Kỷ yếu Hội nghị Quốc gia lần thứ X về Nghiên cứu cơ bản và ứng dụng Công nghệ thông tin (FAIR), Đà Nẵng, ngày 17-18/08/2017
DOI: 10.15625/vap.2017.00099

SO SÁNH MÔ HÌNH HỌC SÂU VỚI CÁC PHƯƠNG PHÁP HỌC TỰ ĐỘNG KHÁC TRONG PHÂN LỚP DỮ LIỆU BIỂU HIỆN GEN MICROARRAY

Huỳnh Phước Hải [1], Nguyễn Văn Hòa[1], Đỗ Thanh Nghị[2]

[1] Khoa Công nghệ thông tin, Trường Đại học An Giang
[2] Khoa Công nghệ thông tin & Truyền thông, Đại học Cần Thơ

hphai@agu.edu.vn, nvhoa@agu.edu.vn, dtnghi@cit.ctu.edu.vn

***TÓM TẮT**: Hiện nay các mô hình học sâu (Deep Learning) tiêu biểu như mô hình mạng nơron tích chập (Convolutional Neural Networks - CNNs) được ứng dụng thành công trong bài toán phân lớp ảnh, văn bản, nhận dạng tiếng nói. Ưu điểm của các mô hình học sâu là tự động học các đặc trưng của dữ liệu để thiết lập các đặc trưng mới và phân lớp dữ liệu. Trong bài báo này chúng tôi đề xuất xây dựng mô hình kiến trúc mạng nơron tích chập để phân lớp dữ liệu biểu hiện gen microarray có số chiều lớn. Kết quả thực nghiệm trên 10 tập dữ liệu biểu hiện gen microarray được lấy từ ngân hàng dữ liệu y sinh (Kent Ridge) và cơ sở dữ liệu Gene Expression Omnibus (GEO) của NCBI cho thấy rằng mô hình mạng nơron tích chập có độ chính xác cao hơn các mô hình đơn giản như k láng giềng (k Nearest Neighbors - kNN), cây quyết định (Decision Tree). Mạng nơron tích chập đạt được độ chính xác tương đương với mô hình máy học véctơ hỗ trợ (Support Vector Machines - SVM), rừng ngẫu nhiên (Random Forest) và tốt hơn so với Adaboost và Bagging của cây quyết định.*

***Từ khóa**: Mô hình học sâu, mạng nơron tích chập, phân lớp dữ liệu biểu hiện gen microarray, k láng giềng, cây quyết định, máy học véctơ hỗ trợ, rừng ngẫu nhiên, Bagging, Adaboost.*

I. GIỚI THIỆU

Trong những thập kỷ gần đây, mặc dù có nhiều nghiên cứu trong điều trị bệnh ung thư tuy nhiên chưa mang lại hiệu quả thực sự hiệu quả cho bệnh nhân do sự liên quan phức tạp giữa các yếu tố di truyền, mô học, đột biến gen ở các khối u (Perou et al., 2000). Việc phân lớp chính xác các khối u rất quan trọng và cần thiết để chẩn đoán điều trị bệnh ung thư thành công (Pawitan et al., 2005). Bằng cách theo dõi mức độ biểu hiệu của số lượng lớn các gen trong một thí nghiệm giúp khám phá ra vai trò của các gen cụ thể trong quá trình điều trị bệnh (Schena et al., 1995). Sự phát triển của các công nghệ chip dữ liệu biểu hiện gen đã tạo ra các bộ dữ liệu có số mẫu nhỏ và số chiều rất lớn được phân tích từ cường độ biểu hiện gen của các tế bào ung thư thu được từ các thí nghiệm microarray gọi là dữ liệu biểu hiện gen microarray (microarray gene expression data - MGE).

Phân lớp dữ liệu có số chiều lớn thường được biết là một trong 10 vấn đề khó của cộng đồng khai mỏ dữ liệu (Yang & Wu, 2006). Mô hình phân lớp cho kết quả tốt trên tập huấn luyện nhưng có kết quả thấp trên tập kiểm tra. Vấn đề khó khăn thường gặp chính là dữ liệu có số chiều quá lớn lên đến hàng nghìn chiều và dữ liệu tách rời nhau trong không gian có số chiều lớn nên việc tìm mô hình phân lớp tốt là khó khăn do có quá nhiều khả năng lựa chọn mô hình. Để tìm kiếm một mô hình phân lớp hiệu quả (phân lớp dữ liệu tốt trên tập kiểm thử) trong không gian giả thuyết lớn là vấn đề khó. Đã có nhiều giải thuật học tự động được nghiên cứu phân lớp dữ liệu có số chiều lớn như *k* láng giềng *k*NN (Fix & Hodges Jr, 1952), cây quyết định CART (Breiman et al., 1984) và C4.5 (Quinlan, 1983), Bagging (Breiman, 1996), Adaboost (Freund & Schapire, 1996), rừng ngẫu nghiên (Breiman, 2001) và máy học véctơ hỗ trợ SVM (Vapnik, 1995).

Những năm qua, mô hình học sâu đặc biệt là mạng nơron tích chập CNNs là mô hình được sử dụng phổ biến trong cộng đồng máy học cho hiệu quả trong các bài toán phân loại hình ảnh (Krizhevsky et al., 2012), phân loại văn bản (Kim, 2014) và gần đây đã có nhiều nghiên cứu sử dụng mạng nơron tích chập trong lĩnh vực tin sinh học (Min et al., 2016) như phân tích Protein (Zacharaki, 2017), phân tích ảnh y khoa (Li et al., 2014). Ưu điểm của CNNs là tận dụng được tính năng trích chọn đặc trưng của lớp tích chập và bộ phân lớp được huấn luyện đồng thời. Ý tưởng học cùng lúc đặc trưng và bộ phân lớp có thể hỗ trợ với nhau trong quá trình huấn luyện và quá trình phân lớp tìm ra các tham số phù hợp với các véctơ đặc trưng tìm được từ lớp tích chập và ngược lại lớp tích chập điều chỉnh các tham số của lớp tích chập để cho các véctơ đặc trưng thu được là tuyến tính phù hợp với bộ phân lớp của lớp cuối cùng. Đến thời điểm hiện nay, chưa có nghiên cứu sử dụng CNNs trong phân lớp dữ liệu biểu hiện gen MGE. Trong bài viết này, chúng tôi đề xuất huấn luyện mô hình mạng tích chập CNNs để phân lớp dữ diệu MGE và so sánh hiệu quả của CNNs với các giải thuật khác như *k* láng giềng (*k*NN), cây quyết định, Bagging, Adaboost, rừng ngẫu nhiên và máy học véctơ hỗ trợ (SVM). Kết quả thực nghiệm trên 10 tập dữ liệu biểu hiện gen MGE từ kho Kent Ridge (Jinyan & Huiqing, 2002), GEO (Edgar et al., 2002) cho thấy rằng mạng nơron tích chập CNNs đạt được độ chính xác tương đương với mô hình máy học SVM, rừng ngẫu nhiên và tốt hơn so với *k* láng giềng, cây quyết định, Adaboost và Bagging của cây quyết định

Phần còn lại của bài viết được tổ chức như sau. Các nghiên cứu liên quan về mô hình phân lớp dữ liệu biểu hiện gen MGE được trình bày trong phần II. Mô hình mạng nơron tích chập phân lớp dữ liệu biểu hiện gen MGE được trình bày trong phần III. Kết quả thực nghiệm sẽ được trình bày trong phần IV trước khi kết luận và hướng phát triển trong phần V.

