Συσταδοποιήση σημάτων πρωτεϊνών

Πουλάκης Βασίλειος

Ελληνικό Ανοιχτό Πανεπιστήμιο

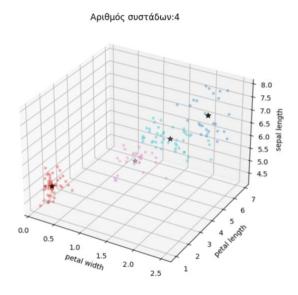
Τμήμα πληροφορικής, προγραμματισμός σε γλώσσα python

Πίνακας περιεχομένων

Περίληψη	3
Αρχικός σχεδιασμός	4
Ενσωμάτωση γραφημάτων Matplotlib στο Tkinter με το FigureCanvasTkAgg	6
Ο Αλγόριθμος Kmeans	10
Υπολογισμός στατιστικών	12
Εισαγωγή Dataset	12
Προβολή Dataset	14
Αναφορές	18

Περίληψη

Σχεδιασμός και υλοποίηση εφαρμογής μηχανικής μάθησης (συσταδοποιήσης) με τη χρήση αντικειμενοστραφούς προγραμματισμού σε γλώσσα python. Η εφαρμογή υλοποιήθηκε στα πλαίσια της τελικής εξέτασης του μαθήματος ΠΛΗΠΡΟ του ΕΑΠ 2022/2023

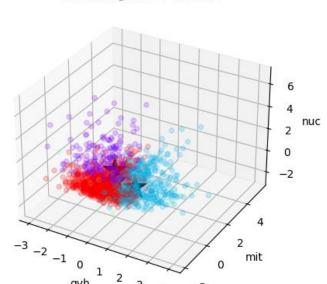


Εικόνα 1Το dataset Iris(εφαρμογή LoadanyDatat.py)

Αρχικός σχεδιασμός

Η εκφώνηση του project09 για την εκπόνηση της τελικής εργασίας στα πλαίσια του Μαθήματος προγραμματισμός σε γλώσσα Python προέβλεπε την σχεδίαση και υλοποίηση Εφαρμογής ομαδοποίησης σημάτων πρωτεϊνών. Ο χρήστης θα μπορεί μέσα από το περιβάλλον χρήσης να ορίσει τα χαρακτηριστικά που θα λαμβάνονται υπόψη για να εκτελεστεί ομαδοποίηση. Στην φάση του σχεδιασμού, σε συνεργασία με τη κ. Συρίγου αποφασίσαμε να χωρίσουμε το project σε 2 μέρη. Το πρώτο αφορούσε το κομμάτι της εξαγωγής στατιστικών από το σύνολο δεδομένων yeast.data καθώς και τη δημιουργία γραφικής παράστασης των στατιστικών αλλά και η υλοποίηση της ομαδοποίησης με τον αλγόριθμο kmeans.

Το δεύτερο αφορούσε το σχεδιασμό και την υλοποίηση της γραφικής διεπαφής χρήστη (Graphic User Interface) το οποίο και ανέλαβε εκείνη, πάνω στο οποίο και θα προσαρμοζόταν το κομμάτι της 'μηχανικής μάθησης' της εφαρμογής όπου και ανέλαβα προσωπικά.



Clustering into 5 clusters

Εικόνα 2 συσταδοποιήση σε 5 clusters 3 χαρακτηριστικών του dataset yeast

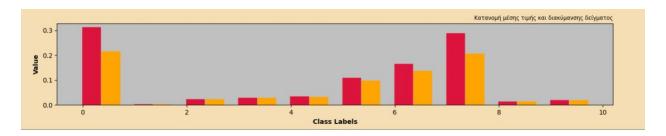
Αφού μελέτησα την περιγραφή του project09 ξεκίνησα με την χρήση *Jupiter notebook* μια πιο 'κλασσική' προσέγγιση του προβλήματος της επεξεργασίας του συνόλου δεδομένων yeast.data .

(Ζητούμενο 1-2)

Αρχικά με τη χρήση της βιβλιοθήκης pandas 'διάβασα΄ το σύνολο δεδομένων διέγραψα την πρώτη στήλη και μετέτρεψα τις τιμές της τελευταίας στήλης από κατηγορικού τύπου σε binary, με χρήση της μεθόδου pd.get_dummies όπου και προέκυψε μια νέα μορφή του συνόλου δεδομένων.

