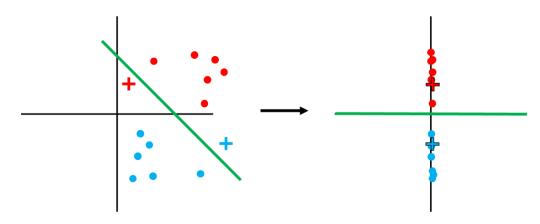


Sharif University of Technology Department of Computer Engineering June 2022  ${ Hadis\ Ahmadian } \\ 400211524 \\ { ML\ for\ Bioinformatics\ Assignment\ \#3}$ 

<b>Question</b>	ONE
-----------------	-----

.1

 $(\tilde{1})$ 



دیتاست سمت چپ را در نظر بگیرید نقاط قرمز متعلق به کلاس 1 و نقاط آبی متعلق به کلاس 2 هستند. داده های به شکل دایره داده های + شکل داده های تست هستند.

اگر برای داده ها یک مرز تصمیم در 2 بعد پیدا کنیم انتظار داریم دسته بند ما مانند خط سبز در شکل سمت چپ شود چون به نظر دسته بند خوبی است(از این جهت که فاصله اش با هردو کلاس تقریبا یکسان است و این فاصله را بیشینه کرده است.)

با این حال این دسته بند نمیتواند داده های تست را درست دسته بندی کند.

اگر داده ها را روی محور عمودی مپ کنیم یعنی درواقع فقط همین بعد آن را درنظر بگیریم میتوان دید یک مرز تصمیم دیگر (خط افقی سبز ) برای داده ییدا خواهد شد که دیگر مشکل دسته بندی غلط داده های تست را نخواهد داشت.

میتوان دید که دقت دسته بند روی داده های تست بعد از کاهش بعد بیشتر است و داده های تست درست دسته بندی شده اند.

(ب) دو مرحله ی Evaluation و subset generation

Evaluation: هدف آن معیاری برای سنجش یک زیر مجموعه ی کاندید از ویژگی هاست.

a: Evaluation متد های

Feature ranking: به هر ویژگی طبق یک معیار و استانداردی یک رنک داده میشود و اگر رنک آن به آستانه ی مشخصی نرسد، از مجموعه ویژگی ها حذف میشود. مثال هایی برای این متد: Pearson correlation, mutual information و information.

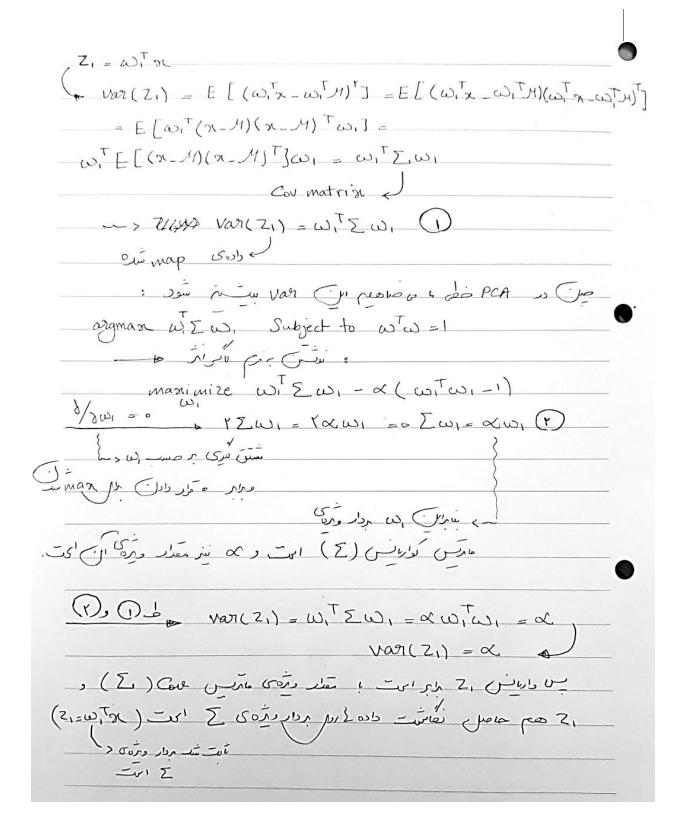
ایی یون احتمال شرطی دو کلاس یعنی  $p(x \mid C1)$  و  $p(x \mid C1)$  و مثال هایی احتمال شرطی دو کلاس یعنی  $p(x \mid C1)$  و مثال هایی Probabilistic distance برای این متد : Chernoff dissimilarity measure

