Predicción de la estructura secundaria de proteínas globulares

Maria Lucas

2023-03-24

Contents

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 a tiempo real con nuevos datos	Sensible a datos redundantes y a valores atípicos
	Requiere pre-procesamiento de los datos

2. Codificación one-hot

```
library(reticulate)
```

```
## Warning: package 'reticulate' was built under R version 4.2.3
```

```
use_python("C:/Users/Arialux/AppData/Local/Programs/Python/Python311")
```

```
def encode_sequence(sequence):

    # Define a dictionary that maps amino acids to their corresponding positions in the one-hot encodin
    aa_to_index = {'A': 0, 'R': 1, 'N': 2, 'D': 3, 'C': 4, 'Q': 5, 'E': 6, 'G': 7, 'H': 8, 'I': 9, 'L':

    # Initialize an 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]
        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

```
# Carga de los datos
#pip install pandas
import pandas as pd
data = pd.read_csv('data4.csv', delimiter=";").values
```

```
# Creación tabla resumen

def sum_table(data):

  coil = 0
  bsheet = 0
  ahelix = 0

  for seq in data:
    if seq[-1] == "_":
      coil += 1
    if seq[-1] == "e":
      bsheet += 1
    if seq[-1] == "h":
      ahelix += 1

  tabla = [["a-helix", ahelix], ["b-sheet", bsheet], ["coil", coil]]

  return print(tabulate(tabla, headers=["Estructura", "Contador"]))

# Aplicación

from tabulate import tabulate

sum_table(data)
```

```
## Estructura      Contador
## ------------  ----------
## a-helix             2508
## b-sheet             1935
## coil                5557
```

(b) Aplicación one-hot

```
import numpy as np

# Guardamos la última columna como y, ya que son las estructuras a predecir
```

```
y = data[:, -1]

# Quitamos la última columna que es la estructura. 1 es columna 0 es row
list_seq = np.delete(data, -1, 1)

seq_encoded = []

for seq in list_seq:
  seq_encoded.append(encode_sequence(seq))
```

(c) Separación de los datos

```
from sklearn.model_selection import train_test_split

# Volvemos a poner la columna de la estructura
seq_encoded = (np.array(seq_encoded))

# Split the data into training and testing sets
seq_encoded_train, seq_encoded_test, y_train, y_test = train_test_split(seq_encoded, y ,test_size=0.33,

sum_table(y_test)
```

```
## Estructura      Contador
## ------------  ----------
## a-helix              779
## b-sheet              692
## coil                1829
```

```
sum_table(y_train)
```

```
## Estructura      Contador
## ------------  ----------
## a-helix             1729
## b-sheet             1243
## coil                3728
```

(d) Aplicación k-NN para predecir la estructura

```
seq_encoded_train = np.array(seq_encoded_train)

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

k_list = [1, 3, 5, 7, 11]
results = []

for i in k_list:
  knn_i = KNeighborsClassifier(n_neighbors = i)
  knn_i.fit(seq_encoded_train, y_train)
  y_pred = knn_i.predict(seq_encoded_test)

  # Accuracy
```

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

  # Kappa value
  kappa_i = cohen_kappa_score(y_test, y_pred)

  # Confusion matrix
  cm_i = confusion_matrix(y_test, y_pred)

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

  results.append([i, accuracy_i, kappa_i, error_i, cm_i])

  tabla = tabulate(results, headers=["k", "Accuracy", "Kappa Value", "Classification Error ", "Confusio
  print(tabla)
```

```
## KNeighborsClassifier(n_neighbors=1)
##   k    Accuracy    Kappa Value    Classification Error   Confusion matrix
## ---  ----------  -------------  ----------------------  ------------------
##   1    0.759394       0.594782                0.240606  [[1497  162  170]
##                                                         [ 160  461   71]
##                                                         [ 165   66  548]]
## KNeighborsClassifier(n_neighbors=3)
##   k    Accuracy    Kappa Value    Classification Error   Confusion matrix
## ---  ----------  -------------  ----------------------  ------------------
##   1    0.759394       0.594782                0.240606  [[1497  162  170]
##                                                         [ 160  461   71]
##                                                         [ 165   66  548]]
##   3    0.711212       0.491203                0.288788  [[1536  139  154]
##                                                         [ 271  359   62]
##                                                         [ 275   52  452]]
## KNeighborsClassifier()
##   k    Accuracy    Kappa Value    Classification Error   Confusion matrix
## ---  ----------  -------------  ----------------------  ------------------
##   1    0.759394       0.594782                0.240606  [[1497  162  170]
##                                                         [ 160  461   71]
##                                                         [ 165   66  548]]
##   3    0.711212       0.491203                0.288788  [[1536  139  154]
##                                                         [ 271  359   62]
##                                                         [ 275   52  452]]
##   5    0.682424       0.428372                0.317576  [[1551  143  135]
##                                                         [ 334  301   57]
##                                                         [ 318   61  400]]
## KNeighborsClassifier(n_neighbors=7)
##   k    Accuracy    Kappa Value    Classification Error   Confusion matrix
## ---  ----------  -------------  ----------------------  ------------------
##   1    0.759394       0.594782                0.240606  [[1497  162  170]
##                                                         [ 160  461   71]
##                                                         [ 165   66  548]]
##   3    0.711212       0.491203                0.288788  [[1536  139  154]
##                                                         [ 271  359   62]
##                                                         [ 275   52  452]]
##   5    0.682424       0.428372                0.317576  [[1551  143  135]
##                                                         [ 334  301   57]
```