II. CÁC MÔ HÌNH PHÂN LỚP DỮ LIỆU BIỂU HIỆN GEN MICROARRAY

Mô hình k láng giềng (k Nearest Neighbors - kNN)

Giải thuật *k*NN (Fix & Hodges, 1952) là một giải thuật học đơn giản nhưng cho hiệu quả cao trong khai phá dữ liệu (Zhou et al., 2009). Giải thuật *k*NN không có quá trình học. Khi dự đoán lớp (nhãn) của một phần tử *x* mới đến, giải thuật *k*NN tìm trong m phần tử của tập huấn luyện *k* láng giềng của *x,* sau đó thực hiện gán lớp cho *x* dựa vào luật bình chọn số đông từ các lớp của *k* láng giềng.

Nhiều nghiên cứu sử dụng *k*NN để phân lớp dữ liệu MGE bởi tính đơn giản nhưng cho kết quả tốt. Li và các cộng sự sử dụng giải thuật di truyền để giảm chiều và phân lớp bệnh Lymphoma bằng *k*NN (Li et al., 2001). Nghiên cứu của Doudoit (Dudoit et al., 2002) đã so sánh và chứng minh *k*NN đạt kết quả phân lớp tốt trên 3 tập dữ liệu Lymphoma, Leukemia và NCI 60. Tập dữ liệu MEG về bệnh Prostate Cancer dùng *k*NN phân lớp đạt kết quả chính xác 90% (Singh et al., 2002). Ngoài ra *k*NN được sử dụng trong nhiều nghiên cứu phân lớp dữ liệu MGE trong các nghiên cứu đã được công bố trong những năm gần đây (Liu et al., 2002), (Pan et al., 2004), (Yao & Ruzzo, 2006), (Deegalla & Boström, 2007), (Parry et al., 2010), (Su et al., 2011), (Halder et al., 2015).

Mô hình cây quyết định (Decision Trees - DT)

Mô hình máy học cây quyết định (Breiman et al., 1984), (Quinlan, 1993) là mô hình máy học tự động được sử dụng rất nhiều trong khai mỏ dữ liệu (Zhou et al., 2009) với tính đơn giản và hiệu quả.

Giả sử tập dữ liệu có *m* phần tử $x_{1,}x_{2,...}x_m$ trong không gian *n* chiều có lớp tương ứng là $y_{1,}y_{2,}...y_m$. Giải thuật cây quyết định xây dựng cây bắt đầu từ nút gốc đến nút lá. Đây là giải thuật đệ quy phân hoạch tập dữ liệu theo các biến độc lập thành các siêu chữ nhật rời nhau mà ở đó các phần tử dữ liệu $x_{i,}x_{j,...}x_k$ của phân vùng (nút lá) có các $y_{i,}y_{j,}...y_k$ là thuần khiết (giống nhau trong vấn đề phân lớp). Giải thuật cây quyết định thực hiện hai bước xây dựng cây và cắt nhánh để tránh học vẹt.

Mô hình cây quyết định cũng được sử dụng để phân lớp dữ liệu MEG như trong nghiên cứu của Netto (Netto et al., 2010) và các cộng sự để phân lớp dữ liệu bệnh Leukemia, nhóm nghiên cứu của Snousy (Al Snousy et al., 2011) để phân lớp dữ liệu ung thư trên toàn bộ các gen không giảm chiều. Ngoài ra, mô hình cây quyết định được sử dụng trong một số nghiên cứu khác như (Ulfenborg et al., 2013), (Ludwig et al., 2015).

Mô hình Bagging và Boosting

Mô hình Bagging (Bootstrap AGGregatING) được (Breiman, 1996) đề xuất nhằm giảm lỗi variance nhưng không làm tăng lỗi bias quá nhiều. Giải thuật Bagging xây dựng mô hình gồm ba bước: đầu tiên từ tập dữ liệu học LS có *m* phần tử, xây dựng *T* mô hình cơ sở độc lập nhau, mô hình thứ *t* được xây dựng trên tập mẫu bootstrap thứ *t* (lấy mẫu *m* phần tử có hoàn lại từ tập học LS). Dự đoán lớp của phần tử mới đến với chiến lược bình chọn số đông thu được từ dự đoán lớp của *T* mô hình cơ sở.

Mô hình Boosting với giải thuật tiêu biểu Adaboost của (Freund & Schapire, 1996) là một phương pháp tổng quát để cải tiến độ chính xác của các bộ phân lớp yếu. Mô hình Adaboost được xây dựng bằng cách lặp lại việc huấn luyện tuần tự các bộ phân lớp yếu *T* lần, mỗi lần lặp huấn luyện bộ phân lớp yếu từ dựa trên tập dữ liệu được lấy mẫu từ tập huấn luyện tập trung vào các phần tử bị phân lớp sai trong các lần lặp trước đó. Phân loại phần tử mới sử dụng kết quả bình chọn trọng số từ *T* bộ phân lớp yếu.

Mô hình Bagging và Boosting được Tan và Gilbert sử dụng để phân loại 7 tập dữ liệu MGE đã cho thấy hiệu quả của Bagging và Boosting tốt hơn so với cây quyết định (Tan & Gilbert, 2003). Bagging được kết hợp với Boosting qua nghiên cứu của (Dettling, 2004) để phân lớp bệnh ung thư. Nghiên cứu của Osareh và Shadgar đã so sánh hiệu quả của giải thuật Adaboost, Bagging với các phương pháp khác trên 8 tập dữ liệu MGE, giải thuật Adaboost và Bagging đạt hiệu quả cao trên đa số các tập dữ liệu đã chọn (Osareh & Shadgar, 2013).

Mô hình Rừng ngẫu nhiên (Random Forest)

Rừng ngẫu nhiên (Breiman, 2001) là một trong những phương pháp tập hợp mô hình thành công nhất. Giải thuật rừng ngẫu nhiên xây dựng cây không cắt nhánh nhằm giữ cho bias thấp và dùng tính ngẫu nhiên để điều khiển tính tương quan thấp giữa các cây trong rừng. Rừng ngẫu nhiên tạo ra một tập hợp các cây quyết định không cắt nhánh, mỗi cây được xây dựng trên tập mẫu bootstrap, tại mỗi nút phân hoạch tốt nhất được thực hiện từ việc chọn ngẫu nhiên một tập con các thuộc tính. Lỗi tổng quát của rừng ngẫu nhiên phụ thuộc vào độ chính xác của từng cây thành viên trong rừng và sự phụ thuộc lẫn nhau giữa các cây thành viên. Giải thuật rừng ngẫu nhiên cho độ chính xác cao khi so sánh với các thuật toán học có giám sát hiện nay, chịu đựng nhiễu tốt.

Nghiên cứu tổng hợp các giải thuật phân lớp trên dữ liệu MGE của Diaz-Uriarte và các cộng sự cho thấy hiệu quả sử dụng rừng ngẫu nhiên để phân lớp 9 tập dữ liệu bằng *k*NN và SVM (Díaz-Uriarte & Alvarez de Andrés, 2006). Rừng ngẫu nhiên cho thấy hiệu quả tốt hơn khi thực hiện phân lớp các tập dữ liệu y sinh với số chiều cực lớn khi được so sánh với các giải thuật Bagging và *k*NN qua các nghiên cứu (Statnikov et al., 2008) và (Pirooznia et al., 2008). Một số nghiên cứu cải tiến giải thuật rừng ngẫu nhiên như (Đỗ Thanh Nghị et al., 2010), (Đỗ Thanh Nghị et al., 2016) đã

cải thiện hiệu quả của rừng ngẫu nhiên cao hơn so với tiếp cận truyền thống và tương đương với SVM. Với hiệu quả cao giải thuật rừng ngẫu nhiên được sử dụng nhiều trong các nghiên cứu phân lớp dữ liệu MGE (Moorthy & Mohamad, 2011), (Chen & Ishwaran, 2012), (Aytekin et al., 2016), (Nishiwaki et al., 2017).