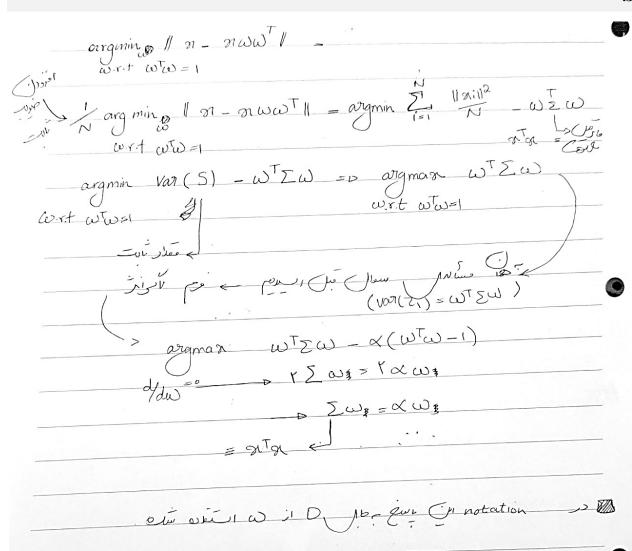
Subset generation: هدف آن توليد يک زير مجموعه براي سنجيده شدن توسط Evaluation است.

متد های Subset generation:

Complete search: این متد ها تضمین میکنند که به جواب بهینه (طبق معیار انتخاب شده برای Evaluation) خواهند رسید. برای مثال exhaustive search با جستجو و سنجیدن کل فضای حالت یعنی بین تمام زیر مجموعه های ممکن از ویژگی ها، پاسخ بهینه را میابد و بنابراین یک جستجوی کامل است.

Evaluation اده این است که به هر ویژگی یک رنک (طبق معیارانتخاب شده برای Evaluation) داده (Evaluation) داده این است که به هر ویژگی یک رنک (طبق معیارانتخاب شده برای N داده این است که به هر ویژگی یک رنک (طبق معیارانتخاب شده برای است که به هر ویژگی یک رنک (طبق معیارانتخاب شده برای است که به هر ویژگی یک رنگ (طبق معیارانتخاب شده برای است که به هر ویژگی یک رنگ (طبق معیارانتخاب شده برای است که به هر ویژگی یک رنگ (طبق معیارانتخاب شده برای است که به هر ویژگی یک رنگ (طبق معیارانتخاب شده برای است که به هر ویژگی یک رنگ (طبق معیارانتخاب شده برای است که به هر ویژگی یک رنگ (طبق معیارانتخاب شده برای است که به هر ویژگی یک رنگ (طبق معیارانتخاب شده برای است که به هر ویژگی یک رنگ (طبق معیارانتخاب شده برای است که به هر ویژگی یک رنگ (طبق معیارانتخاب شده برای است که به هر ویژگی یک رنگ (طبق معیارانتخاب شده برای است که به هر ویژگی یک رنگ (طبق معیارانتخاب شده برای است که به می برای است که به هر ویژگی یک رنگ (طبق معیارانتخاب شده برای است که به می برای است که به می برای است که به برای است که به برای است که به برای است که برای است که به برای است که به برای است که به برای است که برای ا





## .4

(آ) منظور این است که ما فرض میکنیم یک سری فاکتورهای غیرقابل مشاهده و نهفته وجود دارند که ترکیب این فاکتور ها x را حاصل میشود. پس در واقع هدف ما این هست که dependency ویژگی هارا با ترکیبی از فاکتور ها که تعداد آن ها کمتر از ویژگی های اصلی است بیان کنیم. برای مثال ممکن است چندین ویژگی با همبستگی بسیار بالا داشته باشیم که این ها همه میتوانند حالت های مختلف یک فاکتور باشند. کاربرد آن علاوه بر کاهش بعد میتواند knowledge extraction و بیان متغیرها با تعداد فاکتور های کمتر باشد.

