report_executed

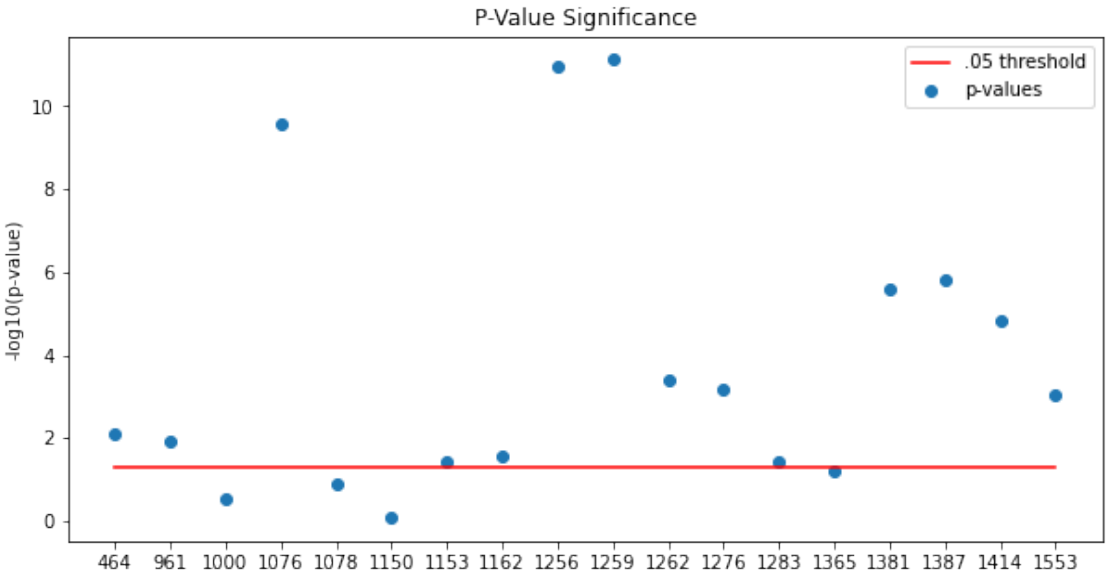
August 20, 2021

1 Statistics

In the statistics module we analyze data for different responses and at different spectral peak locations. We use Python package scipy in this module.

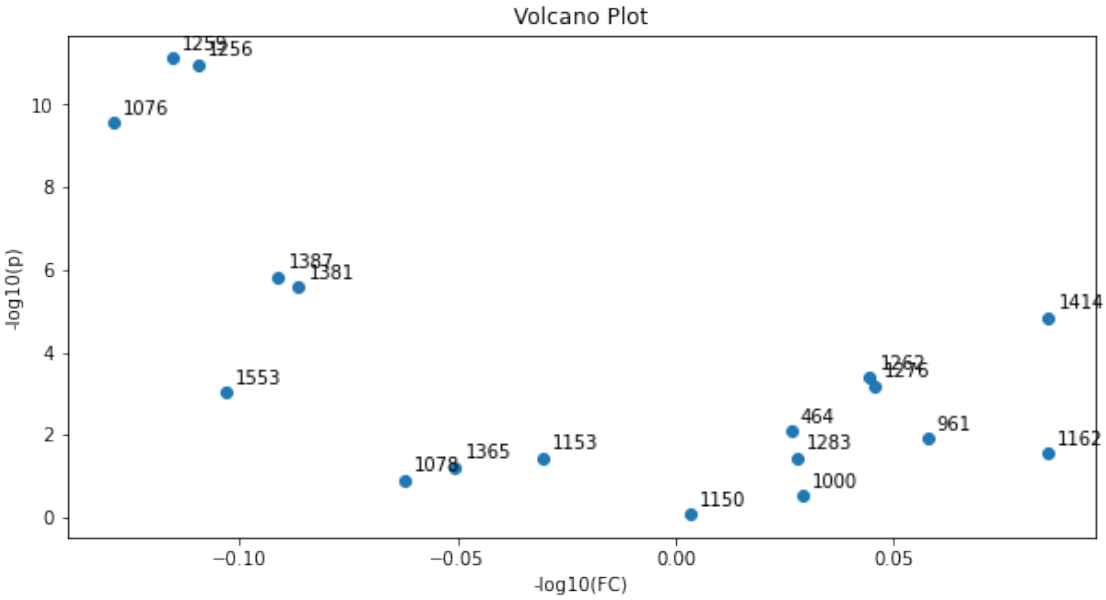
1.1 T-Test

T-test checks for difference in the mean between two sample from different responses. We assume the data is independent and follows the normality assumption. Let $x_1, \ldots, x_n$ and $y_1, \ldots, y_m$ be the two samples and we test whether the means are equal. The null hypothesis states means μ_1 and μ_2 are equal and the alternative hypothesis states they are not equal. If the p-value is lower than the chosen significance level, we can reject the null hypothesis, i.e. the samples do not have the same means.



