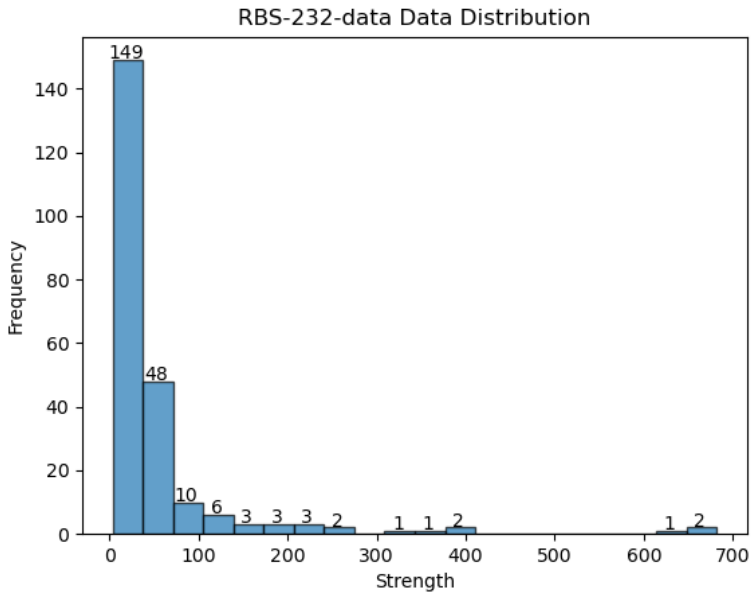
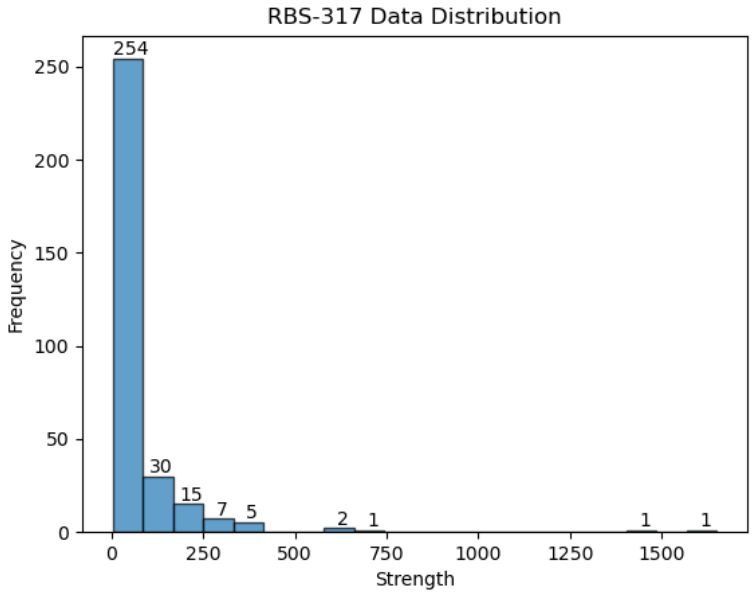
数据集

232 条长度为 30的序列



317 条长度为 30的序列



编码方式

- one-hot 编码 4*30

```
char_map = {
    'A': [1, 0, 0, 0],
    'T': [0, 1, 0, 0],
    'C': [0, 0, 1, 0],
    'G': [0, 0, 0, 1]
}
```

- dimer 编码**(理化特性)**

用RNA的11个理化性质，用 长度为11 的向量进行编码 11*29

```
char_map = {
            'GG': [-0.01, -1.78, 3.32, 0.3, 12.1, 32.0, -11.1, -12.2, -29.7,
-3.26, 0.17],
            'GA': [0.07, -1.7, 3.38, 1.3, 9.4, 32.0, -14.2, -13.3, -35.5, -2.35,
0.1],
            'GC': [0.07, -1.39, 3.22, 0.0, 6.1, 35.0, -16.9, -14.2, -34.9, -3.42,
0.26],
            'GT': [0.23, -1.43, 3.24, 0.8, 4.8, 32.0, -13.8, -10.2, -26.2, -2.24,
0.27],
            'AG': [-0.04, -1.5, 3.3, 0.5, 8.5, 30.0, -14.0, -7.6, -19.2, -2.08,
0.08],
            'AA': [-0.08, -1.27, 3.18, -0.8, 7.0, 31.0, -13.7, -6.6, -18.4,
-0.93, 0.04],
            'AC': [0.23, -1.43, 3.24, 0.8, 4.8, 32.0, -13.8, -10.2, -26.2, -2.24,
0.14],
            'AT': [-0.06, -1.36, 3.24, 1.1, 7.1, 33.0, -15.4, -5.7, -15.5, -1.1,
0.14],
            'CG': [0.3, -1.89, 3.3, -0.1, 12.1, 27.0, -15.6, -8.0, -19.4, -2.36,
0.35],
            'CA': [0.11, -1.46, 3.09, 1.0, 9.9, 31.0, -14.4, -10.5, -27.8, -2.11,
0.21],
            'CC': [-0.01, -1.78, 3.32, 0.3, 8.7, 32.0, -11.1, -12.2, -29.7,
-3.26, 0.49],
            'CT': [-0.04, -1.5, 3.3, 0.5, 8.5, 30.0, -14.0, -7.6, -19.2, -2.08,
0.52],
            'TG': [0.11, -1.46, 3.09, 1.0, 9.9, 31.0, -14.4, -7.6, -19.2, -2.11,
0.34],
            'TA': [-0.02, -1.45, 3.26, -0.2, 10.7, 32.0, -16.0, -8.1, -22.6,
-1.33, 0.21],
            'TC': [0.07, -1.7, 3.38, 1.3, 9.4, 32.0, -14.2, -10.2, -26.2, -2.35,
0.48],
            'TT': [-0.08, -1.27, 3.18, -0.8, 7.0, 31.0, -13.7, -6.6, -18.4,
-0.93, 0.44]}
```