MDS :Multidimensional Scaling سعی میکند تمام نقاط را به یک بعد کمتر مپ کند به گونه ای که فاصله ی دو به دوی آن ها تا حد ممکن تغییر نکند. این فاصله میتواند فاصله ی اقلیدسی یا هر معیار فاصله ی دیگری باشد. در واقع MDS سعی میکند تابع زیر را کمینه کند که در آن نقاط Xi به نقاط Xi به نقاط Xi در ابعاد کمتری مپ شده اند و Xi فاصله ی دو به دوی Xi هاست و Xi فاصله ی دو به دوی Xi هاست و درواقع تابع دارد سعی میکند فواصل دو به دوی نقاط در فضای جدید تا حد امکان شبیه نقاط اولیه باشد و مجموع مجذورات تفاوت این فاصله ها کمینه باشد(فاصله در اینجا اقلیدسی است).

$$\min_{z} \sum_{i=1}^{N} \sum_{i=1}^{N} \left( d_{ij} - \hat{d}_{ij} \right)^2$$

فاصله ها فواصل اقلیدسی هستند و تابع هدف MDS به فرم زیر کاهش میابد (reduce میشود) که در آن Xi یک نقطه در فضای اصلی و Zi معادل آن نقطه در فضای جدید است.  $X^TX$  نیز درواقع ماتریس  $X^TX$  است.

$$\min_{z} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} (x_i^{T} x_j - z_i^{T} z_j)^2$$

به دست می آید. ایده ی اصلی LLE این است که هر نقطه جمع وزن داری از همسایه هایش است (تعریف همسایه میتواند بر اساس فیت های خطی در نواحی محلی به دست می آید. ایده ی اصلی LLE این است که هر نقطه جمع وزن داری از همسایه هایش است (تعریف همسایه میتواند بر اساس یک فاصله ی مشخص یا تعداد مشخصی نقاط نزدیک باشد). در مقوله ی کاهش بعد، این روش در این مورد قابل استفاده است که وزن های به دست آمده، ویژگی های هندسی ذاتی نقاط را منعکس میکنند بنابراین در ابعاد دیگر نیز معتبر خواهند بود.

در مرحله ی اول LLE ما میخواهیم وزن ها را به گونه ای پیدا کنیم که برای هر نقطه، جمع وزن دار همسایه هایش تا حد امکان به خود نقطه نزدیک باشد. برای هر نقطه  $X^r$  همسایه های آن را با نماد  $X_r^s$  نشان میدهیم.  $X^r$  هم وزنی است که در همسایه ی  $X^r$  فرب میشود و باید مجذور فاصله ی این مجموع وزن دار از نقطه ی اصلی حساب شود. هدف LLE این است که مجموع این فاصله ها را کمینه کند یعنی وزن ها به گونه ای باشند که مجموع وزن دار همسایه های هر نقطه تا حد امکان به آن نقطه نزدیک باشد. و نکته ی دیگر هم اینکه برای هر نقطه باید مجموع وزن همسایگانش  $X^r$  باشد.

$$E[W|x] = \sum_{r=1}^{N} \left\| x^r - \sum_{s} w_{rs} x_{(r)}^{s} \right\|^2$$

subject to 
$$\sum_{s} w_{rs} = 1$$

سپس در مرحله ی دوم این وزن ها فیکس میشوند و LLE تلاش میکند با کمینه کردن تابع زیر مختصات Y (که در ابعاد جدید است) را به گونه ای بیابد که طبق همان وزن ها، این الگوهای خطی محلی (یعنی درواقع آن هندسه ی ذاتی نقاط) حفظ شوند. به این منظور تابع زیر را کمینه میکند که در آن Y نقاط در ابعاد جدید است، W وزن های محاسبه شده در مرحله ی قبل است و  $Y_r^s$  همسایه های نقطه ی  $Y_r^s$  همسایه ها از نقطه ی  $Y_r^s$  همسایه ها از نقطه ی  $Y_r^s$  همسایه ها از نقطه ی مجذور فاصله ی مجموع وزن دار همسایه ها از نقطه ی اصلی کمینه شود) در فضای جدید نیز برقرار باشند. در ضمن شرط  $Y_r^s$  اعملی کمینه شود) در فضای جدید نیز برقرار باشند. در ضمن شرط  $Y_r^s$  اعملی کمینه شود) در فضای جدید نیز برقرار باشند.

