

Progress

Mizuno Yasuaki

October 17, 2022

- アミノ酸ベクタの割り当て①
- 学習結果①
- アミノ酸ベクタの割り当て②
- 学習結果②
- まとめ

アミノ酸ベクタの割り当て①

x 成分をアミノ酸のサイズ、y 成分を疎水性尺度とした。

Table 1: アミノ酸ベクタ

アミノ酸	(x, y)	アミノ酸	(x, y)
A	(2.5, 0.02)	M	(6.0, 1.00)
C	(3.0, 0.77)	N	(5.0, -0.77)
E	(5.0, -1.14)	P	(5.5, -0.09)
F	(2.5, 1.35)	Q	(6.0, -1.10)
G	(0.5, -0.80)	S	(3.0, -0.97)
H	(6.0, 0.26)	T	(5.0, 1.13)
I	(5.5, 1.81)	V	(5.0, 1.13)
K	(7.0, -0.41)	W	(7.0, 1.71)
L	(5.5, 1.14)	Y	(7.0, 1.11)

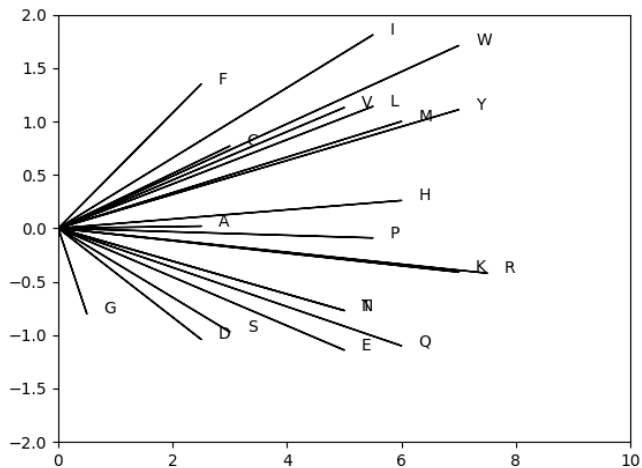


Figure 1: アミノ酸ベクタ①

モデル①

- 全結合層
 - 活性化関数 Relu
 - He の初期値
 - l2 正規化
- adam(learning_rate=0.001)
- batch_size = 128
- epochs = 20

Test accuracy: 0.9567307829856873

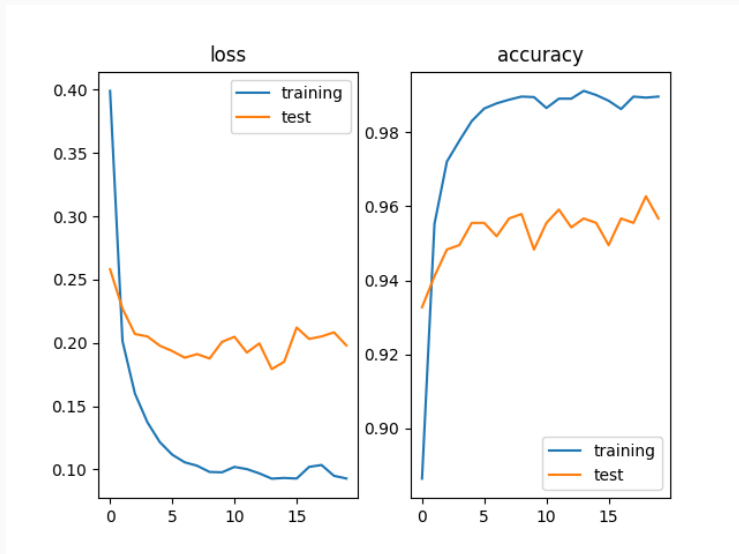


Figure 2: モデル①の学習結果①

Test accuracy: 0.9543269276618958

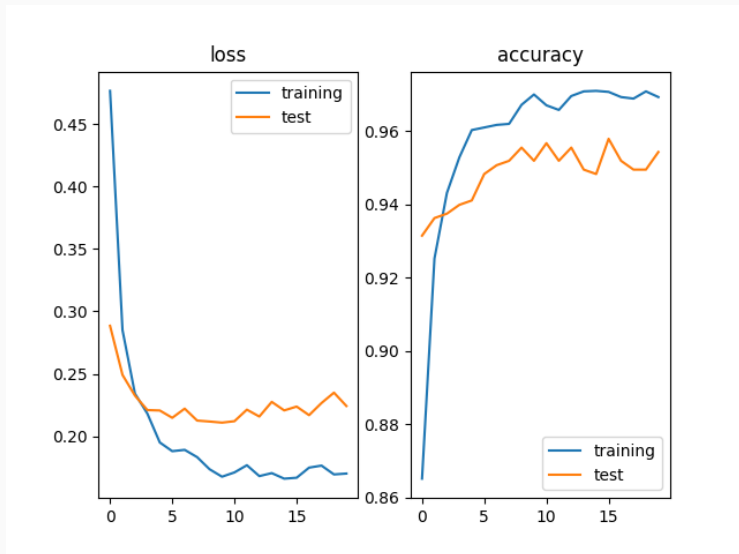


Figure 3: モデル①の学習結果

Table 2: 各クラスにおける正解率

class	accuracy
A	0.9718309640884399
B	0.7884615659713745
C	0.9567307829856873
D	0.0
E	1.0

