

بهبود تخصیص اعتبار قوانین در سیستم دسته‌بندی‌گیر با یادگیری تقویتی مارکوف برای پیش‌بینی ساختار

دوم پروتئین

محمدرضا دهقانی محمودآبادی^۱، کمال میرزائی^{۲*}، فرزاد پیروی^۳

^۱ گروه 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

چکیده

مقاله پژوهشی

تاریخ دریافت:

۱۴۰۱/۱۱/۲۴

تاریخ پذیرش:

۱۴۰۲/۷/۵

کلیدواژه‌ها:

بیوانفورماتیک، ساختار دوم پروتئین،
سیستم دسته‌بندی‌گیر، یادگیری تقویتی
مارکوف

نویسنده مسئول:

Kmirzaie.ir@ maybodiau.ac.ir

این پژوهش برای افزایش دقت تخصیص اعتبار قوانین در سیستم دسته‌بندی‌گیر با استفاده از یادگیری تقویتی مارکوف جهت پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین است. یادگیری تقویتی مارکوف در سیستم دسته‌بندی‌گیر، جایگزین الگوریتم Bucket Brigade شده است. برای آموزش سیستم از مجموعه داده‌ها Protein Data Bank استفاده می‌شود که شامل پروتئین L1W4 با تعداد ۵۷۴۱ نمونه است که ۷۰ درصد برای آموزش و ۳۰ درصد جهت آزمایش استفاده شده است. پس از آموزش سیستم، تعدادی دسته‌بندی (قوانین) با ارزش، تولید می‌شود که در مرحله آزمایش از این قوانین برای پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین استفاده خواهد شد. نتایج آزمایش‌ها نشان می‌دهد دقت سیستم دسته‌بندی‌گیر با یادگیری تقویتی مارکوف در نوع ساده و توسعه یافته آن، افزایش یافته است. با استفاده از یادگیری تقویتی مارکوف، ارزش‌گذاری به هر قانون بهبود داده می‌شود، به گونه‌ای که دقت سیستم دسته‌بندی ساده ۸۲،۵٪ و سیستم دسته‌بندی توسعه یافته ۸۵٪ بهبود یافته است.



: 10.22034/ABMIR.2023.19690.1021



۱- مقدمه

شکل ۱، قسمت الف ساختار اول پروتئین، قسمت ب ساختار دوم پروتئین، قسمت ج ساختار سوم پروتئین و قسمت د ساختار چهارم پروتئین را نمایش می‌دهد [۶].



شکل (۱): انواع ساختارهای پروتئین

پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین از روی اسیدهای آمینه یکی از مسائل مهم بیوانفورماتیک ساختاری 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 افزایش یافته است [۸، ۹]. در این پژوهش از سیستم دسته‌بند یادگیر ساده^۱ (LCS) و دسته‌بند توسعه یافته^۲ (XCS) برای پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین استفاده می‌شود.

بهبود ارزش‌گذاری در LCS و XCS با استفاده از جایگزین شدن یادگیری تقویتی^۳ مارکوف به جای الگوریتم Brigade Bucket در بخش تخصیص اعتبار^۴ انجام شده است. این الگوریتم به منظور بهبود کارایی و عملکرد سیستم‌های توزیع شده و تخصیص منابع در آنها استفاده می‌شود. در الگوریتم Bucket 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 توضیح داده خواهد شد و سپس در بخش سوم کارهای مرتبط با پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین، به صورت مختصر شرح داده می‌شود. روش پیشنهادی در بخش چهارم ارائه می‌گردد. در بخش پنجم مجموعه داده‌ها و در بخش ششم پیاده‌سازی و ارزیابی آن‌ها با توجه به پارامترهای بیان‌شده به همراه زمان اجرای

بیوانفورماتیک ساختاری به عنوان بخشی از زیست‌شناسی محاسباتی، به پیش‌بینی ساختار سه بعدی مولکول‌های زیستی می‌پردازد. هدف اصلی بیوانفورماتیک ساختاری 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 تقسیم می‌شوند: ساختار اول یا توالی، ساختار دوم ترکیب محلی زنجیره‌های پلی‌پپتیدی، ساختار سوم چین‌خوردگی سه‌بعدی پروتئین و ساختار چهارم که ارتباط چند پلی‌پپتیدی را نشان می‌دهد [۲].