(Ζητούμενο 3)

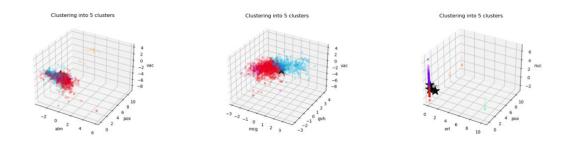
Κατόπιν, βάση αυτής της μορφής του dataset υπολογίστηκαν τα στατιστικά στοιχεία της γραφικής παράστασης που εμφανίζεται στο αρχείο clustering.py της τελικής εφαρμογής.



Εικόνα 3 Ραβδόγραμμα για τη μεταβλητή κλάσης Class Distribution τον Αριθμητικό Μέσο και τη Διακύμανση

(Ζητούμενο 4)

Στη συνέχεια έφτιαξα ένα μοντέλο Kmeans που εκτύπωνε 3D scatter plot για όλους του πιθανούς συνδυασμούς ανά 3 όλων των χαρακτηριστικών με τη βοήθεια της βιβλιοθήκης itertools

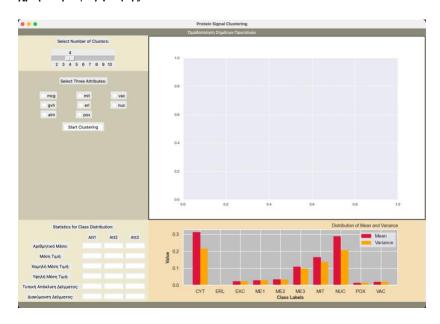


Εικόνα 4Μερικοί από του συνδυασμούς που προέκυψαν.

Ενσωμάτωση γραφημάτων Matplotlib στο Tkinter με το FigureCanvasTkAgg

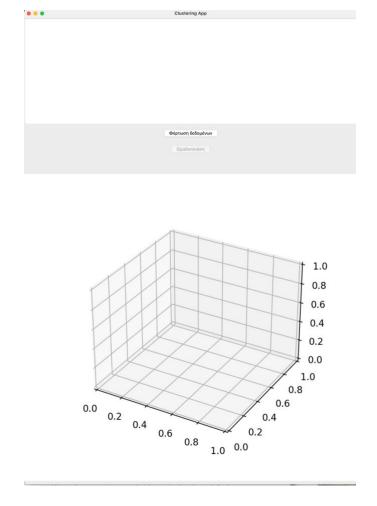
Ωστόσο η κ. Συρίγου είχε ετοιμάσει τη γραφική διεπαφή της τελικής εφαρμογής η οποία όμως δεν συνδέονταν ακόμα με το κομμάτι που είχα ετοιμάσει.

Έτσι ξεκινήσαμε μια διαφορετική προσέγγιση του προβλήματος και φτιάξαμε μια ξεχωριστή εφαρμογή clusters.py που αποτέλεσε και την λύση του προβλήματος της διαδραστικότητας χρήστη-εφαρμογής.



Εικόνα 5 εφαρμογή με διαχειριστή γεωμετρίας grid πριν την εισαγωγή του Canvas

Το Matplotlib παρέχει πολλές κλάσεις που επιτρέπουν την ενσωμάτωση γραφημάτων Matplotlib και χαρακτηριστικών σχεδίασης στο *Tkinter GUI*. Μία από αυτές τις κλάσεις είναι το FigureCanvasTkAgg που είναι ένας ειδικός καμβάς στον οποίο μπορούν να σχεδιαστούν γραφήματα *Matplotlib* και να εισαχθούν στο *Tkinter GUI* ως κανονικό γραφικό στοιχείο *Tkinter*.



Εικόνα 6 η εφαρμογή Clustering App με διαχειριστή γεωμετρίας pack και
Το FigureCanvasTkAgg.

Όταν δημιουργείται μια γραφική παράσταση ή μια εικόνα χρησιμοποιώντας το Matplotlib, υπάρχει στη μνήμη και πρέπει να αποδοθεί για εμφάνιση. Η κλάση FigureCanvasTkAgg παρέχει μια γέφυρα μεταξύ των αντικειμένων σχήματος του Matplotlib και του πλαισίου GUI του Tkinter, επιτρέποντάς σας να εμφανίζετε εικόνες Matplotlib σε ένα παράθυρο Tkinter.