アミノ酸ベクタの割り当て②

Table 3: アミノ酸の疎水性度

アミノ酸	疎水性度	アミノ酸	疎水性度
Arg/R	-5.10	Gly/G	-0.64
Lys/K	-4.11	Ser/S	-0.50
Gln/Q	-3.68	Trp/W	-0.46
Asp/D	-3.60	Ala/A	1.10
Asn/N	-3.50	Met/M	1.90
His/H	-3.20	Cys/C	2.50
Glu/E	-3.20	Phe/F	2.80
Pro/P	-1.90	Leu/L	3.80
Tyr/Y	-1.30	Val/V	4.20
Thr/T	0.70	Ile/I	4.50

アミノ酸ベクタの割り当て②

疎水精度を h とする。任意のアミノ酸 c におけるベクトルを以下に示す。

$$\begin{cases} \theta = 180 - 170 \times \frac{h_c + |h_{min}|}{|h_{max}| + |h_{min}|} \\ x = \cos\theta \\ y = \sin\theta \end{cases}$$

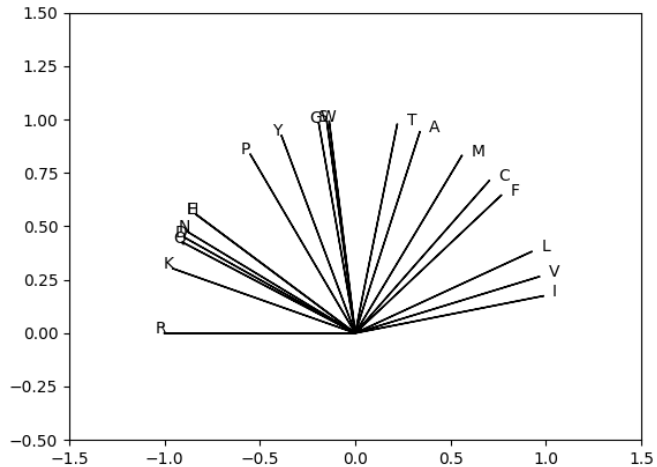


Figure 4: アミノ酸ベクタ②

Test accuracy: 0.9435096383094788

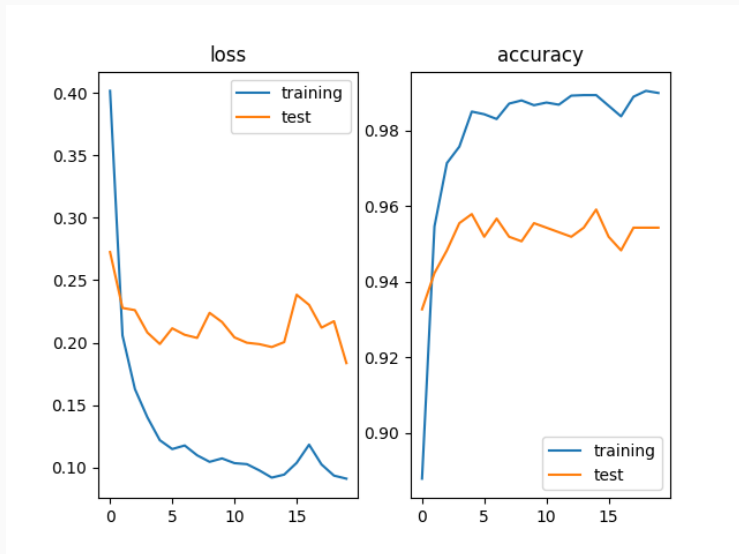


Figure 5: モデル①の学習結果②

Test accuracy: 0.9543269276618958

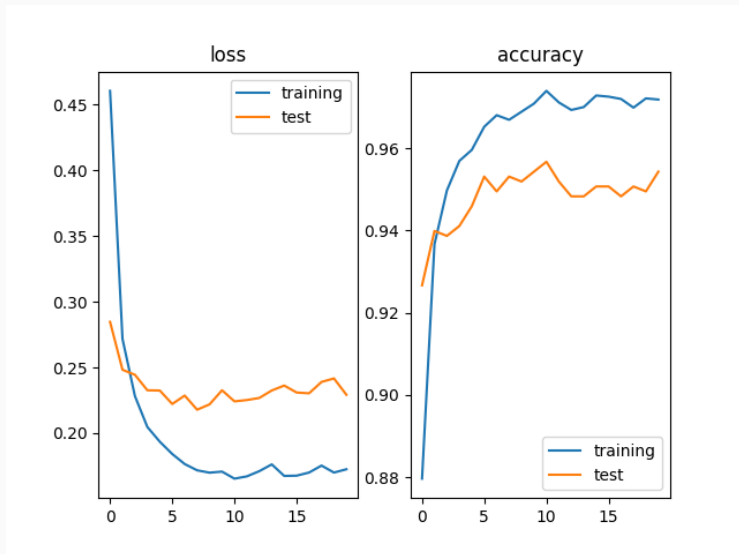


Figure 6: モデル①の学習結果②

Table 4: 各クラスにおける正解率

class	accuracy
A	0.966549277305603
B	0.807692289352417
C	0.961538434028625
D	0.0
E	1.0

- クラス D とクラス E の正答率が小さかった
- 単純なニューラルネットワークを試したので、より複雑なニューラルネットワークを使う
- COG のデータベースで試す