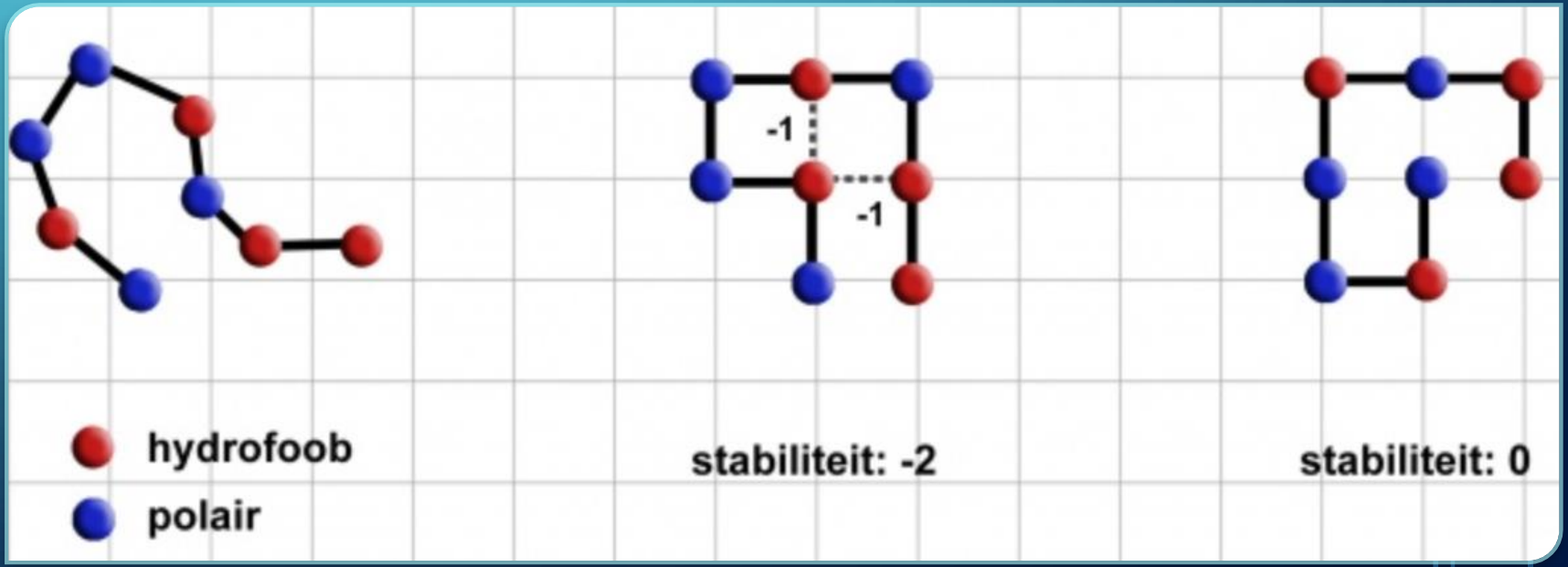
PROTEIN POWDER

EFFICIËNT VOUWEN VAN EEN AMINOZUUR STRING

DE CASE

OM ALGORITMES TE SCHRIJVEN OM ZO GOED MOGELIJK TE VOUWEN VOOR STABILITEIT. (NEGATIEF IS STABIELE BINDING)

- 9 Eiwit ketens
- Eiwitten bestaan uit hydrofobe en polaire aminozuren, later kwam daar een cysteïne aminozuur bij.
- Zoektocht naar hoogste stabiliteit
- Stabiliteit score van -1 bij H & H
- Stabiliteit score van -1 bij C & H
- Stabiliteit score van -5 bij C & C

