Predicción de la estructura secundaria de proteínas globulares

Maria Lucas

2023-03-24

Índice

1. Algoritmo k-NN

El algoritmo k-nn (k-nearest neighbors) es un algoritmo de aprendizaje supervisado utilizado para clasificación y regresión. En el proceso de clasificación, el algoritmo busca encontrar la clase más común entre los k ejemplos de entrenamiento más cercanos al punto de consulta. En el proceso de regresión, el algoritmo busca encontrar el valor medio de los k ejemplos de entrenamiento más cercanos al punto de consulta.

El funcionamiento del algoritmo k-nn es bastante sencillo. Primero, se carga un conjunto de datos de entrenamiento que consta de entradas y etiquetas correspondientes. Luego, se toma un punto de consulta (una entrada sin etiquetar) y se calcula la distancia entre ese punto y cada punto en el conjunto de datos de entrenamiento. Las distancias más comunes utilizadas en k-nn son la distancia euclidiana y la distancia Manhattan.

Una vez que se han calculado las distancias, se seleccionan los k puntos de entrenamiento más cercanos al punto de consulta. Si se está realizando clasificación, se seleccionan las etiquetas correspondientes a estos puntos de entrenamiento y se toma la etiqueta más común como la etiqueta asignada al punto de consulta. Si se está realizando regresión, se toma el valor medio de las etiquetas de los k puntos de entrenamiento más cercanos como el valor asignado al punto de consulta.

La elección del valor de k en el algoritmo k-nn es un factor crítico que puede afectar significativamente el rendimiento del modelo. Si k es demasiado pequeño, el modelo puede ser sensible al ruido en los datos y puede sobreajustarse. Si k es demasiado grande, el modelo puede subajustarse y no ser capaz de capturar patrones sutiles en los datos. El valor de k dependerá del conjunto de datos y el problema específico que se está abordando, aunque se puede empezar por la raíz cuadrada del número de datos e ir ajustando.

Ventajas	Inconvenientes
Simple y fácil de interpretar	No produce un modelo
Rápida fase de entrenamiento	Lenta fase de clasificación
No paramétrico	Se debe escoger una k apropiada
Buen rendimiento en datos con pocos atributos	Computacionalmente costoso para gran cantidad de datos
Se puede actualizar en tiempo real con nuevos datos	Sensible a datos redundantes y a valores atípicos
	Requiere pre-procesamiento de los datos

2. Codificación one-hot

```
def encode_sequence(sequence):

    # Define a dictionary that maps amino acids to their corresponding
    positions in the one-hot encoding
    aa_to_index = {'A': 0, 'R': 1, 'N': 2, 'D': 3, 'C': 4, 'Q': 5, 'E': 6, 'G'
    : 7, 'H': 8, 'I': 9, 'L': 10, 'K': 11, 'M': 12, 'F': 13, 'P': 14, 'S': 15,
     'T': 16, 'W': 17, 'Y': 18, 'V': 19}

    # Empty list to store the encoding
    encoding = []

    # Iterate over each amino acid in the sequence and encode it using the
    aa_to_index dictionary
    for aa in sequence:
        index = aa_to_index[aa]
```

```
        # Creates a list of 20 "0" except for the element at the position of
    the index where it puts a 1
        # The extend method makes the new encoded aa be added to the encoding
    list
        encoding.extend([1 if i == index else 0 for i in range(20)])

    return encoding
```

3. Clasificador knn

(a) Carga del fichero y tabla resumen

```
# Loading data
import pandas as pd
data = pd.read_csv('data4.csv', delimiter=";").values
```

```
from tabulate import tabulate
import numpy as np

def sum_table(data):

  # Creates a dictionary to store the counts of each structure
  counts = {}

  # Iterates over the sequence and adds 1 to the counter of the structure
    encountered
  for seq in data:
    # We use column -1 because it is where the structure info is located
    structure = seq[-1]
    # If the structure is already in counts add 1
    if structure in counts:
      counts[structure] += 1
    # If the structure is not in counts adds it and makes it 1
    else:
      counts[structure] = 1

  # Calculates the total number of structures
  total = sum(counts.values())

  # Creates header labels
  headers = ["Estructura", "Contador", "Porcentaje"]
  tabla = [] # Empty table list to append the results
  # For each structure in the dic
  for structure in counts:
    count = counts[structure] # Saves the number of instances as count
    percentage = count / total * 100 # Calculates the percentage
    tabla.append([structure, count, percentage])# Adds the results to the list

  return print(tabulate(tabla, headers=headers, floatfmt=".2f"))

# Apply the function
```

```
sum_table(data)
```

```
## Estructura      Contador     Porcentaje
## ————————————  ———————————  ————————————
## _                     5557          55.57
## e                     1935          19.35
## h                     2508          25.08
```

