

1 E.A.3.3 (ProteinFolding)

1.1 Modello

Data una sequenza di amminoacidi a_1, \dots, a_n (fissata per il problema), l'idea è quella di modellare uno **stato** come segue:

Stato

Uno stato è un assegnamento p_1, \dots, p_k con $0 \leq k \leq n$ t.c.

- $p_i \in \mathbb{Z}^2$ (posizionamento nel piano)
- $\text{dist}(p_i, p_{i+1}) = 1$ (adiacenza)
- $\nexists p_i, p_j \ i \neq j \wedge p_i = p_j$ (sovrapposizione)

Obiettivo

Uno stato è obiettivo quando $k = n$.

Azioni

Dato uno stato **non obiettivo** (quindi $k < n$), l'insieme di azioni consiste nei possibili assegnamenti per p_{k+1} che rispettano le condizioni di *adiacenza* e *sovrapposizione*.

Da questa modellazione del problema deriva un'importante osservazione, che permette di ottimizzare gli algoritmi di ricerca:

Osservazione 1

Il grafo di ricerca per **ProteinFolding** è un **albero**.

Per dimostrarlo bisogna far vedere che non è possibile raggiungere lo stesso stato con sequenze di azioni diverse. Per assurdo, se fosse possibile, vorrebbe dire che uno stato p_1, \dots, p_k è stato raggiunto partendo da due stati **diversi** q_1, \dots, q_{k-1} e r_1, \dots, r_{k-1} .

A questo punto si può ottimizzare la ricerca, perché non serve controllare se uno stato è già stato esplorato o sta già in frontiera (ogni stato generato a seguito dell'applicazione di un'azione allo stato «in esplorazione» è nuovo).

Dato che il problema presenta forti simmetrie, si può cercare di ottimizzare la ricerca evitando le azioni che generano stati equivalenti.

- la prima azione è sempre in alto
- primo giro sempre a destra

- per tutti gli altri casi tutte le azioni valide