1.2 Volcano Plot

Volcano plot is a scatter plot which demonstrates magnitude between the responses and t-test significance of the data. We can choose a significance level and fold change limit to specify the rectangle of interest.



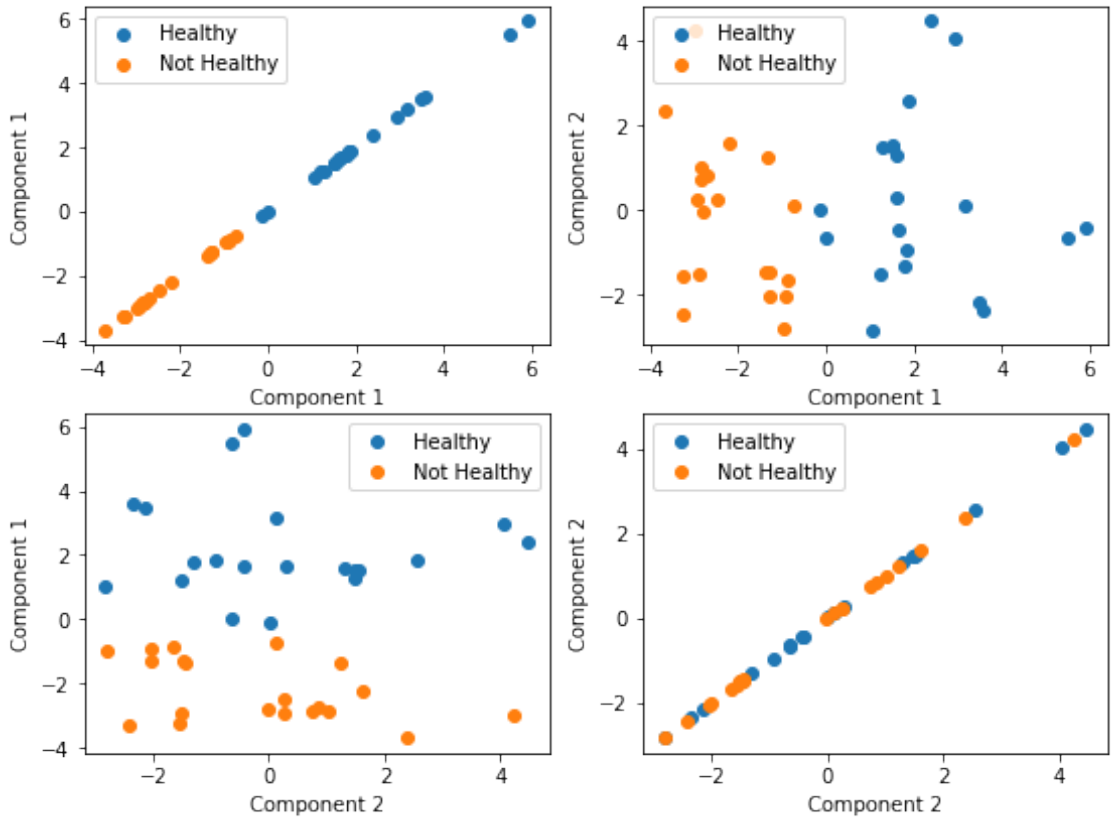
2 Dimension-Reduction

Dimension-reduction methods are used to condense high dimensional data down to dimensions which provide the most information. We have implemented the principal component analysis (PCA). It performs a change of basis and the new basis is chosen, such that the i-th principal component is orthogonal to the first i-1 principal components and the direction maximizes the variance of the projected data. We use the Python library sklearn.

2.1 Principal Component Analysis

The principal component analysis (PCA) is one of the methods for dimension-reduction. It performs a change of basis and the new basis is chosen, such that the i-th principal component is orthogonal to the first i-1 principal components and the direction maximizes the variance of the projected data. Instead of considering all the dimensions, we pick the necessary number of principal components.

