



Institut de XXX

École Doctorale de XXX

# Titre de la thèse

# THÈSE

présentée et soutenue publiquement le XXX

pour l'obtention du

**Doctorat de l'Université XXX**

(spécialité XXX)

par

David MIGNON

## Composition du jury

Rapporteurs : Dr. Prénom1 NOM1 Rapporteur externe  
Dr. Prénom2 NOM2 Rapporteur externe  
Pr. Prénom3 NOM3 Rapporteur interne

Examinateurs : Dr. Prénom4 NOM4 Examinateur  
Dr. Prénom5 NOM5 Directeur de thèse  
Dr. Prénom6 NOM6 Directeur de thèse

---

Laboratoire de XXX



# **Remerciements**

XXX



*à XXX.*



# Table des matières

Liste des figures	vii
Liste des tables	ix
Abreviations	xi
<b>Introduction</b>	<b>1</b>
0.1    Section . . . . .	3
0.1.1    Subsection . . . . .	3
<b>1    Methodes : La theorie</b>	<b>5</b>
1.1    Section . . . . .	5
<b>2    Les Méthodes utilisées</b>	<b>7</b>
2.1    Section . . . . .	7
2.1.1    Subsection . . . . .	7
<b>3    Les comparaisons</b>	<b>9</b>
3.1    Les algorithmes . . . . .	9
3.1.1    Toulbar2 . . . . .	9
3.1.2    l'heuristique . . . . .	9
3.1.3    Le Monte-Carlo . . . . .	9
3.1.4    Le Replica Exchange . . . . .	9
3.2    Les protocoles . . . . .	9
3.2.1    Les protocoles Monte-Carlo . . . . .	9
3.2.2    Les protocoles Replica Exchange . . . . .	9
3.2.3    Les protocoles Heuristic . . . . .	9
3.2.4    Les temps de calcul . . . . .	11
3.3    Les tests . . . . .	12

## **Table des matières**

---

3.3.1	Tous les résidus actif . . . . .	12
3.3.2	Avec des résidus gelés . . . . .	16
3.3.3	Etude au voisinage de GMECs . . . . .	17
3.3.4	Résultats Superfamily . . . . .	31
3.3.5	Résultats Heuristic (protocoles longs) . . . . .	32
3.3.6	densité en séquences . . . . .	33
	<b>Conclusion</b>	<b>35</b>
	<b>Bibliographie</b>	<b>39</b>

# Liste des figures

3.1	Temps d'occupation du processeur selon le nombre de positions actives. . . . .	11
3.2	Distribution des énergies selon la température (protocole RE3). . . . .	12
3.3	Variation de la température au court de la trajectoire de chaque marcheur (protocole RE1). . . . .	13
3.4	Tous les protocoles. . . . .	14
3.5	Variation de la température au court de la trajectoire de chaque marcheur (protocole RE1). . . . .	15
3.6	test : 1M61 2, GMEC vs H . . . . .	28
3.7	test : 1M61 2, GMEC vs RE . . . . .	28
3.8	test : 1G9O 3, GMEC vs H . . . . .	29
3.9	test : 1G9O 5, GMEC vs MC . . . . .	29
3.10	test : 1CKA 5, GMEC vs H . . . . .	30
3.11	test : 1CKA 5, GMEC vs MC . . . . .	30
3.12	. . . . .	33
3.13	. . . . .	33



# Liste des tables

3.1	Les protocoles Monte-Carlo . . . . .	9
3.2	Les protocoles Replica Exchange . . . . .	10
3.3	Les protocoles Heuristic . . . . .	10
3.4	les meilleures énergies pour tous les résidus actifs . . . . .	12
3.5	L'énergie du GMEC et la différence avec les autres protocoles.Tous les résidus sont gelés . . . . .	16
3.6	Liste des échecs pour 1A81 . . . . .	16
3.7	Liste des échecs pour 1BM2 . . . . .	18
3.8	Liste des échecs pour 1CKA . . . . .	19
3.9	Liste des échecs pour 1M61 . . . . .	19
3.10	Liste des échecs pour 1O4C . . . . .	20
3.11	Liste des échecs pour 1R6J . . . . .	21
3.12	Liste des échecs pour 2BYG . . . . .	21
3.13	Résultats 5 position actives . . . . .	22
3.14	Résultats 10 positions actives . . . . .	23
3.15	Mutations 10 positions actives . . . . .	24
3.16	Résultats pour 3 fois (resp 9 fois)plus de cycles heuristiques protocole H+ (resp H++) . . . . .	32



# Abreviations

**XXX** xxx

**YYY** yyy

**ZZZ** zzz



# Introduction

XXX



# Contexte

## 0.1 Section

XXX

### 0.1.1 Subsection

XXX

#### Subsubsection

XXX

##### Paragraph XXX

###### Subparagraph XXX

Citation entre crochets [Name1a *et al.* 1980 ; Name2a *et al.* 1990].

Citation dans le texte Name3a *et al.* [2000].



## Chapitre 1

# Methodes : La theorie

## 1.1 Section

Subparagraph



## Chapitre 2

# Les Méthodes utilisées

## 2.1 Section

XXX

### 2.1.1 Subsection

XXX

#### Subsubsection

XXX

##### Paragraph XXX

**Subparagraph** Référence à une équation (Équation 2.1).

$$H\Psi = E\Psi \tag{2.1}$$



## Chapitre 3

# Les comparaisons

### 3.1 Les algorithmes

3.1.1 Toulbar2

3.1.2 l'heuristique

3.1.3 Le Monte-Carlo

3.1.4 Le Replica Exchange

### 3.2 Les protocoles

3.2.1 Les protocoles Monte-Carlo

3.2.2 Les protocoles Replica Exchange

3.2.3 Les protocoles Heuristic

Nom	Temp	Traj (mega)	seuil voisin	Proba
MC0	0.01	6000	0	0 ; 1 ; 0.1 ; 0
MC0-	0.01	300	0	0 ; 1 ; 0.1 ; 0
MC4	0.2	6000	0	0 ; 1 ; 0.1 ; 0
MC4-	0.2	300	0	0 ; 1 ; 0.1 ; 0
MC42	0.2	6000	0	1 ; 0 ; 0.1 ; 0
MC42-	0.2	300	0	1 ; 0 ; 0.1 ; 0