Parece ser que la clase coil está sobrerepresentada (representa más de la mitad del total de los datos) con respecto a las otras dos clases, esto nos afectará al modelo de predicción. Cuando una de las clases está sobrerepresentada en un conjunto de datos, el modelo puede ser más propenso a predecir esa clase con mayor frecuencia y tener dificultades para reconocer las otras clases menos frecuentes. En este caso, el modelo puede tener una tendencia a predecir que los nuevos casos pertenecen a la clase coil con mayor frecuencia que al resto de clases. Para abordar este problema, se pueden tomar medidas como aumentar la cantidad de casos de las clases menos frecuentes o ajustar las ponderaciones de las clases en el modelo durante el entrenamiento para equilibrar la influencia de cada clase.

Nota: He añadido el apartado porcentaje aunque no se pidiera para que fuera más fácil ver la representación de cada clase.

(b) Aplicación one-hot

```
import numpy as np

# Save the last column as y because it contains the structures to predict
y = data[:, -1]

# Removed the structures columns from the data
list_seq = np.delete(data, -1, 1)

# Create the list to store the encoded data
seq_encoded = []

# Iterate over the data applying the encoding function and storing it in the
    list
for seq in list_seq:
  seq_encoded.append(encode_sequence(seq))
```

(c) Separación de los datos

```
from sklearn.model_selection import train_test_split

# Transform the encoded list sequence to an array
seq_encoded = (np.array(seq_encoded))

# Split the data into training and testing sets setting the seed to 123
seq_encoded_train, seq_encoded_test, y_train, y_test = train_test_split(
    seq_encoded, y ,test_size=0.33,  random_state=123)

# Apply the sum function to examine the data sets
sum_table(y_test)
```

```
## Estructura      Contador    Porcentaje
## ─────────────  ──────────  ─────────────
## h                    779         23.61
## _                   1829         55.42
## e                    692         20.97
```

```
sum_table(y_train)
```

```
## Estructura      Contador    Porcentaje
## ─────────────  ──────────  ─────────────
## h                   1729         25.81
## _                   3728         55.64
## e                   1243         18.55
```

Como podemos observar, la clase coil sigue teniendo una mayor cantidad de muestras. Sin embargo, es importante destacar que las clases están igualmente representadas en los conjuntos de entrenamiento y prueba. Si por casualidad una clase estuviera subrepresentada o incluso ausente en el conjunto de entrenamiento, el modelo podría tener dificultades para generalizar bien y hacer predicciones precisas en nuevos datos. Esto subraya la importancia de asegurarse de que todas las clases estén adecuadamente representadas en el conjunto de entrenamiento con respecto al conjunto de pruebas y a la realidad en sí misma, para lograr un modelo más preciso y confiable.

