Journal of Applied And Basic Machine Intelligence Research (ABMIR)

پژوهش‌های نظری و کاربردی هوش ماشینی

سال اول، شماره دوم، پاییز و زمستان ۱۴۰۲، صفحات ۱۰۴-۹۲

بهبود تخصیص‌اعتبار قوانین در سیستم دسته‌بندیادگیر با یادگیری تقویتی مارکوف برای پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین

محمدرضا دهقانی محمودآبادی[۱]، کمال میرزائی[۲*]، فرزاد پیروی[۳]

[۱] دانشجوی دکتری مهندسی کامپیوتر، واحد میبد، دانشگاه آزاد اسلامی، میبد، ایران

[۲] گروه مهندسی کامپیوتر، واحد میبد، دانشگاه آزاد اسلامی، میبد، ایران

[۳] گروه مهندسی کامپیوتر، واحد مرودشت، دانشگاه آزاد اسلامی، مرودشت، ایران

مقاله پژوهشی

چکیده

این پژوهش برای افزایش دقت تخصیص‌اعتبار قوانین در سیستم دسته‌بند یادگیر با استفاده از یادگیری تقویتی مارکوف جهت پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین است. یادگیری تقویتی مارکوف در سیستم دسته‌بند یادگیر، جایگزین الگوریتم Bucket Brigade شده‌است. برای آموزش سیستم از مجموعه داده‌ها Protein Data Bank استفاده‌می‌شود که شامل پروتئین L1W٤ با تعداد ٥٧٤١ نمونه است که ٧٠ درصد برای آموزش و ٣٠ درصد جهت آزمایش استفاده‌شده‌است. پس از آموزش سیستم، تعدادی دسته‌بند(قوانین) باارزش، تولیدمی‌شود که در مرحله آزمایش از این قوانین برای پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین استفاده‌خواهدشد. نتایج آزمایش‌ها نشان‌می‌دهد دقت سیستم دسته‌بند یادگیر با یادگیری تقویتی مارکوف در نوع ساده و توسعه‌یافته آن، افزایش‌یافته‌است. با استفاده از یادگیری تقویتی مارکوف، ارزش‌گذاری به هر قانون بهبود داده‌می‌شود، به گونه‌ای که دقت سیستم دسته‌بند ساده ٨٢,٥٪ و سیستم دسته‌بند توسعه یافته ٨٥٪ بهبودیافته‌است.

تاریخ دریافت:
١٤٠١/١١/٢٤

تاریخ پذیرش:
١٤٠٢/٧/٥

کلیدواژه‌ها:
بیوانفورماتیک، ساختار دوم پروتئین، سیستم دسته‌بند یادگیر، یادگیری تقویتی مارکوف

نویسنده‌مسئول:
Kmirzaie.ir@ maybodiau.ac.ir

: 10.22034/ABMIR.2023.19690.1021

E-ISSN: 2821-2037/© 2023. Published by Yazd University This is an open access article under the CC BY 4.0 License (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

۱- مقدمه

بیوانفورماتیک‌ساختاری به عنوان بخشی از زیست‌شناسی محاسباتی، به پیش‌بینی ساختار سه بعدی مولکول‌های زیستی می‌پردازد. هدف اصلی بیوانفورماتیک‌ساختاری ابداع روش‌های جدید برای پردازش داده‌های زیستی و حل مسائل موجود در زیست‌شناسی و تولید دانش جدید است [۱].

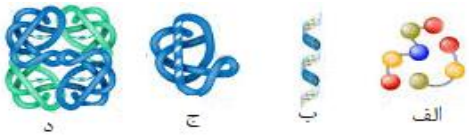
ساختار پروتئین ارتباط مستقیمی با کارکرد آن دارد. به طور کلی ساختار پروتئین‌ها به چهار دسته تقسیم‌می‌شوند: ساختار اول یا توالی، ساختار دوم ترکیب محلی زنجیره‌های پلی‌پپتیدی، ساختار سوم چین‌خوردگی سه‌بعدی پروتئین و ساختار چهارم که ارتباط چند پلی‌پپتیدی را نشان‌می‌دهد [۲].

بیوانفورماتیک‌ساختاری کنش‌های بین ساختارها را با توجه به مختصات فضایی آن‌ها بررسی‌می‌کند. ساختار اول، اجازه تشکیل ترکیب‌های محلی زنجیره پلی‌پپتیدی را می‌دهد [۳]. اگر چه ساختار اتمی مولکول‌ها را می‌توان با روش‌های غیرمحاسباتی به‌دست‌آورد، اما هزینه‌بر بودن این روش‌ها باعث‌می‌شود تا رویکردهای محاسباتی برای تعیین ساختار سه‌بعدی مولکول‌ها استفاده‌شود [٤]. اسیدهای آمینه مختلف، زنجیره‌های جانبی متفاوتی دارند که انواع مختلف اسیدهای آمینه را از روی زنجیره جانبی آن‌ها می‌توان تعیین نمود. در زنجیره اسید آمینه سه نوع پیوند کربن آلفا وجود دارد که در طول زنجیره تکرارمی‌شود. این پیوندها در تعیین ساختار دوم پروتئین نقش‌دارند [۵].

ساختار سوم پروتئین به شکل فضایی یک پروتئین و ترتیب ترکیبی اسیدهای آمینه آن اشاره‌دارد. این ساختار، تعیین‌کننده ویژگی‌های زیستی پروتئین است و می‌تواند توسط روش‌های مختلف مانند رزونانس مغناطیسی هسته‌ای و پراش پرتو ایکس تعیین شود.

ساختار چهارم پروتئین، به صورت فضایی و سه‌بعدی است و به ترتیبِ ترکیبی اسیدهای آمینه پروتئین و تعاملات مختلف بین اجزای ساختاری پروتئین اشاره دارد. این ساختار تعیین کننده خصوصیات و عملکرد نهایی پروتئین است.

شکل ۱، قسمت الف ساختار اول پروتئین، قسمت ب ساختار دوم پروتئین، قسمت ج ساختار سوم پروتئین و قسمت د ساختار چهارم پروتئین را نمایش‌می‌دهد [٦].



شکل(۱): انواع ساختارهای پروتئین

پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین از روی اسیدهای آمینه یکی از مسائل مهم بیوانفورماتیک‌ساختاری است زیرا کارکرد اصلی هر پروتئین به ساختار دوم آن وابسته است [۷].

در دهه‌های اخیر همراه با افزایش قدرت محاسباتی کامپیوترها تمایل به استفاده از تکنیک‌های یادگیری ماشین برای پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین افزایش‌یافته‌است [۸,۹]. در این پژوهش از سیستم دسته‌بند یادگیر ساده[1](LCS) و دسته‌بند یادگیر توسعه‌یافته[2](XCS) برای پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین استفاده‌می‌شود.

بهبود ارزش‌گذاری در LCS و XCS با استفاده از جایگزین شدن یادگیری تقویتی[3] مارکوف به جای الگوریتم Brigade Bucket در بخش تخصیص‌اعتبار[4] انجام‌شده‌است. این الگوریتم به منظور بهبود کارایی و عملکرد سیستم‌های توزیع شده و تخصیص منابع در آنها استفاده می‌شود. در الگوریتمBucket Brigade وظیفه‌ها و منابع در سیستم به صورت زنجیره‌ای و پیوسته هم‌زمان تخصیص می‌یابند. این الگوریتم بر مبنای تبادل پیام بین اعضای سیستم کار می‌کند تا وظایف را به طور متوالی از یک منبع به منبع بعدی منتقل کند.