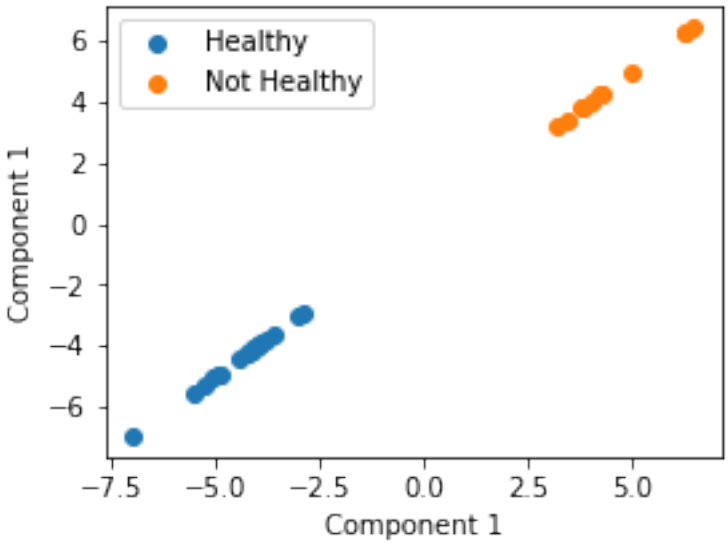
```
PCA Projections
Projections of data into latent space.
Data is colored by response
```



2.2 Linear Discriminant Analysis

Linear discriminant analysis is a classifier with a linear decision boundary. We assume normality and fit conditional densities $p(x \mid y = 0)$ and $p(x \mid y = 1)$ with mean and covariance parameters (μ_0, σ_0) and (μ_1, σ_1), where x, μ_0 and μ_1 are vectors. Dimensionality-reduction is done by projecting the input to the most discriminative directions.

```
LDA Projections
Projections of data into latent space.
Data is colored by response
```



3 Clustering

In this module we use various different clustering methods on spectra. We use the elbow method to find the optimal number of clusters. Clustering is done with scipy and sklearn libraries.

3.1 K-Means Clustering

K-means clustering aims to partition the data into k sets and to minimize the Euclidian within-cluster sum of squares (WCSS). It is solved by either Lloyd's or Elkan's algorithm and we use sklearn module in Python.

	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	\
0	NSCLC_H322_1	SCLC_86M1_2	SCLC_H187_2	SCLC_16HV_1	NSCLC_H3122_1	
1	NSCLC_H522_1	SCLC_86M1_1	SCLC_H187_1	SCLC_16HV_2	NSCLC_H3122_2	
2	NSCLC_H522_2	SCLC_H69_1	SCLC_H82_1	SCLC_H524_1	NaN	
3	NSCLC_PC9_1	SCLC_H69_2	SCLC_H82_2	SCLC_H524_2	NaN	
4	NSCLC_PC9_2	SCLC_SW210-5_1	SCLC_N417_2	NaN	NaN	
5	NaN	SCLC_SW210_5_2	SCLC_N417_1	NaN	NaN	

	Cluster 6	Cluster 7	Cluster 8	Cluster 9	Cluster 10
0	NSCLC_H1703_2	SCLC_DMS79_1	NSCLC_H358_2	NSCLC_H2228_1	NSCLC_A549_1
1	NSCLC_H1703_1	SCLC_DMS79_2	NSCLC_H358_1	NSCLC_H2228_2	NSCLC_A549_2
2	NaN	SCLC_H209_1	NaN	NSCLC_H322_2	NSCLC_H1437_1
3	NaN	SCLC_H209_2	NaN	NaN	NSCLC_H1437_2
4	NaN	NaN	NaN	NaN	NSCLC_HCC4006_1
5	NaN	NaN	NaN	NaN	NSCLC_HCC4006_2

3.2 BIRCH Clustering

BIRCH (balance iterative reducing and clustering using hierarchies) is a hierarchical clustering method. The hierarchy is created based on the linear sum and the square sum of data points.

	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	\
0	NSCLC_H358_2	SCLC_86M1_2	NSCLC_A549_1	SCLC_16HV_1	NSCLC_H2228_1	
1	NSCLC_H522_2	SCLC_86M1_1	NSCLC_A549_2	SCLC_16HV_2	NSCLC_H2228_2	
2	NSCLC_H358_1	SCLC_H69_2	NSCLC_H1437_1	SCLC_H524_1	NSCLC_H322_2	
3	NSCLC_PC9_1	SCLC_SW210-5_1	NSCLC_H1437_2	SCLC_H524_2	NSCLC_H322_1	
4	NSCLC_PC9_2	SCLC_SW210_5_2	NSCLC_HCC4006_1	NaN	NSCLC_H522_1	
5	NaN	NaN	NSCLC_HCC4006_2	NaN	NaN	

