

# Primjena genetskog programiranja za rješavanje problema prijanjanja proteina

Diplomski rad br. 54

Ivan Kokan  
mentor: doc. dr. sc. Marin Golub

Zavod za elektroniku, mikroelektroniku, računalne i inteligentne sustave  
Fakultet elektrotehnike i računarstva  
Sveučilište u Zagrebu

5. srpnja 2010.



## Uvod u genetsko programiranje

Uvod u genetsko programiranje

Jedinka genetskog programiranja

# Sadržaj

Uvod u genetsko programiranje

Jedinka genetskog programiranja

Genetski operatori

Uvod u genetsko programiranje

Jedinka genetskog programiranja

Genetski operatori

Prijanjanje proteina

# Sadržaj

Uvod u genetsko programiranje

Jedinka genetskog programiranja

Genetski operatori

Prijanjanje proteina

Programsko rješenje

# Sadržaj

Uvod u genetsko programiranje

Jedinka genetskog programiranja

Genetski operatori

Prijanjanje proteina

Programsko rješenje

Zaključak

Uvod u genetsko programiranje

Jedinka genetskog programiranja

Genetski operatori

Prijanjanje proteina

Programsko rješenje

Zaključak



# Uvod u genetsko programiranje

# Uvod u genetsko programiranje

- ▶ automatizirana metoda optimiranja računalnih programa

# Uvod u genetsko programiranje

- ▶ automatizirana metoda optimiranja računalnih programa
- ▶ razvila se iz evolucijskih algoritama

# Uvod u genetsko programiranje

- ▶ automatizirana metoda optimiranja računalnih programa
- ▶ razvila se iz evolucijskih algoritama
  - ▶ biološka inspiracija

# Uvod u genetsko programiranje

- ▶ automatizirana metoda optimiranja računalnih programa
- ▶ razvila se iz evolucijskih algoritama
  - ▶ biološka inspiracija
  - ▶ rađanje i umiranje jedinki unutar populacije

# Uvod u genetsko programiranje

- ▶ automatizirana metoda optimiranja računalnih programa
- ▶ razvila se iz evolucijskih algoritama
  - ▶ biološka inspiracija
  - ▶ rađanje i umiranje jedinki unutar populacije
- ▶ **stablata** jedinka evolucijskog algoritma

# Uvod u genetsko programiranje

- ▶ automatizirana metoda optimiranja računalnih programa
- ▶ razvila se iz evolucijskih algoritama
  - ▶ biološka inspiracija
  - ▶ rađanje i umiranje jedinki unutar populacije
- ▶ **stablasta** jedinka evolucijskog algoritma
  - ▶ Michael Lynn Cramer: *A Representation for the Adaptive Generation of Simple Sequential Programs*, 1985.

# Uvod u genetsko programiranje

- ▶ automatizirana metoda optimiranja računalnih programa
- ▶ razvila se iz evolucijskih algoritama
  - ▶ biološka inspiracija
  - ▶ rađanje i umiranje jedinki unutar populacije
- ▶ **stablata** jedinka evolucijskog algoritma
  - ▶ Michael Lynn Cramer: *A Representation for the Adaptive Generation of Simple Sequential Programs*, 1985.
  - ▶ jedinka = računalni program



# Uvod u genetsko programiranje

- ▶ automatizirana metoda optimiranja računalnih programa
- ▶ razvila se iz evolucijskih algoritama
  - ▶ biološka inspiracija
  - ▶ rađanje i umiranje jedinki unutar populacije
- ▶ **stablata** jedinka evolucijskog algoritma
  - ▶ Michael Lynn Cramer: *A Representation for the Adaptive Generation of Simple Sequential Programs*, 1985.
  - ▶ jedinka = računalni program
  - ▶ generacija = iteracija evolucijskog algoritma

# Uvod u genetsko programiranje

- ▶ automatizirana metoda optimiranja računalnih programa
- ▶ razvila se iz evolucijskih algoritama
  - ▶ biološka inspiracija
  - ▶ rađanje i umiranje jedinki unutar populacije
- ▶ **stablata** jedinka evolucijskog algoritma
  - ▶ Michael Lynn Cramer: *A Representation for the Adaptive Generation of Simple Sequential Programs*, 1985.
  - ▶ jedinka = računalni program
  - ▶ generacija = iteracija evolucijskog algoritma
  - ▶ John Reed Koza: *Genetic Programming: On the Programming of Computers by Means of Natural Selection*, 1992.