Πώς λειτουργεί το FigureCanvasTkAgg:

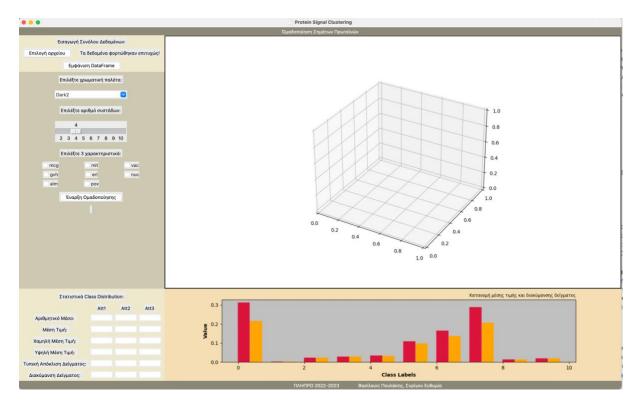
Δημιουργία σχήματος: Αρχικά, πρέπει να δημιουργούμε ένα figure *Matplotlib*. Αυτό γίνεται συνήθως χρησιμοποιώντας τη συνάρτηση pyplot.subplots(), η οποία επιστρέφει ένα αντικείμενο σχήματος και έναν ή περισσότερα αντικείμενα αξόνων.

Δημιουργία ενός στιγμιότυπου του FigureCanvasTkAgg: Αφού έχουμε δημιουργήσει ένα σχήμα, δημιουργούμε ένα στιγμιότυπο του FigureCanvasTkAgg περνώντας το αντικείμενο σχήμα και ένα κύριο αντικείμενο (παράθυρο) Tkinter ως ορίσματα. Αυτό δημιουργεί έναν καμβά που σχετίζεται με τη φιγούρα(figure).

Σχεδίαση του σχήματος: Αφού δημιουργήσουμε τον καμβά, καλούμε τη μέθοδο draw() στο αντικείμενο του καμβά. Αυτό θα αποδώσει τη φιγούρα στον καμβά, καθιστώντας την έτοιμη για προβολή.

Τοποθέτηση του καμβά στο παράθυρο Tkinter: Για να εμφανίσουμε το σχήμα, χρησιμοποιούμε τη μέθοδο $get_tk_widget()$. Αυτό το γραφικό στοιχείο μπορεί στη συνέχεια είτε με τον διαχειριστή grid είτε με τον pack να τοποθετηθεί στο παράθυρο του Tkinter όπως οποιοδήποτε άλλο γραφικό στοιχείο Tkinter.

Βρόχος συμβάντος *Tkinter*: Τέλος, με τη χρήση της μεθόδου *mainloop()* του κύριου αντικειμένου *Tkinter* το σχήμα Matplotlib εμφανίζεται και αλληλοεπιδρά με το χρήστη.



Εικόνα 7Ενσωμάτωση της κλάσης FigureCanvasTkAgg στο GUI.

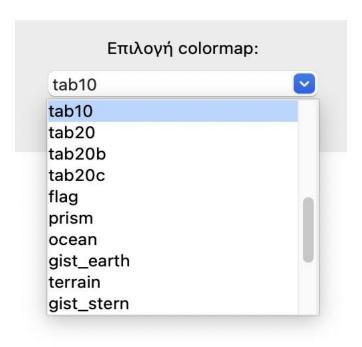
Ο Αλγόριθμος Kmeans

Πλέον και η μέθοδος του αλγόριθμου Kmeans τροποποιήθηκε στο να εκτελεί συσταδοποιήση κάνοντας .fit μόνο στα επιλεγμένα χαρακτηριστικά κάθε φορά που αυτά επιλέγονται από το χρήστη. (Σε αυτή τη φάση ο Kmeans χρησιμοποιήθηκε σαν μαύρο κουτί)

Αυτό που παραμετροποιήθηκε εκτός την επιλογή των χαρακτηριστικών ήταν ο αριθμός των συστάδων που επιλέγεται από το χρήστη καθώς και σε δεύτερη φάση η επιλογή της χρωματικής παλέτας(cmap) απόδοσης των σχηματιζόμενων συστάδων.

Στο πλαίσιο της ομαδοποίησης *kmeans*, το cmap αντιπροσωπεύει μια παράμετρο που χρησιμοποιείται στην οπτικοποίηση δεδομένων για να καθορίσει τον χρωματικό χάρτη που αντιστοιχεί τα χρώματα διαφόρων ομάδων ή σημείων δεδομένων.