Table 3.1 – Les protocoles Monte-Carlo

### ***Chapitre 3. Les comparaisons***

---

Nom	marcheurs	Temp	Traj (mega)	seuil voisin	Proba	swap period (mega)
RE1	4	10<->0.01	1500	10	1 ; 0 ; 0.1 ; 0	7.5
RE2	4	1<->0.125	1500	10	1 ; 0 ; 0.1 ; 0	7.5
RE2-	4	1<->0.125	250	10	1 ; 0 ; 0.1 ; 0	2.5
RE22	4	2<->0.25	1500	10	1 ; 0 ; 0.1 ; 0	7.5
RE3	8	3<->0.175	750	10	1 ; 0 ; 0.1 ; 0	7.5
RE32	8	3<->0.175	750	10	0 ; 1 ; 0.1 ; 0	7.5
RE4	8	10<->0.00316	750	10	1 ; 0 ; 0.1 ; 0	1
RE42	8	10<->0.00316	750	0	1 ; 0 ; 0.1 ; 0	2.5

Table 3.2 – Les protocoles Replica Exchange

Nom	nombre de cycles
h	110000
h-	1100

Table 3.3 – Les protocoles Heuristic

### 3.2.4 Les temps de calcul

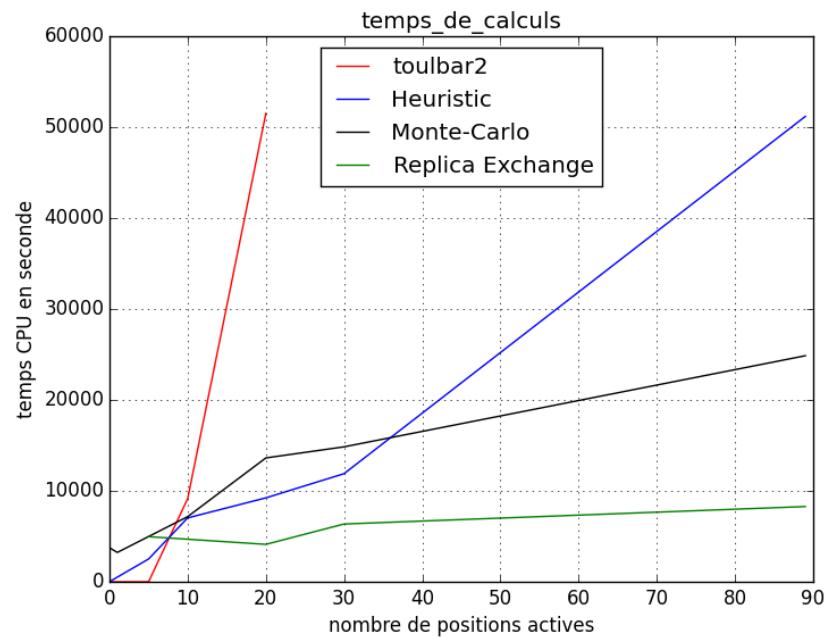


Figure 3.1 – Temps d’occupation du processeur selon le nombre de positions actives.

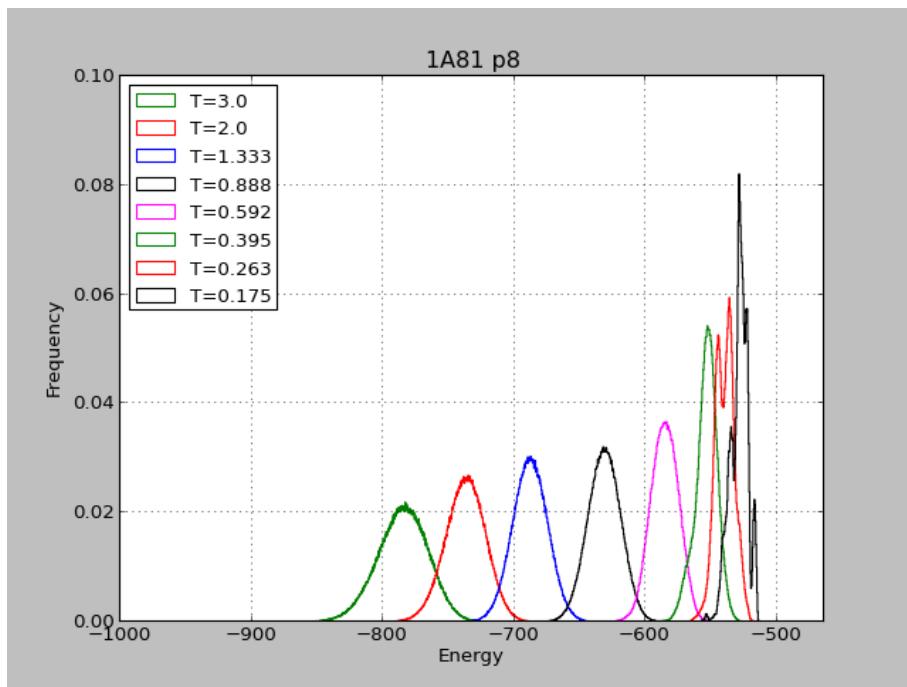


Figure 3.2 – Distribution des énergies selon la température (protocole RE3).

### 3.3 Les tests

#### 3.3.1 Tous les résidus actif

##### Les meilleures énergies

Protéine	h	MC3	MC43	RE1	RE2	RE5	RE3	RE32	RE4
1A81	-521	-538	-522	-525	-520	-520	-514	-512	-518
1ABO	-272	-274	-268	-273	-269	-273	-268	-271	-272
1BM2	-484	-500	-486	-488	-481	-489	-478	-476	-486
1CKA	-252	-258	-249	-259	-251	-251	-247	-246	-249
1G9O	-428	-435	-428	-429	-421	-430	-428	-425	-428
1M61	-480	-493	-479	-483	-480	-481	-480	-480	-480
1O4C	-535	-545	-531	-536	-529	-536	-527	-524	-532
1R6J	-407	-419	-414	-415	-409	-411	-409	-408	-414
2BYG	-457	-469	-454	-461	-456	-460	-456	-454	-462