$$\mathbb{E}\left[Y|W\right] = \sum_{r=1}^{N} \left\| y^r - \sum_{s} w_{rs} y_{(r)}^s \right\|^2$$

in such a way that Cov(Y) = I and  $\mathbb{E}[Y] = 0$ 

Isomap: رویکرد isomap مانند MDS است با این تفاوت که به جای فاصله ی اقلیدسی از نوع دیگری از فاصله استفاده میکند و در واقع یک geodesic میکند و سپس MDS را روی در واقع یک generalization غیرخطی از MDS است. ایزومپ ابتدا فواصل geodesic را محاسبه میکند و سپس geodesic در واقع کو تاه ترین مسیر روی سطح منحنی است گویی که سطح flat باشد.

برای محاسبه ی این نوع فاصله میتوان از الگوریتم هایی مانند فلویدوارشال استفاده کرد.

این الگوریتم ابتدا روی فضای منحنی برای هرنقطه نقاطی را میابد که از لحاظ فاصله ی اقلیدسی فاصله ی کمتری نسبت به یک آتسانه داشته باشند (d(i,j) < e) سپس این نقاط را با یال به یکدیگر متصل میکند. در نتیجه یک گراف روی سطح منحنی ایجاد میشود. برای هر دو نقطه یعنی هر دو راس در این گراف کوتاه ترین مسیر محاسبه میشود و به شکل (i,j) ذخیره میشود. حال ایزومپ عینا مانند MDS عمل میکند با این تفاوت که معیار فاصله ها را (i,j) در نظر میگیرد. همانظور که در MDS توضیح داده شد، نقاط (i,j) فاصله ی دو به دوی (i,j) ها در گراف است و (i,j) فاصله ی دو به دوی نقاط در فضای جدید تا حد امکان geodesic فاصله ی دو به دوی عجدید تا حد امکان شبیه نقاط اولیه باشد و مجموع مجذورات تفاوت این فاصله ها کمینه باشد (فاصله در اینجا geodesic است که با مدل سازی به گراف و محاسبه ی کوتاه ترین مسیر بین هر دو راس به دست آمد).

$$\min_{z} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} \left( dG(i,j) - \widehat{d}G(i,j) \right)^{2}$$

Question TWO .....

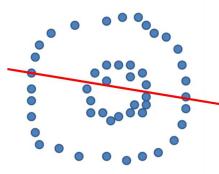
.1

در kmeans ما میخواهیم برای k کلاستر،  $(x-\mu_k)^2$  را کمینه کنیم که x داده های ما هستند و m مرکز هر کلاستر است.

در  $\frac{(x-\mu_k)^2}{\sigma^2}$  است. زیرا نوع ماتریس کواریانس به شکل گفته شده، هدف کمینه شدن مقدار است. زیرا نوع ماتریس کواریانس کواریانس spherical است و این یعنی تمام خوشه ها دقیقا دایره هستند (صورت کسر) که این اتفاق دقیقا در فاصله ی اقلیدسی هم میافتد (یک دایره نقاطی هستند که فاصله ی اقلیدسیشان نسبت به مرکز – در اینجا مرکز خوشه– یکسان است)

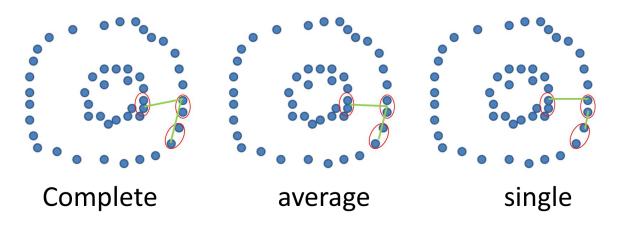
.2

مدل EM هم با 2 توزیع گوسی، دقیقا همین رفتار را خواهد داشت و مانند توضیحات بالا میباشد و کلا Kmeans خود حالت خاصی از EM با توزیع گوسی است.