(d) Aplicación k-NN para predecir la estructura

```
# Transform the training encoded list sequence to an array
seq_encoded_train = np.array(seq_encoded_train)

from sklearn.metrics import confusion_matrix, cohen_kappa_score,
    classification_report
from sklearn.neighbors import KNeighborsClassifier

# Create the list of k to study
k_list = [1, 3, 5, 7, 11]

# Defining list to store data
results = []
reports = []

# We iterate over the k list to generate a model for each k
for i in k_list:

  knn_i = KNeighborsClassifier(n_neighbors = i) # Creates the
    KNeighborsClassifier object with k=i

  #Note: By default KNeighborsClassifier takes k=5 and thus n_neighbors=5 is
    not printed in the console

  knn_i.fit(seq_encoded_train, y_train) # Fit the model to the training set
  y_pred = knn_i.predict(seq_encoded_test) # Predicts the labels of the test
    data

  # Calculate the parameters to determine de adjust of the model:

  accuracy_i = knn_i.score(seq_encoded_test, y_test) # Accuracy
```

```
  kappa_i = cohen_kappa_score(y_test, y_pred) # Kappa value

  cm_i = confusion_matrix(y_test, y_pred, labels=["_", "e", "h"]) # Confusion
    matrix
  order_i = knn_i.classes_ # order of the labels

  error_i = 1 - knn_i.score(seq_encoded_test, y_test) # Error

  report_i = classification_report(y_test, y_pred, labels=["_", "e", "h"]) #
    Report

  # Adds the parameters to the corresponding lists
  results.append([i, accuracy_i, kappa_i, error_i, cm_i, order_i])
  reports.append([i, report_i])

# Creates the results tables from the lists
```

```
## KNeighborsClassifier(n_neighbors=1)
## KNeighborsClassifier(n_neighbors=3)
## KNeighborsClassifier()
## KNeighborsClassifier(n_neighbors=7)
## KNeighborsClassifier(n_neighbors=11)
```

```
tabla = tabulate(results, headers=["k", "Accuracy", "Kappa Value", "Error ", "
    Confusion matrix", "Class order"])
tabla2 = tabulate(reports, numalign = "right", stralign = "right", headers = [
    "k", "Others"])
# Prints the tables
print(tabla)
```

```
##   k    Accuracy    Kappa Value    Error    Confusion matrix      Class order
## ---  ----------  -------------  -------  ------------------  ---------------
##   1    0.759394       0.594782  0.240606  [[1497  162  170]   ['_' 'e' 'h']
##                                           [ 160  461   71]
##                                           [ 165   66  548]]
##   3    0.711212       0.491203  0.288788  [[1536  139  154]   ['_' 'e' 'h']
##                                           [ 271  359   62]
##                                           [ 275   52  452]]
##   5    0.682424       0.428372  0.317576  [[1551  143  135]   ['_' 'e' 'h']
##                                           [ 334  301   57]
##                                           [ 318   61  400]]
##   7    0.653636       0.366468  0.346364  [[1556  136  137]   ['_' 'e' 'h']
##                                           [ 362  266   64]
##                                           [ 374   70  335]]
##  11    0.625758       0.293059  0.374242  [[1593  109  127]   ['_' 'e' 'h']
##                                           [ 410  218   64]
##                                           [ 462   63  254]]
```

```
print(tabla2)
```

```
##   k                                                    Others
## ---  ---------------------------------------------------------
##   1                precision    recall  f1-score   support
```

```
##
##                _       0.82      0.82      0.82      1829
##                e       0.67      0.67      0.67       692
##                h       0.69      0.70      0.70       779
##
##         accuracy                           0.76      3300
##        macro avg       0.73      0.73      0.73      3300
##     weighted avg       0.76      0.76      0.76      3300
##  3                precision    recall  f1-score   support
##
##                _       0.74      0.84      0.79      1829
##                e       0.65      0.52      0.58       692
##                h       0.68      0.58      0.62       779
##
##         accuracy                           0.71      3300
##        macro avg       0.69      0.65      0.66      3300
##     weighted avg       0.71      0.71      0.70      3300
##  5                precision    recall  f1-score   support
##
##                _       0.70      0.85      0.77      1829
##                e       0.60      0.43      0.50       692
##                h       0.68      0.51      0.58       779
##
##         accuracy                           0.68      3300
##        macro avg       0.66      0.60      0.62      3300
##     weighted avg       0.67      0.68      0.67      3300
##  7                precision    recall  f1-score   support
##
##                _       0.68      0.85      0.76      1829
##                e       0.56      0.38      0.46       692
##                h       0.62      0.43      0.51       779
##
##         accuracy                           0.65      3300
##        macro avg       0.62      0.56      0.57      3300
##     weighted avg       0.64      0.65      0.63      3300
## 11                precision    recall  f1-score   support
##
##                _       0.65      0.87      0.74      1829
##                e       0.56      0.32      0.40       692
##                h       0.57      0.33      0.42       779
##
##         accuracy                           0.63      3300
##        macro avg       0.59      0.50      0.52      3300
##     weighted avg       0.61      0.63      0.59      3300
```