Mô hình máy học véctơ hỗ trợ (Support Vector Machines - SVM)

Mô hình máy học SVM dựa trên lý thuyết học thống kê của Vapnik (Vapnik, 1978). Trong vấn đề phân lớp nhị phân (2 lớp dương và âm), giải thuật SVM (Vapnik, 1995) tìm siêu phẳng tối ưu để cho phân hoạch các điểm dữ liệu thành 2 phần sao cho các điểm cùng một lớp nằm về một phía của siêu phẳng. Siêu phẳng tối ưu là siêu phẳng tách 2 lớp ra xa nhất có thể dựa trên 2 siêu phẳng hỗ trợ song song của 2 lớp, siêu phẳng phân lớp tối ưu là siêu phẳng nằm giữa 2 siêu phẳng hỗ trợ. Khoảng cách giữa 2 siêu phẳng hỗ trợ được gọi là lề. Có thể thấy rằng lề phân hoạch càng lớn thì mô hình phân lớp càng an toàn. Những phần tử nằm ngược phía với siêu phẳng hỗ trợ được coi như lỗi. Giải thuật SVM tìm siêu phẳng tối ưu cần phải cực đại hóa lề và cực tiểu hóa lỗi. Trong phân lớp đa lớp (nhiều hơn 2 lớp), SVM có thể xây dựng trực tiếp mô hình tối ưu cho k lớp ($k>2$) như đề xuất của (Weston, 1999). Trong thực tế có ba phương pháp được sử dụng là 1-vs-all của (Vanik, 1995), 1-vs-1 của (Kreel, 1999) và phân tách hai nhóm của (Vural, 2004)

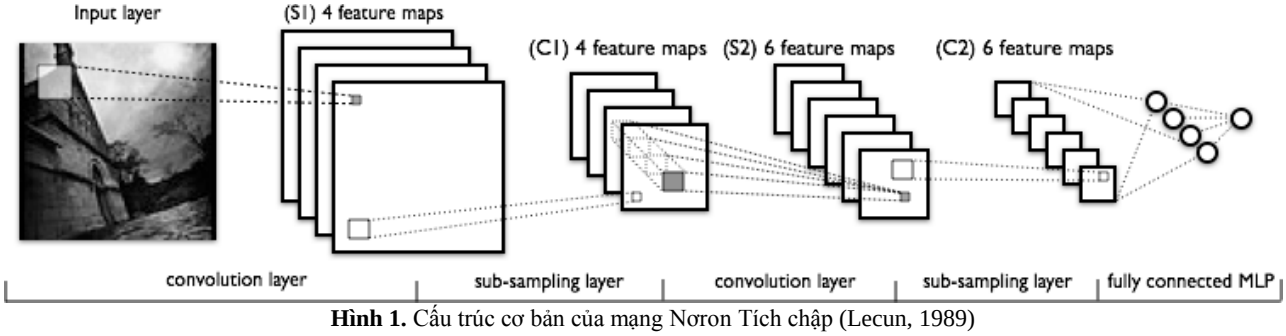
Máy học véctơ hỗ trợ được sử dụng nhiều để phân lớp dữ liệu MGE như nghiên cứu của Mukherjee (Mukherjee et al., 1999) phân loại bệnh Leukemia thu được độ chính xác đạt 100% trên tập dữ liệu có 7129 gen. Nghiên cứu của Furey (Furey et al., 2000) sử dụng SVM để phân lớp bệnh Ovarian bằng kỹ thuật xếp hạng gen để giảm chiều và dùng SVM để phân lớp. Nổi bật nhất và được trích dẫn nhiều nhất là nghiên cứu của nhóm tác giả Isabelle Guyon (Guyon et al., 2002) đã sử dụng SVM để giảm chiều và xây dựng mô hình phân lớp với độ chính xác cao khi phân lớp dữ liệu MGE thu từ bệnh ung thư đại tràng. Kết quả của nghiên cứu này cho thấy SVM có hiệu quả tốt với độ chính xác 98%. Ngoài ra nghiên cứu của Guyon đã chứng minh được các gen được lựa chọn bằng kỹ thuật SVM sẽ xây dựng được bộ phân lớp tốt hơn trong việc phân loại bệnh ung thư. SVM còn được sử dụng trong rất nhiều nghiên cứu khác như trong những năm gần đây như (Li et al., 2004), (Chuang et al., 2005), (Phan et al., 2005), (Huerta et al., 2006), (Alba et al., 2007), (Hsieh et al., 2010), (Vanneschi et al., 2011), (Nagi et al., 2012), (Statnikov et al., 2013), (Vanitha et al., 2015), (Cogill & Wang, 2016).

III. MÔ HÌNH MẠNG NƠRON TÍCH CHẬP PHÂN LỚP DỮ LIỆU BIỂU HIỆN GEN MICROARRAY

Mạng Nơron tích chập

Mạng nơron tích chập (CNNs) (LeCun et al., 1989) là một mô hình học sâu có thể xây dựng được các hệ thống phân loại với độ chính xác cao. Ý tưởng của CNNs được lấy cảm hứng từ khả năng nhận biết thị giác của bộ não người. Để có thể nhận biết được các hình ảnh trong vỏ não người có hai loại tế bào là tế bào đơn giản và tế bào phức tạp (Hubel & Wiesel, 1968). Các tế bào đơn giản phản ứng với các mẫu hình dạng cơ bản ở các vùng kích thích thị giác và các tế bào phức tạp tổng hợp thông tin từ các tế bào đơn giản để xác định các mẫu hình dạng phức tạp hơn. Khả năng nhận biết các hình ảnh của não người là một hệ thống xử lý hình ảnh tự nhiên mạnh mẽ và tự nhiên nên CNNs được phát triển dựa trên ba ý tưởng chính: tính kết nối cục bộ (Local connectivity hay compositionality), tính bất biến (Location invariance) và tính bất biến đối với quá trình chuyển đổi cục bộ (Invariance to local transition) (LeCun et al., 2015). CNNs là một dạng mạng nơron chuyên dụng để xử lý các dữ liệu dạng lưới 1 chiều như dữ liệu âm thanh, dữ liệu MGE hoặc nhiều chiều như dữ liệu hình ảnh, video.

Cấu trúc cơ bản của CNNs gồm các lớp tích chập (Convolution layer), lớp phi tuyến (Nonlinear layer) và lớp lọc (Pooling layer) như hình 1. Các lớp tích chập kết hợp với các lớp phi tuyến sử dụng các hàm phi tuyến như ReLU hay tanh để tạo ra thông tin trừu tượng hơn (Abstract/higher-level) cho các lớp tiếp theo.



Hình 1. Cấu trúc cơ bản của mạng Nơron Tích chập (Lecun, 1989)

Các lớp liên kết trong CNNs được với nhau thông qua cơ chế tích chập. Lớp tiếp theo là kết quả tích chập từ lớp trước đó vì vậy CNNs có được các kết nối cục bộ vì mỗi nơron ở lớp tiếp theo sinh ra từ một bộ lọc được áp đặt lên một vùng cục bộ của lớp trước đó. Nguyên tắc này được gọi là kết nối cục bộ (Local connectivity). Mỗi lớp như vậy được áp đặt các bộ lọc khác nhau. Một số lớp khác như lớp pooling/subsampling dùng để lọc lại các thông tin hữu ích hơn bằng cách loại bỏ các thông tin nhiễu. Trong suốt quá trình huấn luyện, CNNs sẽ tự động học các tham số cho các lớp. Lớp cuối cùng được gọi là lớp kết nối đầy đủ (Fully connect layer) dùng để phân lớp.