- dimer-1 编码

将两个碱基为一组进行编码，用 长度为16 的向量 16*29

- triplet 编码

将三个碱基为一组进行编码，用 长度为64 的向量

表示如'AAA'会被编码为[1,0,...,0]

一个长度为30的序列会被编码成为一个64*28的矩阵

- combined 编码

将上述四种编码方式的输入加上rna二级结构编码的（-1，0，1序列）拼接起来 （4+11+16+64+1）*30 即 95*30

模型

EnsembleNet_M

`EnsembleNet_M` 模型是一个集成模型，它由两个 `MobileNet` 模型（即 `self.mobilenet_dimer` 和 `self.mobilenet_triplet`）组成。这两个模型分别以不同的方式编码输入数据，一个使用 "dimer" 编码，另一个使用 "triplet" 编码。

整体模型的原理如下：

1. 对于输入的 "dimer" 数据（`x_dimer`），通过 `self.mobilenet_dimer` 进行前向传播。`self.mobilenet_dimer` 是一个 `MobileNet` 模型，它使用修改后的 `MobileNetV2` 架构来处理输入数据。具体地，它首先通过一个自定义的卷积层修改输入通道数，然后使用预训练的 MobileNetV2 模型提取特征，并去掉最后的分类器层。
2. 类似地，对于输入的 "triplet" 数据（`x_triplet`），通过 `self.mobilenet_triplet` 进行前向传播。`self.mobilenet_triplet` 也是一个 `MobileNet` 模型，它与 `self.mobilenet_dimer` 结构相同，但是处理的是 "triplet" 数据。
3. 在每个模型中提取的特征上，使用自适应平均池化层将特征图大小调整为 1x1。
4. 将经过池化后的 "dimer" 特征和 "triplet" 特征在第一个维度上拼接起来，形成一个新的特征张量。
5. 将拼接后的特征张量展平成一维向量，作为输入传递给全连接层（`self.fc`）。
6. 最终，通过全连接层获得模型的输出。

```
class EnsembleNet_M(nn.Module):
    def __init__(self, num_classes, input_channels):
        super(EnsembleNet_M, self).__init__()
        self.mobilenet_dimer = MobileNet(num_classes, input_channels)
        self.mobilenet_triplet = MobileNet(num_classes, input_channels)
        # Define an adaptive average pooling layer with output size 1x1
        self.pool = nn.AdaptiveAvgPool2d(1)
        self.fc = nn.Linear(1280 * 2, 1)

    def forward(self, x_dimer, x_triplet):
        # Extract the features from both mobilenets and pool them
        features_dimer =
self.pool(self.mobilenet_dimer.mobilenet.features(x_dimer))
        features_triplet =
self.pool(self.mobilenet_triplet.mobilenet.features(x_triplet))
        # Concatenate the features along the channel dimension and flatten them
        features = torch.flatten(torch.cat([features_dimer, features_triplet],
dim=1), 1)
        # Use the fully connected layer to get the final output
        out = self.fc(features)
        return out
```

结果

rbs-317

	MobileNet-dimer	MobileNet-dimer-1	MobileNet-triplet	MobileNet-combined	EnsembleNet-M
MAE	88.9604	65.0267	61.4571	53.9818	68.0180

	MobileNet-dimer	MobileNet-dimer-1	MobileNet-triplet	MobileNet-combined	EnsembleNet-M
PCC	0.3745	0.0854	0.4210	-0.0969	0.3999
R^2	-0.4886	-0.0906	0.1190	-0.1270	0.1177

rbs-232

	MobileNet-dimer	MobileNet-dimer-1	MobileNet-triplet	MobileNet-combined	EnsembleNet-M
MAE	59.3410	65.6353	69.9492	65.8366	68.9255
PCC	0.8437	0.9100	0.7970	0.8730	0.7419
R^2	0.4047	0.4424	0.4207	0.5231	0.3245