بیوانفورماتیک ساختاری کنش‌های بین ساختارها را با توجه به مختصات فضایی آن‌ها بررسی می‌کند. ساختار اول، اجازه تشکیل ترکیب‌های محلی زنجیره پلی‌پپتیدی را می‌دهد [۳]. اگر چه ساختار اتمی مولکول‌ها را می‌توان با روش‌های غیرمحاسباتی به دست آورد، اما هزینه‌بر بودن این روش‌ها باعث می‌شود تا رویکردهای محاسباتی برای تعیین ساختار سه‌بعدی مولکول‌ها استفاده شود [۴]. 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 تکرار می‌شود. این پیوندها در تعیین ساختار دوم پروتئین نقش دارند [۵].

ساختار سوم پروتئین به شکل فضایی یک پروتئین و ترتیب ترکیبی اسیدهای آمینه آن اشاره دارد. 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 ترتیب ترکیبی اسیدهای آمینه پروتئین و تعاملات مختلف بین اجزای ساختاری پروتئین اشاره دارد. این ساختار تعیین‌کننده خصوصیات و عملکرد نهایی پروتئین است.

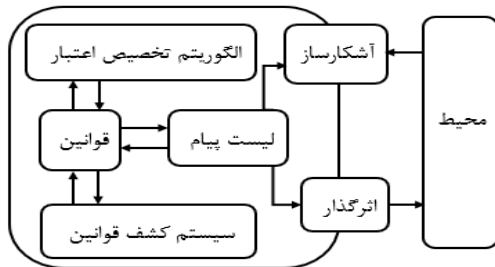
^۳ RL Agent

^۴ Credit Assignment

^۱ Learning Classifier System

^۲ eXtended Learning Classifier

دسته‌بندی پیدا نشد روش پوشش برای تولید دسته‌بند جدید استفاده می‌شود [۱۵].



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

در الگوریتم دوم که تولید دسته‌بند است برای تولید دسته‌بندهای جدید بر اساس برازش^۵ دسته‌بندهای موجود از الگوریتم ژنتیک استفاده می‌شود [۱۶]. تخصیص اعتبار جهت تعدیل پویای قدرت هر قانون (دسته‌بند) و اصلاح مقدار قدرت دسته‌بندها برای حل مسئله است. الگوریتم تخصیص اعتبار مقدار قدرت دسته‌بندها را اصلاح می‌نماید. سپس مراحل اجرای الگوریتم LCS مطابق فلوچارت شکل ۳ است [۱۷، ۱۸]. این مراحل عبارتند از:

- دسته‌بندهایی که بر پیام ورودی فعلی منطبق می‌شوند متناسب آن‌ها قدرت پیشنهاد می‌گردد.
- وقتی پاداشی از محیط دریافت می‌شود یا یک دوره گذرانده می‌شود دسته‌بندهایی که در دوره دریافت پاداش فعال شده 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 پرداخت می‌کنند.
- در سیستم XCS، برازش افراد بر اساس دقت پیش‌بینی هر قانون است و تخصیص اعتبار به قوانین، بر پایه دقت یا سودمندی دسته‌بندها قرار دارد [۱۷]. تفاوت LCS و XCS در چگونگی تخصیص اعتبار به قوانین است [۱۹]. روال اجرایی الگوریتم XCS به صورت ذیل است [۲۰]:
- ساخت مجموعه قوانین فعال شده از مجموعه قوانین تکامل یافته با هر نمونه ورودی صورت می‌پذیرد، اگر مجموعه قوانین فعال شده خالی یا برخی از کلاس‌ها در مجموعه قوانین فعال شده

الگوریتم توضیح داده خواهد شد. در بخش هفتم نتیجه‌گیری بیان می‌شود.

۲- سیستم‌های دسته‌بند یادگیر

LCS در سال ۱۹۷۰ توسط جان هالند ارائه شد. در این سیستم فضای مسئله شامل مجموعه نمونه‌هایی است که هرکدام به یک کلاس خاص تعلق دارند [۱۰]. شکل ۲ ساختار LCS را نشان می‌دهد که از اجزای آشکارساز^۱، اثرگذار^۲ و محیط تشکیل شده است. آشکارساز وظیفه استخراج و تشخیص ویژگی‌های مهم و قابل توجه از داده‌های ورودی را دارد، در حالی که اثرگذارها وظیفه ترکیب ویژگی‌ها و ایجاد بازنمایی مناسبی از داده‌ها برای مدل دسته‌بندی را بر عهده دارد. ورودی از قسمت آشکارساز وارد می‌شود. این ورودی به صورت قالبی از پیام‌های رمزگذاری شده تحت عنوان لیست پیام است. در این لیست قوانین "اگر - آن‌گاه" (دسته‌بندها) به کار گرفته می‌شود. نتایج عمل دسته‌بند دوباره رمزگذاری شده و در لیست پیام‌ها نوشته می‌شود. پیام‌های جدید قوانینی هستند که سیگنال‌ها برای انجام عمل‌هایی، توسط اثرگذار استفاده کرده‌اند [۱۱].