	Cluster 6	Cluster 7	Cluster 8	Cluster 9	Cluster 10
0	NSCLC_H3122_1	SCLC_H69_1	SCLC_DMS79_1	SCLC_H187_2	NSCLC_H1703_2
1	NSCLC_H3122_2	SCLC_H82_1	SCLC_DMS79_2	SCLC_H187_1	NSCLC_H1703_1
2	NaN	NaN	SCLC_H209_1	SCLC_H82_2	NaN
3	NaN	NaN	SCLC_H209_2	SCLC_N417_2	NaN
4	NaN	NaN	NaN	SCLC_N417_1	NaN
5	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN

3.3 DBSCAN Clustering

DBSCAN is a non-parametric density-based clustering algorithm. It clusters together nearby neighbors, marking further away points as outliers, as they are in the low density area.

	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	\
0	NSCLC_A549_1	NSCLC_H1703_2	NaN	NaN	NaN	
1	NSCLC_A549_2	NSCLC_H1703_1	NaN	NaN	NaN	
2	NSCLC_H1437_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
3	NSCLC_H2228_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
4	NSCLC_H2228_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
5	NSCLC_H1437_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
6	NSCLC_H3122_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
7	NSCLC_H322_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
8	NSCLC_H322_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
9	NSCLC_H358_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
10	NSCLC_H3122_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
11	NSCLC_H522_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
12	NSCLC_H522_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
13	NSCLC_HCC4006_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
14	NSCLC_H358_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
15	NSCLC_PC9_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
16	NSCLC_PC9_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
17	NSCLC_HCC4006_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
18	SCLC_86M1_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
19	SCLC_86M1_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
20	SCLC_16HV_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
21	SCLC_16HV_2	NaN	NaN	NaN	NaN	

22	SCLC_DMS79_1	NaN	NaN	NaN	NaN
23	SCLC_DMS79_2	NaN	NaN	NaN	NaN
24	SCLC_H187_2	NaN	NaN	NaN	NaN
25	SCLC_H187_1	NaN	NaN	NaN	NaN
26	SCLC_H209_1	NaN	NaN	NaN	NaN
27	SCLC_H524_1	NaN	NaN	NaN	NaN
28	SCLC_H209_2	NaN	NaN	NaN	NaN
29	SCLC_H524_2	NaN	NaN	NaN	NaN
30	SCLC_H69_1	NaN	NaN	NaN	NaN
31	SCLC_H82_1	NaN	NaN	NaN	NaN
32	SCLC_H82_2	NaN	NaN	NaN	NaN
33	SCLC_H69_2	NaN	NaN	NaN	NaN
34	SCLC_N417_2	NaN	NaN	NaN	NaN
35	SCLC_N417_1	NaN	NaN	NaN	NaN
36	SCLC_SW210-5_1	NaN	NaN	NaN	NaN
37	SCLC_SW210_5_2	NaN	NaN	NaN	NaN

	Cluster 6	Cluster 7	Cluster 8	Cluster 9	Cluster 10
0	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
1	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
2	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
3	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
4	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
5	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
6	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
7	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
8	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
9	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
10	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
11	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
12	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
13	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
14	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
15	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
16	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
17	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
18	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
19	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
20	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
21	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
22	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
23	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
24	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
25	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
26	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
27	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
28	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
29	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN

30	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
31	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
32	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
33	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
34	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
35	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
36	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
37	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN

3.4 Mean Shift Clustering

The mean shift algorithm is a nonparametric clustering technique which does not require prior knowledge of the number of clusters, and does not constrain the shape of the clusters. It works by starting at data points and iteratevely finding the convergence points for kernel estimate gradient.

	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5	\
0	NSCLC_A549_1	NSCLC_H1703_2	NaN	NaN	NaN	
1	NSCLC_A549_2	NSCLC_H1703_1	NaN	NaN	NaN	
2	NSCLC_H1437_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
3	NSCLC_H2228_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
4	NSCLC_H2228_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
5	NSCLC_H1437_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
6	NSCLC_H3122_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
7	NSCLC_H322_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
8	NSCLC_H322_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
9	NSCLC_H358_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
10	NSCLC_H3122_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
11	NSCLC_H522_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
12	NSCLC_H522_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
13	NSCLC_HCC4006_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
14	NSCLC_H358_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
15	NSCLC_PC9_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
16	NSCLC_PC9_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
17	NSCLC_HCC4006_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
18	SCLC_86M1_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
19	SCLC_86M1_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
20	SCLC_16HV_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
21	SCLC_16HV_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
22	SCLC_DMS79_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
23	SCLC_DMS79_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
24	SCLC_H187_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
25	SCLC_H187_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
26	SCLC_H209_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
27	SCLC_H524_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
28	SCLC_H209_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
29	SCLC_H524_2	NaN	NaN	NaN	NaN	
30	SCLC_H69_1	NaN	NaN	NaN	NaN	
31	SCLC_H82_1	NaN	NaN	NaN	NaN	