Mạng nơron tích chập dùng để phân lớp dữ liệu MGE có kiến trúc mạng gồm nhiều tầng. Lớp đầu vào của mạng (Input layer) là một ma trận cường độ biểu hiện gen của dữ liệu MGE. Lớp đầu ra của mạng (Output layer) là số lớp của dữ liệu. Giữa lớp đầu vào và đầu ra gồm nhiều tầng tích chập và một lớp kết nối đầy đủ. Mỗi tầng gồm một lớp tích chập, một lớp phi tuyến và một lớp lọc. Dữ liệu khi được huấn luyện qua các tầng tích chập sẽ được phân lớp ở lớp kết nối đầy đủ sử dụng bộ phân lớp Softmax.

Lớp tích chập (Convolution)

Tích chập được sử dụng đầu tiên trong xử lý tín hiệu số. Nhờ vào nguyên lý biến đổi thông tin có thể áp dụng kĩ thuật này vào xử lý ảnh và video số. Trong lớp tích chập sử dụng một bộ các bộ lọc có kích thước nhỏ hơn với ma trận đầu vào và áp lên một vùng của ma trận đầu vào và tiến hành tính tích chập giữa bộ filter và giá trị của ma trận trong vùng cục bộ đó. Các filter sẽ dịch chuyển một bước trượt (Stride) chạy dọc theo ma trận đầu vào và quét toàn bộ ma trận. Trọng số của filter ban đầu sẽ được khởi tạo ngẫu nhiên và sẽ được học dần trong quá trình huấn luyện mô hình.

Lớp phi tuyến Relu (Rectified linear unit)

Trong kiến trúc mạng CNNs thường sử dụng hàm kích hoạt $f(x) = \max(0, x)$ chuyển toàn bộ giá trị âm trong kết quả lấy từ lớp tích chập thành giá trị 0 để tạo tính phi tuyến cho mô hình gọi là Relu. Ngoài ra còn có nhiều hàm kích hoạt khác như signmod, tang nhưng hàm Relu dễ cài đặt tính toán nhanh và hiệu quả (Krizhevsky et al., 2012).

Lớp Pooling

Lớp Pooling sử dụng một cửa sổ trượt quét qua toàn bộ ma trận dữ liệu theo một bước trượt cho trước để tiến hành lấy mẫu. Các phương thức phổ biến trong lớp Pooling là MaxPooling (lấy giá trị lớn nhất), MinPooling (lấy giá trị nhỏ nhất) và AveragePooling (lấy giá trị trung bình). Công dụng của lớp Pooling dùng để giảm kích thước dữ liệu, các tầng trong CNNs chồng lên nhau có lớp Pooling ở cuối mỗi tầng giúp cho kích thước dữ liệu được co lại nhưng vẫn giữa được các đặc trưng để lấy mẫu. Ngoài ra giảm kích thước dữ liệu sẽ giảm số lượng tham số của mạng làm tăng tính hiệu quả và kiểm soát hiện tượng học vẹt (Overfiting).

Lớp kết nối đầy đủ (Fully connect layer)

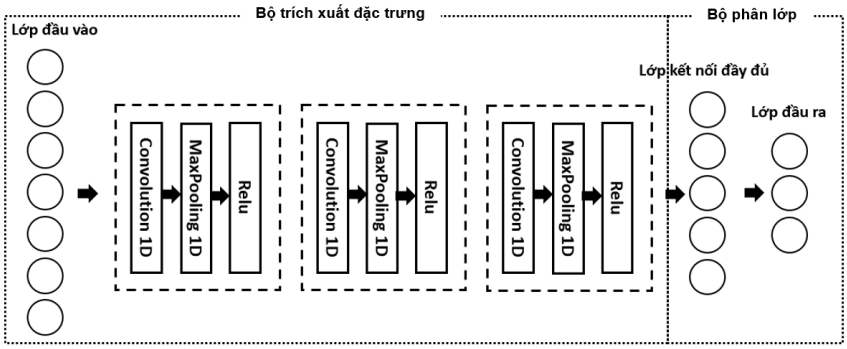
Lớp kết nối đầy đủ là một lớp giống như mạng nơron truyền thẳng các giá trị được tính toán từ các lớp trước sẽ được liên kết đầy đủ vào trong nơron của lớp tiếp theo. Tại lớp kết nối đầy đủ sẽ tiến hành phân lớp dữ liệu bằng cách kích hoạt hàm softmax để tính xác suất ở lớp đầu ra.

Mô hình mạng Nơron tích chập phân lớp dữ liệu MGE

Dữ liệu MGE đã được chuẩn hoá là một ma trận có các dòng tương ứng các mẫu bệnh còn các cột tương ứng với các gen, giá trị tại một điểm trong ma trận là cường độ biểu hiện gen của mẫu thử dữ liệu tương ứng với gen tại cột đó. Như vậy dữ liệu MGE có đặc điểm dạng lưới 1 chiều có thể sử dụng CNNs để phân lớp.

Chúng tôi đề xuất xây dựng mô hình CNNs dùng để phân lớp dữ liệu MGE có cấu trúc như hình 2. Kiến trúc mạng CNNs phân lớp dữ liệu MGE đề xuất gồm hai phần chính là bộ trích chọn đặc trưng (feature extractor) và bộ phân lớp (classifier). Bộ trích chọn đặc trưng gồm lớp đầu vào và các tầng tích chập. Lớp đầu vào nhận đầu vào là dữ liệu biểu hiện gen. Các tầng tích chập gồm lớp tích chập (Convolution 1D), lớp lọc (Maxpooling 1D), lớp phi tuyến Relu chồng lên nhau gọi là 1 tầng. Mô hình gồm nhiều tầng được xếp chồng lên nhau. Bộ phân lớp gồm một lớp của mạng nơron sử dụng softmax regression. Sau khi dữ liệu được trích suất bởi bộ trích chọn đặc trưng sẽ được phân lớp bằng bộ phân lớp.

Mô hình CNNs của chúng tôi đề xuất nói riêng và mạng CNNs nói chung có đặc điểm cả bộ trích chọn đặc trưng và bộ phân lớp được huấn luyện đồng thời. Hai bộ phận này bổ trợ cho nhau trong quá trình huấn luyện dữ liệu. Bộ phân lớp giúp tìm ra các bộ tham số hợp lý phù hợp với các vector đặc trưng tìm được. Ngược lại, bộ trích chọn đặc trưng sẽ điều chỉnh các tham số của các tầng tích chập sao cho đặc trưng thu được là tuyến tính, phù hợp với bộ phân lớp ở lớp cuối cùng.



Hình 2. Mô hình CNNs phân lớp dữ liệu biểu hiện gen microarray

Mạng CNNs sẽ được huấn luyện trên các tập dữ liệu MGE, bản chất quá trình huấn luyện là sự thay đổi các trọng số liên kết của mạng. Trong quá trình này, các trọng số của mạng sẽ hội tụ dần tới các giá trị sao cho với mỗi vector đầu vào từ tập huấn luyện, mạng CNNs sẽ cho ra vector đầu ra như phân lớp mong muốn. Để có được bộ tham số mạng phân lớp hiệu quả phân lớp cần điều chỉnh các tham số như độ dài các bộ lọc trong các lớp tích chập và pooling. Đối với các tập dữ liệu có số mẫu nhỏ và số chiều rất lớn khi huấn luyện dễ xảy ra hiện tượng overfiting. Khi đó mạng học có kết quả rất tốt trên tập huấn luyện nhưng có kết quả thấp trên tập kiểm tra. Hiện tượng này xảy ra do khi mạng được huấn luyện, mạng chuyển từ các hàm ánh xạ đơn giản đến các hàm ánh xạ phức tạp. Mạng sẽ đạt được một cấu hình tổng quát hóa tốt nhất tại một điểm nào đó trong quá trình học. Sau thời điểm đó mạng bị mô hình hóa nhiễu, những gì mạng học được sẽ trở thành overfiting. Trong trường hợp này chúng tôi sử dụng kỹ thuật huấn luyện dừng sớm (Early stop traning) để chọn được mô hình có kết quả tốt nhất nhưng không bị overfiting.