(e) Predicción coil/non-coil y curva ROC

```
# Preparing y
y2 = np.copy(y) # Copy y to y2 to preserve the original

# Change the structures (h and e = 1, _ = 0), so 1 = nc, 0 = coil
y2[y2 == "h"] = "1"
y2[y2 == "e"] = "1"
```

```
y2[y2 == "_"] = "0"

# Examine the data set
sum_table(y2)

# Split the data set into training and test using the seed 123
```

```
##   Estructura    Contador    Porcentaje
## ------------  ----------  ------------
##            0        5557         55.57
##            1        4443         44.43
```

```
seq_encoded_train2, seq_encoded_test2, y2_train, y2_test = train_test_split(
    seq_encoded, y2 ,test_size=0.33,  random_state=123)

# Examine the data set
sum_table(y2_train)
```

```
##   Estructura    Contador    Porcentaje
## ------------  ----------  ------------
##            1        2972         44.36
##            0        3728         55.64
```

```
sum_table(y2_test)

#k-NN and ROC curve
```

```
##   Estructura    Contador    Porcentaje
## ------------  ----------  ------------
##            1        1471         44.58
##            0        1829         55.42
```

```
from sklearn.metrics import roc_curve, roc_auc_score

# Create the list of k to study
k_list = [1, 3, 5, 7, 11]

# Defining list to store data
results_list2 = []
metrics_list = []
roc_auc_list = []
fpr_list = []  # False positive ratio
tpr_list = []  # True positive Ratio

# We iterate over the k list to generate a model for each k
for i in k_list:

  knn_i = KNeighborsClassifier(n_neighbors=i) # Creates the
    KNeighborsClassifier object with k=i
  knn_i.fit(seq_encoded_train2, y2_train) # Fit the model to the training set
  y_pred_proba = knn_i.predict_proba(seq_encoded_test2)[:, 1]  # Predicted
    probabilities of class 1
  y_pred = np.where(y_pred_proba >= 0.5, '1', '0')  # Convert predicted
    probabilities to binary class labels
```

```
  # Calculate the parameters to create roc_curve
  fpr, tpr, thresholds = roc_curve(y2_test, y_pred_proba, pos_label = "1")
  # Calculate ROC_curve
  roc_auc = roc_auc_score(y2_test, y_pred_proba)

  # Calculate the parameters to determine de adjust of the model:

  accuracy_i = knn_i.score(seq_encoded_test2, y2_test) # Accuracy

  kappa_i = cohen_kappa_score(y2_test, y_pred) # Kappa value

  # Confusion matrix and order of the labels
  cm_i = confusion_matrix(y2_test, y_pred, labels=["0", "1"]) # Confusion
    matrix
  order_i = knn_i.classes_ # Order of the labels
  tn, fp, fn, tp = confusion_matrix(y2_test, y_pred, labels=["0", "1"]).ravel
    () # Extract data

  # Compute the evaluation metrics
  VPP = tp / (tp + fp) # VPP
  VPN = tn / (tn + fn) # VPN
  sensitivity = tp / (tp + fn) # S
  specificity = tn / (tn + fp) # E

  error_i = 1 - accuracy_i # Error

  # Adds the parameters to the results list
  results_list2.append([i, accuracy_i, kappa_i, error_i, cm_i ,order_i])

  metrics_list.append([i, sensitivity, specificity, VPP, VPN])

  # Adds the ROC curve, fpr and tpr to the list
  roc_auc_list.append(roc_auc)
  fpr_list.append(fpr)  # add fpr for this value of k to the list
  tpr_list.append(tpr)  # add tpr for this value of k to the list

# Creates the table to show the parameters
```

```
## KNeighborsClassifier(n_neighbors=1)
## KNeighborsClassifier(n_neighbors=3)
## KNeighborsClassifier()
## KNeighborsClassifier(n_neighbors=7)
## KNeighborsClassifier(n_neighbors=11)
```

```
tabla = tabulate(results_list2, headers=["k", "Accuracy", "Kappa Value", "
   Error ", "Confusion matrix", "Class order"])
tabla2 = tabulate(metrics_list, headers=["k", "Sensibilidad", "Especificidad",
    "VPP", "VPN"])
print(tabla) # Prints the table
```

```
##   k    Accuracy    Kappa Value    Error   Confusion matrix    Class order
## ---  ----------  -------------  --------  ------------------  -------------
##   1    0.800909       0.597264  0.199091  [[1497  332]        ['0' '1']
```

```
##                                                  [ 325 1146]]
##   3    0.754545       0.502118   0.245455  [[1441  388]       ['0' '1']
##                                                  [ 422 1049]]
##   5    0.730909       0.451173   0.269091  [[1443  386]       ['0' '1']
##                                                  [ 502  969]]
##   7    0.709697       0.407354   0.290303  [[1415  414]       ['0' '1']
##                                                  [ 544  927]]
##  11    0.680909       0.346082   0.319091  [[1396  433]       ['0' '1']
##                                                  [ 620  851]]
```

```
print(tabla2)

# Plots the ROC curves with AUC
```

```
##    k    Sensibilidad    Especificidad       VPP       VPN
## ---  ---------------  ---------------  --------  --------
##    1         0.779062          0.81848  0.775372  0.821625
##    3          0.71312         0.787862  0.729993  0.773484
##    5         0.658736         0.788956  0.715129  0.741902
##    7         0.630184         0.773647  0.691275  0.722307
##   11         0.578518         0.763259  0.662773   0.69246
```