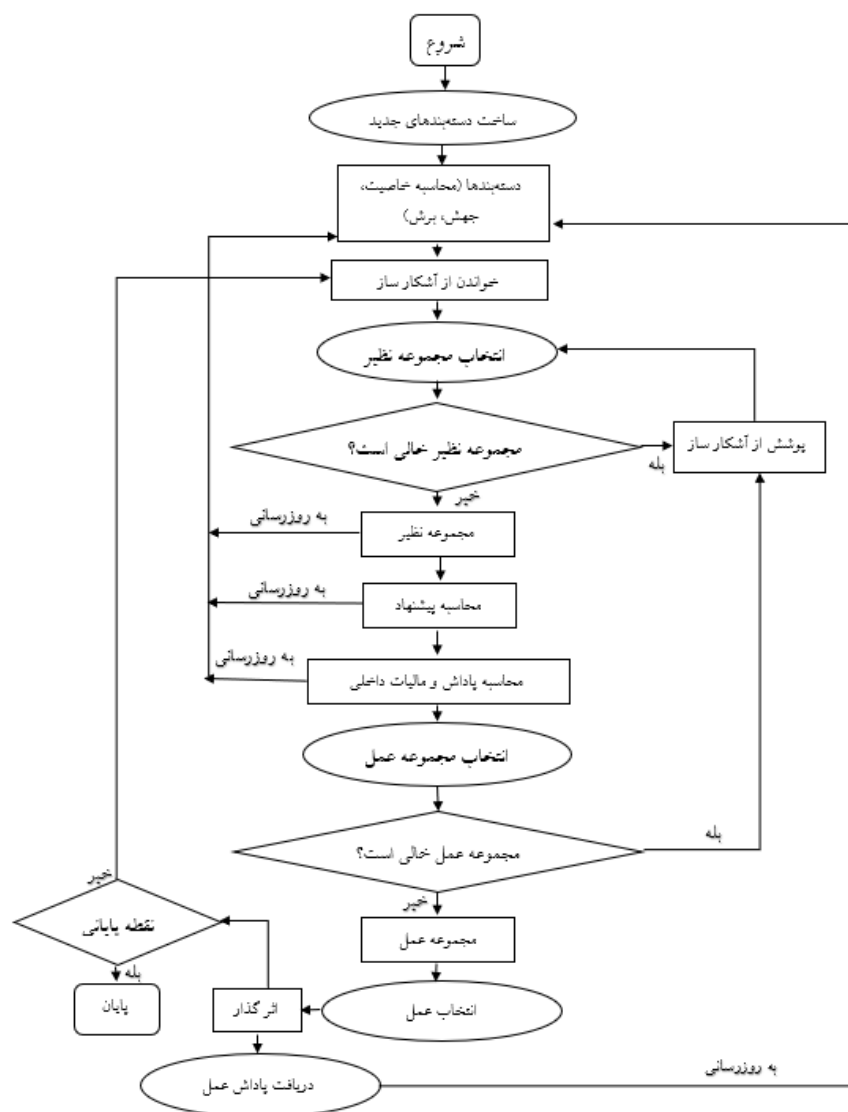
ارزش‌گذاری یا پاداش عمل‌های اجرا شده توسط بخش تخصیص اعتبار در یادگیری تقویتی سیستم LCS انجام می‌شود. در ادامه الگوریتم ژنتیک به عنوان مسئول کشف قانون^۳، قانون‌های جدید را می‌یابد و به جمعیت دسته‌بندها اضافه می‌کند [۱۲]. یکی از مزایای LCS کشف قوانین جدید و تخصیص اعتبار است [۱۳]. سیستم دسته‌بند یادگیر (شکل ۲) از قسمت‌های مختلف موتور دسته‌بند، کشف قانون با الگوریتم ژنتیک و الگوریتم تخصیص اعتبار تشکیل شده است [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^۴ است. وقتی عامل، پیغام ورودی از محیط دریافت می‌کند آن را با لیست دسته‌بندها تطبیق می‌دهد. اگر

⁴ Covering
⁵ Fitness

¹ Detector
² Effector
³ Rule Discovery

پیش‌بینی نشده‌است، عملیات پوشش فعال و یک دسته‌بند جدید ساخته می‌شود.



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

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.