Υπάρχουν διάφοροι χρωματικοί χάρτες διαθέσιμοι στο matplotlib, και ο χρήστης μπορεί να επιλέξει αυτόν που ταιριάζει καλύτερα στις ανάγκες οπτικοποίησής.



Εικόνα 8Μενού επιλογής colormap χρωμάτων της βιβλιοθήκης matplotlib

Υπολογισμός στατιστικών

Ο υπολογισμός των στατιστικών που προβάλλονται στην εφαρμογή υλοποιήθηκε με τις αντίστοιχες μεθόδους της βιβλιοθήκης pandas('Mean', 'Median', 'Minimum', 'Maximum', 'Variance', 'Standard Deviation')

Εισαγωγή Dataset

Η περιγραφή του αρχικού project αφορούσε την εισαγωγή και επεξεργασία/συσταδοποιήση ενός dataset του yeast.data. Στην εφαρμογή 'γέφυρα' (Loadany Data) δίνεται η δυνατότητα επεξεργασίας και άλλων συνόλων δεδομένων, μεταξύ αυτών το iris.data καθώς και το

				🗟 Εφαρμ	ιογή συστο	ιδοποίησης	με Kmean	s	
		CTG 2	2.xls						
DS	0.0 0.0 0.0 0.0 2.0 2.0 0.0 0.0	wineq HTRU ecoli.c yeast. abalor iris.da Data_	data ne.data ta Cortex_I tTissue.>	hite.csv Nuclear.xls					DP.1 0000 0000 0000 0000 2099 2805 0000 0000 0000
.0	0.0 0.0 1.0 1.0 0.0 1.0	0.0 0.0 0.0 0.0 0.0	131.0 131.0 130.0 130.0 130.0 131.0 130.0	0.005076 0.009077 0.005838 0.005571 0.006088 0.001524 0.002845	0.072335 0.222390 0.407840 0.380223 0.441400 0.382622 0.450925	0.007614 0.006051 0.004170 0.004178 0.004566 0.003049 0.005690	0.002538 0.001513 0.005004 0.004178 0.004566 0.004573 0.004267	0.000000 0.000000 0.000000 0.000000 0.000000	0.000000 0.000000 0.000834 0.001393 0.000000 0.001524 0.001422

Εικόνα 9Μενού επιλογής συνόλου δεδομένων της εφαρμογής LoadanyData

CTG 2 του project08.

13

Η επιλογή των παραπάνω συνόλων δεδομένων έγινε με βάση το μέγεθος τον αριθμό των χαρακτηριστικών ,την μορφή των χαρακτηριστικών(numerical) καθώς και τη διαθεσιμότητα. Η εισαγωγή γίνεται με τις μεθόδους pd.read της βιβλιοθήκης pandas αλλά και την εισαγωγή των αρθρωμάτων xlrd και openpyxl(για αρχεία xls,xlsx).

Για την εύρεση/φόρτωση των αρχείων χρησιμοποιήθηκε το άρθρωμα *os* και πιο συγκεκριμένα το os.path που περιέχει μερικές χρήσιμες συναρτήσεις για τα path των αρχείων. Η μέθοδος os.path.abspath() επιστρέφει το 'απόλυτο' όνομα διαδρομής στη διαδρομή που έχει περάσει ως παράμετρος σε αυτήν τη συνάρτηση.