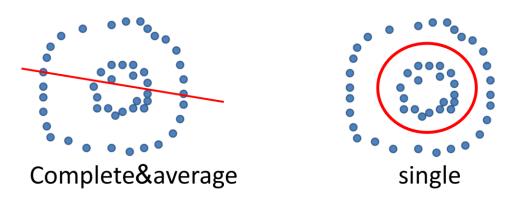


(ب) در ابتدا که هر نقطه یک کلاستر جدا گانه است، در هر حالت نقاط نزدیک تر به هم یک کلایتر میشوند حالا برای مراحل بالاتر، در مورد single-link میتوان مطمین بود که خوشه هایی که در ادامه با هم merge میشوند خوشه های تشکیل دهنده ی هر حلقه هستند پس دو خوشه ی به شکل دو حلقه از هم جدا خواهند شد. اما در دو حالت دیگر همانطور که در مثال زیر مشخص است مثلا در مورد average ممکن است مرکز دو خوشه در دو حلقه ی متفاوت هم چنین در

حالت complete نیز ممکن است ماکسیمم فاصله ی دو خوشه در یک حلقه از هم بیشتر باشد تا بیشترین فاصله ی دو خوشه در دو حلقه ی متفاوت بنابراین دو خوشه به شکل دو حلقه از هم جدا نخواهند شد.

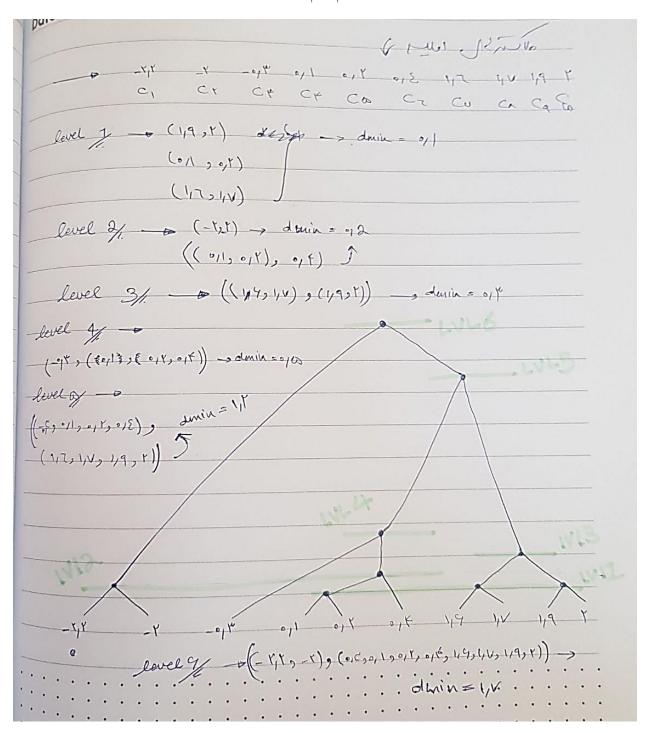


در نتیجه نتیجه ی نهایی کلاسترینگ حدودا به شکل زیر خواهد بود:



.3

وقتی میخواهیم کلاستر هایی که طبق معیار گفته شده بیشترین شباهت را به هم دارند انتخاب کنیم در واقع میخواهیم کلاسترهایی را انتخاب کنیم که کمترین dmin را باهم دارند بنابراین با این روش، ابتدا تمام نقاط را یک کلاستر در نظر میگیریم سپس آنهایی که کمترین dmin را باهم دارند با هم merge میکنیم و در level بعدی نیز همین کار را تکرار میکنیم تا به درخت نهایی برسیم. کلاستر هایی که در هر level انتخاب میشوند و dmin آنها نسبت به هم و هم چنین نتیجه ی نهایی در ادامه آمده است.