Table 3.4 – les meilleures énergies pour tous les résidus actifs

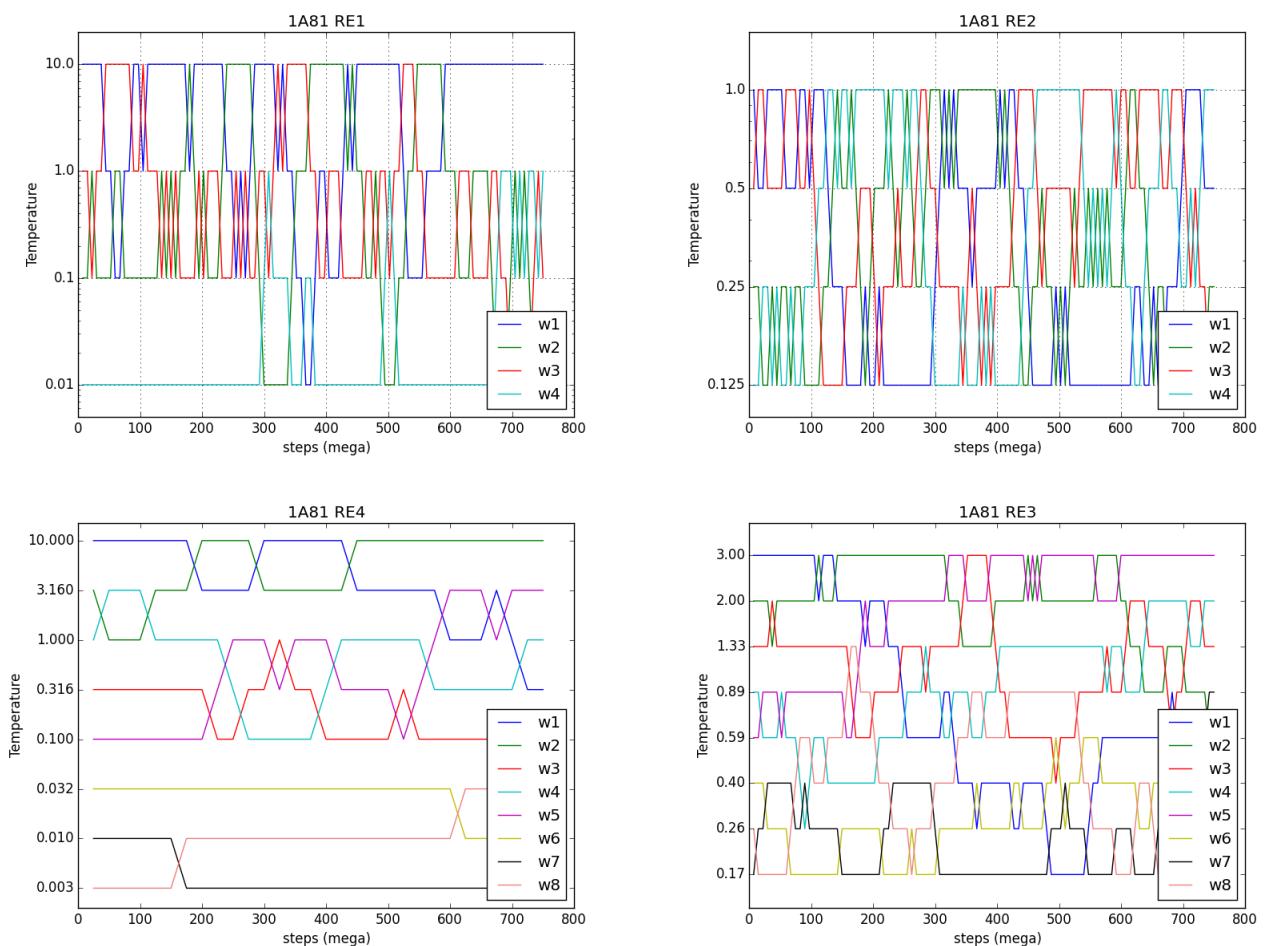


Figure 3.3 – Variation de la température au court de la trajectoire de chaque marcheur (protocole RE1).

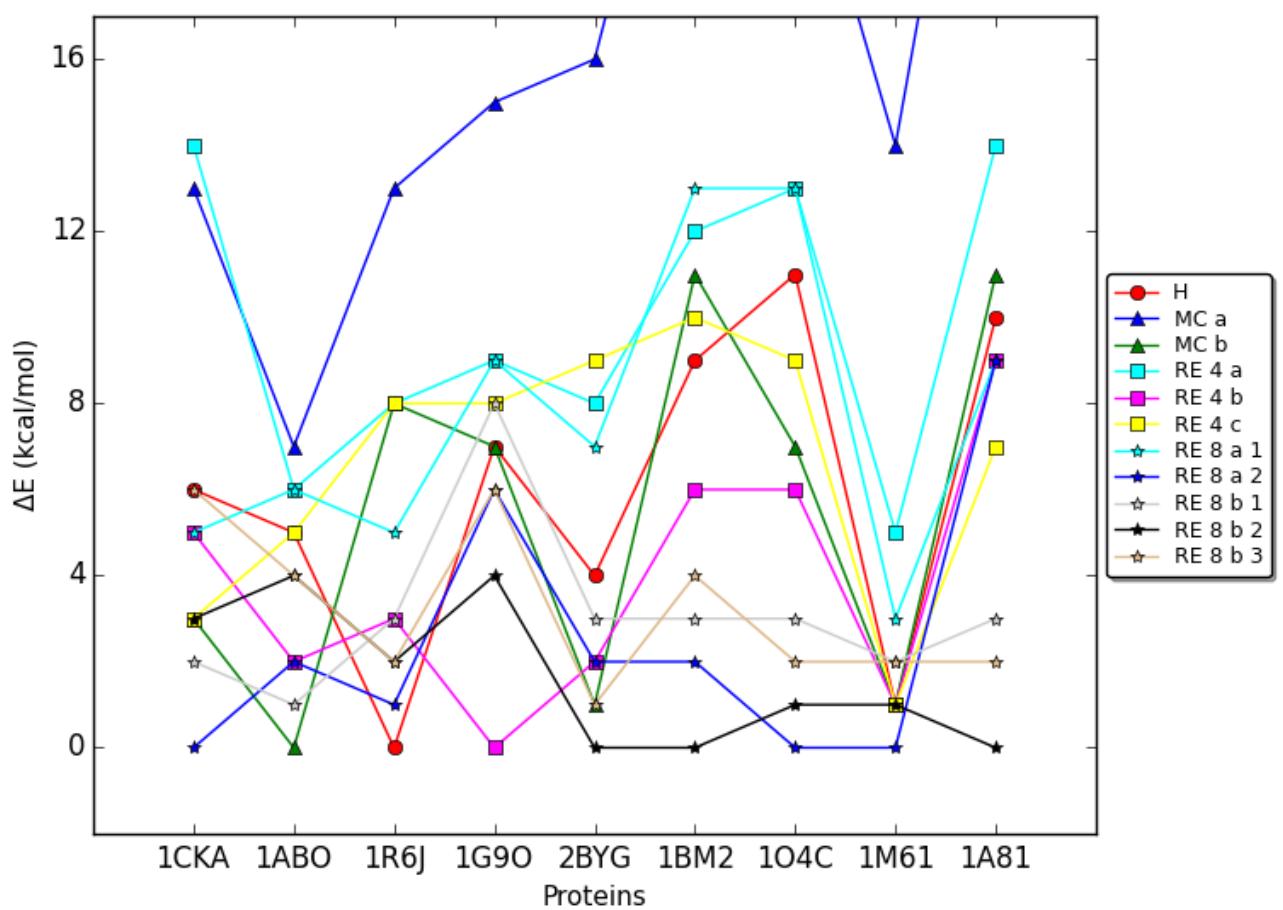


Figure 3.4 – Tous les protocoles.