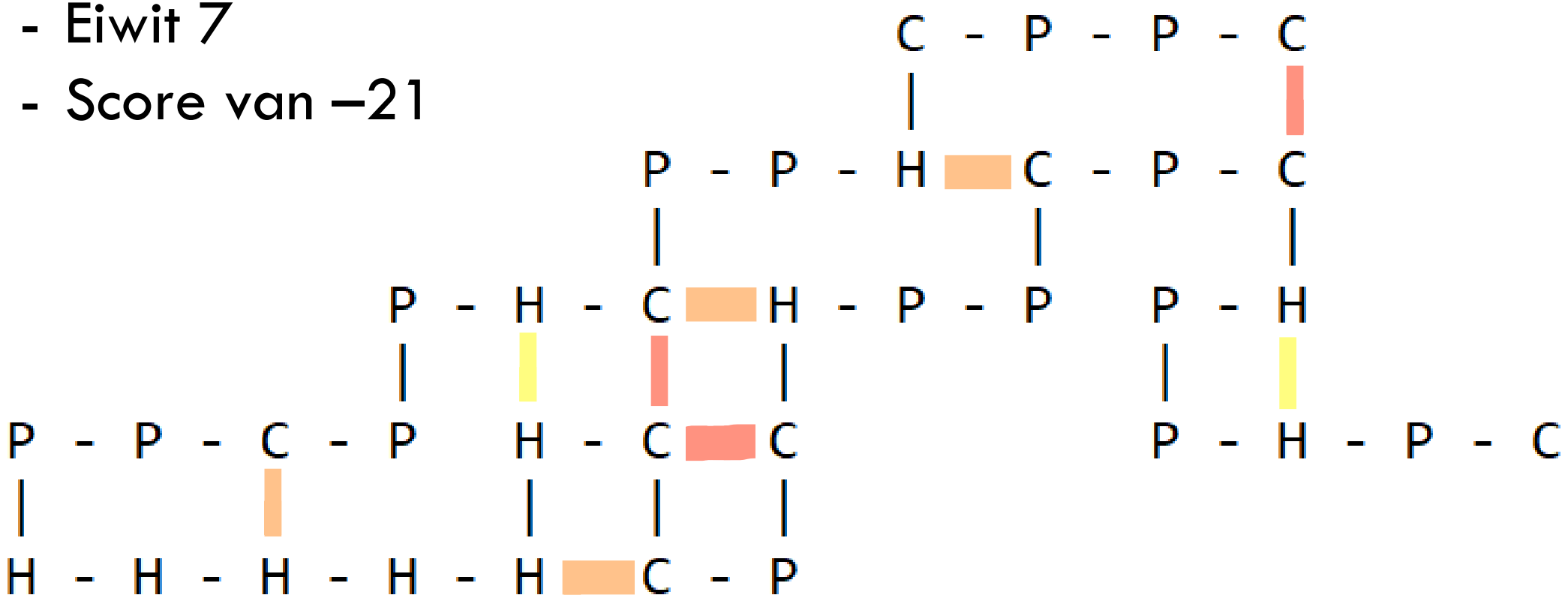


	Protein chain Hydrofoob en Polair
2	H-H-P-H-H-H-P-H-P-H-H-H-P-H
7	C-P-P-C-H-P-P-C-H-P-P-C-P-P-H-H-H-H-H-H-C-C-P-C-H-P-P-C-P-C-H-P-P-H-P-C

- Eiwit 2
- Score van –6

	Eiwit keten Hydrofoob, Polair en cysteine
2	H-H-P-H-H-H-P-H-P-H-H-H-P-H
7	C-P-P-C-H-P-P-C-H-P-P-C-P-P-H-H-H-H-H-H-C-C-P-C-H-P-P-C-P-C-H-P-P-H-P-C

- Eiwit 7
- Score van –21



VERSCHILLENDE ALGORITMES OM TE GEBRUIKEN

- Random
- Breadth First
- Random Halfs
- Breadth First Piecewise

RANDOM

Eiwit 2:

H-H-P-H-H-H-P-H-P-H-H-H-P-H

Voordelen

- Snel en eenvoudig

Nadelen:

- Zegt niet veel over het werkelijke optimum van de oplossing

10.000 iteraties
-6 Score
7.19 sec runtime

```
        P - H - P
        |       |
        H   H - H
        |   |
P - H - H   H
|           |
H   H - H - P
```

BREADTH FIRST

Voordelen

- Niet doodlopend
- Vind het complete optimum eenmaal volledig uitgewerkt.

Nadelen:

- Kost veel rekenkracht en dus tijd.