IV. KẾT QUẢ THỰC NGHIỆM

Chúng tôi cài đặt mô hình CNNs bằng ngôn ngữ Python, sử dụng thư viện Tensorflow (Martín Abadi et al., 2015) và Keras (Cholle et al., 2015). Các giải thuật k láng giềng *k*NN, cây quyết định DT, rừng ngẫu nhiên RF, Bagging, Adaboost cũng được cài đặt bằng Python có kế thừa từ mã nguồn C4.5 được cung cấp bởi (Quinlan, 1993) và thư viện Sklearn (Pedregosa et al., 2011). Đối với giải thuật SVM, chúng tôi sử dụng thư viện LibSVM của (Chang & Lin, 2011). Chúng tôi chạy thực nghiệm trên môi trường với CPU Intel Core i3-3227U 1.9GHz, bộ nhớ RAM 8GB, hệ điều hành Linux Mint.

Dữ liệu

Để so sánh CNNs với các mô hình khác chúng tôi sử dụng 10 tập dữ liệu từ các nghiên cứu biểu hiện gen của các bệnh ung thư được đã được công bố công khai tại Kent Ridge (Jinyan & Huiqing, 2002) và kho cơ sở dữ liệu biểu hiện gen GEO của NCBI (Edgar et al., 2002). Dữ liệu thực nghiệm có tính đa dạng bao gồm các tập dữ liệu 2 lớp, 3 lớp, 4 lớp, 5 lớp, 5 tập dữ liệu không có tập dữ liệu kiểm tra, 5 tập dữ liệu có tập kiểm tra và tập kiểm thử. Thông tin chi tiết của các tập dữ liệu được trình bày trong bảng 1.

Bảng 1. Mô tả các tập dữ liệu biểu hiện gen microarray

TT tập dữ liệu	Tên tập dữ liệu	Số mẫu	Số chiều	Số lớp	Nghi thức	Nguồn
1	Lung Cancer	181	12533	2	trn-tst	(Gordon et al., 2002)
2	Leukemia	72	12582	3	trn-tst	(Armstrong et al., 2002)
3	Breast Cancer	97	24481	2	trn-tst	(Veer et al, 2002)
4	SRBCT of childhood	83	2308	4	loo	(Statnikov et al., 2013)
5	Brain Tumor	90	5920	5	loo	(Statnikov et al., 2013)
6	Breast Cancer	118	22215	2	loo	(Chin et al, 2006)
7	Lung Cancer	96	7129	3	loo	(Beer et al., 2002)
8	Leukemia	72	7129	2	trn-tst	(Golub et al., 1999)
9	Breast Cancer	104	22283	2	loo	(Chowdaly et al., 2006
10	Prostate Cancer	102	12600	2	trn-tst	(Singh et al., 2002)

Kết quả

Đối với các tập dữ liệu không sẵn có tập kiểm tra, chúng tôi dùng giao thức kiểm tra chéo leave-one-out (loo) vì các tập dữ liệu này có phần tử nhỏ hơn 300. Chúng tôi tiến hành đánh giá hiệu quả của các mô hình phân lớp dựa trên các tiêu chí đánh giá như Precision, Recall, F1-measure và Accuracy (van Rijsbergen, 1979)

Mô hình CNNs được huấn luyện với tốc độ học là 0.01, sử dụng hàm kích hoạt softmax trong lớp đầy đủ. Hàm kích hoạt Relu được sử dụng toàn bộ trong các tầng ẩn của lớp tích chập, số lần học nhiều nhất của mạng là 100 lần. Kiến trúc mạng cơ bản gồm: Lớp đầu vào → Các tầng [Lớp Convolution → Lớp MaxPooling → Lớp Activation] →Lớp đầu ra. Khi huấn luyện mạng chúng tôi chọn tham số Batch size=32 để chọn kích thước mẫu được học và điều chỉnh các tham số trong các lớp của mạng để có độ chính xác tốt nhất. Số lần huấn luyện mạng tối đa là 100 lần. Mô hình có kết quả phân lớp tốt nhất trên tập huấn luyện sẽ được chọn và kiểm tra trên các tập kiểm thử để đánh giá.

Đối với mô hình kNN chúng tôi thực nghiệm với nhiều tham số *k* (*k*=1, 3, 5, 7) để chọn kết quả tốt nhất. Phương pháp tập hợp mô hình chúng tôi chạy thử nghiệm với nhiều số lượng cây quyết định khác nhau để chọn kết quả tốt nhất. Số cây quyết định được thử nghiệm từ 10 cây đến 350 cây. Qua thực nghiệm chúng tôi thấy được giải thuật RF xây dựng 200 cây quyết định sẽ đảm bảo được độ chính xác cao còn các giải thuật Bagging, Boosting xây dựng số cây nhỏ hơn 50 cây quyết định để đảm bảo được độ chính xác tốt nhất. Giải thuật SVM sử dụng hàm nhân tuyến tính có kết quả tốt nhất các tập dữ liệu MGE. Kết quả thu được từ các mô hình phân lớp (với các tham số tối ưu) như trình bày trong bảng 3, 4, 5 và 6.

Bảng 3. Kết quả phân lớp của 7 giải thuật trên 10 tập dữ liệu với tiêu chí đánh giá Accuracy (%)

TT tập dữ liệu	DT	kNN	RF	BagDT	Adaboost	SVM	CNNs
1	97.31	97.32	100.00	98.66	97.32	98.66	99.33
2	100.00	93.33	100.00	93.33	86.67	93.33	86.67
3	63.16	63.16	84.21	78.95	63.16	63.16	89.47
4	79.52	96.39	100.00	97.59	68.67	100.00	100.00
5	65.56	87.78	82.22	83.33	65.56	86.67	85.56
6	84.74	88.14	88.13	90.68	86.44	87.29	88.14
7	97.91	98.96	98.96	98.96	96.88	98.96	95.30
8	91.17	82.35	85.29	94.12	91.18	97.06	94.13
9	87.50	90.38	96.15	95.19	95.19	97.11	97.12
10	55.88	73.53	88.24	76.47	70.59	94.12	97.06

Bảng 4. Kết quả phân lớp của 7 giải thuật trên 10 tập dữ liệu với tiêu chí đánh giá Precision (%)

TT tập dữ liệu	DT	kNN	RF	BagDT	Adaboost	SVM	CNNs
1	100.00	78.95	100.00	93.33	100.00	88.24	100.00
2	100.00	94.67	100.00	94.67	92.00	94.07	91.11
3	69.23	77.78	90.91	75.00	66.67	69.23	85.71
4	79.02	96.38	100.00	96.53	65.59	100.00	100.00
5	66.16	82.03	77.74	80.36	66.16	82.82	85.56
6	84.64	89.33	88.81	90.26	86.35	87.26	88.14
7	100.00	100.00	98.85	98.85	97.70	100.00	95.30
8	86.67	75.00	100.00	92.86	86.67	93.33	92.86
9	80.85	92.11	96.20	97.43	95.30	95.34	97.12
10	69.23	54.07	86.21	75.76	72.73	92.59	96.00

Bảng 5. Kết quả phân lớp của 7 giải thuật trên 10 tập dữ liệu với tiêu chí đánh giá Recall (%)

TT tập dữ liệu	DT	kNN	RF	BagDT	Adaboost	SVM	CNNs
1	73.33	100.00	100.00	93.33	73.33	100.00	93.33
2	100.00	93.33	100.00	93.33	86.67	93.33	86.67
3	75.00	58.33	83.33	100.00	83.33	68.42	100.00
4	79.52	96.39	100.00	96.39	66.27	100.00	100.00
5	60.00	86.67	82.22	85.55	65.55	86.67	85.56
6	84.75	88.14	88.14	89.83	86.44	87.29	88.14
7	97.67	98.84	1.00	100.00	98.84	98.84	95.30
8	92.86	85.71	64.29	92.86	92.86	100.00	92.86
9	90.48	83.33	96.15	90.47	95.19	97.62	97.12
10	72.00	73.53	92.59	100.00	96.00	100.00	100.00