### 3.3. Les tests

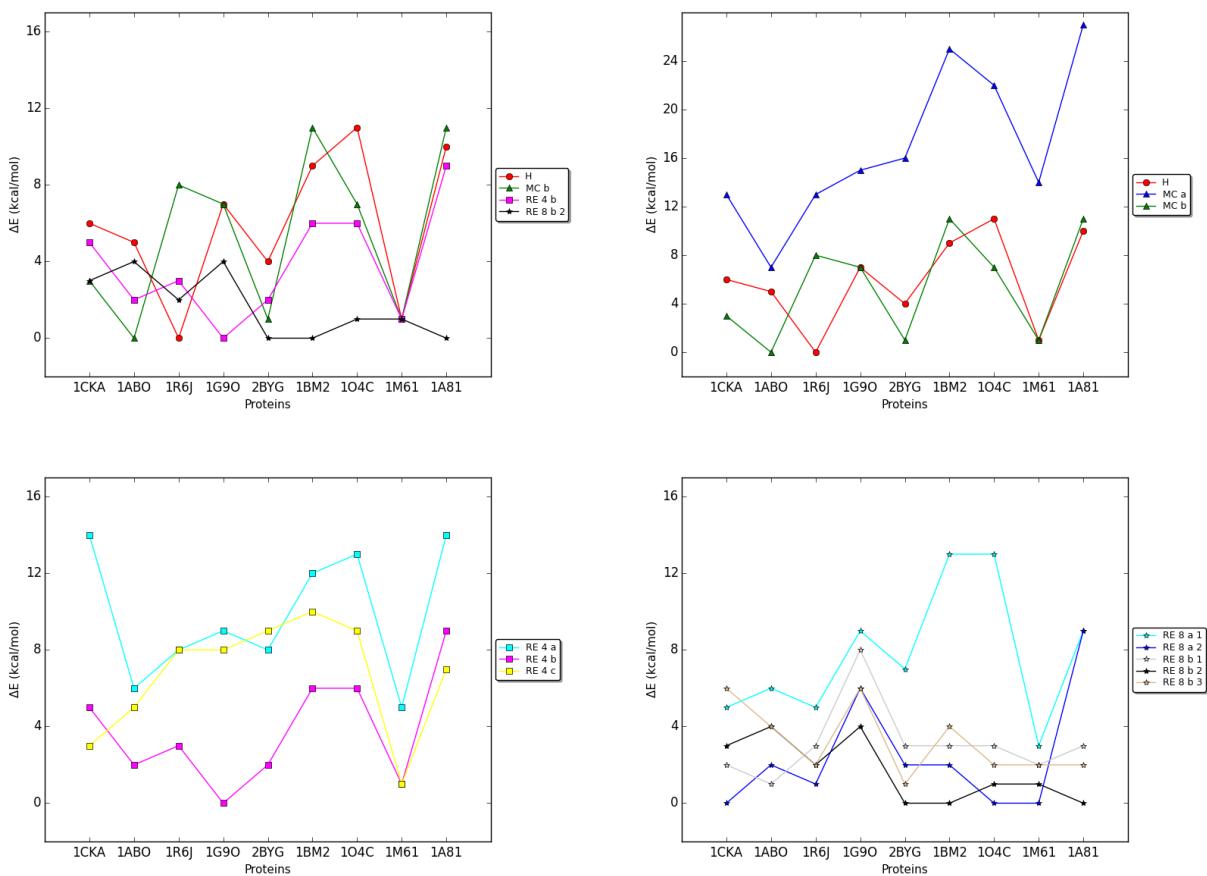


Figure 3.5 – Variation de la température au court de la trajectoire de chaque marcheur (protocole RE1).

### 3.3.2 Avec des résidus gelés

#### Séquence native

Protéine	GMEC	H-	MC0	MC4-
1A81	-585.1365	0	-0.2547	0
1ABO	-320.1798	0	0	0
1BM2	-553.5532	0	-0.0564	-0.0121
1CKA	-319.2787	0	0	0
1G9O	-481.1175	0	-0.1394	0
1M61	-555.9140	0	0	0
1O4C	-591.2115	0	0	-0.1250
1R6J	-454.9340	0	0	0
2BYG	-507.0165	0	0	0

Table 3.5 – L'énergie du GMEC et la différence avec les autres protocoles. Tous les résidus inactifs ()

#### Une position active

Position	GMEC	MC4-
14	-584.4693	-0.0405
39	-584.7378	-0.0111
55	-584.0477	-0.0012
60	-583.7763	-0.0140
66	-592.3835	-0.0347
70	-583.8950	-0.0348
71	-588.5916	-0.0247
76	-583.3815	-0.0248
79	-582.8485	-0.0406
86	-584.1412	-0.0248
101	-583.8406	-0.0248
105	-583.0197	-0.0248
107	-582.2241	-0.0248