مقاله به صورت ذیل بخش‌بندی می‌شود. در بخش دوم سیستم‌های دسته‌بند یادگیر توضیح‌داده‌خواهدشد و سپس در بخش سوم کارهای مرتبط با پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین، به‌صورت مختصر شرح‌داده‌می‌شود. روش پیشنهادی در بخش چهارم ارائه‌می‌گردد. در بخش پنجم مجموعه داده‌ها و در بخش ششم پیاده‌سازی و ارزیابی آن‌ها با توجه به پارامترهای بیان‌شده به همراه زمان اجرای

[1] Learning Classifier System
[2] eXtended Learning Classifier
[3] RL Agent
[4] Credit Assignment

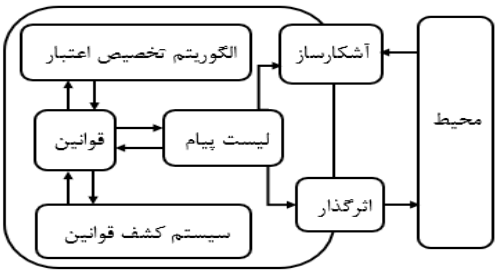
الگوریتم توضیح‌داده‌خواهدشد. در بخش هفتم نتیجه‌گیری بیان می‌شود.

۲- سیستم‌های دسته‌بند یادگیر

LCS در سال ۱۹۷۰ توسط جان هالند ارائه‌شد. در این سیستم فضای مسئله شامل مجموعه نمونه‌هایی است که هرکدام به یک کلاس خاص تعلق دارند [۱۰]. شکل۲ ساختار LCS را نشان‌می‌دهد که از اجزای آشکارساز[1]، اثرگذار[2] و محیط تشکیل‌شده‌است. آشکارساز وظیفه استخراج و تشخیص ویژگی‌های مهم و قابل توجه از داده‌های ورودی را دارد، در حالی که اثرگذارها وظیفه ترکیب اویژگی‌ها و ایجاد بازنمایی مناسبی از داده‌ها برای مدل دسته‌بندی را بر عهده دارد. ورودی از قسمت آشکارساز واردمی‌شود. این ورودی به‌صورت قالبی از پیام‌های رمزگذاری‌شده تحت عنوان لیست پیام است. در این لیست قوانین "اگر – آن‌گاه" (دسته‌بندها) به‌کارگرفته‌می‌شود. نتایج عمل دسته‌بند دوباره رمزگذاری‌شده و در لیست پیام‌ها نوشته‌می‌شود. پیام‌های جدید قوانینی هستند که سیگنال‌ها برای انجام عمل‌هایی، توسط اثرگذار استفاده‌کرده‌اند [۱۱].

ارزش‌گذاری یا پاداش عمل‌های اجراشده توسط بخش تخصیص‌اعتبار در یادگیری تقویتی سیستم LCS انجام‌می‌شود. در ادامه الگوریتم ژنتیک به عنوان مسئول کشف قانون[3]، قانون‌های جدید را می‌یابد و به جمعیت دسته‌بندها اضافه می‌کند [۱۲]. یکی از مزایای LCS کشف قوانین جدید و تخصیص‌اعتبار است [۱۳]. سیستم دسته‌بند یادگیر(شکل۲) از قسمت‌های مختلف موتور دسته‌بند، کشف قانون با الگوریتم ژنتیک و الگوریتم تخصیص‌اعتبار تشکیل‌شده‌است [۱۴].

برای ساخت دسته‌بند جدید با استفاده از لیست دسته‌بندها دو الگوریتم کشف قوانین برای این کار وجود دارد. الگوریتم اول کشف قوانین، روش پوشش[4] است. وقتی عامل، پیغام ورودی از محیط دریافت‌می‌کند آن را با لیست دسته‌بندها تطبیق‌می‌دهد. اگر دسته‌بندی پیدا نشد روش پوشش برای تولید دسته‌بند جدید استفاده‌می‌شود [۱۵].



شکل (۲): ساختار سیستم دسته‌بند یادگیر(LCS)

در الگوریتم دوم که تولید دسته‌بند است برای تولید دسته‌بندهای جدید بر اساس برازش[5] دسته‌بندهای موجود از الگوریتم ژنتیک استفاده‌می‌شود [۱۶]. تخصیص اعتبار جهت تعدیل پویای قدرت هر قانون(دسته‌بند) و اصلاح مقدار قدرت دسته‌بندها برای حل مسئله است. الگوریتم تخصیص‌اعتبار مقدار قدرت دسته‌بندها را اصلاح‌می‌نماید. سپس مراحل اجرای الگوریتم LCS مطابق فلوچارت شکل ۳ است [۱۷,۱۸]. این مراحل عبارتند از:

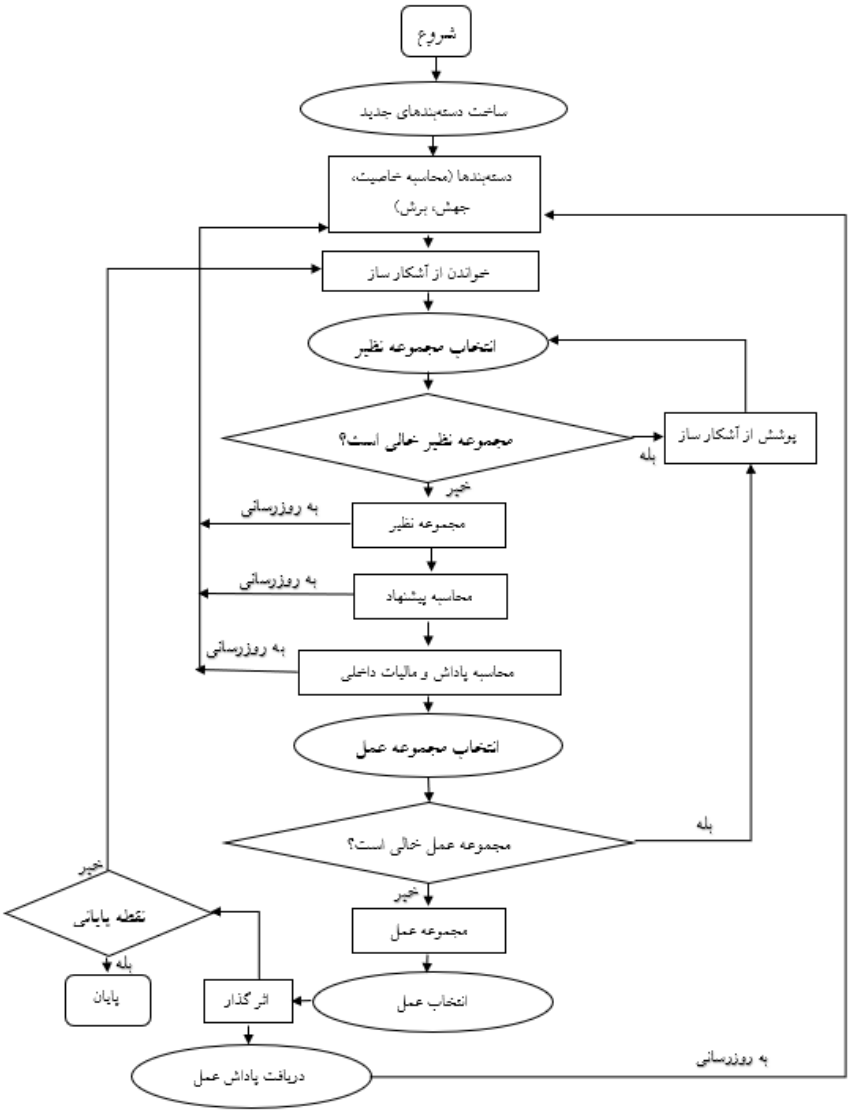
- دسته‌بندهایی که بر پیام ورودی فعلی منطبق‌می‌شوند متناسب آن‌ها قدرت پیشنهاد می‌گردد.
- وقتی پاداشی از محیط دریافت می‌شود یا یک دوره گذرانده می‌شود دسته‌بندهایی که در دوره دریافت پاداش فعال‌شده و قدرت آن‌ها افزایش پیدا کرده، به عامل برای رفتن موقعیت جدید کمک می‌کنند و دسته‌بندهایی که پیشنهاد آن‌ها در پایان هر دوره فعال می‌شود مالیات پرداخت‌می‌کنند.

