

תרגיל 4 עיבוד תלת מימדי  
רינה קרנאוך ואופק קוה  
סמסטר אביב 2021

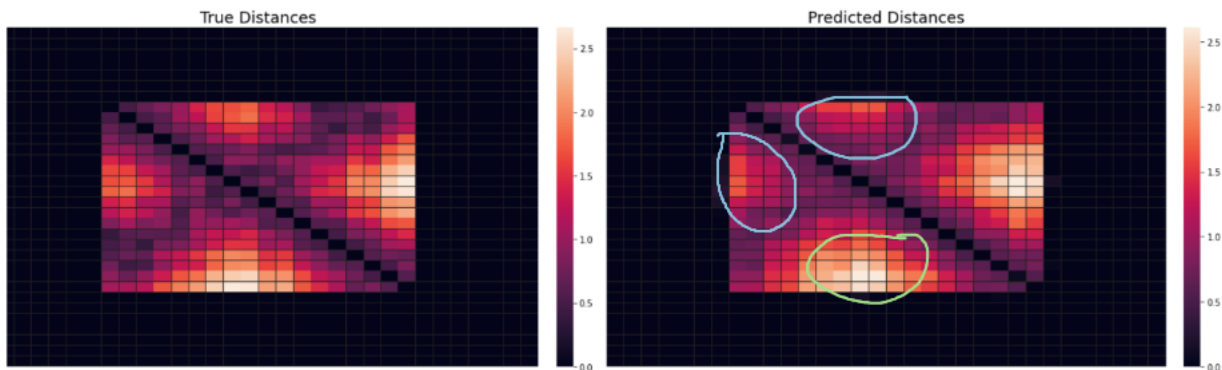
1. בחרנו את הפרמטרים הבאים –

```
# number of ResNet blocks for the second ResNet, dilation list to repeat and the kernel size.  
  
RESNET_2_BLOCKS = 5 # good start may be 3/5/7  
DILATION = [2,2] # was [1]  
RESNET_2_SIZE = (5,5) # good start may be (3,3)/(5,5)/(7,7)  
  
# percentage of dropout for the dropout layer  
  
DROPOUT = 0.1 # good start may be 0.1-0.5  
  
# number of epochs  
  
EPOCHS = 65
```

ובכמות הפרמטרים –

Total params: 1,022,483  
Trainable params: 1,021,907  
Non-trainable params: 576

2. קיבלנו את heat-maps הבאים –



נבחין כי האלכסון הראשי זהה (הרי לא חישבנו את המרחקים בעלי אינדקסים זהים). אנחנו רואים במעגל הירוק שהאזורים די דומים בין הפרדיקציה למרחקים בפועל. האזורים במעגל הכחול לא כל כך דומים, נדמה כי ישנם מרחקים ארוכים יותר בפועל ב-true-distances מאשר הפרדיקציה.

3. Total Score = 1365.645

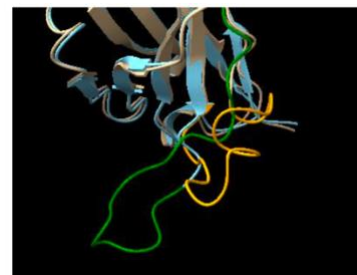
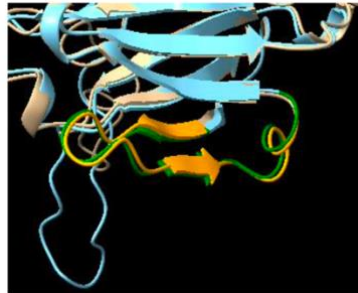
angle\_constraint = 618.446

diehedral\_constraint = 902.175

4. ביצענו align וקיבלנו (תכלת ref, חום מה שמידלנו):