از مجموعه قوانین فعال‌شده یک پیش‌بینی برای هر کلاس بر اساس مقدار پیش‌بینی و برازش اختصاصی دسته‌بند ساخته می‌شود. سپس محاسبات پیش‌بینی انتخاب و قوانین پیش‌بینی برای یک کلاس ایجاد می‌گردد و مجموعه قوانین فعال‌شده به وسیله نمونه ورودی ساخته می‌شود، بنابراین سیستم نتیجه را بر اساس پیش‌بینی باز می‌گرداند.

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 ایجاد می‌کند. دسته‌بند جدید در مجموعه قوانین تکامل یافته درج و یک دسته‌بند حذف می‌شود. سپس سیستم مجموعه قوانین فعال‌شده جدید را شکل می‌دهد و فرآیند به‌طور معمول ادامه می‌یابد. برای محاسبه برازش یک دسته‌بند در هر زمان مجموعه عمل تکرار قبلی یا قوانین پیش‌بینی به‌وسیله نمونه ورودی به‌روزرسانی می‌شود [۱۱].

دسته‌بند جدید XCS ایجادشده جمعیت را اسکن، سپس شرایط و عمل دسته‌بندهای موجود برای مقداردهی اولیه بررسی می‌شود. اگر شرایط برقرار و دسته‌بند جدید در جمعیت وجود نداشته باشد، مقدار فراوانی دسته‌بند افزایش می‌یابد [۱۸، ۱۰]. شکل ۴ فلوچارت مراحل اجرایی سیستم XCS نشان می‌دهد.

۳- کارهای مرتبط

در سال‌های اخیر، روش‌ها و الگوریتم‌های مختلفی برای پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین معرفی شده‌است. این روش‌ها می‌توانند در کاربردهای مختلف استفاده شوند و بهبود عملکرد پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین را فراهم کنند. که برخی از آن‌ها عبارتند از:

در سال ۲۰۱۹ وافا و همکارانش، پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین با استفاده از شبکه‌های عصبی و یادگیری عمیق انجام داده‌اند. در تحقیق وافا و همکارانش مشخص گردید که شبکه‌های عصبی با دامنه ویژگی‌های بزرگ‌تر و پیچیدگی معماری کم‌تر پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین را بهتر تولید می‌کنند. دقت پیش‌بینی در حدود ۸۴٪ گزارش شده‌است [۲۴].

توماس اسکالازیکی 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 ۷۶،۵٪ برای پیش‌بینی ۸ کلاس گزارش شده‌است [۲۵].

الگوریتم ژنتیک به‌صورت دوره‌ای بر اساس آستانه فعال می‌شود و بر روی مجموعه قوانین فعال‌شده اجرا خواهد شد. الگوریتم ژنتیک والدین را از مجموعه قوانین فعال‌شده انتخاب می‌کند. اگر دو فرزند در مجموعه قوانین تکامل یافته، با والدین جایگزین شود و تعداد دسته‌بندها در مجموعه قوانین تکامل یافته به اندازه جمعیت برسد، برخی از دسته‌بندها باید حذف شود [۲۱]. بر اساس مقدار برازش، احتمال حذف هر دسته‌بند محاسبه می‌شود. برازش کم‌تر از میانگین برازش مجموعه قوانین تکامل یافته، احتمال حذف دسته بندها را افزایش می‌دهد [۱۴].

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 تنظیم می‌شود [۱۶]. نرخ یادگیری برای تعدیل پیش‌بینی در دسته‌بندها از مجموعه عمل تکرار قبلی، محاسبه می‌شود [۲۲].