32	SCLC_H82_2	NaN	NaN	NaN	NaN
33	SCLC_H69_2	NaN	NaN	NaN	NaN
34	SCLC_N417_2	NaN	NaN	NaN	NaN
35	SCLC_N417_1	NaN	NaN	NaN	NaN
36	SCLC_SW210-5_1	NaN	NaN	NaN	NaN
37	SCLC_SW210_5_2	NaN	NaN	NaN	NaN

	Cluster 6	Cluster 7	Cluster 8	Cluster 9	Cluster 10
0	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
1	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
2	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
3	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
4	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
5	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
6	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
7	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
8	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
9	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
10	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
11	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
12	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
13	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
14	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
15	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
16	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
17	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
18	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
19	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
20	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
21	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
22	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
23	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
24	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
25	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
26	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
27	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
28	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
29	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
30	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
31	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
32	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
33	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
34	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
35	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
36	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN
37	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN

3.5 Gaussian Mixture Clustering

Gaussian mixture models (GMMs) cluster the data by fitting a mixture of Gaussian models to the data and clustering together data points with similar parameter estimates. It's closely related to k-means clustering but allows for less restrictive cluster shapes. K-means fits a multi-dimensional ball as the perimeter, but GMMs can also fit ellipsoidal shapes and other shapes.

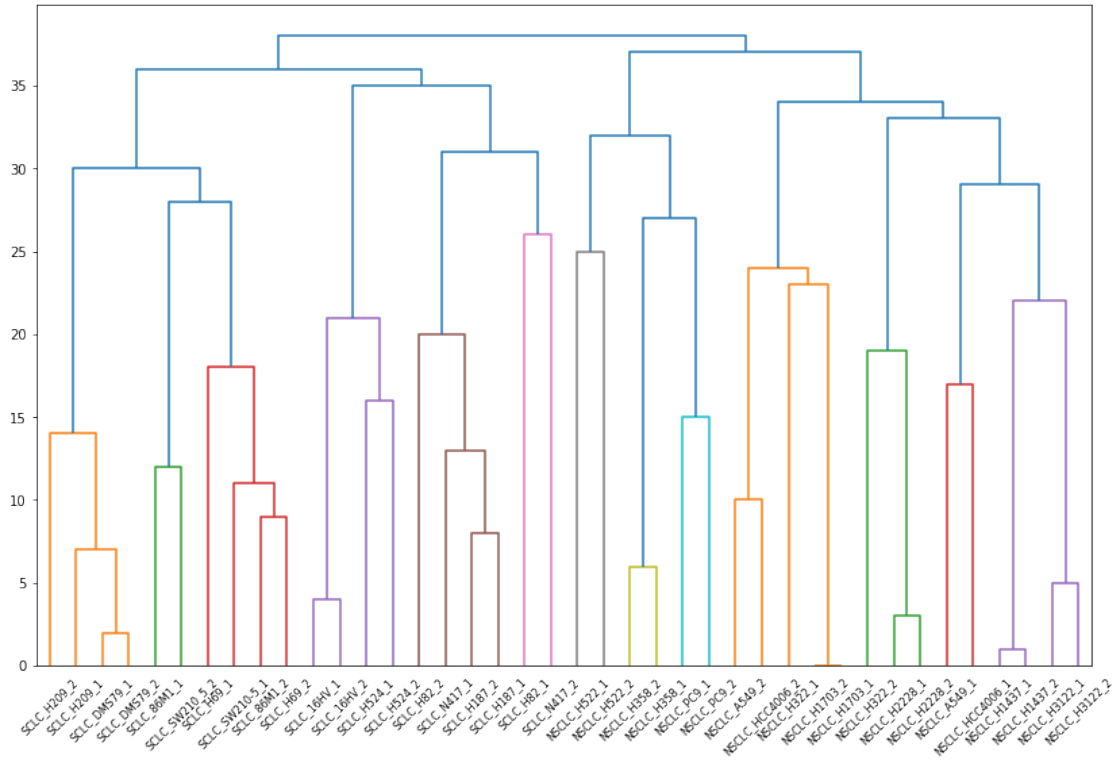
```
       Cluster 1       Cluster 2     Cluster 3      Cluster 4  \
0   NSCLC_H1703_2     SCLC_86M1_1  NSCLC_H358_2  NSCLC_H1437_1
1   NSCLC_H1703_1     SCLC_16HV_1  NSCLC_H358_1  NSCLC_H1437_2
2             NaN     SCLC_16HV_2           NaN            NaN
3             NaN     SCLC_H187_2           NaN            NaN
4             NaN     SCLC_H187_1           NaN            NaN
5             NaN     SCLC_H524_1           NaN            NaN
6             NaN     SCLC_H524_2           NaN            NaN
7             NaN      SCLC_H82_1           NaN            NaN
8             NaN      SCLC_H82_2           NaN            NaN
9             NaN     SCLC_N417_2           NaN            NaN
10            NaN     SCLC_N417_1           NaN            NaN
11            NaN  SCLC_SW210_5_2           NaN            NaN

         Cluster 5      Cluster 6     Cluster 7     Cluster 8  \
0      SCLC_86M1_2  NSCLC_H2228_1  NSCLC_H522_1  SCLC_DMS79_1
1       SCLC_H69_1  NSCLC_H2228_2  NSCLC_H522_2  SCLC_DMS79_2
2       SCLC_H69_2   NSCLC_H322_2   NSCLC_PC9_1   SCLC_H209_1
3   SCLC_SW210-5_1            NaN   NSCLC_PC9_2   SCLC_H209_2
4              NaN            NaN           NaN           NaN
5              NaN            NaN           NaN           NaN
6              NaN            NaN           NaN           NaN
7              NaN            NaN           NaN           NaN
8              NaN            NaN           NaN           NaN
9              NaN            NaN           NaN           NaN
10             NaN            NaN           NaN           NaN
11             NaN            NaN           NaN           NaN

          Cluster 9     Cluster 10
0      NSCLC_A549_1  NSCLC_H3122_1
1      NSCLC_A549_2  NSCLC_H3122_2
2      NSCLC_H322_1            NaN
3   NSCLC_HCC4006_1            NaN
4   NSCLC_HCC4006_2            NaN
5               NaN            NaN
6               NaN            NaN
7               NaN            NaN
8               NaN            NaN
9               NaN            NaN
10              NaN            NaN
11              NaN            NaN
```