Table 3.6 – Liste des échecs pour 1A81

Cinq positions actives

Dix positions actives

Dix positions actives, mutations

Vingt et trente positions actives

### **3.3.3 Etude au voisinage de GMECs**

Position	GMEC	MC4-
2	-553.3134	-0.0040
3	-553.5532	-0.0121
5	-553.0932	-0.0179
6	-553.5532	-0.0121
8	-556.1917	-0.0148
10	-551.4990	-0.0149
11	-551.8859	-0.0149
12	-550.8152	-0.0148
13	-553.4829	-0.0451
14	-553.5532	-0.0121
15	-553.5532	-0.0121
17	-553.5532	-0.0121
18	-553.0880	-0.0121
19	-553.5532	-0.0270
20	-553.0003	-0.0121
21	-553.5532	-0.0121
22	-553.1769	-0.0121
29	-553.5532	-0.0121
34	-553.5532	-0.0270
36	-555.3358	-0.0317
37	-553.5532	-0.0121
41	-553.5076	-0.0121
46	-552.9056	-0.0149
49	-553.5532	-0.0121
51	-553.5532	-0.0179
55	-551.8384	-0.0121
56	-553.5532	-0.0121
57	-561.0695	-0.0121
58	-553.5532	-0.0121
62	-553.5532	-0.0121
65	-553.5532	-0.0121
66	-551.2026	-0.0179
68	-552.6182	-0.0148
70	-553.5532	-0.0121
72	-552.2724	-0.0121
73	-553.5532	-0.0121
75	-553.5532	-0.0179
77	-553.0234	-0.0466
80	-553.5532	-0.0121
81	-553.5532	-0.0121
82	-548.0641	-0.0121
83	-553.5532	-0.0121
85	-550.1884	-0.0122
86	-552.7375	-0.0148
87	-550.6139	-0.0121
90	-552.8601	-0.0009
91	-553.5532	-0.0121
92	-553.5532	-0.0121
93	-553.2772	-0.0148
94	-553.3207	-0.0251

Position	GMEC	MC4-
17	-316.1693	-0.0109

Table 3.8 – Liste des échecs pour 1CKA

Position	GMEC	MC4
58	-561.9469	-0.0138

Table 3.9 – Liste des échecs pour 1M61

Position	GMEC	MC4-
1	-591.2115	-0.1380
2	-591.2115	-0.1250
3	-591.2115	-0.1250
4	-590.7216	-0.0319
5	-590.5458	-0.1071
6	-591.2115	-0.1521
7	-590.7923	-0.1429
8	-591.2115	-0.1250
9	-591.2115	-0.1728
10	-591.2115	-0.2572
11	-589.9443	-0.2489
12	-591.1022	-0.1137
13	-589.9867	-0.0535
14	-591.2115	-0.1250
15	-589.4899	-0.0436
16	-591.2115	-0.1521
17	-590.4460	-0.0557
18	-589.0053	-0.1366
19	-590.7580	-0.0348
20	-591.2115	-0.1250
21	-591.2115	-0.1600
22	-591.2115	-0.1250
23	-590.5249	-0.1530
24	-590.7262	-0.0630
25	-591.2115	-0.1250
26	-591.2115	-0.1250
27	-590.8058	-0.1194
28	-591.2115	-0.1250
29	-591.2115	-0.1571
30	-590.5207	-0.0221
31	-590.5507	-0.0530
32	-591.2115	-0.1571
33	-591.2115	-0.1234
34	-590.7486	-0.1258
35	-591.2115	-0.0378
36	-589.1510	-0.0974
37	-591.0133	-0.0941
38	-589.2126	-0.2743
39	-589.0387	-0.1890
40	-590.8793	-0.0883
41	-589.4209	-0.0409
42	-591.2115	-0.1250
43	-587.9420	-0.1315
44	-589.8470	-0.0595
45	-591.2115	-0.1712
46	-588.8346	-0.2668
47	-589.9117	-0.2773
48	-588.6520	-0.2625
49	-591.2115	-0.2120
50	-590.6561	-0.0807

Position	GMEC	MC4-
4	-453.4484	-0.0155
20	-452.6464	-0.0114
32	-454.9340	-0.0092
68	-454.4856	-0.0060
73	-454.7809	-0.0155
77	-454.1344	-0.0155
79	-453.4729	-0.0155

Table 3.11 – Liste des échecs pour 1R6J

Position	GMEC	MC4-
1	-505.2910	-0.0132
3	-506.7960	-0.0254
4	-505.5800	-0.0023
5	-506.8732	-0.0948
49	-505.5183	-0.0135
59	-507.0165	-0.0100
85	-506.6217	-0.0101
88	-505.2286	-0.0097
95	-506.3195	-0.0131

Table 3.12 – Liste des échecs pour 2BYG

### Chapitre 3. Les comparaisons

---

Protéine	GMEC	H	MC4	RE3
1A81 1	-579.3989	0	0	
1A81 2	-575.2254	0	0	
1A81 3	-582.7452	0	0	
1A81 4	-569.9383	0	-5.3443	0
1A81 5	-591.8143	0	0	
1ABO 1	-315.4497	0	0	
1ABO 2	-316.6637	0	0	
1ABO 3	-307.4824	0	0	
1ABO 4	-313.7710	0	0	
1ABO 5	-313.5695	0	0	
1BM2 1	-548.2341	0	0	
1BM2 2	-554.8135	0	0	
1BM2 3	-557.8629	0	0	
1BM2 4	-544.9791	0	0	
1BM2 5	-550.2956	0	-0.0121	
1CKA 1	-315.0859	0	0	
1CKA 2	-309.7692	0	0	
1CKA 3	-317.3820	0	0	
1CKA 4	-314.8550	0	0	
1CKA 5	-312.0405	-0.0001	-0.0001	
1G9O 1	-469.9540	0	0	
1G9O 2	-476.4094	0	0	
1G9O 3	-479.7190	0	0	
1G9O 4	-478.9513	0	0	
1G9O 5	-480.7260	0	0	
1M61 1	-557.6647	0	0	
1M61 2	-546.9587	0	0	
1M61 3	-553.0731	0	0	
1M61 4	-555.0885	0	0	
1M61 5	-554.6356	0	0	
1O4C 1	-584.4267	0	-0.0655	
1O4C 2	-584.8989	0	-0.1437	
1O4C 3	-588.4971	0	-0.1164	
1O4C 4	-587.7129	0	-0.1400	
1O4C 5	-587.6514	0	-0.1168	
1R6J 1	-444.5018	0	0	
1R6J 2	-449.3043	0	-0.9421	0
1R6J 3	-453.1139	0	0	
1R6J 4	-453.1139	0	0	
1R6J 5	-454.9340	0	0	
2BYG 1	-500.7946	0	-0.0150	
2BYG 2	-506.2319	0	0	
2BYG 3	-506.8744	0	-0.0131	
2BYG 4	-504.5135	0	0	
2BYG 5	-506.0052	0	0	