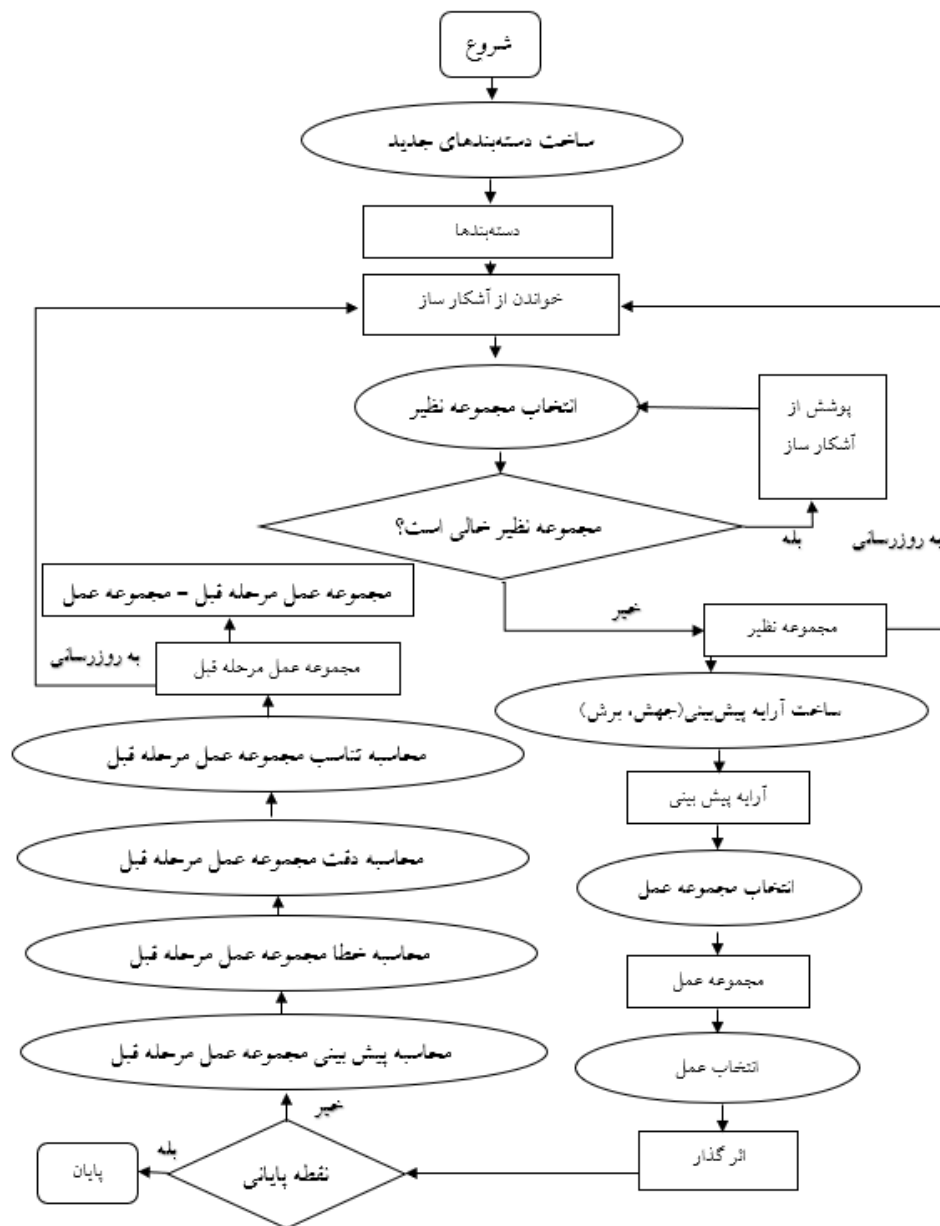
عمل کشف با الگوریتم ژنتیک روی مجموعه قوانین فعال، انجام می‌شود. مجموعه قوانین فعال‌شده با احتمال نسبت برازش‌ها انتخاب و کپی می‌شوند. عمل پیوندزنی^۱ یا برش روی کپی‌ها با احتمال برش در فراخوانی الگوریتم ژنتیک انجام می‌گیرد. با احتمال جهش در ژن فرزندان عمل جهش صورت می‌پذیرد. اگر مجموعه قوانین تکامل یافته کم‌تر از اندازه جمعیت شود در جمعیت کپی‌ها درج می‌شود و حذف رخ نمی‌دهد. در غیر این صورت دو دسته‌بند بر اساس مقدار برازش از مجموعه قوانین تکامل یافته حذف می‌گردد [۱۴].

نرخ وقوع الگوریتم ژنتیک با هدف تخصیص منابع به‌طور مساوی بین مجموعه‌های مختلف انجام می‌شود. بسته به شرایط ممکن است در برخی از مجموعه‌ها نرخ وقوع الگوریتم ژنتیک بیش‌تر از دیگران رخ دهد؛ 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 شکل می‌گیرد، شمارنده در هر مرحله از زمان افزایش می‌یابد. XCS متوسط زمان نشان دسته‌بند را محاسبه می‌کند اگر تفاوت بین میانگین و شمارنده فعلی

¹ Crossover

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].

پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین با روش یادگیری عمیق توسط ژیلیانگ لئو و همکارانش در سال ۲۰۲۱ ارائه گردید. مدل یادگیری عمیق برای پیش‌بینی ساختارهای دوم پروتئین، ۳ حالت یا ۸ حالت پیشنهاد شده است. دقت پیش‌بینی توسط مدل یادگیری عمیق بر



شکل (۴): سیستم دسته‌بند یادگیر توسعه یافته (XCS)

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].

۴-۲ سیستم دسته‌بند یادگیر مارکوفی

در سیستم دسته‌بند یادگیر مارکوفی، محیط (مرحله یک شکل ۵) 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 قابل اجرا است که شرایط آن برآورده شود. یک قانون به‌عنوان یک مدل محلی از فضای راه‌حل در نظر گرفته می‌شود.