3.6 Hierarchical Clustering

Hierarchical clustering builds hierarchies of clusters based on a chosen metric and a linkage scheme. We used cosine distance and average linkage scheme.

	Cluster 1	Cluster 2	Cluster 3	Cluster 4	Cluster 5
0	NSCLC_A549_1	NSCLC_H358_2	SCLC_86M1_2	SCLC_H82_1	SCLC_16HV_1
1	NSCLC_H1437_1	NSCLC_H358_1	SCLC_86M1_1	SCLC_N417_2	SCLC_16HV_2
2	NSCLC_H1437_2	NSCLC_PC9_1	SCLC_H69_1	NaN	SCLC_H524_1
3	NSCLC_H3122_1	NSCLC_PC9_2	SCLC_H69_2	NaN	SCLC_H524_2
4	NSCLC_H3122_2	NaN	SCLC_SW210-5_1	NaN	NaN
5	NSCLC_HCC4006_1	NaN	SCLC_SW210_5_2	NaN	NaN

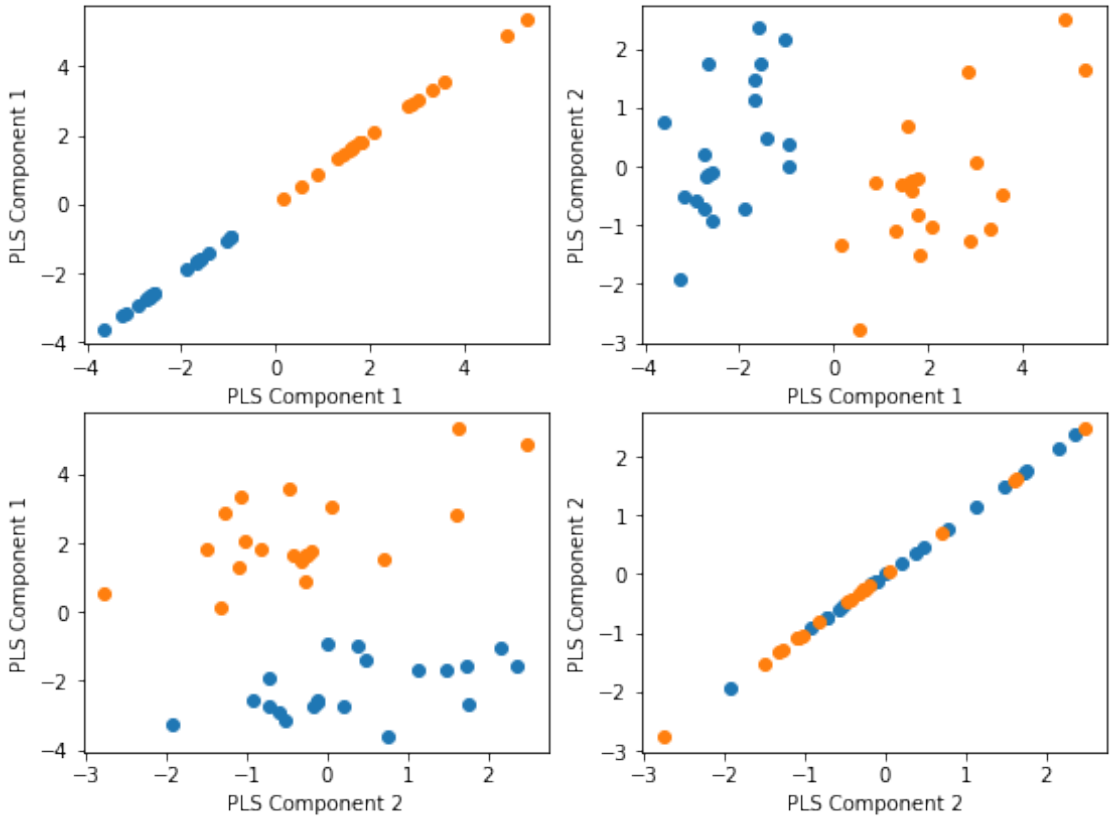
	Cluster 6	Cluster 7	Cluster 8	Cluster 9	Cluster 10
0	NSCLC_H1703_2	NSCLC_H2228_1	NSCLC_H522_1	SCLC_H187_2	SCLC_DMS79_1
1	NSCLC_H1703_1	NSCLC_H2228_2	NSCLC_H522_2	SCLC_H187_1	SCLC_DMS79_2
2	NSCLC_A549_2	NSCLC_H322_2	NaN	SCLC_H82_2	SCLC_H209_1
3	NSCLC_H322_1	NaN	NaN	SCLC_N417_1	SCLC_H209_2
4	NSCLC_HCC4006_2	NaN	NaN	NaN	NaN
5	NaN	NaN	NaN	NaN	NaN



4 Classification

Classification methods aim to classify the response of samples. The given data is separated into a training set and a testing set. The model parameters are found from the training set and the testing set is used to quantify the model accuracy. The methods are from sklearn package.

4.1 Partial Least Squares-Discriminant Analysis



4.2 Support Vector Machines

Classification via SVM is done by fitting a linear plane to the latent space but only considering a subset of inputs in the fitting process. The quantity R^2 measures what percentage of variation was explained by the model in the training set. The quantity Q^2 shows the same measurement but for the test data set.

```
SVM Validated Parameters:  {'kernel': 'linear', 'shrinking': True}
SVM: R^2=1.0 Q^2=1.0
```

4.3 Random Forest

Random forests is an ensemble classification method. It works by constructing multiple decision trees based on the training data and then choosing the class, chosen by the most number of decision