### 3.3. Les tests

Protéine	GMEC	toulbar2	H	MC	RE
1A81 1	yes	-583.9354	0.	0.	
1A81 2	yes	-581.7802	0.	0.	
1A81 3	yes	-587.4392	-0.0001	-0.1595	
1A81 4	yes	-589.1322	0.	-0.0317	
1A81 5	yes	-578.2558	0.	-0.0563	
1ABO 1	yes	-309.1670	-0.0675	-0.9054	
1ABO 2	yes	-308.8387	0.	0.	
1ABO 3	yes	-303.8520	0.	0.	
1ABO 4	yes	-310.0087	0.	-0.0128	
1ABO 5	yes	-301.6727	0.	0.	
1BM2 1	yes	-549.8638	0.	-0.0950.	
1BM2 2	yes	-541.5944	0.	0.	
1BM2 3	yes	-543.7434	0.	0.	
1BM2 4	yes	-549.0453	0.	0.	
1BM2 5	yes	-544.1447	0.	-0.1082	
1CKA 1	yes	-305.8477	0.	0.	
1CKA 2	yes	-309.9886	0.	0.	
1CKA 3	yes	-304.6618	0.	0.	
1CKA 4	yes	-302.4894	0.	0.	
1CKA 5	yes	-299.2329	-0.2859	-3.2525	0.
1G9O 1	yes	-466.6764	0.	0.	
1G9O 2	yes	-478.8797	0.	0.	
1G9O 3	yes	-477.2503	-0.1366	0.	
1G9O 4	yes	-470.6458	0.	0.	
1G9O 5	yes	-464.8659	0.	-3.9599	0.
1M61 1	yes	-550.0699	0.	-0.0776	
1M61 2	yes	-538.6026	-3.5105	-4.5062	0.3215
1M61 3	yes	-552.2673	0.	0.	
1M61 4	yes	-550.0553	0.	0.	
1M61 5	yes	-553.6559	0.	-0.0432	
1O4C 1	yes	-587.4665	0.	-0.1121	
1O4C 2	yes	-585.8545	0.	-0.1046	
1O4C 3	yes	-580.3505	0.	-0.1519	
1O4C 4	yes	-587.1548	0.	-0.1545	
1O4C 5	yes	-590.2650	0.	-0.1753	
1R6J 1	yes	-448.8351	0.	-2.4022	-2.3986
1R6J 2	yes	-448.4631	0.	-1.0398	
1R6J 3	yes	-450.3950	0.	-0.0106	
1R6J 4	yes	-451.7211	0.	0.	
1R6J 5	yes	-450.9943	0.	-0.0162	
2BYG 1	no	-5.7485	-505.6397	-0.0337	
2BYG 2	yes	-504.7389	0.	0.	
2BYG 3	yes	-504.3048	0.	-0.0833	
2BYG 4	yes	-504.3466	0.	-0.2149	
2BYG 5	yes	-491.6095	0.	0.	

Table 3.14 – Résultats 10 positions actives

### **Chapitre 3. Les comparaisons**

---

Protéine	H mut nb	MC mut nb
1A81 1	0	0
1A81 2	0	0
1A81 3	0	2
1A81 4	0	0
1A81 5	0	0
1ABO 1	0	4
1ABO 2	0	0
1ABO 3	0	1
1ABO 4	2	2
1ABO 5	0	0
1BM2 1	0	2
1BM2 2	0	0
1BM2 3	0	0
1BM2 4	0	1
1BM2 5	0	2
1CKA 1	0	0
1CKA 2	0	1
1CKA 3	0	0
1CKA 4	0	0
1CKA 5	5	3
1G9O 1	0	0
1G9O 2	0	0
1G9O 3	0	0
1G9O 4	0	0
1G9O 5	0	3
1M61 1	0	2
1M61 2	3	7
1M61 3	0	0
1M61 4	0	0
1M61 5	0	0
1O4C 1	0	0
1O4C 2	0	0
1O4C 3	0	0
1O4C 4	0	0
1O4C 5	0	3
1R6J 1	0	3
1R6J 2	0	2
1R6J 3	0	0
1R6J 4	0	0
1R6J 5	0	0
2BYG 1	no	no
2BYG 2	0	0
2BYG 3	0	1
2BYG 4	1	3
2BYG 5	0	0

### 3.3. Les tests

---

Protéine	GMEC	toulbar2	H	MC	RE
1A81 1	yes	-566.9106	0.	-0.3275	-0.3851
1A81 2	yes	-564.6618	-0.1705	-2.4355	-1.0069
1A81 3	yes	-572.7774	0.	-0.4640	-0.6186
1A81 4	yes	-572.9780	-0.3878	-0.5748	-0.6991
1A81 5	yes	-572.7410	-0.0068	-0.5088	-0.1541
1ABO 1	yes	-299.6592	-0.1205	-1.1159	-0.2153
1ABO 2	no	-13.8563	-298.3854	0.	0.
1ABO 3	no	-1.2190	-298.3854	0.	0.
1ABO 4	no	-1.9940	-297.8545	-0.0076	0.
1ABO 5	no	-3.5418	-297.8009	-0.9483	-0.9483
1BM2 1	yes	-526.0936	0.	-0.0619	-0.1584
1BM2 2	no	-7.5304	-525.3588	-0.0725	-0.0143
1BM2 3	yes	-534.3861	-0.0229	-0.4762	-0.2897
1BM2 4	no	-0.1186	-526.8307	-2.5883	-0.0789
1BM2 5	yes	-535.3334	-0.2396	-0.3746	-0.3746
1CKA 1	yes	-295.8571	0.	0.	0.
1CKA 2	yes	-295.3571	0.	0.	0.
1CKA 3	yes	-293.8687	0.	0.	0.
1CKA 4	no	-4.3122	-293.8687	0.	0.
1CKA 5	no	-4.2849	-293.4203	0.	0.
1G9O 1	no	-2.0574	-451.4604	-1.2525	-1.2525
1G9O 2	no	-3.2106	-453.2474	-0.2177	-0.1915
1G9O 3	no	-1.9008	-453.7856	-0.4417	-0.1019
1G9O 4	no	-0.5030	-456.7331	-0.3855	-0.1455
1G9O 5	no	-0.4298	-456.9981	-0.1495	-0.5114
1M61 1	yes	-528.0700	0.	0.	0.
1M61 2	yes	-528.7653	0.	0.	0.
1M61 3	yes	-530.0684	0.	0.	0.
1M61 4	yes	-534.5248	0.	0.	0.
1M61 5	yes	-548.0096	0.	-0.2521	-0.1345
1O4C 1	no	-574.0047	-0.3465	-0.0690	-0.0587
1O4C 2	no	-6.4214	-574.8584	-0.1963	-0.3175
1O4C 3	yes	-573.6314	0.	-0.3461	-0.0997
1O4C 4	yes	-575.8667	0.	-0.3640	-0.1382
1O4C 5	no	-573.3479	0.	-0.1131	-0.2206
1R6J 1	yes	-440.7417	0.	-0.2604	-0.2002
1R6J 2	yes	-437.2537	0.	-0.0071	-0.0183
1R6J 3	yes	-439.4335	0.	-0.0537	-0.0732
1R6J 4	yes	-439.5988	0.	-0.0639	-0.0601
1R6J 5	yes	-438.0222	0.	-0.0735	-0.0244
2BYG 1	yes	-496.2991	0.	-3.1878	-0.0257
2BYG 2	yes	-494.8723	0.	-0.0524	-0.0831
2BYG 3	yes	-494.4390	0.	-1.3564	-0.0826
2BYG 4	yes	-495.9213	0.	-0.1968	-0.6022
2BYG 5	no	-1.8604	-497.5123	-0.0933	-0.0386