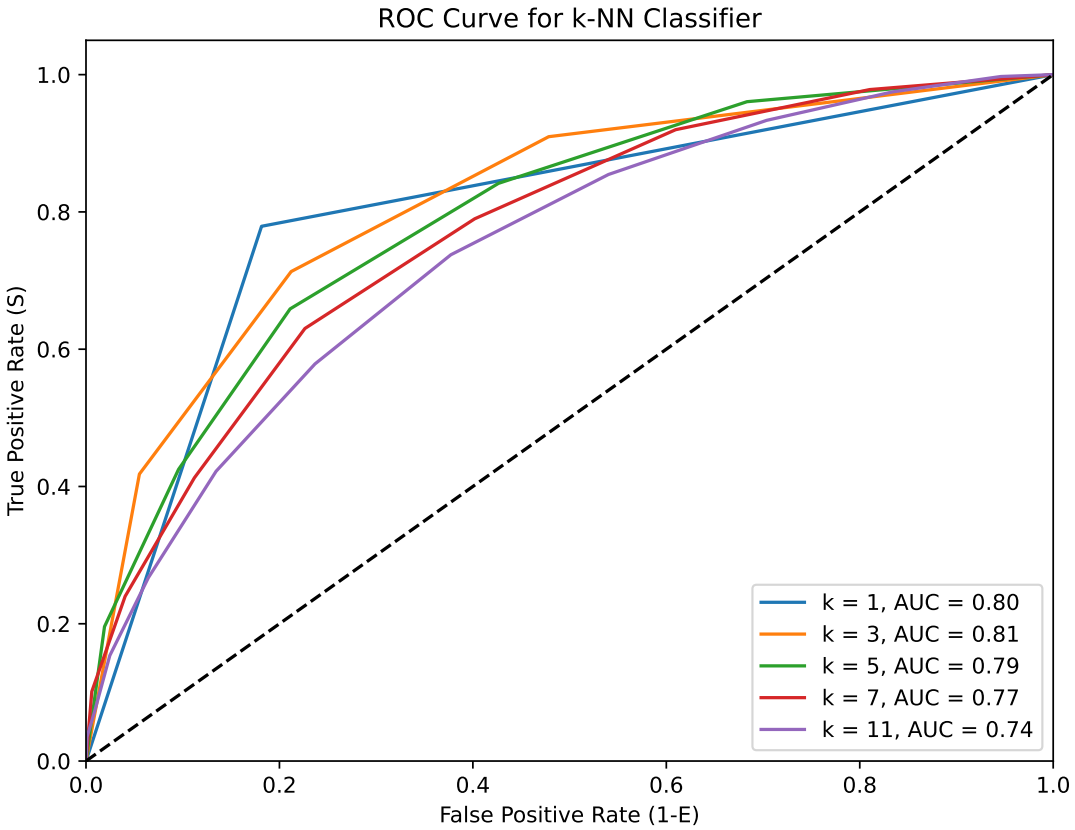
```
import matplotlib.pyplot as plt

plt.figure(figsize=(8, 6)) # Set figure size
for i in range(len(k_list)): # Draw as many curves as items in k_list
    plt.plot(fpr_list[i], tpr_list[i], label='k = %d, AUC = %.2f' % (k_list[i
    ], roc_auc_list[i])) # Plots the curve for each k and sets the AUC values
    for the legend
plt.plot([0, 1], [0, 1], 'k--') # Draws diagonal line for reference
plt.xlim([0.0, 1.0]) # Set X axis
```

```
## (0.0, 1.0)
```

```
plt.ylim([0.0, 1.05]) # Set Y axis
```

```
## (0.0, 1.05)
```

```
plt.xlabel('False Positive Rate (1-E)') # X label
plt.ylabel('True Positive Rate (S)') # Y label
plt.title('ROC Curve for k-NN Classifier') # Graph title
plt.legend(loc="lower right") # Legend
plt.show() # Prints the graph
```



Es importante destacar que, en este nuevo modelo, los datos se distribuyen de manera más equitativa entre las clases. Esto puede ayudar a evitar un posible sesgo en las predicciones del modelo, ya que cada clase tiene una presencia más equilibrada en el conjunto de datos.