در سیستم XCS، برازش افراد بر اساس دقت پیش‌بینی هر قانون است و تخصیص‌اعتبار به قوانین، بر پایه دقت یا سودمندی دسته‌بندها قرار دارد [۱۷]. تفاوت LCS و XCS در چگونگی تخصیص‌اعتبار به قوانین است [۱۹]. روال اجرایی الگوریتم XCS به‌صورت ذیل است [۲۰]:

ساخت مجموعه قوانین فعال‌شده از مجموعه قوانین تکامل‌یافته با هر نمونه ورودی صورت می‌پذیرد، اگر مجموعه قوانین فعال‌شده خالی یا برخی از کلاس‌ها در مجموعه قوانین فعال‌شده

[1] Detector
[2] Effector
[3] Rule Discovery
[4] Covering
[5] Fitness

پیش‌بینی‌نشده‌است، عملیات پوشش فعال و یک دسته‌بند جدید ساخته‌می‌شود.



شکل (۳): فلوچارت سیستم دسته‌بند یادگیر(LCS)

از مجموعه قوانین فعال‌شده یک پیش‌بینی برای هر کلاس بر اساس مقدار پیش‌بینی و برازش اختصاصی دسته‌بند ساخته‌می‌شود. سپس محاسبات پیش‌بینی انتخاب و قوانین پیش‌بینی برای یک کلاس ایجادمی‌گردد و مجموعه قوانین فعال‌شده به‌وسیله نمونه ورودی ساخته‌می‌شود، بنابراین سیستم نتیجه را بر اساس پیش‌بینی باز می‌گرداند.

ارایه پیش‌بینی در XCS با ایجاد جمعیت اولیه از قوانین آغاز می‌شود. هر قانون ویژگی‌های ورودی را با شرط تعیین می‌کند و مقدار خروجی را پیش‌بینی می‌کند. سپس از میان جمعیت قوانین با اعمال معیارهای انتخاب، بهترین قوانین انتخاب می‌شوند. نسل‌های جدید از قوانین با عملیات برش و جهش تولید می‌شوند. اعمال پاداش یا مجازات در سیستم توسط محیط با پیش‌بینی بهبود یافته و حفظ تنوع قوانین انجام می‌شود.

الگوریتم ژنتیک به‌صورت دوره‌ای بر اساس آستانه فعال‌می‌شود و بر روی مجموعه قوانین فعال‌شده اجراخواهدشد. الگوریتم ژنتیک والدین را از مجموعه قوانین فعال‌شده انتخاب‌می‌کند. اگر دو فرزند در مجموعه قوانین تکامل‌یافته، با والدین جایگزین شود و تعداد دسته‌بندها در مجموعه قوانین تکامل‌یافته به اندازه جمعیت برسد، برخی از دسته‌بندها باید حذف‌شود [۲۱]. بر اساس مقدار برازش، احتمال حذف هر دسته‌بند محاسبه‌می‌شود. برازش کم‌تر از میانگین برازش مجموعه قوانین تکامل یافته، احتمال حذف دسته بندها را افزایش‌می‌دهد [۱٤].

مؤلفه تقویتی در XCS به‌روزرسانی پارامترهای پیش‌بینی، پیش‌بینی خطا و برازش اختصاصی در مجموعه عمل مرحله قبلی دسته‌بند است. مقدار پیش‌بینی با روش یادگیری تقویتی تنظیم‌می‌شود [۱٦]. نرخ یادگیری برای تعدیل پیش‌بینی در دسته‌بندها از مجموعه عمل تکرار قبلی، محاسبه‌می‌شود [۲۲].

عمل کشف با الگوریتم ژنتیک روی مجموعه قوانین فعال، انجام‌می‌شود. مجموعه قوانین فعال‌شده با احتمال نسبت برازش‌ها انتخاب و کپی‌می‌شوند. عمل پیوندزنی[1] یا برش روی کپی‌ها با احتمال برش در فراخوانی الگوریتم ژنتیک انجام‌می‌گیرد. با احتمال جهش در ژن فرزندان عمل جهش صورت‌می‌پذیرد. اگر مجموعه قوانین تکامل یافته کم‌تر از اندازه جمعیت شود در جمعیت کپی‌ها درج‌می‌شود و حذف رخ‌نمی‌دهد. در غیر این صورت دو دسته‌بند بر اساس مقدار برازش از مجموعه قوانین تکامل یافته حذف می‌گردد [۱٤].

نرخ وقوع الگوریتم ژنتیک با هدف تخصیص منابع به‌طور مساوی بین مجموعه‌های مختلف انجام‌می‌شود. بسته به شرایط ممکن است در برخی از مجموعه‌ها نرخ وقوع الگوریتم ژنتیک بیش‌تر از دیگران رخ‌دهد؛ اما در کل نرخ تولیدمثل در واحد زمان ثابت است. برای اجرای الگوریتم ژنتیک هر دسته‌بند در بدو تولد از شمارنده استفاده می‌شود [۲۳]. وقتی یک مجموعه شکل‌می‌گیرد، شمارنده در هر مرحله از زمان افزایش‌می‌یابد. XCS متوسط زمان نشان دسته‌بند را محاسبه می‌کند اگر تفاوت بین میانگین و شمارنده فعلی بیش‌تر از آستانه فعال‌شدن الگوریتم ژنتیک شود الگوریتم ژنتیک اجرا می‌شود [۱۰].

در بعضی مواقع دسته‌بند ورودی معینی ندارد یا مجموعه قوانین فعال‌شده تهی است. در این مورد XCS، یک دسته‌بند یا قانونی با شرط ورود از آشکارساز و عمل تصادفی ایجادمی‌کند. دسته‌بند جدید در مجموعه قوانین تکامل یافته درج و یک دسته‌بند حذف‌می‌شود. سپس سیستم مجموعه قوانین فعال‌شدهِ جدید را شکل‌می‌دهد و فرآیند به‌طور معمول ادامه‌می‌یابد. برای محاسبه برازش یک دسته‌بند در هر زمان مجموعه عمل تکرار قبلی یا قوانین پیش‌بینی به‌وسیله نمونه ورودی به‌روزرسانی‌می‌شود [۱۱].

دسته‌بند جدید XCS ایجادشده جمعیت را اسکن، سپس شرایط و عمل دسته‌بندهای موجود برای مقداردهی اولیه بررسی‌می‌شود. اگر شرایط برقرار و دسته‌بند جدید در جمعیت وجود نداشته باشد، مقدار فراوانی دسته‌بند افزایش‌می‌یابد [۱۰,۱۸]. شکل ٤ فلوچارت مراحل اجرایی سیستم XCS نشان‌می‌دهد.

