Breast Cancer Wisconsin (Diagnostic)

Luís Gustavo Aramys Almeida Matos

Inteligência Computacional

7 de dezembro de 2016

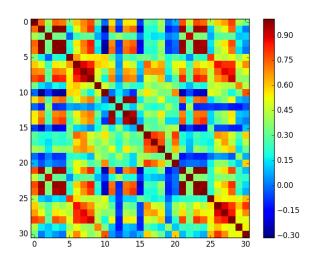
Dataset

- Exames para câncer de mama.
- Características do núcleo de células computadas a partir de imagens digitalizadas
- 30 variáveis de entrada
- 1 variável de saída
- Raio, textura, perímetro, área, suavidade, compacidade, concavidade, pontos côncavos, simetria, dimensão fractal

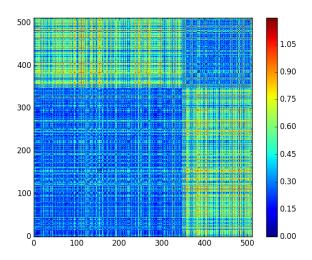
Problema

- Problema de classificação
- Identificar se o câncer é benigno ou maligno.
- Aplicar e avaliar os modelos de classificação:
 - Classificador Bayesiano Simples
 - Classificador Bayesiano Quadrático
 - Regressão Logística
 - Perceptron
 - Perceptron Múltiplas Camadas

Matriz de Correlação

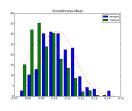


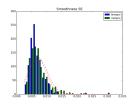
Distância Euclidiana

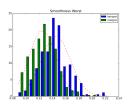


Histogramas

Smoothness

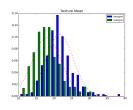


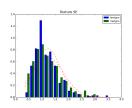


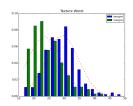


Histogramas

Texture







Tecnologia

Python

- SciPy
 - NumPy
 - matplotlib
 - pandas: Python Data Analysis Library
- scikit-learn: Machine Learning in Python

Matlab

• Statistics and Machine Learning Toolbox

Metodologia

Para cada método de classificação foi feito:

- Validação cruzada de 10 ciclos
- Matriz de confusão (média de cada ciclo)
- Métricas de acurácia, precisão, recuperação.

Classificador Bayesiano Simples (Naive Bayes)

- Aplicação do teorema de Bayes
- Supõe que cada par de variáveis é independente

Theorem (Teorema de Bayes)

$$P(y|x_1...x_n) = \frac{P(y)P(x_1,...,x_n|y)}{P(x_1,...,x_n)}$$

Onde:

y é a variável de saída que identifica a classe

 $x = [x_1, \dots, x_n]$ é o vetor de entrada

Classificador Bayesiano (Naive Bayes) - Resultados

Avaliação dos resultados

- ACC = 93.67%
- AUC = 0.9266
- PRE(C1) = 0.94
- REC(C1) = 0.8868
- PRE(C2) = 0.9350
- REC(C2) = 0.9664

	$\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita)	\hat{C}_2 (Predita)
C_1	18.80	2.40
C_2	1.20	34.50

Tabela: Matriz de confusão

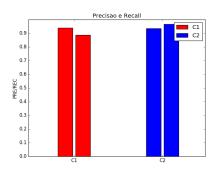


Figura: Precisão e Recall

Classificador Bayesiano Quadrático

- Um classificador com uma fronteira de decisão quadrática, gerado pela densidades condicionais dos dados e utilizando a regra de Bayes.
- A decisão é calculada pela função discriminante:

Theorem (Função Discriminante)

$$g_i(x(t)) = InP(C_i|x(t)) = InP(x(t)|C_i) + InP(C_i)$$

Classificador Bayesiano Quadrático - Resultados

Avaliação dos resultados

- ACC = 95.78%
- AUC = 0.9549
- PRE(C1) = 0.9434
- REC(C1) = 0.9434
- PRE(C2) = 0.9664
- REC(C2) = 0.9664

	$\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita)	$\hat{\mathcal{C}}_2$ (Predita)
C_1	20.00	1.20
C_2	1.20	34.50