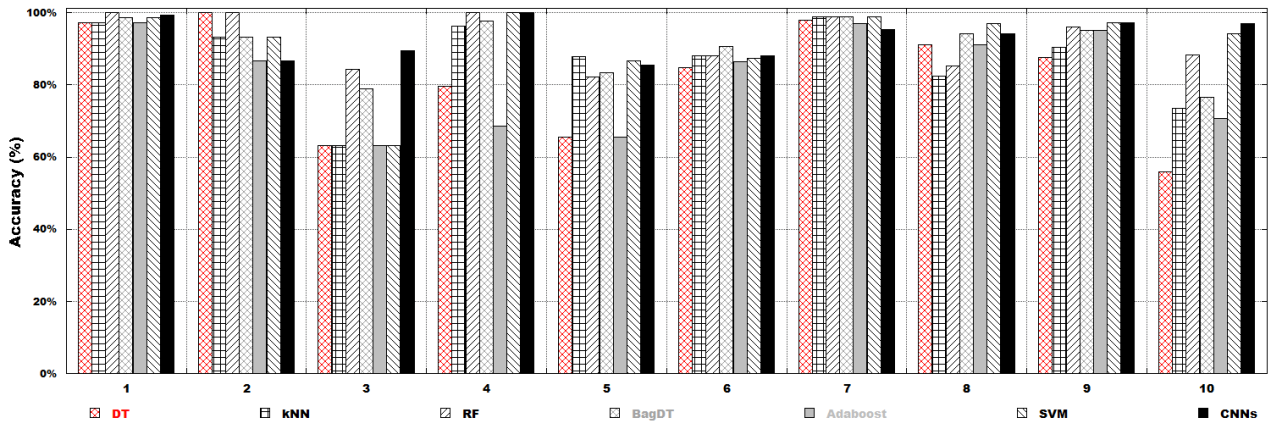
Bảng 6. Kết quả phân lớp của 7 giải thuật trên 10 tập dữ liệu với tiêu chí đánh giá F1 (%)

TT tập dữ liệu	DT	kNN	RF	BagDT	Adaboost	SVM	CNNs
1	84.00	88.24	100.00	93.33	84.62	93.75	96.55
2	100.00	93.04	100.00	93.04	87.38	92.86	84.67
3	72.00	66.67	86.96	85.71	74.07	67.00	92.31
4	79.17	96.36	100.00	96.38	62.19	100.00	100.00
5	62.78	84.56	77.96	82.11	64.55	84.57	85.56
6	84.66	87.61	87.72	89.56	86.28	87.10	88.14
7	98.82	99.42	99.42	99.42	98.27	99.41	95.30
8	89.66	80.00	78.26	92.86	89.66	96.55	92.86
9	85.39	87.50	96.14	93.82	95.16	96.74	97.12
10	70.59	62.31	86.21	86.21	82.76	96.50	97.95

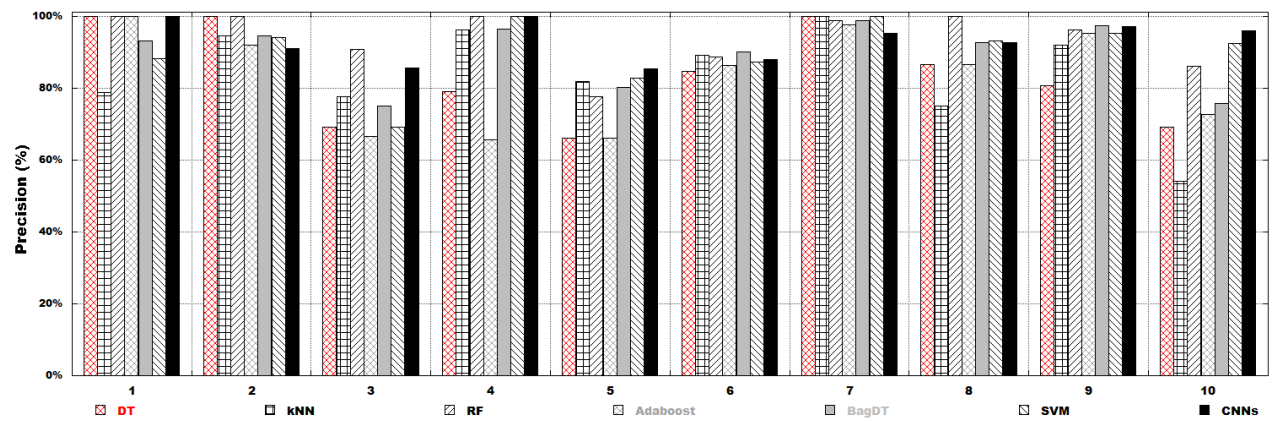
Kết quả phân lớp trên 10 tập dữ liệu MGE với các tiêu chí đánh giá Precison, Recall, F1 và Accuracy của 7 giải thuật DT, kNN, RF, BagDT, Boosting, SVM và CNNs từ các bảng 3, 4, 5, 6 cho thấy CNNs và RF có độ chính xác (Accuracy) tốt nhất trên 4/10 tập dữ liệu, SVM có kết quả tốt nhất 3/10 tập dữ liệu. Adaboost có kết quả thấp nhất và cao hơn một ít là BagDT, kNN và DT. Đối với tiêu chí Precision, CNNs có kết quả tốt nhất 4/10 tập dữ liệu, RF có kết quả tốt nhất 5/10 tập dữ liệu và SVM có kết quả tốt nhất 2/10 tập dữ liệu. BagDT có kết quả tốt nhất trên 2/10 tập dữ liệu cao hơn DT, kNN và Adaboost. Đánh giá với tiêu chí Recall, CNNs có kết quả tương đương với RF khi tốt nhất 3/10 tập dữ liệu, SVM có kết quả với tiêu chí Recall tốt nhất 6/10 tập dữ liệu cao hơn tất cả các giải thuật còn lại. BagDT có kết quả tốt nhất 4/10 tập dữ liệu cao hơn các giải thuật kNN, DT và Adaboost. Với tiêu chí F1, CNNs có kết quả tốt nhất trên 5/10 tập dữ liệu cao hơn RF và SVM có kết quả tốt trên 4/10 và 2/10 tập dữ liệu và tốt hơn tất cả các

giải thuật khác. Đặc biệt CNNs có kết quả chính xác tổng hợp cao hơn các giải thuật khác trên các tập dữ liệu có số chiều lớn hơn 12500 chiều như các tập dữ liệu Lung Cancer (12533 gen), Breast Cancer (22283 gen) và Protates Cancer (12600 gen).

Hình 3 và 4 thể hiện biểu đồ trực quan so sánh kết quả của tiêu chí đánh giá Accuracy và Precision của 7 giải thuật trên 10 tập dữ liệu. Hai biểu đồ này chỉ ra rằng được giải thuật CNNs có hiệu quả tốt tương đương với SVM và giải thuật RF và hiệu quả tốt hơn so với các giải thuật BagDT, DT, kNN và Adaboost.



Hình 3. Biểu đồ so sánh tiêu chí Accuracy của 7 giải thuật trên 10 tập dữ liệu



Hình 4. Biểu đồ so sánh tiêu chí Precision của 7 giải thuật trên 10 tập dữ liệu

V. KẾT LUẬN VÀ HƯỚNG PHÁT TRIỂN

Chúng tôi vừa trình bày đề xuất huấn luyện mô hình mạng tích chập CNNs để phân loại dữ liệu biểu hiện gen microarray và so sánh hiệu quả của mô hình đề xuất với các mô hình *k*NN, cây quyết định, Bagging, Adaboost, rừng ngẫu nhiên và máy học véctơ hỗ trợ. Kết quả thực nghiệm trên 10 tập dữ liệu biểu hiện gen có số chiều lớn và số mẫu ít cho thấy mô hình CNNs có thể phân lớp với độ chính xác cao hơn các mô hình học như *k*NN, cây quyết định và Bagging, Adaboost. Mạng nơron tích chập CNNs cho kết quả phân lớp tương đương với máy học SVM và rừng ngẫu nhiên.