→ Vooral interessant voor de kleinere aminozuur ketens

```
P - H   P - H
|   |   |
H   H - H   H - H
|           |
P - H - H - H - P
```

RANDOM HALF

- Eiwit in stukken 2 stukken knippen
- Vouwt eerste stuk in beste mogelijkheid.
- Vouwt dan tweede deel aan het eerste deel voor een x aantal keer.

```
H - H
    |
    P - H

H - H
    |
    P - H     P - H
        |     |
        H - H
```

BREADTH FIRST PIECEWISE

- Knip het Eiwit in grote door de user aangegeven stukjes, en bouwt vanaf daar op een breadth first manier het beste eiwit.
- Sommige Eiwitten lopen vast bij bepaalde grote van stukjes.
- Geeft goede scores in snelle runtime

Segmentatie

- De eiwitten worden a priori gesegmenteerd in n stukken volgens een aantal criteria bepaald door ons.
- Voorbeeld eiwit 7 is opgedeeld in ('CPPCHPPC', 'HPPC', 'PPHHH', 'HHHC', 'CPCH', 'PPC', 'PC', 'HPPH', 'PC')

RANDOMFOLD

Eiwit 2
Runtime 7.19 seconden
Score -6

```
        P - H - P
        |       |
        H   H - H
        |   |
P - H - H   H
|           |
H   H - H - P
```

Eiwit 7
Runtime 33.8 seconden
Score -27

```
            P - P
            |   |
            C   C - H - P
                        |
        P - C   P - C   P
        |   |   |   |   |
        C   P   C   C   C
        |   |   |   |   |
P - H   P - H   H   H
|               |   |
P - H - P   H - H   P - P
        |   |           |
        C   H - H   P - C
                |   |
                H - P
```

- 10.000 iteraties
- Resultaten kunnen zeer verschillen bij grotere eiwitten

BREADTHFIRST

Eiwit 2
Runtime 114 seconden
Score -6

```
P - H   P - H
|   |   |
H   H - H   H - H
|               |
P - H - H - H - P
```

Eiwit 7
Runtime 40y+
Score n.v.t.

- Bereikt een optimum
- Vanaf eiwit 2 duurt het algorithm langer dan 17 uur.

RANDOM HALF

Eiwit 2
Runtime 23.6 seconden
Score -6

```
    P - H - P
    |       |
    H   H - H
    |   |
H   H   H   H
|   |   |   |
P - H   P - H
```

Eiwit 7
Runtime 107.4 seconden
Score -34

```
    P - H - C - P
    |           |
    P - C   C - P
        |
        H   C - P
        |   |   |
        P - P   P
                |
                H - H
                    |
        H - H - H - H
        |
P - C - C   C - H   H - P
|           |   |   |   |
C - H   C - P   P - P   C
    |   |
    P - P
```

- 10.000 iteraties
- Knipt beide algoritmes in twee stukken

BREADTHFIRST PIECEWISE

Eiwit 2
Runtime 0.8 seconden
Score -6

```
P - H   P - H
|   |   |
H   H - H   H - H
|               |
P - H - H - H - P
```

Eiwit 7
Runtime 6.1 seconden
Score -36

```
        P - P
        |   |
        H   C - P - P
        |           |
P - C   C - P   H - H   P - C
|           |       |   |
P - H - C - P   H - H   H - P
                |           |
        C - C - H - H   C - H - P
        |               |
        P - C - H   C - P
                |   |
                P - P
```

- Knipt eiwit 2 in drie stukken, en behaald lokale optimale resultaten .
- Knipt eiwit 7 in 8 stukjes.