 $base_dir = os.path.dirname(os.path.abspath(__file__))$

Προβολή Dataset

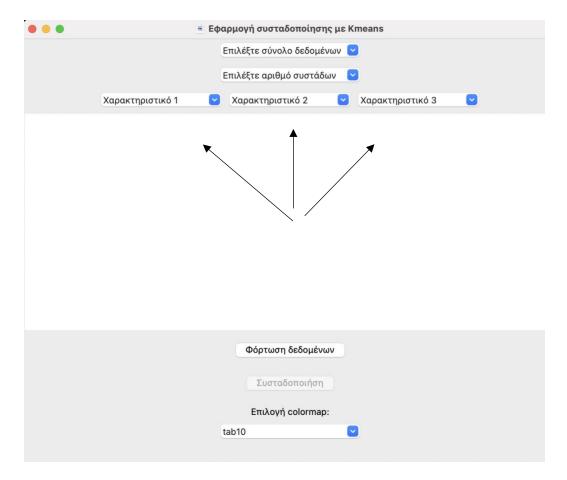
yeast.data											
	Sequence Name	mcg	gvh	alm	mit	erl	pox	vac	nuc	Class Distribution	
0	ADT1_YEAST		0.61	0.47	0.13	0.5	0.00	0.48	0.22	MIT	
1	ADT2_YEAST	0.43	0.67	0.48	0.27	0.5	0.00	0.53	0.22	MIT	
2	ADT3 YEAST	0.64	0.62	0.49	0.15	0.5	0.00	0.53	0.22	MIT	
2	AAR2_YEAST	0.58	0.44	0.57	0.13	0.5	0.00	0.54	0.22	NUC	
4	AATM_YEAST	0.42	0.44	0.48	0.54	0.5	0.00	0.48	0.22	MIT	
5	AATC_YEAST	0.51	0.40	0.56	0.17	0.5	0.50	0.49	0.22	CYT	
6	ABC1_YEAST	0.50	0.54	0.48	0.65	0.5	0.00	0.53	0.22	MIT	
	BAF1_YEAST	0.48	0.45	0.59	0.20	0.5	0.00	0.58	0.34	NUC	
8	ABF2_YEAST	0.55	0.50	0.66	0.36	0.5	0.00	0.49	0.22	MIT	
9	ABP1_YEAST	0.40	0.39	0.60	0.15	0.5	0.00	0.58	0.30	CYT	
10	ACE1_YEAST	0.43	0.39	0.54	0.21	0.5	0.00	0.53	0.27	NUC	
11	ACE2_YEAST		0.37	0.59	0.20	0.5	0.00	0.52	0.29	NUC	
12	ACH1_YEAST	0.40	0.42	0.57	0.35	0.5	0.00	0.53	0.25	CYT	
13	ACON_YEAST		0.40	0.52	0.46	0.5	0.00	0.53	0.22	MIT	
14	ACR1_YEAST	0.66	0.55	0.45	0.19	0.5	0.00	0.46	0.22	MIT	
15	ACT_YEAST	0.46	0.44	0.52	0.11	0.5	0.00	0.50	0.22	CYT	
16	ACT2_YEAST		0.39	0.50	0.11	0.5	0.00	0.49	0.40	CYT	
17	ACT3_YEAST	0.58	0.47	0.54	0.11	0.5	0.00	0.51	0.26	NUC	
18	ACT5_YEAST	0.50	0.34	0.55	0.21	0.5	0.00	0.49	0.22	NUC	
19	ADA2_YEAST		0.60	0.55	0.21	0.5	0.00	0.50	0.25	NUC	
20	C1TC_YEAST	0.45	0.40	0.50	0.16	0.5	0.00	0.50	0.22	CYT	
21	PUR4_YEAST	0.43	0.44	0.48	0.22	0.5	0.00	0.51	0.22	CYT	
22	PUR3_YEAST	0.73	0.63	0.42	0.30	0.5	0.00	0.49	0.22	CYT	

Εικόνα 10 Προβολή του yeast dataset στην εφαρμογή LoadanyData.py

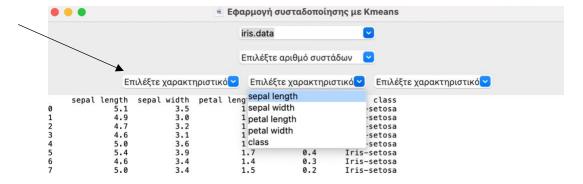
Στην εφαρμογή LoadanyData.py γίνεται χρήση του text widget της βιβλιοθήκης Tkinter όπου το dataset που επιλέγεται/φορτώνεται μετατρέπεται σε συμβολοσειρά χρησιμοποιώντας τη μέθοδο to_string(),και στη συνέχεια προβάλλεται στο πλαίσιο κειμένου text widget με τη μέθοδο (self.text.insert(tk.END, data_str).

Επιλογή Χαρακτηριστικών(με Comboboxes)

Σε αυτήν τη βελτιωμένη έκδοση της εφαρμογής είναι ενδεικτική η ευκολία που επιλέγονται τα χαρακτηριστικά του εκάστοτε συνόλου δεδομένων για συσταδοποίηση, με τη χρήση των Comboboxes.