Uvod u genetsko programiranje

Jedinka genetskog programiranja

Genetski operatori

Prijanjanje proteina

Programsko rješenje

Zaključak

# Jedinka genetskog programiranja

- ▶ nelinearna struktura

- ▶ nelinearna struktura — **stablo**

# Jedinka genetskog programiranja

- ▶ nelinearna struktura — **stablo**
- ▶ čvorovi stabla

- ▶ nelinearna struktura — **stablo**
- ▶ čvorovi stabla
  - ▶ unutarnji čvorovi — operatori (sin , AND, do)



- ▶ nelinearna struktura — **stablo**
- ▶ čvorovi stabla
  - ▶ unutarnji čvorovi — operatori (`sin`, `AND`, `do`)
  - ▶ završni čvorovi — operandi (`1,64`, `true`, `x`)

- ▶ nelinearna struktura — **stablo**
- ▶ čvorovi stabla
  - ▶ unutarnji čvorovi — operatori (`sin`, `AND`, `do`)
  - ▶ završni čvorovi — operandi (`1,64`, `true`, `x`)
- ▶ rekurzivni obilazak (*postorder*)

- ▶ nelinearna struktura — **stablo**
- ▶ čvorovi stabla
  - ▶ unutarnji čvorovi — operatori (`sin`, `AND`, `do`)
  - ▶ završni čvorovi — operandi (`1,64`, `true`, `x`)
- ▶ rekurzivni obilazak (*postorder*)
- ▶ **dobrota** (eng. *fitness*) — mjerilo kvalitete jedinke