H-H-P-H-P-H-P-H-P-H-H-H-H-P-H-P-P-P-H-P-P-P-H-P-P-P-P-H-P-P-P-H-P-P-P-H-P-H-H-H-H-P-H-P-H-P-H-P-H-H

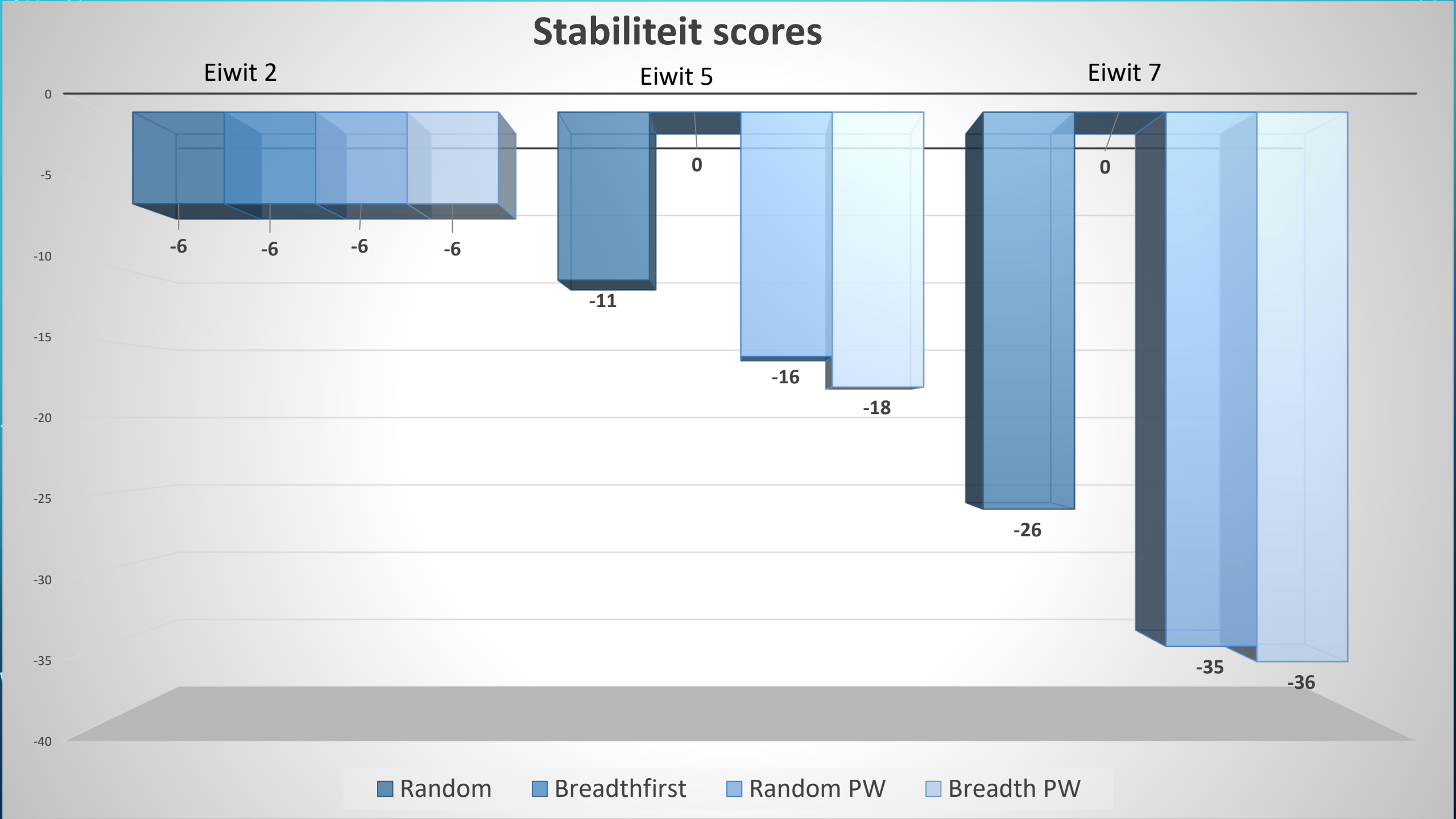
```
        P - H - P - H - P
        |               |
        H - H   H - H   H
                |   |   |
    P - H - P - H   H - P
    |
P - P   P - H   H - P
|       |   |   |   |
H   P - H   H - H   H - P
|   |                   |
P   H   H - H   H - P - P
|   |       |   |
P   P - H - P   P
|               |
P - H   H - P - P
    |   |
    P   P
    |   |
    P - P
```

GEWOON OMDAT HET KAN.