Tabela: Matriz de confusão

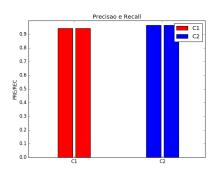


Figura: Precisão e Recall

Regessão Logística

- Na regressão logística, a saída do modelo é uma aproximação da probabilidade a posteriori.
- A função discriminante é calculada pela função sigmoide, ou função logística ou logit

Theorem (Função Logística)

$$g_i(x(t)|\theta_i)) = \frac{1}{1 + exp(\hat{x}(t)\theta_i)}$$

Onde:

$$\hat{x}(t) = [1, x(t)]e\theta_i = [\theta_{i0}, \theta_{i1}]^T$$

Regessão Logística - Resultados

Avaliação dos resultados

- ACC = 95.96%
- AUC = 0.9563
- PRE(C1) = 0.9479
- REC(C1) = 0.9434
- PRE(C2) = 0.9665
- REC(C2) = 0.9692

	$\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita)	\hat{C}_2 (Predita)
C_1	20.00	1.20
C_2	1.10	34.60

Tabela: Matriz de confusão

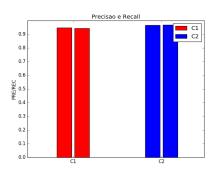


Figura: Precisão e Recall

Perceptron

O Perceptron utiliza o modelo McCulloch-Pitts para o neurônio artificial. O processamento de cada unidade é dado por:

McCulloch-Pitts

$$u(t) = h(z(t)) = h\left(\theta_0 + \sum_{i=1}^n x_i(t)\theta_i\right)$$

Onde:

u(t): valor de ativação

z(t): potencial de ativaçãos

h: função de ativação

 $x_i(t)$: entradas do neurônio

Perceptron - Implementação

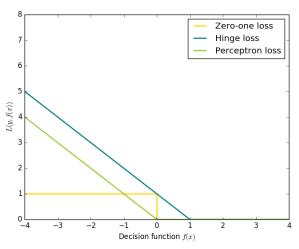
Scikit Learn

```
class sklearn.linear_model.Perceptron(penalty=None,
   alpha=0.0001, fit_intercept=True, n_iter=5,
   shuffle=True, verbose=0, eta0=1.0, n_jobs=1,
   random_state=0, class_weight=None, warm_start=False)
```

É uma expecialização do sklearn.linear_model.SGDClassifier.

Perceptron

• Função custo: linear



Perceptron - Resultados

Avaliação dos resultados

- ACC = 96.13%
- AUC = 0.9615
- PRE(C1) = 0.9358
- REC(C1) = 0.9623
- PRE(C2) = 0.9772
- REC(C2) = 0.9608

	$\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita)	\hat{C}_2 (Predita)
C_1	20.40	0.80
C_2	1.40	34.30

Tabela: Matriz de confusão

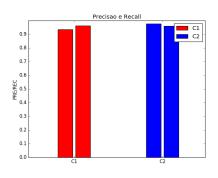
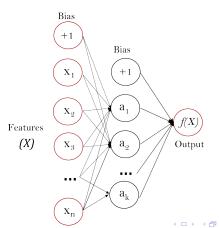


Figura: Precisão e Recall

Perceptron de Múltiplas Camadas

- Camada de entrada que n\u00e3o realiza processamento (dimens\u00e3o do vetor de entrada)
- Camada de saída: vetor com as estimativas das variáveis indicadoras (dimensão vetor de saída)



Perceptron de Múltiplas Camadas

 A função custo a ser utilizada é a Entropia cruzada, ou função verossimilhança:

Entropia Cruzada

$$I(\theta) = -\sum_{t=1}^{N} \nu(t) log(\hat{\nu}) + (1 - \nu(t)) log(1 - \hat{\nu}(t))$$

A função de ativação nos neurônios das camadas intermediárias é:

Tangente hiperbólica

$$u(t) = \frac{1 - exp(-z(t))}{1 + exp(-z(t))}$$

- Método de ajuste dos parâmetros: Gradiente descendente estocástico
- Aprendizado através do Backpropagation



Perceptron de Múltiplas Camadas - Observações

- Capaz de aprender modelos não lineares
- Quando existem camadas escondidas, a função custo é não convexa
- Mais de um mínimo local
- Diferentes resultados a cada inicialização
- Sensível a escala das variáveis de entrada

Perceptron de Múltiplas Camadas - Observações

Padronização das variáveis de entrada

- MLP apresenta desempenho ruim sem padronização
- Média zero e desvio padrão 1
- A padronização é calculada para o conjunto de treinamento e as mesma transformação é aplicada para o conjunto de teste.

Perceptron de Múltiplas Camadas - Implementação

Scikit Learn

```
class sklearn.neural_network.MLPClassifier
(hidden_layer_sizes=(100, ), activation='relu',
solver='adam', alpha=0.0001, batch_size='auto',
learning_rate='constant', learning_rate_init=0.001,
power_t=0.5, max_iter=200, shuffle=True,
random_state=None, tol=0.0001, verbose=False,
warm_start=False, momentum=0.9, nesterovs_momentum=True,
early_stopping=False, validation_fraction=0.1,
beta_1=0.9, beta_2=0.999, epsilon=1e-08)
```

Perceptron de Múltiplas Camadas - Resultados

Avaliação dos resultados para uma camada intermediária com 21 neurônios

	$\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita)	$\hat{\mathcal{C}}_2(Predita)$
C_1	20.20	1.00
C_2	0.40	35.30

•
$$ACC = 97.35\%$$

•
$$AUC = 97.08\%$$

•
$$PRE(C1) = 0.9806$$

•
$$REC(C1) = 0.9528$$

•
$$PRE(C2) = 0.9725$$

•
$$REC(C2) = 0.9888$$

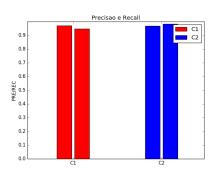


Figura: Precisão e Recall

Perceptron de Múltiplas Camadas - Resultados

Camada intermediária com 100 neurônios

C 20.40 0.80	$\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita)	$C_2(Predita)$
C1 20.40 0.00	C ₁ 20.40	0.80
C_2 0.30 35.40	C ₂ 0.30	35.40

- ACC = 98.07%
- AUC = 0.9769
- PRE(C1) = 0.9855
- REC(C1) = 0.9623
- PRE(C2) = 0.9779
- REC(C2) = 0.9916

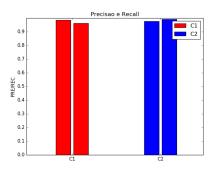


Figura: Precisão e Recall

Perceptron de Múltiplas Camadas - Resultados

Camadas intermediárias (10,10)

	$\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita)	$\hat{\mathcal{C}}_2$ (Predita)
C_1	20.30	0.90
C_2	0.30	35.40

- ACC = 97.89%
- AUC = 0.9746
- PRE(C1) = 0.9854
- REC(C1) = 0.9575
- PRE(C2) = 0.9752
- REC(C2) = 0.9916

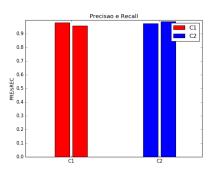


Figura: Precisão e Recall

Máquina de Vetor de Suporte - Resultados

Avaliação dos resultados

	$\hat{\mathcal{C}}_1$ (Predita)	$\hat{\mathcal{C}}_2(Predita)$
C_1	20.40	0.80
C_2	0.50	35.20

- ACC = 97.72%
- AUC = 0.9741
- PRE(C1) = 0.9761
- REC(C1) = 0.9623
- PRE(C2) = 0.9778
- REC(C2) = 0.9860

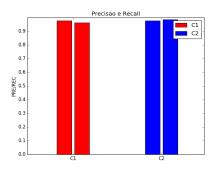


Figura: Precisão e Recall