Trong tương lai chúng tôi tiếp tục nghiên cứu các mô hình học sâu để phân loại dữ liệu biểu hiện gen microarray bằng cách tinh chỉnh các tham số của mạng và xây dựng các bộ phân lớp mới sau khi dữ liệu được kết xuất qua các lớp tích chập. Ngoài nghiên cứu cải thiện chất lượng mô hình phân lớp, chúng tôi sẽ tập trung cải tiến tốc độ huấn luyện mô hình, thực nghiệm trên nhiều tập dữ liệu lớn và song song hóa mô hình mạng nơron tích chập.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

[1] M. B. Al Snousy, H. M El-Deeb, K. Badran and I. A Al Khlil, Suite of decision tree-based classification algorithms on cancer gene expression data, *Egypt. Inform. J.*, vol. 12, no. 2, pp. 73-82, 2011.

[2] E. Alba, J. Garcia-Nieto, L. Jourdan and E. G Talbi, Gene selection in cancer classification using PSO/SVM and GA/SVM hybrid algorithms, *Evolutionary Computation*, 2007.

[3] S. Aytekin, B. S Yarman and İ. Z Gökbay, Microarray Gene Expression Data Classification with Random Forest, *Int. J. Eng. Sci*, vol. 3898, 2016.

[4] L. Breiman, Bagging predictors, *Mach. Learn*, vol. 24, no. 2, pp. 123-140, 1996.

[5] L. Breiman, J. Friedman, C. J Stone and R. A Olshen, *Classification and regression trees*. CRC press, 1984.

[6] L. Breiman, "Random forests," *Mach. Learn*, vol. 45, pp. 5-32, 2001.

[7] M. E. Burczynski et al., Molecular Classification of Crohn's Disease and Ulcerative Colitis Patients Using Transcriptional Profiles in Peripheral Blood Mononuclear Cells," The Journal of Molecular Diagnostics, vol. 8, no. 1, pp. 51-61, Feb. 2006.

[8] C. C Chang and C. J Lin, LIBSVM: a library for support vector machines, *ACM Trans. Intell. Syst. Technol. TIST*, vol. 2, no. 3, p. 27, 2011.

[9] X. Chen and H. Ishwaran, Random forests for genomic data analysis, *Genomics*, vol. 99, no. 6, pp. 323-329, 2012.

[10] F. Chollet et al., *Keras*, 2015.

[11] Y. Chuang, H. Yang and C. Jin, Classification of multiple cancer types using fuzzy support vector machines and outlier detection methods, *Biomed. Eng. Appl. Basis Commun.*, vol. 17, no. 06, pp. 300-308, 2005.

[12] S. Cogill and L. Wang, Support vector machine model of developmental brain gene expression data for prioritization of Autism risk gene candidates, *Bioinformatics*, vol. 32, no. 23, pp. 3611-3618, 2016.

[13] K. Chin et al., Genomic and transcriptional aberrations linked to breast cancer pathophysiologies, Cancer Cell, vol. 10, no. 6, pp. 529-541, Dec. 2006.

[14] D. Chowdary et al., Prognostic Gene Expression Signatures Can Be Measured in Tissues Collected in RNAlater Preservative, The Journal of Molecular Diagnostics, vol. 8, no. 1, pp. 31-39, Feb. 2006.

[15] S. Deegalla and H. Boström, Classification of microarrays with KNN: Comparison of dimensionality reduction methods, in *International Conference on Intelligent Data Engineering and Automated Learning*, 2007.

[16] M. Dettling, BagBoosting for tumor classification with gene expression data, *Bioinformatics*, vol. 20, no. 18, pp. 3583-3593, 2004.

[17] R. Díaz-Uriarte and S. Alvarez de Andrés, Gene selection and classification of microarray data using random forest, *BMC Bioinformatics*, vol. 7, no. 1, p. 3, 2006.

[18] T. N. Do, P. Lenca, S. Lallich and N. K Pham, Classifying very-high-dimensional data with random forests of oblique decision trees, in *Advances in knowledge discovery and management*, Springer Berlin Heidelberg, 2010.

[19] S. Dudoit, J. Fridlyand and T. P Speed, "Comparison of discrimination methods for the classification of tumors using gene expression data," *J. Am. Stat. Assoc.*, vol. 97, no. 457, pp. 77-87, 2002.

[20] R. Edgar, M. Domrachev and A. E Lash, Gene Expression Omnibus: NCBI gene expression and hybridization array data repository, *Nucleic Acids Res.*, vol. 30, no. 1, pp. 207-210, 2002.

[21] E. Fix and J. L Hodges Jr, Discriminatory analysis-nonparametric discrimination: Small sample performance,DTIC Document, 1952.

[22] Y. Freund and R. E Schapire, A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting, Computational Learning Theory, pp. 23-37, 1995.

[23] T. S. Furey, et al, Support vector machine classification and validation of cancer tissue samples using microarray expression data, *Bioinformatics*, vol. 16, no. 10, pp. 906-914, 2000.

[24] I. Guyon, J. Weston, S. Barnhill and V. Vapnik, Gene selection for cancer classification using support vector machines, *Mach. Learn.*, vol. 46, no. 1, pp. 389-422, 2002.

[25] G. J. Gordon, et al. "Translation of Microarray Data into Clinically Relevant Cancer Diagnostic Tests Using Gege Expression Ratios in Lung Cancer And Mesothelioma". Cancer Research, 62:4963-4967, 2002

[26] A. Halder, S. Dey, A. Kumar, Active Learning Using Fuzzy k-NN for Cancer Classification from Microarray Gene Expression Data, in *Advances in Communication and Computing*, Springer, 2015.

[27] S. H. Hsieh et al., Leukemia cancer classification based on Support Vector Machine, in *Industrial Informatics (INDIN), 2010 8th IEEE International Conference on*, 2010.

[28] D. H. Hubel and T. N. Wiesel, Receptive fields and functional architecture of monkey striate cortex," *J. Physiol.*, vol. 195, no. 1, pp. 215-243, 1968.

[29] E. B. Huerta, B. Duval and J. K. Hao, A hybrid GA/SVM approach for gene selection and classification of microarray data, in *Workshops on Applications of Evolutionary Computation*, 2006.

[30] L. Jinyan and L. Huiqing, *Kent Ridge Bio-medical Data Set Repository*. 2002.

[31] Y. Kim, "Convolutional neural networks for sentence classification," *ArXiv Prepr. ArXiv14085882*, 2014.

[32] A. Krizhevsky, I. Sutskever and G. E. Hinton, Imagenet classification with deep convolutional neural networks," in *Advances in neural information processing systems*, 2012.

[33] Y. LeCun, Y. Bengio and G. Hinton, Deep learning, *Nature*, vol. 521, no. 7553, pp. 436-444, 2015.

[34] L. Li, C. R. Weinberg, T. A. Darden and L. G. Pedersen, Gene selection for sample classification based on gene expression data: study of sensitivity choice of parameters of the GA/KNN method, *Bioinformatics*, vol. 17, no. 12, pp. 1131-1142, Dec. 2001.

[35] Q. Li, W. Cai, X. Wang, Y. Zhou, D. D. Feng, M. Chen, "Medical image classification with convolutional neural network," in *Control Automation Robotics & Vision, 2014 13th International Conference on*, 2014

[36] T. Li, C. Zhang and M. Ogihara, A comparative study of feature selection and multiclass classification methods for tissue classification based on gene expression, *Bioinformatics*, vol. 20, no. 15, pp. 2429-2437, 2004.