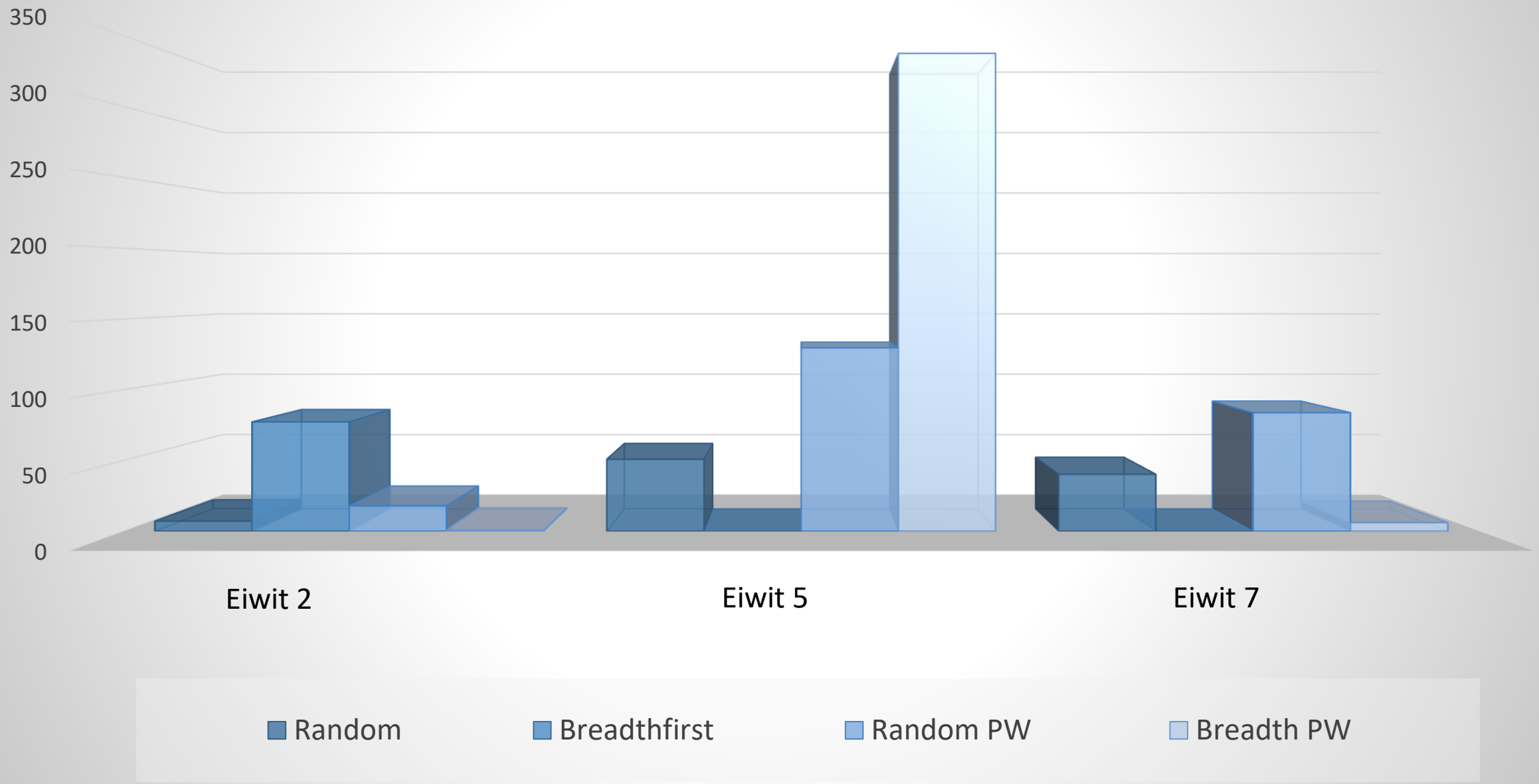
VANAF HIER WORDT HET VIJFDE EIWIT MEEGENOMEN IN DE RESULTATEN.

- BESTAAT ALLEEN UIT POLAIRE (P) EN HYDROFOBE (H) AMINOZUREN
- KWA LENGTE HET LANGSTE EIWIT VAN DE 9.