۳- کارهای مرتبط

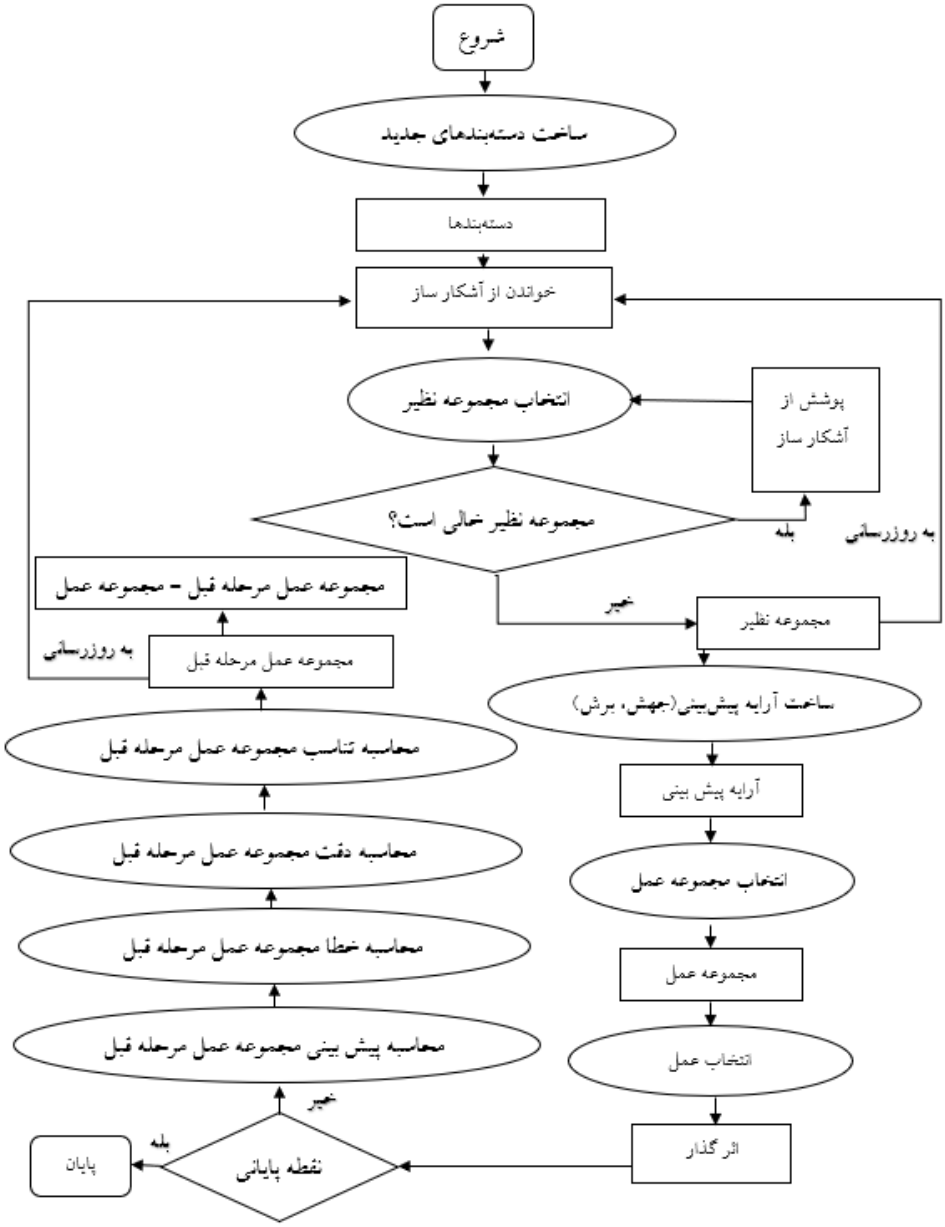
در سال‌های اخیر، روش‌ها و الگوریتم‌های مختلفی برای پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین معرفی‌شده‌است. این روش‌ها می‌توانند در کاربردهای مختلف استفاده‌شوند و بهبود عملکرد پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین را فراهم‌کنند. که برخی از آن‌ها عبارتند از:

در سال ۲۰۱۹ وافا وارده و همکارانش، پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین با استفاده از شبکه‌های عصبی و یادگیری عمیق انجام داده‌اند. در تحقیق وافا وارده و همکارانش مشخص‌گردید که شبکه‌های عصبی با دامنه ویژگی‌های بزرگ‌تر و پیچیدگی معماری کم‌تر پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین را بهتر تولیدمی‌کنند. دقت پیش‌بینی در حدود ٪۸٤ گزارش‌شده‌است [۲٤].

توماس اسکلارزیک و همکارانش برای پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین در سال ۲۰۲۰ قوانین ترتیب اسیدهای آمینه ساختار دوم پروتئین را شناسایی نمودند. در این پژوهش معیار دقت، حساسیت و انحراف معیار ٪۸۸ برای پیش‌بینی ۳ کلاس و ٪۷٦,۵ برای پیش‌بینی ۸ کلاس گزارش‌شده‌است [۲۵].

[1] Crossover

پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین با روش یادگیری عمیق توسط ژیلیانگ لئو و همکارانش در سال ۲۰۲۱ ارائه‌گردید. مدل یادگیری عمیق برای پیش‌بینی ساختارهای دوم پروتئین، ۳ حالته یا ۸ حالته پیشنهاد شده است. دقت پیش‌بینی توسط مدل یادگیری عمیق بر روی مجموعه داده‌های استاندارد عمومی CB513 قابل مقایسه با سایر مدل‌های مدرن است. مدل یادگیری عمیق در پیش‌بینی نسبت به شبکه‌های عصبی عملکرد بهتری دارد [۲۶].



شکل (٤): سیستم دسته‌بند یادگیر توسعه یافته(XCS)

٤- روش پیشنهادی

در روش پیشنهادی، یادگیری تقویتی مارکوف جایگزین الگوریتم Bucket Brigade در LCS و XCS می‌شود. در ادامه یادگیری تقویتی مارکوف بررسی خواهدمی‌شود. در نهایت معماری سیستم دسته‌بند بهبودیافته مارکوفی ارائه می‌گردد.

٤-١ یادگیری تقویتی مارکوف

یادگیری تقویتی نوعی یادگیری ماشین است که نیاز آن برای دریافت داده از یادگیری نظارت‌شده[1] کم‌تر است. یادگیری تقویتی برای ایجاد تغییر در محیط، عملی انجام‌می‌دهد و اهمیت آن عمل با استفاده از تابع پاداش[2] منعکس‌می‌شود. از دیدگاه ریاضی یادگیری تقویتی به عنوان یک مدل حالت و مشخصات فرآیندهای تصمیم‌گیری مارکوف[3] است. خاصیت مارکوفی در موقعیت‌هایی کاربرد دارد که احتمال خروجی‌های گوناگون به حالت‌های گذشته وابسته نیست و تنها نیاز به حالت کنونی است. تابع پاداش شامل پاداش‌های فوری[4] و تاخیری[5] است. پاداش فوری تاثیر کمّی عمل در محیط حالت است. پاداش تاخیری اثر عمل در حالت‌های آینده محیط است.

تابع انتقال حالت[6] تابعی است که تغییر حالت آن از محیط به عنوان نتیجه عمل‌های عامل به‌دست می‌آید. عامل به عنوان یک ماشین حالت متناهی تصادفی است که ورودی آن پاداش دریافتی از محیط و خروجی عمل ارسال شده به محیط است.

تابع سیاست[7] یا خروجی عامل برای انجام عمل برمبنای بهینه‌سازی تابع پاداش تعریف‌می‌شود. راهکار برای فرآیند تصمیم‌گیری مارکوف یک سیاست بهینه[8] است که به انتخاب عملی وابسته است که حالتی از پاداش تجمیع کلی[9] را بیشینه‌کند. سیاست بهینه تعیین می‌کند که عامل نیاز به انجام عمل در هر حالت دارد یا خیر.

یادگیری تقویتی فعال و غیرفعال هر دو از انواع یادگیری تقویتی هستند. در یادگیری تقویتی غیرفعال، سیاست عامل ثابت است و به عامل گفته‌می‌شود که چه کاری انجام دهد. در مقابل در یادگیری تقویتی فعال، عامل نیاز به تصمیم‌گیری دارد که چه کاری انجام دهد و بنابراین هیچ سیاست از قبل تعیین‌شده‌ای وجود ندارد که عامل براساس آن عمل کند [۲۷].