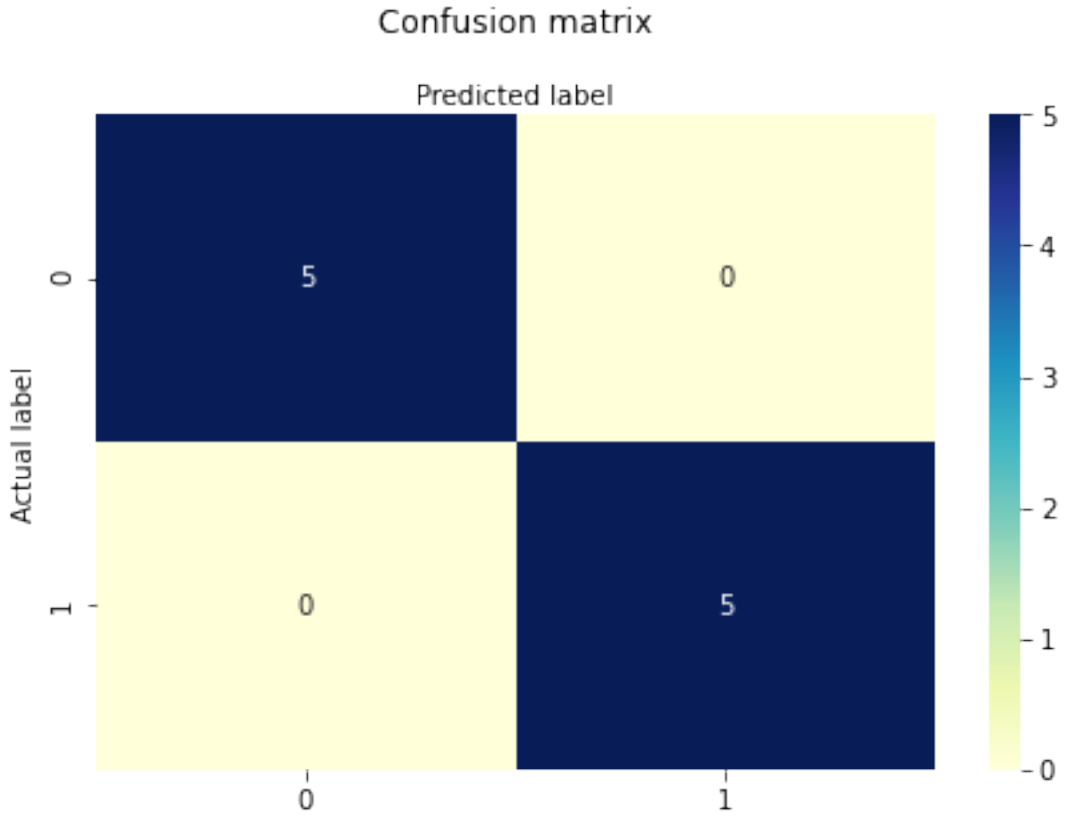
trees. The quantity R^2 measures what percentage of variation was explained by the model in the training set. The quantity Q^2 shows the same measurement but for the test data set.

```
Random Forest Validated Parameters:  {'criterion': 'gini', 'n_estimators': 50}
RF: R^2=1.0 Q^2=1.0
```

4.4 Logistic Regression

Logistic regression uses a logistic function to model a binary dependent variable. The confusion matrix displays the accuracy of the model for the test data set. We use the packages sklearn for the logistic regression and seaborn for the confusion matrix.

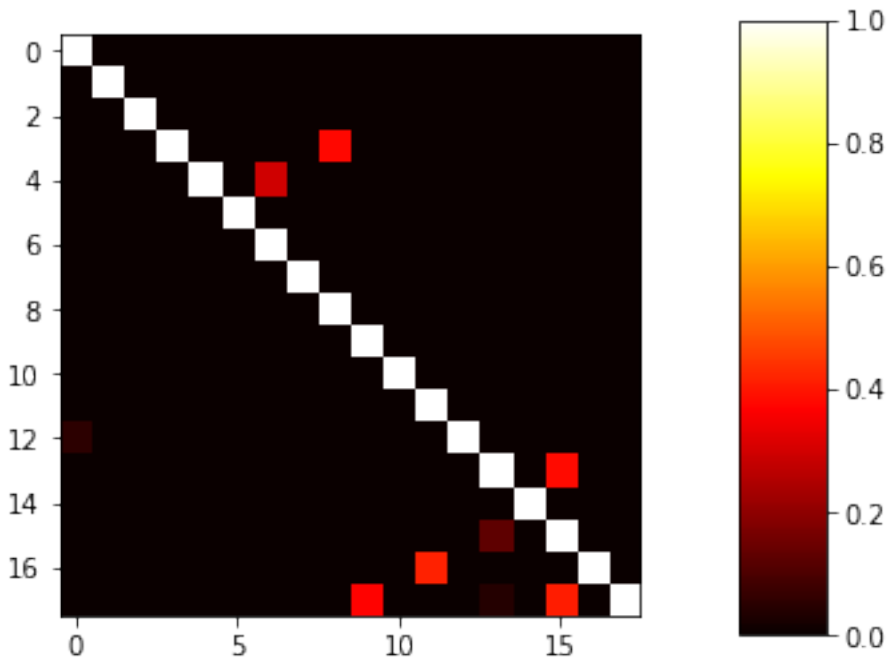
```
Accuracy: 1.0
<modules.adapml_classification.Classification object at 0x7fae92288cd0>
```



5 Regression

5.1 Linear Regression

Linear regression fits a linear plane between the dependant variables and the response. The linear plane models the relationship between them and allows for prediction or explain variation.


0
2
4
6
8
10
12
14
16
0
5
10
15
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0.0