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 توصیف کند. یک قانون همراه با پارامترهای آن اغلب به‌عنوان دسته‌بند نامیده می‌شود. در سیستم‌های سبک میشیگان، دسته‌بندها در یک جمعیت قرار می‌گیرند که دارای حداکثر تعداد دسته‌بند تعریف‌شده توسط کاربر است. برخلاف اکثر الگوریتم‌های جستجوی تصادفی، LCS از جمعیت‌های خالی شروع می‌شود. در عوض، دسته‌بندها در ابتدا با روش پوشش به جمعیت معرفی می‌شوند. در هر LCS مدل آموزش‌دیده مجموعه‌ای از قوانین یا دسته‌بندهاست. در LCS به سبک میشیگان، کل جمعیت دسته‌بند آموزش‌دیده مدل پیش‌بینی را تشکیل می‌دهد.

۴-۱ روش پیشنهادی

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

۴-۱ یادگیری تقویتی مارکوف

یادگیری تقویتی نوعی یادگیری ماشین است که نیاز آن برای دریافت داده از یادگیری نظارت‌شده^۱ کم‌تر است. یادگیری تقویتی برای ایجاد تغییر در محیط، عملی انجام می‌دهد و اهمیت آن عمل با استفاده از تابع پاداش^۲ منعکس می‌شود. از دیدگاه ریاضی یادگیری تقویتی به عنوان یک مدل حالت و مشخصات فرآیندهای تصمیم‌گیری مارکوف^۳ 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^۴ و تاخیری^۵ است. پاداش فوری تأثیر کمی عمل در محیط حالت است. پاداش تاخیری اثر عمل در حالت‌های آینده محیط است.

تابع انتقال حالت^۶ 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^۷ یا خروجی عامل برای انجام عمل بر مبنای بهینه‌سازی تابع پاداش تعریف می‌شود. راهکار برای فرآیند تصمیم‌گیری مارکوف یک سیاست بهینه^۸ است که به انتخاب عملی وابسته است که حالتی از پاداش تجمع کلی^۹ را بیشینه کند. 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 گفته می‌شود که چه کاری انجام دهد. در مقابل در یادگیری

⁶ State Transition Function

⁷ Policy function

⁸ Optimal Policy

⁹ Overall Cumulative Reward

¹ Supervised Learning

² Reward Function

³ Markov Decision Process

⁴ Immediate Reward

⁵ Delayed Reward

انتخاب می‌شوند. عملگرهای برش و جهش اکنون برای تولید دو قانون نسل جدید اعمال می‌شوند. در این مرحله قوانین والد و فرزندان هر دو به جمعیت برگردانده می‌شوند. در یک چرخه یادگیری LCS اندازه حداکثر جمعیت حفظ می‌شود. برای این منظور، روش حذف دسته‌بندها را بر اساس احتمال برازش معکوس انتخاب می‌کند. هنگامی که یک دسته‌بند برای حذف انتخاب می‌شود، پارامتر فراوانی آن، یک واحد کاهش می‌یابد. وقتی تعداد یک دسته‌بند به صفر می‌رسد به‌طور کامل از جمعیت حذف می‌شود. LCS این مراحل را به‌طور مکرر برای تعدادی از تکرارهای آموزشی تعریف شده توسط کاربر یا تا زمانی که معیارهای توقف آنالین LCS یک نمونه آموزشی جدید در هر تکرار از محیط دریافت می‌کند. برای یادگیری آفلاین LCS از طریق یک مجموعه داده آموزشی محدود تکرار می‌شود. هنگامی که به آخرین نمونه در مجموعه داده می‌رسد به اولین نمونه برمی‌گردد و دوباره در میان مجموعه داده می‌چرخد.

هنگامی که آموزش کامل شد جمعیت قوانین، ناگزیر حاوی برخی قوانین ضعیف، اضافی و بی‌تجربه خواهد بود. معمول است که از فشرده‌سازی^۵ قانون به‌عنوان مرحله پس‌پردازش استفاده شود. این جمعیت قوانین فشرده به‌دست‌آمده برای استفاده به‌عنوان یک مدل پیش‌بینی و یا برای تفسیر دانش کشف‌شده است. صرف‌نظر از این که فشرده‌سازی اعمال شده 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.

قوانین IF:THEN در LCS، قابل‌درک و تفسیر توسط انسان هستند. قوانینی که مدل پیش‌بینی LCS را تشکیل می‌دهند، با پارامترهای مختلف قانون می‌توان رتبه‌بندی کرد. سیستم‌های دسته‌بند یادگیر برای مسائلی مناسب هستند که نیاز به راه‌حل‌های قابل تفسیر دارند.