٤-٢ سیستم دسته‌بند یادگیر مارکوفی

در سیستم دسته‌بند یادگیر مارکوفی، محیط (مرحله یک شکل۵) منبع داده‌ای است که LCS بر اساس آن یادمی‌گیرد که می‌تواند یک مجموعه داده آموزشی محدود و آفلاین یا یک جریان متوالی آنلاین از نمونه‌های آموزشی باشد. بخشی از یادگیری LCS شامل انتخاب ویژگی است، بنابراین لازم نیست همه ویژگی‌های داده‌های آموزشی آموزنده باشند. مجموعه مقادیر ویژگی یک نمونه به‌عنوان حالت شناخته می‌شود.

یک قانون یک رابطه وابسته بین مقادیر حالت و برخی پیش‌بینی‌ها است. قوانین به شکل یک عبارت IF:THEN هستند، ویژگی مهم در LCS و یادگیری ماشین مبتنی بر قانون، این است که یک قانون فردی به‌خودی‌خود یک مدل جامع و فراگیر نیست، زیرا این قانون تنها زمانی قابل‌اجرا است که شرایط آن برآورده شود. یک قانون به‌عنوان یک مدل محلی از فضای راه‌حل درنظرگرفته‌می‌شود.

در LCS به سبک میشیگان هر قانون برازش خاص خود را دارد و همچنین تعدادی قانون و پارامترهای مرتبط با آن را دارد که می‌تواند تعداد نسخه‌های آن قانون موجود را توصیف‌کند. یک قانون همراه با پارامترهای آن اغلب به‌عنوان دسته‌بند نامیده‌می‌شود. در سیستم‌های سبک میشیگان، دسته‌بندها در یک جمعیت قرارمی‌گیرند که دارای حداکثر تعداد دسته‌بند تعریف‌شده توسط کاربر است. برخلاف اکثر الگوریتم‌های جستجوی تصادفی، LCS از جمعیت‌های خالی شروع‌می‌شود. در عوض، دسته‌بندها در ابتدا با روش پوشش به جمعیت معرفی‌می‌شوند. در هر LCS مدل آموزش‌دیده مجموعه‌ای از قوانین یا دسته‌بندهاست. در LCS به سبک میشیگان، کل جمعیت دسته‌بند آموزش‌دیده مدل پیش‌بینی را تشکیل‌می‌دهد.

[1] Supervised Learning
[2] Reward Function
[3] Markov Decision Process
[4] Immediate Reward
[5] Delayed Reward
[6] State Transition Function
[7] Policy function
[8] Optimal Policy
[9] Overall Cumulative Reward

فرآیند تطبیق یکی از مهم‌ترین مراحل LCS است. در اولین مرحله چرخه یادگیری LCS، یک نمونه آموزشی از محیط می‌گیرد. در دومین مرحله (مرحله دو شکل۵) هر قانون در جمعیت اکنون با نمونه آموزشی مقایسه تا انطباق آن قانون بررسی‌شود. در مرحله سه(مرحله سه شکل۵) هر قانون تطبیقی به مجموعه تطابق منتقل‌می‌شود. یک قانون با یک نمونه آموزشی مطابقت دارد اگر همه مقادیر ویژگی مشخص‌شده در شرط قانون معادل مقدار ویژگی مربوطه در نمونه آموزشی باشند. یک قانون تطبیق اگر عمل صحیح را پیشنهادکند، وارد مجموعه درست[1] می‌شود، در غیر این صورت به نادرست[2] می‌رود. در یادگیری تقویتی LCS، یک مجموعه عمل در اینجا تشکیل‌می‌شود. اگر هیچ دسته‌بندی با آن مطابقت نداشت، روش پوشش اعمال‌می‌شود (مرحله پنج شکل۵). مرحله پوشش، به‌طور تصادفی یک قانون ایجاد می‌کند که با نمونه آموزشی فعلی مطابقت دارد و در مورد یادگیری نظارت‌شده، آن قانون نیز با عملکرد درست ایجادمی‌شود.

در مرحله شش(مرحله شش شکل۵) پارامترهای هر قانون در تطابق به‌روز می‌شوند تا تجربه جدید به‌دست‌آمده از نمونه آموزشی فعلی را منعکس‌کنند. بسته به مقداردهی اولیه الگوریتم LCS، به‌روزرسانی می‌تواند در این مرحله انجام شود. دقت قانون با دقت مدل متفاوت است. محاسبه دقت قانون با تقسیم تعداد دفعاتی که قانون در یک مجموعه درست بوده است بر تعداد کل دفعاتی که در یک مجموعه استفاده‌شده‌است، انجام‌می‌شود.

در مرحله هفت(مرحله هفت شکل۵) به‌طور معمول یک روش تعمیم فرض[3] اعمال‌می‌شود. تعمیم فرض یک روش تعمیم است که دسته‌بندها را ادغام‌می‌کند تا بخش‌های اضافی از فضای مسئله را پوشش‌دهد. این ادغام به گونه‌ای اتفاق‌می‌افتد که دسته‌بند تعمیم‌یافته، کلی‌تر باشد، به همان اندازه دقیق و تمام فضای مساله دسته‌بند را پوشش دهد.

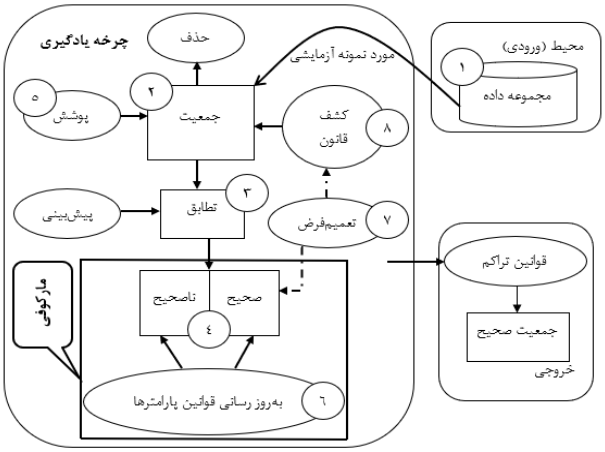
در مرحله هشت(مرحله هشت شکل۵) LCS یک الگوریتم ژنتیک نخبه گرایانه را اتخاذمی‌کند که دو دسته‌بند والد را بر اساس برازش انتخاب‌می‌کند. والدین از مجموعه درست با استفاده از چرخ رولت[4] انتخاب‌می‌شوند. عملگرهای برش و جهش اکنون برای تولید دو قانون نسل جدید اعمال‌می‌شوند. در این مرحله قوانین والد و فرزندان هر دو به جمعیت برگردانده‌می‌شوند. در یک چرخه یادگیری LCS اندازه حداکثر جمعیت حفظ‌می‌شود. برای این منظور، روش حذف دسته‌بندها را بر اساس احتمال برازش معکوس انتخاب‌می‌کند. هنگامی‌که یک دسته‌بند برای حذف انتخاب‌می‌شود، پارامتر فراوانی آن، یک واحد کاهش‌می‌یابد. وقتی تعداد یک دسته‌بند به صفر می‌رسد به‌طور کامل از جمعیت حذف‌می‌شود. LCS این مراحل را به‌طور مکرر برای تعدادی از تکرارهای آموزشی تعریف‌شده توسط کاربر یا تا زمانی که معیارهای توقف تعریف‌شده توسط کاربر برآورده شوند طی‌می‌کند. برای یادگیری آنلاین LCS یک نمونه آموزشی جدید در هر تکرار از محیط دریافت‌می‌کند. برای یادگیری آفلاین LCS از طریق یک مجموعه داده آموزشی محدود تکرارمی‌شود. هنگامی‌که به آخرین نمونه در مجموعه داده می‌رسد به اولین نمونه برمی‌گردد و دوباره در میان مجموعه داده می‌چرخد.