Εικόνα 11Ta Comboboxes



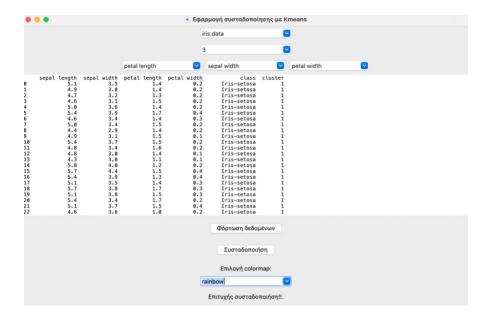
Εικόνα 12 Επιλογή χαρακτηριστικών με Comboboxes

Τα συγκεκριμένα *Comboboxes* δημιουργήθηκαν με μια επαναληπτική δομή for.

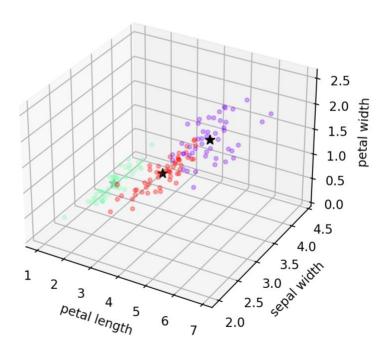
Στη συνέχεια όταν πλέον έχει φορτωθεί/επιλεγεί σύνολο δεδομένων με δεύτερη επαναληπτική δομή for,οι στήλες του συνόλου δεδομένων μετατρέπονται σε λίστα και κατόπιν γίνονται τα 'values' των *Comboboxes*.

Και τέλος με μία τρίτη επαναληπτική δομή for τα 3 επιλεγμένα χαρακτηριστικά αποθηκεύονται στη λίστα selected_features και τέλος με την βοήθεια ενός list comprehension γίνεται ένας έλεγχος έτσι ώστε στην επόμενη επανάληξη του βρόχου το χαρακτηριστικό που έχει ήδη επιλεγεί να μην είναι διαθέσιμο στα υπόλοιπα *Comboboxes*.