Uvod u genetsko programiranje

Jedinka genetskog programiranja

Genetski operatori

Prijanjanje proteina

Programsko rješenje

Zaključak

# Genetski operatori

# Genetski operatori

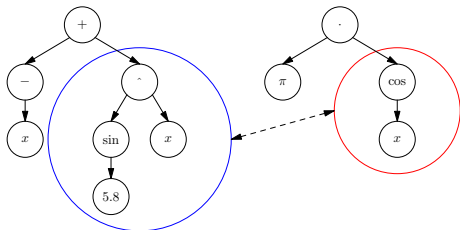
- ▶ reprodukcija

# Genetski operatori

- ▶ reprodukcija
- ▶ križanje

# Genetski operatori

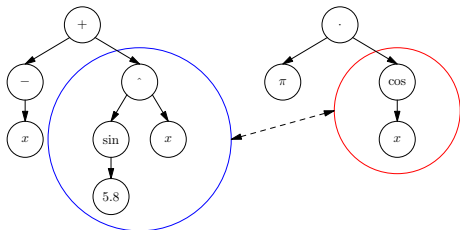
- ▶ reprodukcija
- ▶ križanje





# Genetski operatori

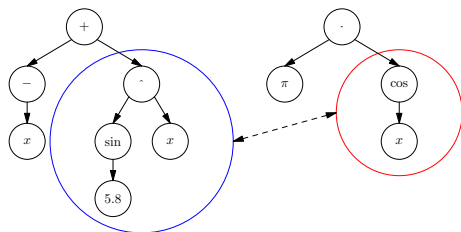
- ▶ reprodukcija
- ▶ križanje



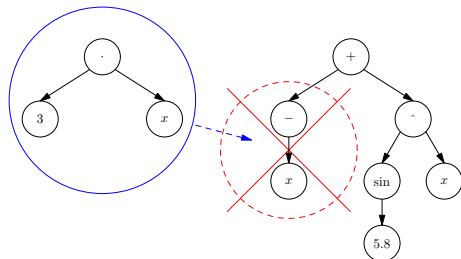
- ▶ mutacija

# Genetski operatori

- ▶ reprodukcija
- ▶ križanje



- ▶ mutacija



Uvod u genetsko programiranje

Jedinka genetskog programiranja

Genetski operatori

Prijanjanje proteina

Programsko rješenje

Zaključak

# Prijanjanje proteina

# Prijanjanje proteina

- ▶ računalno modeliranje interakcija dvaju ili više proteina

# Prijanjanje proteina

- ▶ računalno modeliranje interakcija dvaju ili više proteina
- ▶ cilj: predvidjeti formiranje kompleksnih trodimenzionalnih struktura

# Prijanjanje proteina

- ▶ računalno modeliranje interakcija dvaju ili više proteina
- ▶ cilj: predvidjeti formiranje kompleksnih trodimenzionalnih struktura
- ▶ vrste prijanjanja

# Prijanjanje proteina

- ▶ računalno modeliranje interakcija dvaju ili više proteina
- ▶ cilj: predvidjeti formiranje kompleksnih trodimenzionalnih struktura
- ▶ vrste prijanjanja
  - ▶ prijanjanje čvrstih proteina (eng. *rigid-body docking*)



# Prijanjanje proteina

- ▶ računalno modeliranje interakcija dvaju ili više proteina
- ▶ cilj: predvidjeti formiranje kompleksnih trodimenzionalnih struktura
- ▶ vrste prijanjanja
  - ▶ prijanjanje čvrstih proteina (eng. *rigid-body docking*)
  - ▶ prijanjanje savitljivih proteina (eng. *flexible-body docking*)

# Prijanjanje proteina

- ▶ računalno modeliranje interakcija dvaju ili više proteina
- ▶ cilj: predvidjeti formiranje kompleksnih trodimenzionalnih struktura
- ▶ vrste prijanjanja
  - ▶ prijanjanje čvrstih proteina (eng. *rigid-body docking*)
  - ▶ prijanjanje savitljivih proteina (eng. *flexible-body docking*)
- ▶ geometrijske i elektrostatske značajke

# Prijanjanje proteina

- ▶ računalno modeliranje interakcija dvaju ili više proteina
- ▶ cilj: predvidjeti formiranje kompleksnih trodimenzionalnih struktura
- ▶ vrste prijanjanja
  - ▶ prijanjanje čvrstih proteina (eng. *rigid-body docking*)
  - ▶ prijanjanje savitljivih proteina (eng. *flexible-body docking*)
- ▶ geometrijske i elektrostatske značajke
- ▶ *Protein Data Bank*

Uvod u genetsko programiranje

Jedinka genetskog programiranja

Genetski operatori

Prijanjanje proteina

Programsko rješenje

Zaključak

# Programsko rješenje

# Programsko rješenje

- ▶ rješava problem prijanjanja dvaju čvrstih proteina

# Programsko rješenje

- ▶ rješava problem prijanjanja dvaju čvrstih proteina
  - ▶ geometrijske značajke

# Programsko rješenje

- ▶ rješava problem prijanjanja dvaju čvrstih proteina
  - ▶ geometrijske značajke
- ▶ *Evolutionary Computation Framework (ECF)*



# Programsko rješenje

- ▶ rješava problem prijanjanja dvaju čvrstih proteina
  - ▶ geometrijske značajke
- ▶ *Evolutionary Computation Framework* (ECF)
- ▶ jedinka = kompozicija geometrijskih transformacija dvaju proteina