هنگامی‌که آموزش کامل‌شد جمعیت قوانین، ناگزیر حاوی برخی قوانین ضعیف، اضافی و بی‌تجربه خواهد بود. معمول است که از فشرده‌سازی[5] قانون به‌عنوان مرحله پس‌پردازش استفاده‌شود. این جمعیت قوانین فشرده به‌دست‌آمده برای استفاده به‌عنوان یک مدل پیش‌بینی و یا برای تفسیر دانش کشف‌شده‌است. صرف‌نظر از این که فشرده‌سازی اعمال‌شده باشد یا خیر خروجی یک الگوریتم LCS جمعیتی از دسته‌بندها است که می‌تواند برای پیش‌بینی مواردی که قبلاً دیده نشده بود، اعمال شود. روش پیش‌بینی بخشی از چرخه یادگیری LCS تحت نظارت نیست، اما نقش مهمی در چرخه یادگیری تقویتی LCS بازی می‌کند.

قوانینIF:THEN در LCS، قابل‌درک و تفسیر توسط انسان هستند. قوانینی که مدل پیش‌بینی LCS را تشکیل‌می‌دهند، با پارامترهای مختلف قانون می‌توان رتبه‌بندی‌کرد. سیستم‌های دسته‌بند یادگیر برای مسائلی مناسب هستند که نیاز به راه‌حل‌های قابل تفسیر دارند.

[1] Correct
[2] Incorrect
[3] Subsumption
[4] Roulette wheel
[5] Compression

شکل ۵ معماری روش اجرای LCS بهبودیافته مارکوفی را نمایش‌می‌دهد. جهت انجام روش ارائه‌شده از سیستم دسته‌بند یادگیر بهبودیافته با تأثیر یادگیری تقویتی در فضای تخصیص‌اعتبار استفاده‌خواهدشد. در بخش تخصیص‌اعتبار که بر پایه الگوریتم Bucket Brigade است می‌توان الگوریتم یادگیری تقویتی مارکوفی را برای کارایی بهتر جایگزین کرد.



شکل(۵): معماری LCS بهبودیافته مارکوفی

در این پژوهش الگوریتم یادگیری تقویتی مارکوف برای مساله تخصیص‌اعتبار اجرامی‌شود و با توجه به این‌که پاسخ بهبودیافته برای ارزش‌گذاری صورت‌می‌پذیرد، شرایط بهبود قابل مشاهده‌است. بنابراین با استفاده از داده‌های دنباله پروتئین‌ها و ویژگی‌های آن‌ها مدلی بر مبنای LCS ایجاد می‌گردد. در روش پیشنهادی، LCS پیاده‌سازی و به ازای تأثیر الگوریتم یادگیری تقویتی مارکوف در بخش تخصیص‌اعتبار قدرت قوانین در قسمت ارزش‌گذاری مدل تشریح‌می‌گردد.

با استفاده از داده‌های موجود در سایت PDB سیستم دسته‌بند یادگیر آموزش داده‌می‌شود. سپس کارایی سیستم دسته‌بند یادگیر پایه با سیستم دسته‌بند یادگیر بهبودیافته مارکوفی با استفاده از پارامترهای صحت و دقت مقایسه‌می‌شود.

۵- مجموعه داده‌ها

در بیوانفورماتیک از پایگاه‌های داده برای ذخیره و سازمان‌دهی استفاده‌می‌شود. پایگاه‌های داده از نظر قالب، سازوکار دسترسی و عمومی بودن یا نبودن متفاوت هستند. پایگاه داده اصلی ساختار مولکولی بانک اطلاعات پروتئین در سراسر جهان، PDB است که حاصل تلاش و همکاری مشترک پژوهش‌های بیوانفورماتیک ساختاری در ایالات‌متحده، بانک اطلاعات پروتئین در موسسه بیوانفورماتیک اروپا در انگلستان و بانک اطلاعات پروتئین ژاپن در دانشگاه اُساکا است. نمونه داده مورد استفاده در این مقاله پروتئین 4L1W و با تعداد ۵۷۴۱ نمونه است [۲۸] **که ۷۰٪ برای آموزش و ۳۰٪ جهت آزمایش استفاده‌می‌شود.**

۶- پیاده‌سازی و ارزیابی

سیستم LCS و XCS با الگوریتم یادگیری تقویتی مارکوف، بهبودیافته و در محیط پایتون ۳/۹ پیاده‌سازی‌شده‌است. جدول۱ پارامترهای تنظیمی جهت شبیه‌سازی نشان‌می‌دهد.

جدول (۱): پارامترهای تنظیمی جهت شبیه‌سازی

N	۱۰۰۰
p_spec	۰٫۵
nu	۵
upsilon	۰٫۰۴
chi	۰٫۸
β	۰٫۲
Θ_{GA}	۲۵
Θ_{del}	۲۰

N: حداکثر سایز جمعیت

p_spec: احتمال تعیین ویژگی در هنگام پوشش

nu: استفاده برای تعیین دقت هنگام محاسبه برازش

upsilon: احتمال جهش در فرزندان

chi: احتمال استفاده از برش

β: نرخ یادگیری

Θ_{GA}: آستانه فعال‌شدن الگوریتم ژنتیک است. اگر تعداد متوسط آخرین استفاده بیشتر از آستانه شود، الگوریتم ژنتیک فعال‌می‌شود.

Θ_{del}: آستانه حذف دسته‌بند است. اگر مقدار exp دسته‌بند بیشتر از این آستانه شود می‌توان آن را با توجه به برازش حذف‌کرد.

Exp برای انتقال از فضای ویژگی‌ها به فضای اعداد حقیقی مورد استفاده قرار می‌گیرد. این تابع برای افزایش سریع میزان ورودی استفاده می‌شود.

نتایج به‌دست‌آمده از ۱۰۰۰۰ تکرار برای پیاده‌سازی LCS و XCS با LCS بهبودیافته مارکوفی با ۵۰۰ جمعیت اولیه در جدول۲ نشان‌داده‌شده‌است. همچنین پارامترهای میانگین، بیشینه و کمینه قوانین از تعداد در ۱۰۰۰۰ تکرار جدول ۲ قابل مشاهده است.

هرچه تعداد عامل و قانون کمتر باشد شناسایی ساختار زودتر به هدف می‌رسد. میانگین نشان‌دهنده متوسط قانون از شروع تا پایان است. کمینه نشان‌دهنده کم‌ترین تعداد قانون و بیشینه نشان‌دهنده بیش‌ترین تعداد قانون برای رسیدن به هدف در محیط مورد نظر است. در این مقاله حداکثر تکرار ۱۰۰۰۰ درنظرگرفته‌شده‌است زیرا در LCS امکان تله یا دور وجوددارد.

نتایج به دست آمده براساس دقت قابل بررسی است. مقدار دقت یا بازیابی ارزش (PPV)[1] حاصل تقسیم مثبت صادق (TP)[2] بر جمع مثبت صادق و مثبت کاذب (FP)[3] است که به این مجموع در واقعیت مثبت گفته‌می‌شود. به عبارتی واقعیت مثبت حاصل تفریق مقدار میزان کشف اشتباه (FDR)[4] از یک است. براساس ماتریس درهم ریختگی[5] دقت برای اندازه‌گیری‌های توالی از رابطه(۱) محاسبه می‌شود.

$$PPV=TP/(TP+FP) =1-FDR \quad (۱)$$

در مقایسه چهار سیستم ارائه شده حاکی از برتری دقت XCS بهبود یافته مارکوفی در مقایسه با سه LCS، XCS و LCS بهبود یافته مارکوفی است. XCS بهبودیافته مارکوفی دسته‌بندهای جدید بهتری از ویژگی‌های پروتئین‌ها در مقایسه با الگوریتم‌های دیگر تولید می‌کند که باعث یافتن راه‌حل‌ها و نتایج بهتری می‌شود.