Question THREE.....

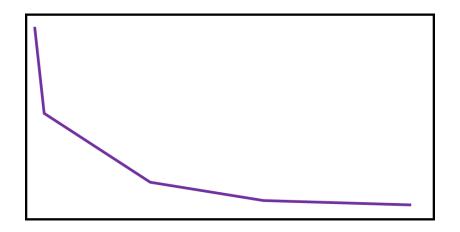
.1

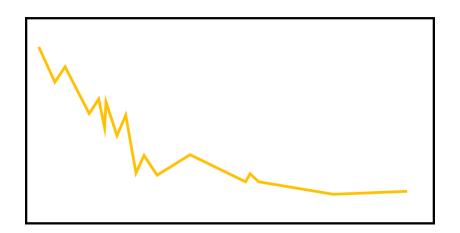
(آ) پرسپترون یک الگوریتم iterative است که از یک نقطه ی شروع به سمت یک اوپتیمال محلی برای تابع هزینه حرکت میکند بنابراین نقطه ی شروع در آن تاثیر زیادی دارد و داده هایی که در ابتدا دیده میشوند تاثیر گذار تر هستند از داده هایی که در ایپاک های آخر دیده میشوند اگر چند تک داده ی اول outlier باشند، چون پرسپترون در هر ایپاک فقط یک داده را میبیند به سمت داداه های اولیه ی outlier بایاس میشود. به همین علت بهتر است در کابرد هایی که به نقطه ی شروع حساس هستد چندین بار الگوریتم را از نقطه های شروع متفاوت آغاز کرد.

(ب) در حالت Minibatch چون پرسپترون در هر ایپاک چندین داده میبنید و برای تصمیم جهت حرکت در فضای حالت، به گرادیان تمام آن بچ توجه میکند این باعث میشود حرکت نرم تری داشته باشد(چون یک داده ی outlier در یک بچ تاثیر کمتری دارد و اثر سایر داده های سالم آن را تا حد خوبی فیلتر میکند) و با یک شیب نسبتا نرم خطا در هر ایپاک کاهش میابد.

در حالت تک داده پرسپترون در هر ایپاک با توجه به گرادیان تنها یک داده جهت حرکت در فضای حالت را مشخص میکند این باعث میشود اگر داده voutlier باشد یا نویز زیادی داشته باشد و حرکت تنها با اتوجه به آن صورت بگیرد، خطا روی سایر داداه ها افزایش یابد پس در این حالت حرکت خیلی بیشتر نویز دارد و مانند حالت قبل یکنواخت نیست.

نمونه ای از مقدار تابع خطا در هر ایپاک برای دو حالت فوق:





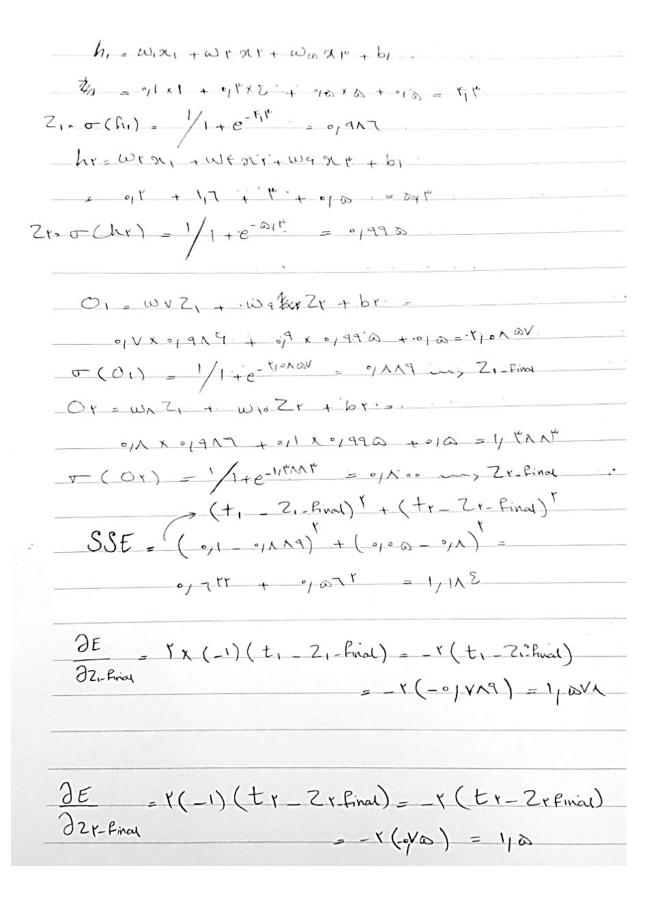
## .2

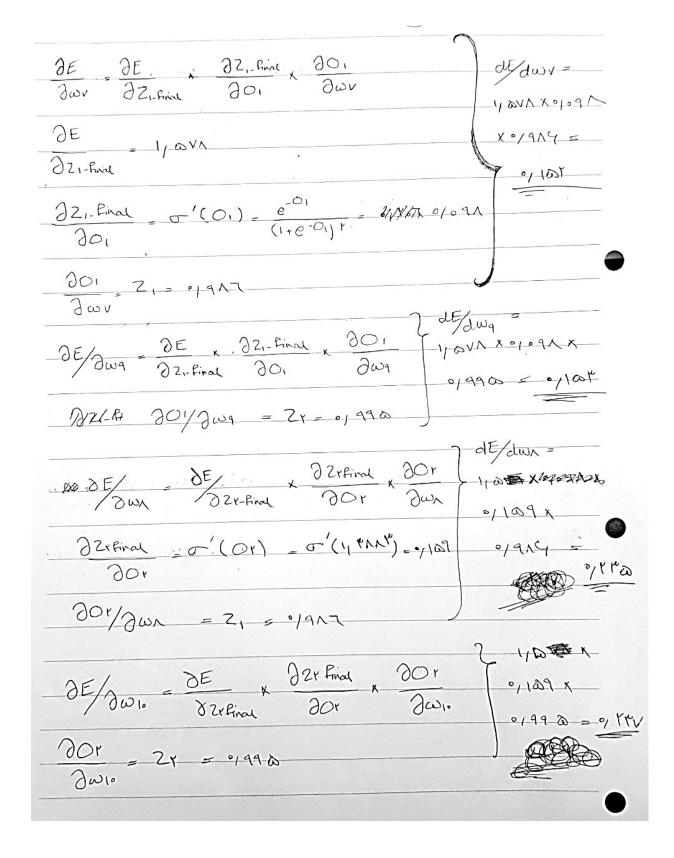
نكات مهم:

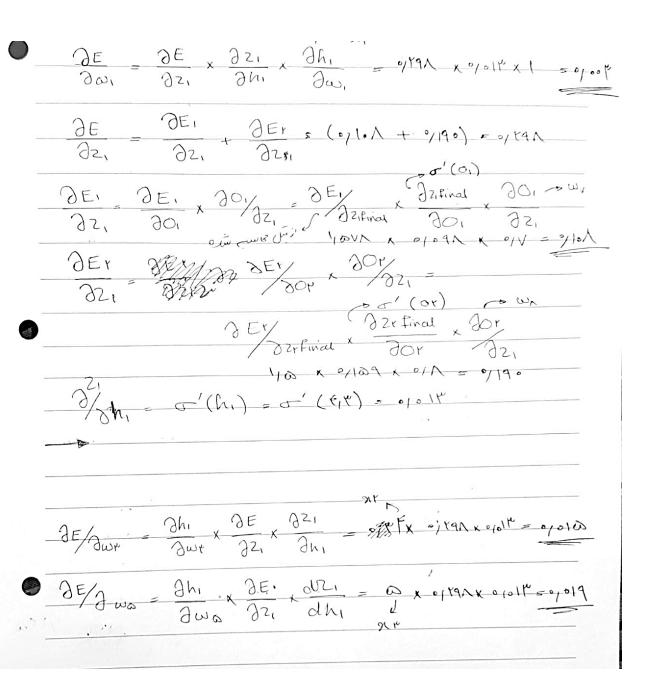
در این پاسخ  $z_1=\sigma(h_1)$  &  $z_2=\sigma(h_2)$  &  $z_1_{final}=\sigma(o_1)$  &  $z_2_{final}=\sigma(o_2)$  که  $\sigma$  تابع فعال ساز سیگموید است.