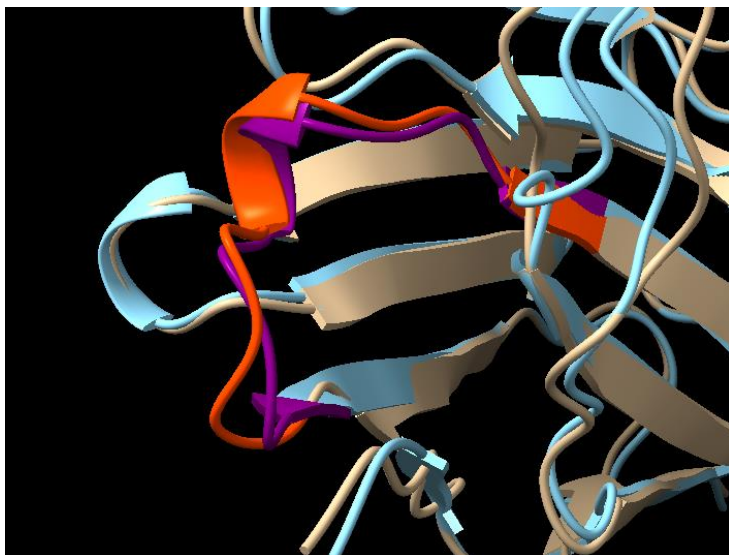


כאשר בפעם שעברה היה לנו, מסודר בסדר ( $H1, H2, H3$ )

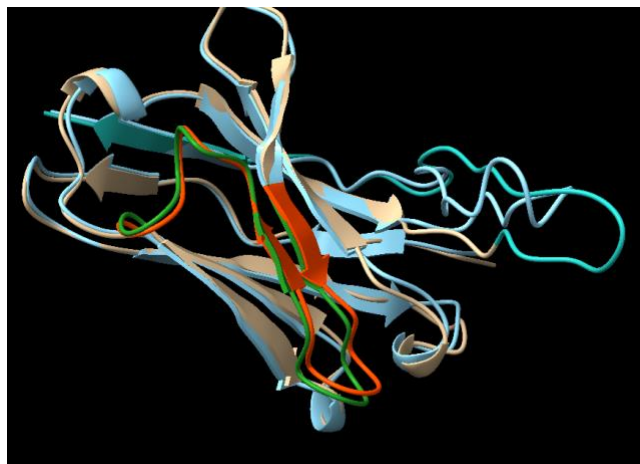


המשך בעמוד הבא.

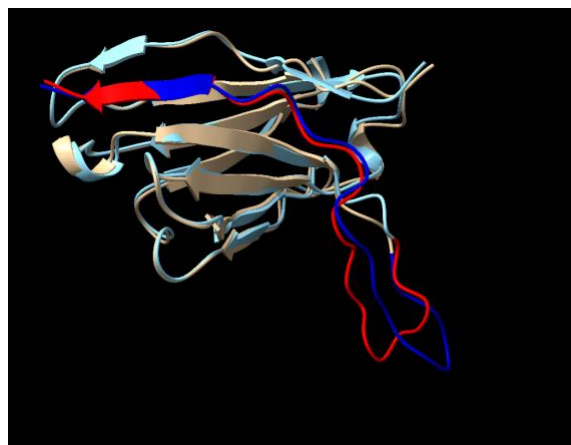
נצבע את השרשרת H1 ונקבל –



ואת שרשרת H2 ונקבל –



ואת שרשרת H3 ונקבל –



אכן נראה שהצלחנו למדל בצורה טובה יותר בעזרת רזזטה  
והרשת, בעיקר עבור השרשרת השלישית למראית העין. בנוסף גם

הrmsd הכולל עבור כל האטומים יציג לנו שיפור, שנראה בסעיף הבא.

5. עבור rmsd קיבלנו –

RMSE between 111 pruned atom pairs is 0.623 angstroms; (across all 125 pairs: 1.661)

כאשר בפעם הקודמת קיבלנו rmsd מינימלי של 2.287, מה שאומר שמידלנו טוב יותר.