اعداد داخل جدول ۲ نشان‌دهنده تعداد تکرار ترکیب برای رسیدن به هدف مورد نظر در شناسایی ساختار دوم پروتئین است. بنابراین هر چه تعداد تکرار ترکیب کمتر شود عامل زودتر به هدف رسیده و نتیجه بهتری بدست‌آورده‌می‌شود.

زمان اجرای الگوریتم LCS و XCS با LCS و XCS بهبودیافته مارکوفی با سیستم CPU Core i7 و RAM 8 گیگ مورد ارزیابی قرار می‌گیرد. جدول ۳ زمان اجرای الگوریتم LCS و XCS با LCS و XCS بهبودیافته ماکوفی بر روی ساختار دوم پروتئین با اندازه‌های مختلف را نشان‌می‌دهد. بنابراین LCS و XCS بهبودیافته مارکوفی قادراست جواب‌های نزدیک به بهینه را به‌دست‌آورد. هر چه اندازه دنباله بزرگ‌تر شود زمان اجرا سیستم دقیق برای به‌دست‌آوردن راه‌حل بهینه افزایش‌می‌یابد و تفاوت در زمان اجرای سیستم‌ها قابل مشاهده‌خواهدبود.

جدول (۲): مقایسه نتایج اجرای LCS و XCS با LCS و XCS بهبودیافته مارکوفی

مدل	جمعیت اولیه	تکرار حداکثر	میانگین	بیشینه	کمینه
LCS	۵۰۰	۱۰۰۰۰	۳۸۰	۴۳۰	۲۴۵
XCS	۵۰۰	۱۰۰۰۰	۴۵۶	۳۸۰	۵۱۰
LCS بهبودیافته مارکوفی	۵۰۰	۱۰۰۰۰	**۳۵۰**	**۲۲۰**	**۲۰۵**
XCS بهبودیافته مارکوفی	۵۰۰	۱۰۰۰۰	۴۱۰	**۲۹۰**	**۳۶۵**

در جدول ۳ زمان اجرای LCS و XCS بهبودیافته مارکوفی نسبت به LCS و XCS بیش‌تر است. این روش در مرحله تخصیص‌اعتبار مسئله شرایط دقیق‌تری نسبت به مرحله قبل را اضافه‌می‌کند و امکان‌پذیر بودن تمامی حالت‌ها کاری به نسبت زمان را بررسی می‌نماید. هرچه دنباله بزرگ‌تر شود زمان اجرای سیستم با توجه به تخصیص‌اعتبار افزایش‌می‌یابد.

نتایج نشان می‌دهد که روش محاسبه دقت سیستم بهبود یافته براساس درصد، یک روش موثر و قابل اعتماد برای ارزیابی بهبود عملکرد است. با اعمال رابطه(۲) بر روی سیستم پیشنهادی، می‌توان نشان‌داد که به چه اندازه عملکرد سیستم، بهبودیافته‌است.

$$\text{درصد بهبود} = (\text{دقت سیستم بهبودیافته} \div \text{دقت پایه}) * ۱۰۰ \quad (۲)$$

دقت پیش‌بینی سیستم بهبود یافته با استفاده از روش درصدی حدود ۸۵ درصد بهبود را نشان می‌دهد. این نتیجه نشان می‌دهد که سیستم پیشنهادی قابلیت پیش‌بینی بهبودی با دقت بالایی را داراست.

جدول (۳): زمان اجرای الگوریتم‌های سیستم دسته‌بند

[1] Positive Prediction Value
[2] True Position
[3] False Position
[4] False Detect Rate
[5] Confusion Matrix

مدل	تعداد تکرار	زمان اجرا	دقت
LCS	۱۰۰۰۰	۰,۲۶۵۲	۰,۵۰۶۲
XCS	۱۰۰۰۰	۰,۲۸۵۲	۰,٦٥٢٤
LCS بهبودیافته مارکوفی	۱۰۰۰۰	۰,٤٩٠٦	۰,٦١٣٦
XCS بهبودیافته مارکوفی	۱۰۰۰۰	۰,٥٢٧٦	۰,٧٦٧٥

۷- نتیجه‌گیری

پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین یک زمینه پژوهشی مهم در حوزه زیست‌شناسی محاسباتی و علم پروتئین است. یادگیری ساختارهای سه‌بعدی پروتئین و تفهیم عملکرد زیستی آن‌ها از جمله وظایف اساسی در پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین محسوب می‌شود. در دهه‌ی گذشته به دلیل افزایش چشمگیر در تقاضا تعدادی از روش‌های نوین برای پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین ارائه‌شده‌اند. با این حال هنوز نمی‌توان به‌طور کامل نیازهای مرتبط با ساختار سه‌بعدی پروتئین، پیش‌بینی عملکرد و تأمین اطلاعات کافی درباره ساختار پروتئین را برای زیست‌شناسان و دانشمندان پزشکی برآورده نمود. در این پژوهش یک روش بهبود یافته برای LCS و XCS جهت پیشرفت و توسعه پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین ارائه‌شده‌است که از یادگیری تقویتی مارکوف به عنوان جایگزین الگوریتم Bucket Brigade در سیستم دسته‌بند یادگیر استفاده‌می‌شود. برای آموزش سیستم، از مجموعه داده‌ها PDB استفاده‌شد که شامل پروتئین ٤L1W با ٥٧٤١ نمونه بود. پس از آموزش سیستم، تعدادی دسته‌بند باارزش تولید شد که در مرحله آزمون برای پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین استفاده‌می‌شود. نتایج آزمایش‌ها نشان داد که دقت سیستم دسته‌بند یادگیر با یادگیری تقویتی مارکوف در نوع ساده و توسعه یافته آن بهبودیافته‌است. با استفاده از یادگیری تقویتی مارکوف، ارزش‌گذاری به هر قانون بهبود یافت به گونه‌ای که دقت سیستم دسته‌بند ساده به ۸۲,۵٪ و سیستم دسته‌بند توسعه‌یافته به ۸۵٪ ارتقایافت.

در ادامه این پژوهش، برای بهبود عملکرد پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین، روش‌های زیر پیشنهاد می‌شود:

- روش‌های ترکیبی روند پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین که می‌توانند مزایای مختلف مدل واحد را ادغام‌کنند.
- ادغام خصوصیات مختلف پروتئین که اطلاعات زیستی کم‌تری از پروتئین را ارائه‌می‌دهد.
- استفاده از مشخصات تراز توالی چندگانه که می‌تواند اطلاعات تکامل زیستی کم‌تری را از سایر پروتئین‌های شناخته‌شده ارائه دهد.