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 شکل ۵) هر قانون در جمعیت اکنون با نمونه آموزشی مقایسه تا انطباق آن قانون بررسی شود. در مرحله سه (مرحله سه شکل ۵) هر قانون تطبیقی به مجموعه تطابق منتقل می‌شود. یک قانون با یک نمونه آموزشی مطابقت دارد اگر همه مقادیر ویژگی مشخص شده در شرط قانون معادل مقدار ویژگی مربوطه در نمونه آموزشی باشند. یک قانون تطبیق اگر عمل صحیح را پیشنهاد کند، وارد مجموعه درست^۱ می‌شود، در غیر این صورت به نادرست^۲ می‌رود. در یادگیری تقویتی LCS، یک مجموعه عمل در اینجا تشکیل می‌شود. اگر هیچ دسته‌بندی با آن مطابقت نداشت، روش پوشش اعمال می‌شود (مرحله پنج شکل ۵). 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 ایجاد می‌شود.

در مرحله شش (مرحله شش شکل ۵) پارامترهای هر قانون در تطابق به‌روز می‌شوند تا تجربه جدید به‌دست‌آمده از نمونه آموزشی فعلی را منعکس کنند. 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 استفاده شده است، انجام می‌شود.

در مرحله هفت (مرحله هفت شکل ۵) به‌طور معمول یک روش تعمیم فرض^۳ اعمال می‌شود. تعمیم فرض یک روش تعمیم است که دسته‌بندها را ادغام می‌کند تا بخش‌های اضافی از فضای مسئله را پوشش دهد. این ادغام به گونه‌ای اتفاق می‌افتد که دسته‌بند تعمیم‌یافته، کلی‌تر باشد، به همان اندازه دقیق و تمام فضای مساله دسته‌بند را پوشش دهد.

در مرحله هشت (مرحله هشت شکل ۵) LCS یک الگوریتم ژنتیک نخبه‌گرایانه را اتخاذ می‌کند که دو دسته‌بند والد را بر اساس برازش انتخاب می‌کند. والدین از مجموعه درست با استفاده از چرخ رولت^۴

⁴ Roulette wheel

⁵ Compression

¹ Correct

² Incorrect

³ Subsumption

مولکولی بانک اطلاعات پروتئین در سراسر جهان، PDB است که حاصل تلاش و همکاری مشترک پژوهش‌های بیوانفورماتیک ساختاری در ایالات متحده، 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 استفاده می‌شود.

۶- پیاده‌سازی و ارزیابی

سیستم LCS و XCS با الگوریتم یادگیری تقویتی مارکوف، بهبودیافته و در محیط پایتون ۳/۹ پیاده‌سازی شده‌است. جدول ۱ پارامترهای تنظیمی جهت شبیه‌سازی نشان می‌دهد.

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

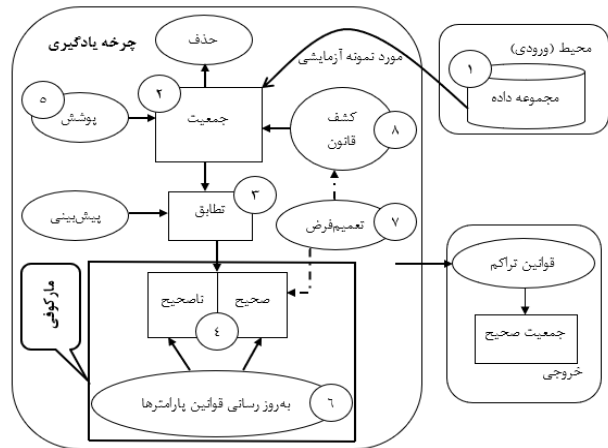
β : نرخ یادگیری

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

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

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

شکل ۵ معماری روش اجرای LCS بهبودیافته مارکوفی را نمایش می‌دهد. جهت انجام روش ارائه‌شده از سیستم دسته‌بند یادگیر بهبودیافته با تأثیر یادگیری تقویتی در فضای تخصیص اعتبار استفاده خواهد شد. در بخش تخصیص اعتبار 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 تخصیص اعتبار اجرایی شود و با توجه به این که پاسخ بهبودیافته برای ارزش‌گذاری صورت می‌پذیرد، شرایط بهبود قابل مشاهده است. 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 تخصیص اعتبار قدرت قوانین در قسمت ارزش‌گذاری مدل تشریح می‌گردد.