Stabiliteit scores

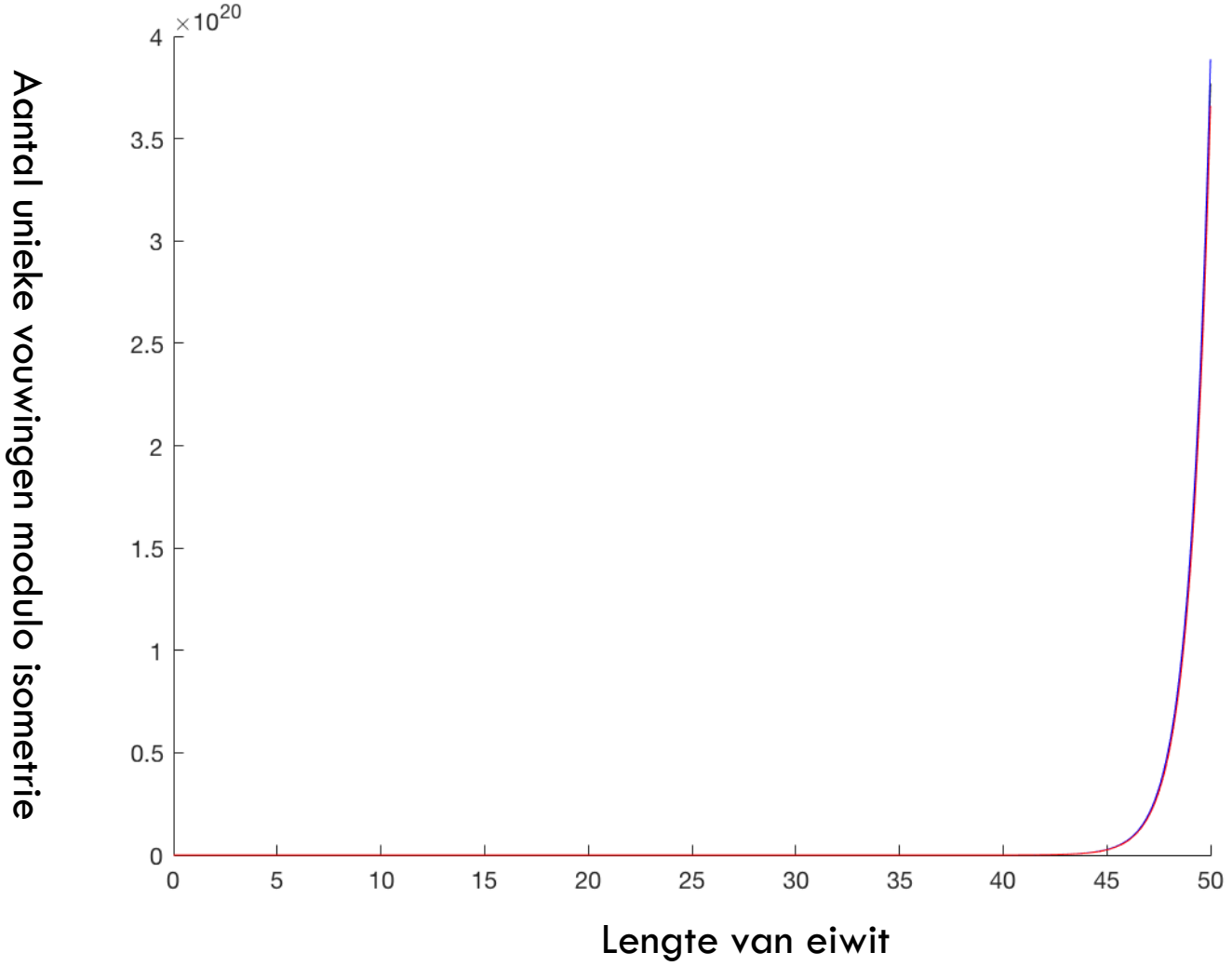


Runtime in seconden

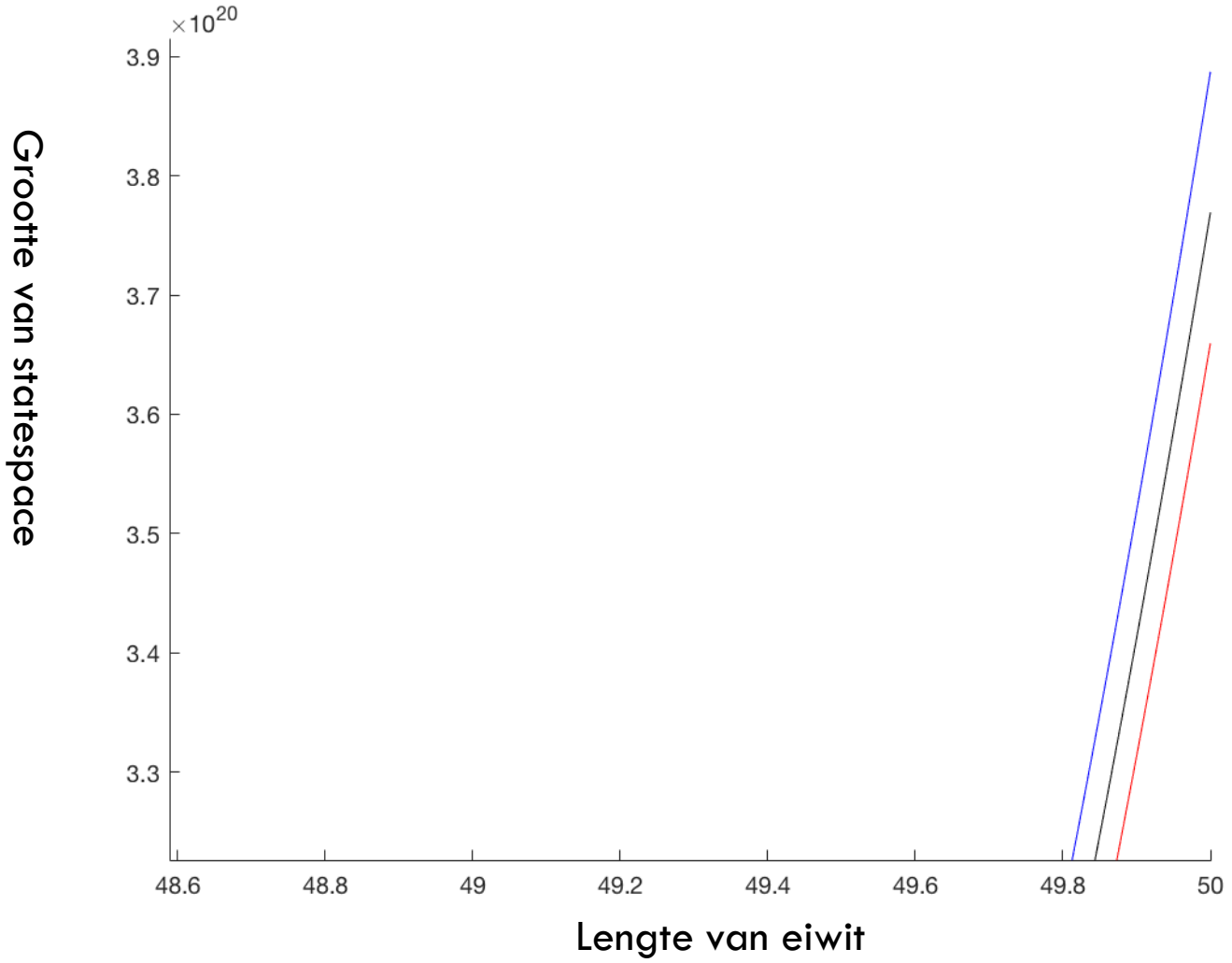


EXTRAPOLANT VAN DE STATESPACE AAN DE HAND VAN DE EERSTE VIJFTIEN STATESPACES

- Extraploant: x → $0{,}09993e^{0{,}9936x}$