[37] H. Liu, J. Li and L. Wong, A comparative study on feature selection and classification methods using gene expression profiles and proteomic patterns, *Genome Inform.*, vol. 13, pp. 51-60, 2002.

[38] S. A. Ludwig, D. Jakobovic and S. Picek, Analyzing gene expression data: Fuzzy decision tree algorithm applied to the classification of cancer data, in *2015 IEEE International Conference on*, 2015

[39] Martín Abadi *et al.*, *TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Systems*. 2015.

[40] S. Min, B. Lee, S. Yoon, Deep learning in bioinformatics, *Brief. Bioinform*, 2016.

[41] K. Moorthy and M. S. Mohamad, Random forest for gene selection and microarray data classification,"*Bioinformation*, vol. 7, no. 3, p. 142, 2011.

[42] S. Mukherjee *et al.*, "Support vector machine classification of microarray data, AI Memo 1677, Massachusetts Institute of Technology, 1999.

[43] J. Nagi, G. A. Di Caro, A. Giusti, F. Nagi and L. M. Gambardella, Convolutional neural support vector machines: hybrid visual pattern classifiers for multi-robot systems," in *Machine Learning and Applications (ICMLA), 2012 11th International Conference on*, 2012, vol. 1, pp. 27-32.

[44] O. P. Netto et al., Applying decision trees to gene expression data from dna microarrays: A leukemia case study, in *XXX Congress of the Brazilian Computer Society, X Workshop on Medical Informatics*, 2010, p. 10.

[45] Đỗ Thanh Nghị, Phạm Nguyên Khang, Nguyễn Hữu Hòa, Nguyễn Minh Trung, Giải thuật rừng ngẫu nhiên với luật gán nhãn cục bộ cho phân lớp. Hội thảo Fair'9, 2016.

[46] K. Nishiwaki, K. Kanamori and H. Ohwada, "Gene Selection from Microarray Data for Alzheimer's Disease Using Random Forest," *Int. J. Softw. Sci. Comput. Intell. IJSSCI*, vol. 9, no. 2, pp. 14-30, 2017.

[47] A. Osareh và B. Shadgar, An efficient ensemble learning method for gene microarray classification, *BioMed Res. Int.*, vol. 2013, 2013.

[48] F. Pan, B. Wang, X. Hu and W. Perrizo, Comprehensive vertical sample-based KNN/LSVM classification for gene expression analysis, *J. Biomed. Inform.*, vol. 37, no. 4, pp. 240-248, 2004.

[49] R. Parry *et al.*, k-Nearest neighbor models for microarray gene expression analysis and clinical outcome prediction, *Pharmacogenomics J.*, vol. 10, no. 4, pp. 292-309, 2010.

[50] Y. Pawitan *et al.*, Gene expression profiling spares early breast cancer patients from adjuvant therapy: derived and validated in two population-based cohorts, *Breast Cancer Res.*, vol. 7, no. 6, p. R953, 2005.

[51] F. Pedregosa *et al.*, Scikit-learn: Machine Learning in Python, *J. Mach. Learn. Res.*, vol. 12, pp. 2825-2830, 2011.

[52] C. M. Perou *et al.*, Molecular portraits of human breast tumours, *Nature*, vol. 406, pp. 747-752, 2000.

[53] J. Phan et al., Improvement of SVM algorithm for microarray analysis using intelligent parameter selection, in *Engineering in Medicine and Biology Society, 2005. IEEE-EMBS 2005. 27th Annual International Conference of the*, 2005, pp. 4838-4841.

[54] M. Pirooznia, J. Y. Yang, M. Q. Yang and Y. Deng, A comparative study of different machine learning methods on microarray gene expression data, *BMC Genomics*, vol. 9, no. 1, p. S13, 2008.

[55] J. R. Quinlan, C4. 5: Programming for machine learning, *Morgan Kauffmann*, vol. 38, 1993.

[56] C. V. Rijsbergen, Information Retrieval, *Butterworth*, 1979.

[57] M. Schena, D. Shalon, R. W. Davis, P. O. Brown, Quantitative monitoring of gene expression patterns with a complementary DNA microarray, *Science*, vol. 270, no. 5235, p. 467, 1995.

[58] D. Singh *et al.*, Gene expression correlates of clinical prostate cancer behavior, *Cancer Cell*, vol. 1, no. 2, pp. 203-209, Mar. 2002.

[59] A. Statnikov, L. Wang and C. F. Aliferis, A comprehensive comparison of random forests and support vector machines for microarray-based cancer classification, *BMC Bioinformatics*, vol. 9, no. 1, p. 319, 2008.

[60] A. Statnikov *et al.*, A comprehensive evaluation of multicategory classification methods for microbiomic data, *Microbiome*, vol. 1, no. 1, p. 11, 2013.

[61] Y. Su, R. Wang, C. Li, P. Chen, A dynamic subspace learning method for tumor classification using microarray gene expression data, in *Natural Computation, 2011 Seventh International Conference on*, 2011

[62] A. C. Tan, D. Gilbert, Ensemble machine learning on gene expression data for cancer classification, 2003.

[63] B. Ulfenborg, K. Klinga-Levan, and B. Olsson, Classification of tumor samples from expression data using decision trunks, *Cancer Inform.*, vol. 12, p. 53, 2013.

[64] C. D. A. Vanitha, D. Devaraj and M. Venkatesulu, Gene expression data classification using support vector machine and mutual information-based gene selection, *Procedia Comput. Sci.*, vol. 47, pp. 13-21, 2015.

[65] L. Vanneschi, A. Farinaccio, G. Mauri, M. Antoniotti, P. Provero, M. Giacobini, A comparison of machine learning techniques for survival prediction in breast cancer, *BioData Min.*, vol. 4, no. 1, p. 12, 2011.

[66] V. Vapnik, The Nature of Statistical Learning Theory, Springer-Verlag, 1995.

[67] LJ.Veer, et al. Gene Expression Profiling Predicts Clinical Outcome of Breast Cancer, Nature, 415:530-536, 2002.

[68] Q. Yang and X. Wu, 10 challenging problems in data mining research, *Int. J. Inf. Technol. Decis. Mak.*, vol. 5, no. 04, pp. 597-604, 2006.

[69] Z. Yao and W. L. Ruzzo, A regression-based K nearest neighbor algorithm for gene function prediction from heterogeneous data, *BMC Bioinformatics*, vol. 7, no. 1, p. S11, 2006.

[70] E. I. Zacharaki, Prediction of protein function using a deep convolutional neural network ensemble, *PeerJ Prepr.*, vol. 5, p. e2778v1, 2017.

[71] Z. Zhou, Y. Yang, X. Wu and V. Kumar, The Top Ten Algorithms in Data Mining, *Fla. Chapman HallCRC*, 2009.

A COMPARISION OF DEEP LEARNING MODEL AND OTHER METHODS IN THE CLASSIFICATION OF GENE EXPRESSION MICROARRAY DATA

Huynh Phuoc Hai, Nguyen Van Hoa, Do Thanh Nghi

ABSTRACT: *In recent years, deep learning models, such as Convolutional Neural Networks (CNNs) have been use image classification, natural language processing and speech recognition. The advantages of CNNs is that they automatically create new features from raw data and classify them. In this paper, we propose to use convolutional neural networks to classify microarray gene expression data with hight dimensions. Using ten microarray datasets from the Medical Database (Kent Ridge) and NCBI Gene Expression Omnibus (GEO) database we conclude that CNNs is better higher accuracy than simple classification methods including k nearest neighbors, decision tree. CNNs are outperformed by bagging and adaboost and have performance same to random forest and SVM.*