Para el cálculo de la curva roc, la función roc_curve de sklearn calcula automáticamente los thresholds necesarios para poder obtener valores que representen adecuadamente los FPR y TPR sin que sea computacionalmente costoso. En cambio, para el cálculo de la matriz de confusión, se ha usado un threshold estándard de 0.5 que podría no ser el más interesante para el modelo.

El uso de diferentes thresholds para el cálculo de la curva ROC y la matriz de confusión se debe a la naturaleza de cada métrica. Para la curva ROC, se requiere calcular los valores de TPR y FPR para diferentes puntos de corte o thresholds en la salida del modelo. Para facilitar este cálculo, la función roc_curve de sklearn utiliza un enfoque automático que encuentra los thresholds necesarios de manera eficiente.

Por otro lado, para la matriz de confusión, se utiliza un threshold estándar de 0.5 para clasificar las predicciones del modelo en TN, FP, TN y FN. Sin embargo, este threshold puede no ser el más adecuado para todos los modelos y puede variar según la aplicación. Por lo tanto, sería interesante considerar diferentes thresholds y evaluar el rendimiento del modelo en diferentes puntos de corte para comprender mejor su comportamiento y desempeño en diferentes situaciones.

(f) Resultados

Clasificación para tres estructuras

Previamente a la aplicación del algoritmo, es conveniente asegurarse que todos los tipos de estructura están correctamente representados tanto en el set de entrenamiento como en el de prueba. Como hemos comentado,

aunque la clase coil está sobrerepresentada, los sets de entrenamiento y prueba contienen un porcentaje de estructuras similar de cada clase.

Observando los resultados de la clasificación para las tres clases de estructuras secundarias, podemos ver que el modelo que mejor predice es el que usa k=1. Podemos deducirlo puesto que tiene un error de clasificación menor (0,24) lo que indica que tan solo predice mal un 24% de los casos del data test. Como bien sabemos este error no deja de ser 1-exactitud (accuracy), así que estos dos parámetros nos aportan la idea de qué tan bien nuestro modelo clasifica la estructura de la cadena de aminoácidos.

El valor kappa está estrechamente relacionado con la exactitud, excepto que éste tiene en cuenta la probabilidad de clasificar correctamente por azar. Cuánto más cercano a 1 es el valor, mejor predice el modelo, mientras que si el valor es cercano a 0, el modelo no predice mejor que una clasificación aleatoria. En este caso el valor más elevado es el de k=1, con 0.59. Si seguimos la guía general proporcionada en el libro (Lantz, Brett. Machine Learning with R (2). Packt Publishing, 2015. 452 p. ISBN 9781784394523), el modelo sigue un ajuste moderado-bueno. Depende de la aplicación del modelo si este ajuste es suficientemente bueno para ser usado o no, según si se pueden permitir errores o no.

La precisión, el recall y el F-score también parecen indicar que el modelo con k=1 se ajusta mejor. En este caso como hay 3 posibles resultados se calculan sobre cada una de las clases. Aunque el k=1 parezca ajustarse mejor, se debe escoger el modelo según la naturaleza de nuestros datos y el problema a resolver. La precisión representa la proporción de ejemplos positivos que son realmente positivos (que se han clasificado como esa clase y lo eran). Si queremos que el modelo sólo clasifique coil en los casos que realmente sea coil, buscaremos un valor alto de precisión para coil. Por otro lado, un valor elevado de recall indicará que nuestro modelo detecta gran parte de los casos positivos, siguiendo el ejemplo anterior, de todas las estructuras que eran coil ha clasificado bien muchas de ellas. Finalmente, si queremos hacernos una idea general podemos consultar el F-score, que combina recall y precisión en un solo valor.

Es importante tener en cuenta que ninguno de los parámetros mencionados por sí solos puede proporcionar una idea completa sobre si un modelo está overfitted o underfitted a los datos de entrenamiento, ya que cada uno de ellos mide diferentes aspectos del rendimiento del modelo. Por lo tanto, es recomendable evaluar múltiples parámetros diferentes y realizar una evaluación cruzada para evitar el overfitting y obtener una visión más completa del rendimiento del modelo.