References

[1] E. J. Petrie, P. E. Czabotar, and J. M. Murphy, “The Structural Basis of Necroptotic Cell Death Signaling.,” trends Biochem. Sci., vol. 44, no. 1, pp. 53–63, 2019.
[2] W. G. Krebs, V. Alexandrov, C. A. Wilson, N. Echols, H. Yu, and M. Gerstein, “Normal Mode Analysis of Macromolecular Motions in a Database Framework: Developing Mode Concentration as a Useful Classifying Statistic.,” Proteins, vol. 48, no. 4, pp. 682–695, 2002.
[3] M. T. Chen and R. Weiss, “Artificial Cell-Cell Communication in Yeast Saccharomyces Cerevisiae Using Signaling Elements from Arabidopsis Thaliana,” Nat. Biotechnol., vol. 23, no. 12, pp. 1551–1555, 2005.
[4] P. P. Ferreira, T. T. Dorini, F. B. Santos, A. J. S. Machado, and L. T. F. Eleno, “Elastic Anisotropy and Thermal Properties of Extended Linear Chain Compounds MV2Ga4 From ab-initio Calculations,” materialia, vol. 4, pp. 529–539, 2018.
[5] K. N. Allen, S. Entova, L. C. Ray, and B. Imperiali, “Monotopic Membrane Proteins Join the Fold,” Trends Biochem. Sci., vol. 44, no. 1, pp. 7–20, Jan. 2019.
[6] P. Sharma et al., “The Health of Things for Classification of Protein Structure Using Improved Grey Wolf Optimization,” J. Supercomput., vol. 76, no. 2, pp. 1226–1241, 2020.
[7] X. Lan, M. Ye, R. Shao, B. Zhong, P. C. Yuen, and H. Zhou, “Learning Modality-Consistency Feature Templates: A Robust RGB-Infrared Tracking System,” IEEE Trans. Ind. Electron., vol. 66, no. 12, pp. 9887–9897, 2019.
[8] S. Basith, B. Manavalan, T. H. Shin, and G. Lee, “SDM6A: A Web-Based Integrative Machine-Learning Framework for Predicting 6mA Sites in the Rice Genome,” Mol. Ther. - Nucleic Acids, vol. 18, pp. 131–141, 2019.
[9] C. A. Toussi and J. Haddadnia, “Improving Protein Secondary Structure Prediction: the Evolutionary Optimized Classification

Algorithms," Struct. Chem., vol. 30, no. 4, pp. 1257–1266, 2019.
[10] S. W. Wilson, "Classifier Fitness Based on Accuracy," Evol. Comput., vol. 3, no. 2, pp. 149–175, 1995.
[11] J. Drugowitsch, "Design and Analysis of Learning Classifier Systems: A Probabilistic Approach," Stud. Comput. Intell., p. 268, 2008.
[12] A. Shankar and S. Louis, "Learning Classifier Systems for User Context Learning," Congress on Evolutionary Computation, vol. 3. pp. 2069–2075, 2005.
[13] S. Maiti, A. Hassan, and P. Mitra, "Boosting Phosphorylation Site Prediction with Sequence Feature-Based Machine Learning.," Proteins, vol. 88, no. 2, pp. 284–291, 2020.
[14] A. R. Pakraei and K. Mirzaie, "The Introduction of a Heuristic Mutation Operator to Strengthen the Discovery Component of XCS," J. Adv. Comput. Res., vol. 9, no. 1, pp. 51–70, 2018.
[15] S. Hua and Z. Sun, "A Novel Method of Protein Secondary Structure Prediction with High Segment Overlap Measure: Support Vector Machine Approach1 1Edited by B. Holland," J. Mol. Biol., vol. 308, no. 2, pp. 397–407, 2001.
[16] P. L. Lanzi, "Using Raw Accuracy to Estimate Classifier Fitness in XCS," Genetic and Evolutionary Computation Conference. pp. 1922–1923, 2003.
[17] M. Compiani, D. Montanari, and R. Serra, "Learning and Bucket Brigade Dynamics in Classifier Systems," Phys. d nonlinear Phenom., vol. 42, pp. 202–212, 1990.
[18] D. L. Young and C. Eccles, "Automatic Construction of Markov Decision Process Models for Multi-Agent Reinforcement Learning," 2020.
[19] R. J. Urbanowicz and J. H. Moore, "Learning Classifier Systems: A Complete Introduction, Review, and Roadmap," J. Artif. Evol. Appl., vol. 2009, pp. 1–25, 2009.
[20] M. Nakata, T. Kovacs, and K. Takadama, "A Modified XCS Classifier System for Sequence Labeling," Genetic and Evolutionary Computation Conference. pp. 565–572, 2014.
[21] H. Wang, M. La Russa, and L. S. Qi, "CRISPR/Cas9 in Genome Editing and Beyond," Annu. Rev. Biochem., vol. 85, no. 1, pp. 227–264, 2016.
[22] J. Casillas, B. Carse, and L. Bull, "Fuzzy-XCS: A Michigan Genetic Fuzzy System," IEEE Trans. Fuzzy Syst., vol. 15, no. 4, pp. 536–550, 2007.
[23] K. M. Badrabadi and M. Mirzaie, "Relationship between B-factor and average shortest path in the protein structure," Archives of Advances in Biosciences, vol. 5, no.3 2014.
[24] W. Wardah, M. G. M. Khan, A. Sharma, and M. A. Rashid, "Protein secondary structure prediction using neural networks and deep learning: A review," Comput. Biol. Chem., vol. 81, pp. 1–8, 2019.
[25] T. Smolarczyk, I. Roterman, I. Konieczna, and K. Stapor, "Protein Secondary Structure Prediction: A Review of Progress and Directions," Curr. Bioinform., vol. 15, pp. 90–107, Mar. 2020.
[26] Z. Lyu, Z. Wang, F. Luo, J. Shuai, and Y. Huang, "Protein Secondary Structure Prediction With a Reductive Deep Learning Method.," Front. Bioeng. Biotechnol., vol. 9, p. 687426, 2021.
[27] D. L. Young and C. Eccles, "Automatic Construction of Markov Decision Process Models for Multi-Agent Reinforcement Learning," 2020.
[28] B. Zhang, X.-J. Hu, and S.-X. Lin, "https://www.rcsb.org/structure/4L1W," visited on 2022, Apr. 16, 2014.

Journal of Applied And Basic Machine Intelligence Research (ABMIR)

Applied and Basic Machine Intelligence Research

Vol. 1, No. 2, Autumn & Winter 2023, pp. 92 -104

Improving the validity allocation of a learning classification algorithm with Markov reinforcement learning for protein secondary structure prediction

Mohammad Reza DehghaniMahmoudAbadi[1], Kamal Mirzaie[2*], Farzad Peyravi[3]

[1]Ph.D. Student of Computer Engineering, Maybod Branch, Islamic Azad University, Maybod, Iran

[2]Department of Computer Engineering, Maybod Branch, Islamic Azad University, Maybod, Iran

[3]Department of Computer Engineering, Marvdasht Branch, Islamic Azad University, Marvdasht, Iran

Article Information

Original Research Paper

Received:
2023 February 13

Accepted:
2023 September 27

Keywords:
Bioinformatics,Protein Secondary Structure, Learning Classifier System, Markov Reinforcement Learning

Corresponding Author*:
k.mirzaie@maybodiau.ac.ir

Abstract

In this research, Markov reinforcement learning has been used to predict the second structure of the protein to assign the validity of the classifier system and the accuracy of the classifier. Markov reinforcement learning is used in the learning cluster system instead of the Bucket Brigade algorithm. The Protein Data Bank dataset has been used for learning and training the system. 4L1W protein with 5741 samples, 70% for learning and 30% for training. After training the system, a number of valuable rules were produced, which were used in the test phase to predict the second structure of the protein. The results of the experiments showed that the learning of the improved learner classifier system and the improved eXtended learner classifier increased with Markov reinforcement learning. Considering that in Markov reinforcement learning, the scoring response is improved for each rule or classifier. Therefore, a more complete scoring method has been performed and the prediction accuracy of each rule or 85 classifiers has been improved.

: 10.22034/ABMIR.2023.19690.1021

E-ISSN: 2821-2037 /© 2023. Published by Yazd University This is an open access article under the CC BY 4.0 License (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).