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

۵- مجموعه داده‌ها

در بیوانفورماتیک از پایگاه‌های داده برای ذخیره و سازمان‌دهی استفاده می‌شود. پایگاه‌های داده از نظر قالب، سازوکار دسترسی و عمومی بودن یا نبودن متفاوت هستند. پایگاه داده اصلی ساختار

اندازه‌های مختلف را نشان می‌دهد. بنابراین LCS و XCS بهبودیافته مارکوفی قادر است جواب‌های نزدیک به بهینه را به دست آورد. هر چه اندازه دنباله بزرگ‌تر شود زمان اجرا سیستم دقیق برای به دست آوردن راه حل بهینه افزایش می‌یابد و تفاوت در زمان اجرای سیستم‌ها قابل مشاهده خواهد بود.

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

بهبودیافته مارکوفی

۳	۴	۵	۶	۷	۸
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 تخصیص اعتبار مسئله شرایط دقیق‌تری نسبت به مرحله قبل را اضافه می‌کند و امکان‌پذیر بودن تمامی حالت‌ها کاری به نسبت زمان را بررسی می‌نماید. هرچه دنباله بزرگ‌تر شود زمان اجرای سیستم با توجه به تخصیص اعتبار افزایش می‌یابد.

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 نشان داد که به چه اندازه عملکرد سیستم، بهبود یافته است.

دقت پایه / (دقت سیستم بهبود یافته * ۱۰۰) (۲)

= درصد بهبود

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

نتایج به دست آمده از ۱۰۰۰۰ تکرار برای پیاده‌سازی LCS و XCS با LCS بهبودیافته مارکوفی با ۵۰۰ جمعیت اولیه در جدول ۲ نشان داده شده است. 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 در نظر گرفته شده است زیرا در LCS امکان تله یا دور وجود دارد.

نتایج به دست آمده براساس دقت قابل بررسی است. مقدار دقت یا بازیابی ارزش (PPV)^۱ حاصل تقسیم مثبت صادق (TP)^۲ بر جمع مثبت صادق و مثبت کاذب (FP)^۳ است که به این مجموع در واقعیت مثبت گفته می‌شود. به عبارتی واقعیت مثبت حاصل تفریق مقدار میزان کشف اشتباه (FDR)^۴ از یک است. براساس ماتریس درهم ریختگی^۵ دقت برای اندازه‌گیری‌های توالی از رابطه (۱) محاسبه می‌شود.

$$PPV = TP / (TP + FP) = 1 - FDR \quad (1)$$

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 بدست آورده می‌شود.

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 مارکوفی بر روی ساختار دوم پروتئین با

⁴ False Detect Rate

⁵ Confusion Matrix

¹ Positive Prediction Value

² True Position

³ False Position

- ادغام خصوصیات مختلف پروتئین که اطلاعات زیستی کم‌تری از پروتئین را ارائه می‌دهد.
- استفاده از مشخصات تراز توالی چندگانه که می‌تواند اطلاعات تکامل زیستی کم‌تری را از سایر پروتئین‌های شناخته شده 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

۳	۳	۳	۳
۰,۵۰۶۲	۰,۲۶۵۲	۱۰۰۰۰	LCS
۰,۶۵۲۴	۰,۲۸۵۲	۱۰۰۰۰	XCS
۰,۶۱۳۶	۰,۴۹۰۶	۱۰۰۰۰	LCS بهبود یافته مارکوفی
۰,۷۶۷۵	۰,۵۲۷۶	۱۰۰۰۰	XCS بهبود یافته مارکوفی

۷- نتیجه گیری

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 ارائه شده‌اند. 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 ارائه شده است که از یادگیری تقویتی مارکوف به عنوان جایگزین الگوریتم Bucket Brigade در سیستم دسته‌بند یادگیر استفاده می‌شود. برای آموزش سیستم، از مجموعه داده‌ها PDB استفاده شد که شامل پروتئین ۴L1W با ۵۷۴۱ نمونه بود. پس از آموزش سیستم، تعدادی دسته‌بند با ارزش تولید شد که در مرحله آزمون برای پیش‌بینی ساختار دوم پروتئین استفاده می‌شود. نتایج آزمایش‌ها نشان داد که دقت سیستم دسته‌بند یادگیر با یادگیری تقویتی مارکوف در نوع ساده و توسعه یافته آن بهبود یافته است. 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 توسعه یافته به ۸۵٪ ارتقا یافت.

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 ادغام کنند.



- 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.
- 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 Approach," Edited 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. Badrabad and M. Mirzaie, "Relationship between B-factor and average shortest path in the

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

Mohammad Reza DehghaniMahmoudAbadi¹, Kamal Mirzaie^{2*}, Farzad Peyravi³

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

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

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

Article Information

Abstract

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

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/>).