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

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

```
def count_instances(array):
  unique, counts = np.unique(array, return_counts=True)
  dic = dict(zip(unique, counts))

  return print(dic)
```

```
# Preparing y

y2 = np.copy(y)

y2[y2 == "h"] = "1"
y2[y2 == "e"] = "1"
y2[y2 == "_"] = "0"

count_instances(y2)
```

```
## {'0': 5557, '1': 4443}
```

```
seq_encoded_train2, seq_encoded_test2, y2_train, y2_test = train_test_split(seq_encoded, y2 ,test_size=

count_instances(y2_train)
```

```
## {'0': 3728, '1': 2972}
```

```
count_instances(y2_test)

#k-NN and ROC curve
```

```
## {'0': 1829, '1': 1471}
```

```
from sklearn.metrics import roc_curve, roc_auc_score

k_list = [1, 3, 5, 7, 11]
accuracy_list2 = []
roc_auc_list = []
fpr_list = []  # create empty list to store fpr for each k
tpr_list = []  # create empty list to store tpr for each k


for i in k_list:
  knn_i = KNeighborsClassifier(n_neighbors=i)
  knn_i.fit(seq_encoded_train2, y2_train)
  y_pred_proba = knn_i.predict_proba(seq_encoded_test2)[:, 1]  # predicted probabilities of class 1
  fpr, tpr, thresholds = roc_curve(y2_test, y_pred_proba, pos_label = "1")  # calculate fpr, tpr, and t
  roc_auc = roc_auc_score(y2_test, y_pred_proba)  # calculate ROC AUC
  accuracy_i = knn_i.score(seq_encoded_test2, y2_test)
  accuracy_list2.append(accuracy_i)
  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
```

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

```
print('Accuracy:', accuracy_list2)
```

```
## Accuracy: [0.8009090909090909, 0.7545454545454545, 0.730909090909091, 0.7096969696969697, 0.68090909
```

```
print('ROC AUC:', roc_auc_list)
```

```
## ROC AUC: [0.7987709532090992, 0.8143476633540968, 0.7916117658734068, 0.769447518062903, 0.742924348
```

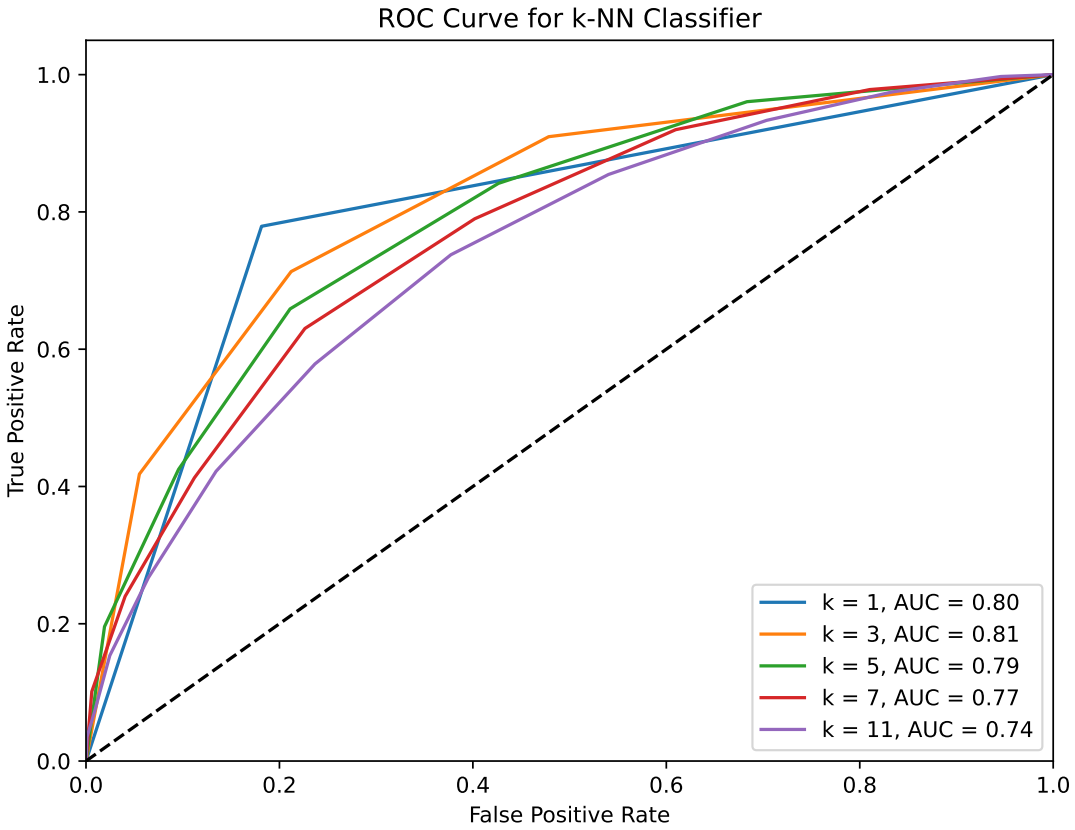
```
import matplotlib.pyplot as plt

plt.figure(figsize=(8, 6))
for i in range(len(k_list)):
    plt.plot(fpr_list[i], tpr_list[i], label='k = %d, AUC = %.2f' % (k_list[i], roc_auc_list[i]))
plt.plot([0, 1], [0, 1], 'k--')
plt.xlim([0.0, 1.0])
```

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

```
plt.ylim([0.0, 1.05])
```

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

```
plt.xlabel('False Positive Rate')
plt.ylabel('True Positive Rate')
plt.title('ROC Curve for k-NN Classifier')
plt.legend(loc="lower right")
plt.show()
```



(f) Resultados

```
print("Donete")
```

```
## Donete
```