### Chapitre 3. Les comparaisons

---

Protéine	GMEC	toulbar2	H	MC	RE
1A81 1	no	-1.2074	-562.9572	-0.6353	
1A81 2	no	-2.5520	-570.2620	-0.0578	
1A81 3	no	-43.5263	-562.9572	-2.4996	-1.2025
1A81 4	no	-5.1300	-559.6145	-0.0305	
1A81 5	no	-3.2417	-553.1077	-1.9586	-0.5791
1ABO 1	no	-44.5504	-296.5680	0.	
1ABO 2	no	-12.7303	-294.8500	0.	
1ABO 3	no	-9.3870	-295.2689	-0.2630	
1ABO 4	no	-10.7691	-296.5680	0.	
1ABO 5	no	-4.3907	-296.5680	0.	
1BM2 1	no	-22.5876	-556.1168	-1.7290	-1.6013
1BM2 2	no	-22.1386	-556.7539	-1.9856	-1.5876
1BM2 3	no	-22.5410	-556.1168	-1.9990	-1.1541
1BM2 4	no	-15.2639	-556.8507	-2.2127	-2.3854
1BM2 5	no	-15.9890	-556.3240	-2.83542	-1.1937
1CKA 1	no	-6.2700	-293.4203	0.	
1CKA 2	no	-2.0995	-293.4203	0.	
1CKA 3	no	-47.0217	-291.9243	0.	
1CKA 4	no	-44.0830	-293.4203	0.	
1CKA 5	no	-8.8608	-293.2709	0.	
1G9O 1	no	-2.0816	-449.0890	-1.5942	0.
1G9O 2	no	-0.3270	-452.6676	-0.3126	
1G9O 3	no	-17.7150	-450.0341	-1.5667	-1.5667
1G9O 4	no	-2.9758	-453.9682	-1.4284	-1.6202
1G9O 5	no	-445.8910	-1.6890	-7.6985	-2.3857
1M61 1	no	-14.4935	-0.0097	-523.9321	0.
1M61 2	no	-5.0899	-531.3717	-1.8749	-0.0083
1M61 3	no	-3.5795	-527.2659	-0.0154	
1M61 4	no	-16.1511	-530.2666	0.	
1M61 5	no	-23.0927	-522.5696	0.	
1O4C 1	no	-14.9064	-571.4882	-0.3435	
1O4C 2	no	-58.1558	-570.1458	-0.0795	
1O4C 3	no	-9.9221	-569.9777	-0.1789	
1O4C 4	no	-5.7790	-568.9839	-0.0423	
1O4C 5	no	-9.9221	-569.9777	-0.1789	
1R6J 1	yes	-435.4258	0.0	-0.0246	
1R6J 2	no	-14.9800	-435.0087	-0.0957	
1R6J 3	no	-439.8187	-439.8187	-0.0440	
1R6J 4	no	-435.0087	-0.0	-0.0957	
1R6J 5	no	-435.0970	-0.7036	-1.8823	-0.0781
2BYG 1	no	-17.9752	-492.6879	-0.1592	
2BYG 2	no	-0.3832	-492.3568	-0.1502	
2BYG 3	no	-0.1442	-492.6879	-0.1593	
2BYG 4	no	-492.6821	-0.0958	-0.0050	
2BYG 5	no	-0.5003	-492.1595	-0.6876	

### 3.3. Les tests

---

Protein	GMEC	H	MC	RE
1CKA 3	-304.6618	0	0	
1CKA 4	-302.4894	0	0	
1CKA 5	-299.2329	-0.2859	-3.2525	0
1G9O 3	-477.2503	-0.1366	0	
1G9O 4	-470.6458	0	0	
1G9O 5	-464.8659	0	-3.9599	0
1M61 1	-550.0699	0	-0.0776	
1M61 2	-538.6026	-3.5105	-4.5062	0.3215
1M61 5	-553.6559	0	-0.0432	

Protein	seq-rot nb	gmec+1	H rank	MC rank	seq nb	gmec+1	H mut nb	MC mut nb
1CKA 3	67669		1	1	227		0	0
1CKA 4	4649		1	1	498		0	0
1CKA 5	1388		78	?	77		0	2
1G9O 3	354559		23	1	63		1	0
1G9O 4	22639		1	1	381		0	0
1G9O 5	8658395		1	?	11		0	3
1M61 1	11199153		?	?	21		3	7
1M61 2	11199153		1	1	88		0	0
1M61 5	16417604		1	1	83		0	0

