

Experimentatie

Statespace:

2D: $1 + 3^{(n-2)}$

3D: $1 + 5^{(n-2)}$

Dit zijn de *theoretisch* maximaal behaalbare verschillende vouwingen.

Deze statespace is als volgend bepaald:

De eerste twee aminozuren kun je gewoon standaard vast leggen, omdat het niet uitmaakt welke richting je opgaat hiermee. Dit geeft je een standaard mogelijkheid

➤ 1

Daarna kun je in 2D, 3 verschillende kanten op vouwen en in 3D 5 verschillende kanten.

➤ $1 + 3$

Dit kan daarna ook met welke aaneenvolgende aminozuren

➤ $1 + 3^{(n)}$

Op de eerste twee aminozuren na, want die staan al vast...

➤ $1 + 3^{(n-2)}$

Keten	Lower-bound	Upper-bound (2D)
HH P HH H PH P HH H PH	1	531,442
H P HP P HH P HP P PH H HP P PH	1	387,420,490
PP P HH P PH P PP P HHHHHH H PP H PP P PH P PP P	1	16,677,181,699,666,570
HH P HP P PH P HHHH H PH P PP H PP P PP P PH P PP P PH P HHHH P PH P PH P HH	1	239,299,329,230,617,529,084
CPP C HP P CH P PP H HHHH H CC P CH P PP C CH P PP H PC	1	16,677,181,699,666,570
H C PH P CP H PH C CH P HP P PH P PP H PP P PH P CP H PP P PH H HC C CH C CH H	1	239,299,329,230,617,529,084
H C PH P PH C HHHH P CC P PH P PP H PP P CP P PH P PP H PH H HC H CH P PH P HH	1	239,299,329,230,617,529,084

Score

Berekening Upper-bound:

- $(\text{aantal H} - 1) * 1 + (\text{aantal C} - 1) * 5$

Keten	Lower-bound	Upper-bound
HHPHHHPHPHHHPH	0	-9
HPHPHPHPHPHPHPHPH	0	-9
PPPHHPHHPPPPHHHHHHHPHHPPPPHHPHP	0	-15
HHPHPHPHPHHHHHPPPHPPHPPPHPPPHPPPHPHHHHPHPHPHH	0	-23
CPPCHPPCHPPCPHHHHHHCCPCHPPCPCHPPHPC	0	-55
HCPHPCPHPCCHPHPPPHPPPHPPPHPCPHPPHPHHHCCHCHCHHH	0	-63
HCPHHPHCHHHHPCCPPHPPPHPPPPCPPPHPPHPHHHHCHPHPHPHH	0	-45

Experiment

Met dit experiment willen we kijken hoe de beginscore van een streng invloed heeft op de score die uiteindelijk kan worden behaald met het 'hilldimber' algoritme. Om deze vraag te beantwoorden, gebruiken we de drie verschillende startpunten waarmee we onze hilldimber kunnen runnen, namelijk:

- Straight (recht gevouwen)
- Random (random gevouwen)
- Depth (eerst gerund met depth-first)

Welke runs maken wij:

- Elk algoritme runnen wij met de volgende strengs:
 - Streng 1 (alleen P & H, laagste score upper-bound)
 - Streng 4 (alleen P & H, hoogste score upper-bound)
 - Streng 8 (P, H & C, laagste score upper-bound)
 - Streng 7 (P, H & C, hoogste score upper-bound)
- Er is voor deze vier strengs gekozen omdat we graag voor beide soorten strengs (zonder en met cysteïne) het verschil wilden laten zien tussen de streng met de hoogste en de streng met de laagste upper-bound.
- Voor elke combinatie berekenen we de gemiddelde score per iteratie over **5** runs.
- Andere instellingen (voor iedere run gelijk):
 - Dimension: 3D
 - Iteraties : 1000
 - Maximum runtime depth: 15 seconden
- Verwachtingen beginscore:
 - Een recht gevouwen streng heeft altijd een score van 0 omdat de verschillende aminozuren per definitie niet naast elkaar liggen.
 - Een random gevouwen streng heeft altijd een andere score omdat het random is.
 - Een streng vanuit depth-first algoritme heeft altijd dezelfde beginscore per streng. Dit komt omdat we de depth-first eerst 15 seconden laten runnen en dan met de beste streng vanuit daar verder gaan. Omdat hij steeds even lang de tijd krijgt, komt de beste streng altijd neer op dezelfde score.
- Verwachtingen eindscore:
 - We verwachten dat een streng met een lagere beginscore meer en sneller vooruit zal gaan tijdens de hilldimber, maar dat de uiteindelijke score voor alle drie de startpunten ongeveer gelijk zal zijn.
- Resultaten:
 - De plots van de resultaten staan in de map 'resultaten'.
 - Zie hieronder een tabel voor uitleg welke plot bestanden en csv bestanden bij welke soort run horen.

Naam plot bestand	Naam csv bestand	Instellingen
plot1.1	exp3	Random, keten 1
plot1.2	exp7	Random, keten 4
plot1.3	exp10	Random, keten 8
plot1.4	exp13	Random, keten 7
plot2.1	exp4	Straight, keten 1
plot2.2	exp6	Straight, keten 4
plot2.3	exp9	Straight, keten 8
plot2.4	exp12	Straight, keten 7
plot3.1	exp5	Depth, keten 1
plot3.2	exp8	Depth, keten 4
plot3.3	exp11	Depth, keten 8
plot3.4	exp14	Depth, keten 7