# Programsko rješenje

- ▶ rješava problem prijanjanja dvaju čvrstih proteina
  - ▶ geometrijske značajke
- ▶ *Evolutionary Computation Framework* (ECF)
- ▶ jedinka = kompozicija geometrijskih transformacija dvaju proteina
  - ▶ rotacije i translacije u prostoru

# Programsko rješenje

- ▶ rješava problem prijanjanja dvaju čvrstih proteina
  - ▶ geometrijske značajke
- ▶ *Evolutionary Computation Framework* (ECF)
- ▶ jedinka = kompozicija geometrijskih transformacija dvaju proteina
  - ▶ rotacije i translacije u prostoru
- ▶ funkcije dobrote

# Programsko rješenje

- ▶ rješava problem prijanjanja dvaju čvrstih proteina
  - ▶ geometrijske značajke
- ▶ *Evolutionary Computation Framework* (ECF)
- ▶ jedinka = kompozicija geometrijskih transformacija dvaju proteina
  - ▶ rotacije i translacije u prostoru
- ▶ funkcije dobrote
  - ▶ EvalOpCenter

# Programsko rješenje

- ▶ rješava problem prijanjanja dvaju čvrstih proteina
  - ▶ geometrijske značajke
- ▶ *Evolutionary Computation Framework* (ECF)
- ▶ jedinka = kompozicija geometrijskih transformacija dvaju proteina
  - ▶ rotacije i translacije u prostoru
- ▶ funkcije dobrote
  - ▶ EvalOpCenter
  - ▶ EvalOpMinDistance

# Programsko rješenje

- ▶ rješava problem prijanjanja dvaju čvrstih proteina
  - ▶ geometrijske značajke
- ▶ *Evolutionary Computation Framework* (ECF)
- ▶ jedinka = kompozicija geometrijskih transformacija dvaju proteina
  - ▶ rotacije i translacije u prostoru
- ▶ funkcije dobrote
  - ▶ EvalOpCenter
  - ▶ EvalOpMinDistance
  - ▶ EvalOpPairwise

Uvod u genetsko programiranje

Jedinka genetskog programiranja

Genetski operatori

Prijanjanje proteina

Programsko rješenje

Zaključak

# Zaključak



- ▶ vrlo dobra prilagodba problemu

- ▶ vrlo dobra prilagodba problemu
  - ▶ konvergencija rješenju kroz nekoliko desetaka generacija

- ▶ vrlo dobra prilagodba problemu
  - ▶ konvergencija rješenju kroz nekoliko desetaka generacija
  - ▶ na početku veći utjecaj translacija

- ▶ vrlo dobra prilagodba problemu
  - ▶ konvergencija rješenju kroz nekoliko desetaka generacija
  - ▶ na početku veći utjecaj translacija
  - ▶ u konačnici “podešavanja” rotacijama

- ▶ vrlo dobra prilagodba problemu
  - ▶ konvergencija rješenju kroz nekoliko desetaka generacija
  - ▶ na početku veći utjecaj translacija
  - ▶ u konačnici “podešavanja” rotacijama
- ▶ veća populacija = veći “genetski materijal” = kvalitetnija rješenja

- ▶ vrlo dobra prilagodba problemu
  - ▶ konvergencija rješenju kroz nekoliko desetaka generacija
  - ▶ na početku veći utjecaj translacija
  - ▶ u konačnici “podešavanja” rotacijama
- ▶ veća populacija = veći “genetski materijal” = kvalitetnija rješenja
- ▶ mutacije nemaju značajnog utjecaja na dobrotu

- ▶ vrlo dobra prilagodba problemu
  - ▶ konvergencija rješenju kroz nekoliko desetaka generacija
  - ▶ na početku veći utjecaj translacija
  - ▶ u konačnici “podešavanja” rotacijama
- ▶ veća populacija = veći “genetski materijal” = kvalitetnija rješenja
- ▶ mutacije nemaju značajnog utjecaja na dobrotu
- ▶ elektrostatske značajke proteina?