Clasificación para coil y non-coil

Primeramente, cabe destacar que al separar los datos de esta manera, la clase non-coil está mejor representada que las clases a-helix y b-sheet por separado. Es importante saber que tanto el valor predictivo positivo (VPP o precisión) como el valor predictivo negativo (VPN), se ven afectados por la prevalencia de una de las clases. Si la clase positiva está subrepresentada, se podría obtener un VPP elevado clasificando todos los casos como negativos. Por ello es importante evaluar múltiples parámetros a la hora de evaluar el ajuste de un modelo.

Igual que en el modelo anterior, parece ser que el k=1 es el más exacto y con menor error. Nuevamente el valor kappa nos indica que estamos ante un modelo de ajuste moderado-bueno.

Los valores de sensibilidad (S), especificidad (E), VPP y VPN, también nos indican que el modelo con k=1 es el que mejor se ajusta en general. En este caso, el modelo tiene una sensibilidad de 0.77 y una especificidad de 0.81, lo que significa que es capaz de detectar correctamente el 77% de los casos positivos y de identificar correctamente el 81% de los casos negativos.

Por otro lado, los valores predictivos positivo y negativo indican la probabilidad de que un resultado positivo o negativo, respectivamente, sea verdadero. En este caso, el VPP es 0.77 y el VPN es 0.82, lo que significa que cuando el modelo da una predicción positiva, hay una probabilidad del 77% de que sea verdadera, mientras que cuando da una predicción negativa, la probabilidad de que sea verdadera es del 82%. Esto coincide con las reflexiones realizadas en los apartados 3.a y 3.e, y es que como la clase negativa (coil) está ligeramente sobrerepresentada, es más probable que la clasifique correctamente.

Analizando la curva ROC podría parecer que k=1 es el que mejor se ajusta, ya que es el que más se aproxima a 1 de sensibilidad y 0 de 1 - especificidad. Lo podemos ver en la curva ROC, pero también en la propia matriz

de confusión. El número de falsos positivos y de falsos negativos es bastante similar, sobretodo para k=1. Conforme aumentamos el valor de k, la curva se aleja cada vez más de estos valores ideales, determinando así que se ajustan peor los modelos.

Si examinamos el AUC, vemos que k = 3 es ligeramente superior. Al ser una diferencia de tan solo 0.01, al tener en cuenta el resto de factores, k=1 sigue siendo el modelo que mejor se ajusta. Consultando el libro de referencia (Lantz, Brett. Machine Learning with R (2). Packt Publishing, 2015. 452 p. ISBN 9781784394523), podemos determinar que el ajuste de acuerdo al AUC (0.8) es bueno/excelente. Cabe destacar que el AUC da una medida sobre la capacidad del modelo para distinguir entre las clases positiva y negativa en diferentes niveles de probabilidad de clasificación o thresholds. Este valor no proporciona información sobre la precisión del modelo o la calidad de la predicción en sí misma, por ello lo combinamos con el resto de parámetros para determinar cuál es mejor modelo para el caso de estudio.

Comentario global

En ambos casos hemos obtenido un relativamente buen modelo para predecir la estructura de la secuencia de aminoácidos. Parecería que el modelo coil/non-coil sería más exacto al sólo tener dos posibles resultados en lugar de tres, pero tras examinar los distintos parámetros vemos que en realidad ambos modelos son buenos.

Un valor de k muy pequeño como es k=1, puede significar que el modelo está muy ajustado a los datos de entrenamiento (overfitted) y no generalizará bien con datos nuevos. Si quisiéramos ajustar mejor los modelos necesitaríamos usar técnicas como las cross-validation para usar el máximo número de datos posibles para su entrenamiento.

También sería conveniente una vez tengamos el modelo que queremos utilizar, después de ajustar la k y las estructuras a predecir, que creemos un set de datos de validación para asegurarnos que efectivamente el modelo es bueno. Al evaluar el ajuste de varios modelos utilizando el mismo conjunto de prueba, hemos determinado el modelo que mejor predice estos datos en particular, creando así un "overfitting" a los datos de prueba, aunque en realidad, este modelo podría no ser el que mejor prediga datos futuros. Pasando un nuevo set de datos de validación ("nunca vistos"), los nuevos parámetros calculados a partir de este nos darán una idea de de la capacidad de predicción del modelo en cuanto a datos futuros.