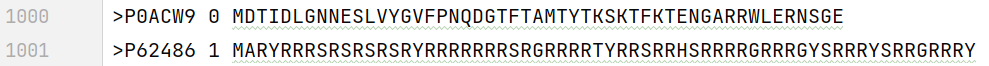
**实验7 蛋白质功能预测实验**

**1. 实验数据**

**(1) 训练集**

该训练数据集包含2000条蛋白质序列，存放于文件“ProSeqs\_Train.txt”。文件中每一行若以空格隔开，内容分别是序列ID、类标号以及蛋白质的氨基酸序列。截取文件中第1000和1001行内容，如下图所示：



其中“P62486”为序列ID，1表示该蛋白质具有某种生物功能（反之，0表示蛋白质不具有这种生物功能），而“MARYRRRSRSRSRSRYRRRRRRRSRGRRRRTYRRSRRHSRRRRGRRRGYSRRRYSRRGRRRY”为蛋白质P62486的氨基酸序列。

自然界中，天然蛋白质主要由20种标准的氨基酸构成，分别对应于字母表AA20={'A', 'R', 'N', 'D', 'C', 'Q', 'E', 'G', 'H', 'I', 'L', 'K', 'M', 'F', 'P', 'S', 'T', 'W', 'Y', 'V'}中的英文字母。若在蛋白质序列中存在非标准的氨基酸，即存在AA20以外的英文字母，则统一记为'X'。

**(2) 测试集**

另有200条未知标签的测试数据，保存在“ProSeqs\_Test.txt”文件中。每一行仅给定序列ID及其氨基酸序列，而每条序列的类别(1: 具有某种功能，0: 不具有该功能)未知，待建模识别。

**2. 实验目的**

本次实验目标如下：

**(1)** 灵活设计样本的特征向量，具备一定的特征工程能力。

**(2)** 利用机器学习分类算法，基于训练集构建分类器模型；

**(3)** 进而将构建好的分类器模型应用于测试集，给出全体未知标签样本的分类结果，即预测氨基酸序列为功能蛋白(1)或非功能蛋白(0)。

**3. 设计思路**

**(1)** 具体采用的机器学习算法不限，有条件也可以尝试深度学习模型，以预测效果最佳为目标，追求F1 score越高越好；可以尝试多种学习模型的集成。

**(2)** 需从每条序列中提取特征，表示为固定长度的向量。特征向量设计思路不限，可尝试如下：

(a) 氨基酸组分，即每种氨基酸在蛋白质序列中的比例，可以表示为一个20维的向量。

(b) 可以固定步长间隔式地抽取子序列，并计算各个子序列的氨基酸组分。比如将某条蛋白质序列记为字符串pseq，则可分别计算子串pseq[ : : 2]和pseq[1: :2]的氨基酸组分。依次类推，可以尝试计算各种子串pseq[i: :k] (k=2,3,4,…; i=0,1,…,k-1)的氨基酸组分。此类特征统称为k-space氨基酸组分。

(c) 序列上连续的两个氨基酸称为二肽，且二肽的可能种类共计20\*20=400. 我们还可以考虑二肽组分。依次类推，三肽组分？…

**(3)** 针对设计好的特征向量，可能是高维的，则可尝试进行特征选择、数据变换、降维等特征工程相关预处理，实现方法不限。

**(4)** *拓展探索*：有资源有条件的同学甚至可以考虑*预训练的蛋白质或自然语言模型*对氨基酸序列进行编码表示，然后开展适当的特征工程，构建起更高质量的蛋白质功能分类预测模型。

**4. 实验要求**

**(1)** 将预测结果保存在名为“preds.txt”的文本文件中，内容为200行， 每一行只有0 或者1，代表你的算法对测试数据的预测结果。预测数据顺序须与测试集“ProSeqs\_Test.txt”中的样本顺序保持一致。

**(2)** 将结果文件“preds.txt”以附件形式提交至学习通，将全部源代码文件压缩打包为 “src.zip”以第二个附件提交至学习通。另请注意：只需提交结果文件和源代码压缩文件，且不要对结果文件“preds.txt”进行压缩，也无需提交本次实验报告文件。

**(3)** 本次实验成绩评定采用竞赛机制，采用每位同学预测结果的F1 score作为本次实验成绩。