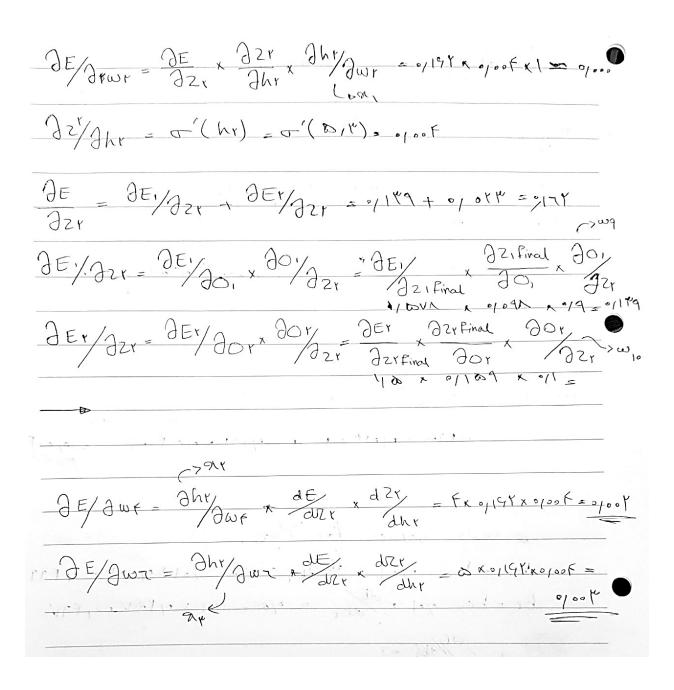
هم چنین در مشتق گیری ها تمام محسابات تا 3 رقم اعشار انجام شده است.

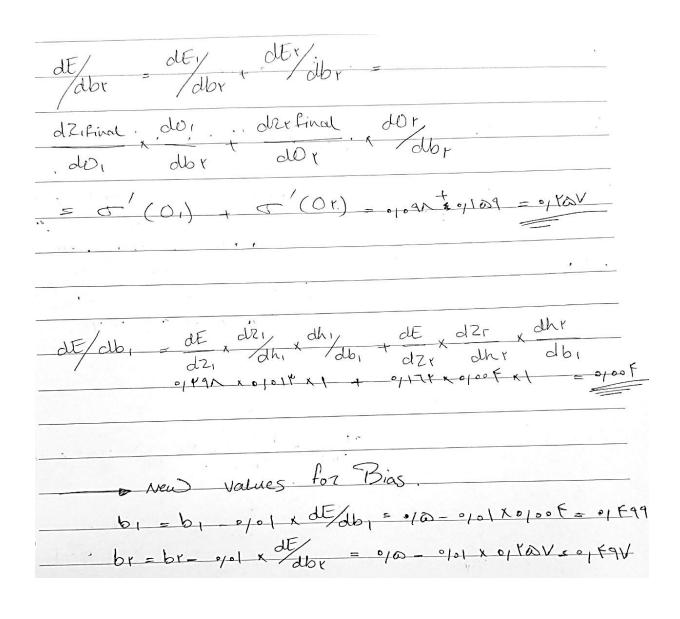
علاوه بر لایه ی hidden، برای لایه ی خروجی نیز تابع سیگموید در نظر گرفته شده است.











wi= wi- 9/01 x dE dwi W+ = 0/1 × 0/01 0 = 0/499 W4 = 018 -0101 x 0100 Y = 01 499 (NO = 0/0 × 0/0/9 = 0/41 W7 = 017 -010/ x 0/00 = 0/099 1PT10= 70110 x 10103-V10 = VW VPV = = 0/0/03-1/0 = 0/V9V W9 50/9-010/20/128 50/191 W10 = 0/1 - 0/01 x 0/14 = 0/09V new values for weights.