Screenshots

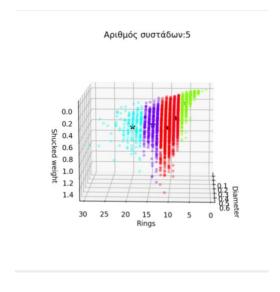


Αριθμός συστάδων:3

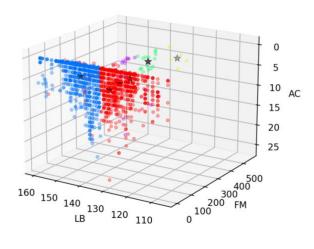


← → ↑ Q 至 🖺 x=4.5050, y=4.6851, z=2.948

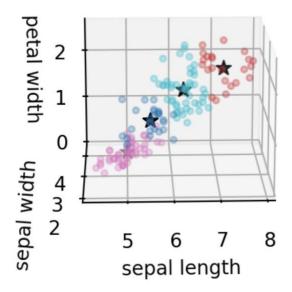
Εικόνα 13Iris dataset



Εικόνα14 Abalone dataset



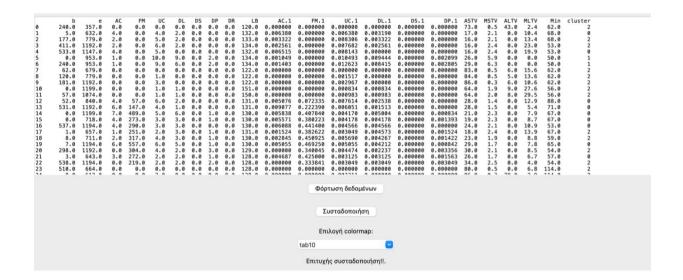
Εικόνα 15 CTG dataset

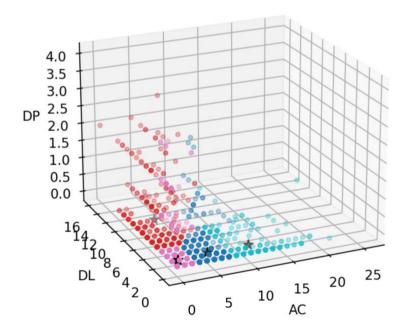


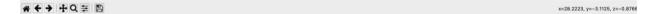
Εικόνα 16 Iris dataset

Χρόνος εκτέλεσης

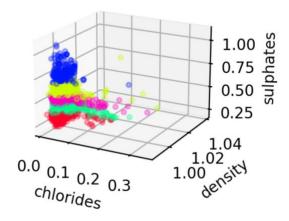
Το προγραμματιστικό project εκπονήθηκε από το Φεβρουάριο του 2023 όπου και έγινε η ανάθεση μέχρι και σήμερα 14 Ιουνίου 2023. Υπολογίζεται ότι για την υλοποίηση του χρειάστηκαν γύρω στις 100 ώρες οι οποίες συμπεριλαμβάνουν τις συναντήσεις με την κ. Συρίγου κυρίως, προσωπική μελέτη και προγραμματισμό, άλλα και τις συναντήσεις καθοδήγησης με τον κ.Χαιρή Κιούρτ.



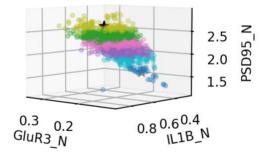




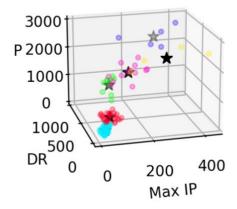
Εικόνα 17 CTG 2 dataset



Αριθμός συστάδων:6

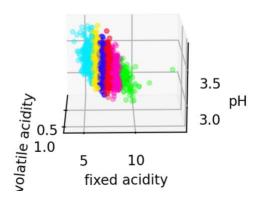


Αριθμός συστάδων:6

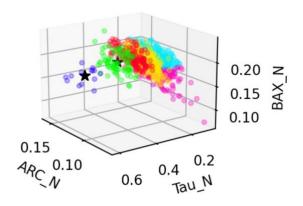


Εικόνα 18 ομαδοποιήσεις με την εφαρμογή LoadanyDataset

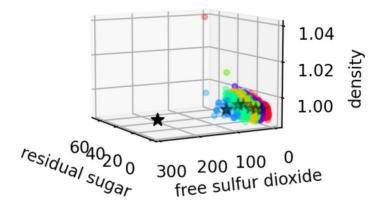
Αριθμός συστάδων:6



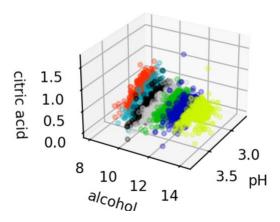
Αριθμός συστάδων:6



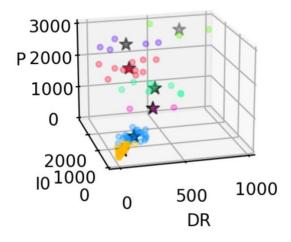
Αριθμός συστάδων:7



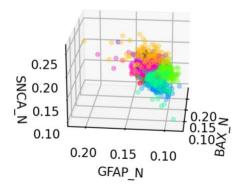
Αριθμός συστάδων:7



Αριθμός συστάδων:7



Αριθμός συστάδων:7



Βιβλιογραφία

Αβούρης, Ν.,Παλιουράς, Β,.Καζιρας, Σ,.Κουκιάς, Μ. (2012). Εισαγωγή στους Υπολογιστες με την Python Εκδόσεις Πανεπιστημίου Πατρών Πάτρα.

Βακαλή , Α.,Γιαννόπουλος, Η,.Ιωαννίδης, Χ,.Κοιλιάς, Χ. Μάλαμας , Κ (2012). Ανάπτυζη εφαρμογών σε προγραματιστικό περιβάλλον.

Raschka, S. (2015). Python Machine Learning. United Kingdom: Packt Publishing.

Moore, A. D. (2018). Python GUI Programming with Tkinter: Develop Responsive and Powerful GUI Applications with Tkinter.

Grus, J. (2015). Data Science from Scratch: First Principles with Python. Japan: O'Reilly.

Jones, B. K., Beazley, D. (2013). Python Cookbook: Recipes for Mastering Python 3. United States: O'Reilly Media.

Rossant, C. (2015). Learning IPython for Interactive Computing and Data Visualization. United Kingdom: Packt Publishing

Markelle Kelly, Rachel Longjohn, Kolby Nottingham,

The UCI Machine Learning Repository, https://archive.ics.uci.edu