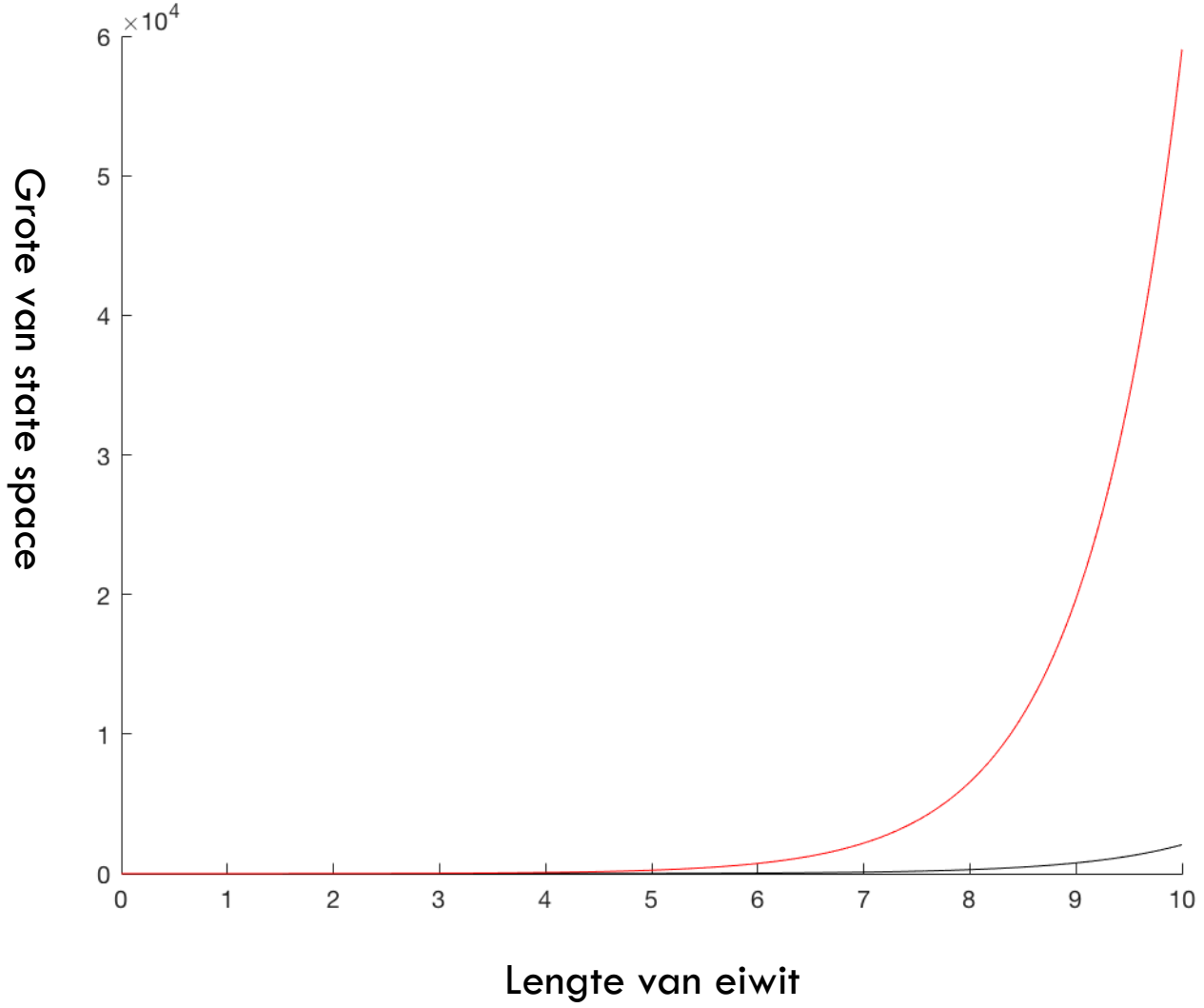


ZOOM IN VAN EXTRAPOLANT MET DE 95% ZEKERHEIDSINTER VALLEN



A PRIORI BOVENGRENS (ROOD) MET DE EXTRAPOLANT

- De a priori bovengrens is te grof en wordt gegeven door n → 3^n



CONCLUSIE

Voor de vier algoritmes zijn er voor ons een paar duidelijke conclusies:

- In theorie optimum → Breadthfirst
- Snel en redelijke resultaten → Random
- Laagste stabiliteit → Breadth First Piecewise

3/4
1/4

GIFJE OM AF TE SLUITEN

- https://media.giphy.com/media/MUq6rf5WNJFAsKrIJG/giphy.gif