### Chapitre 3. Les comparaisons

---

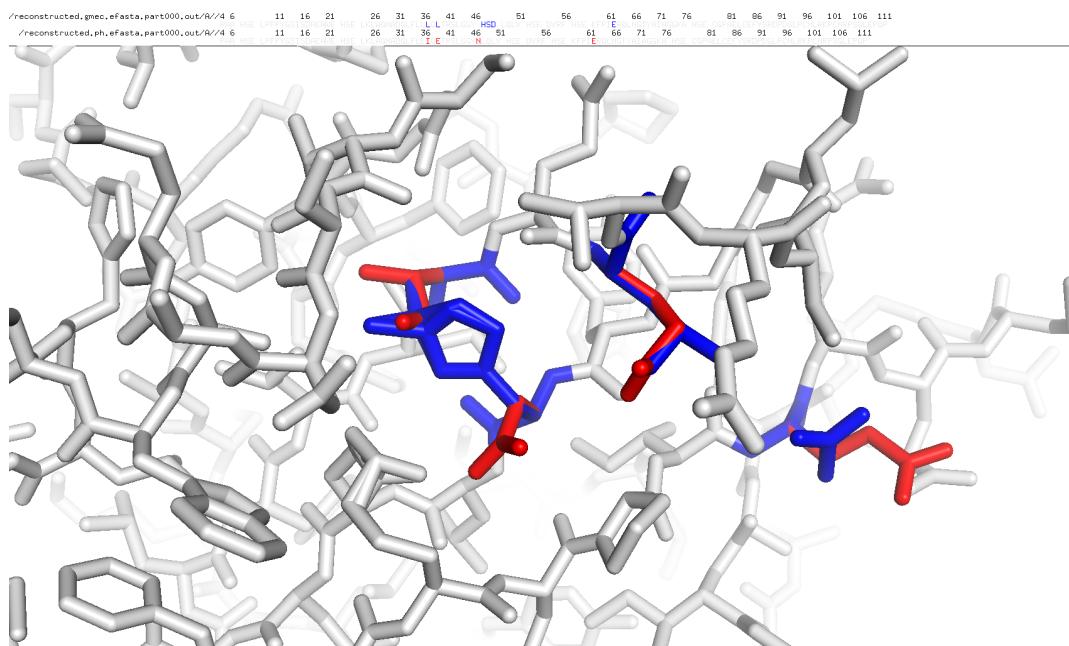


Figure 3.6 – test : 1M61 2, GMEC vs H

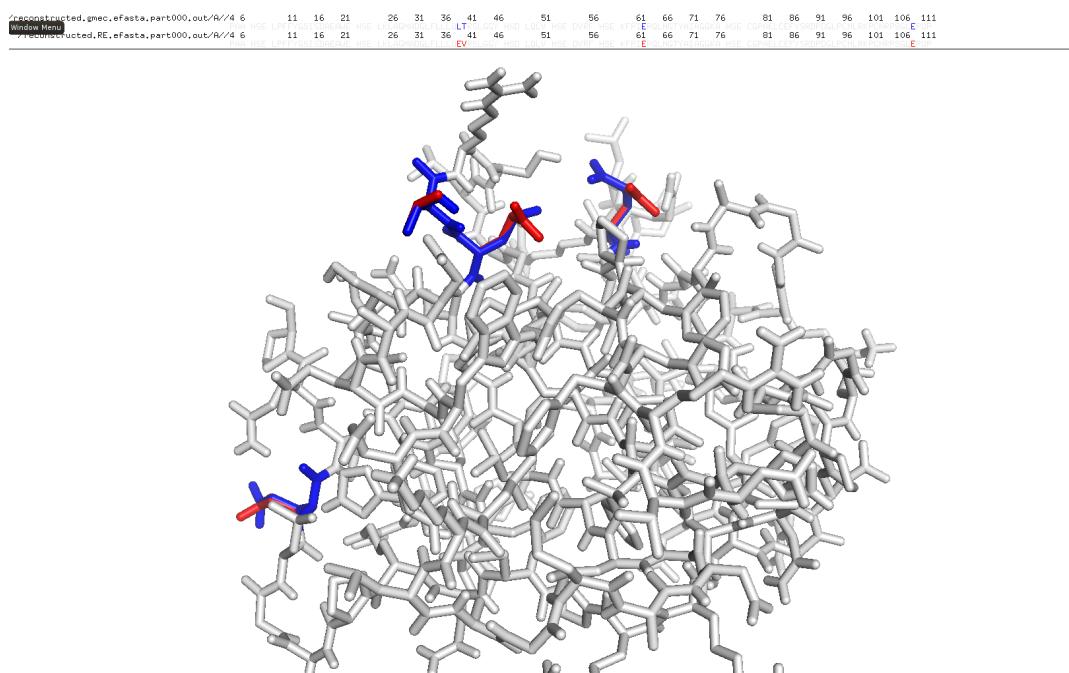


Figure 3.7 – test : 1M61 2, GMEC vs RE

### 3.3. Les tests

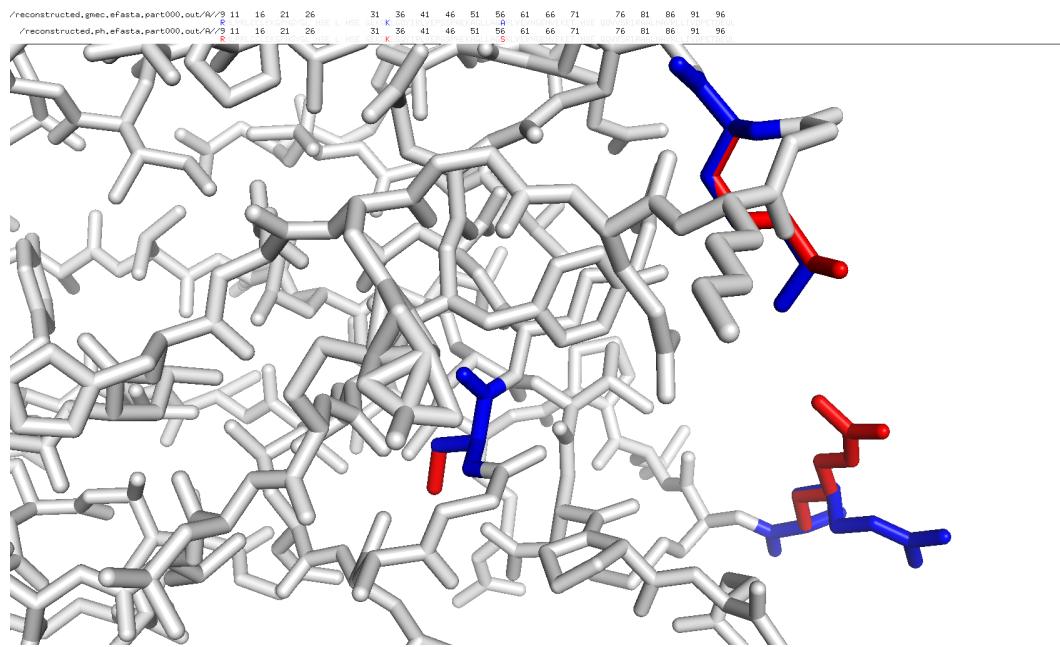


Figure 3.8 – test : 1G9O 3, GMEC vs H

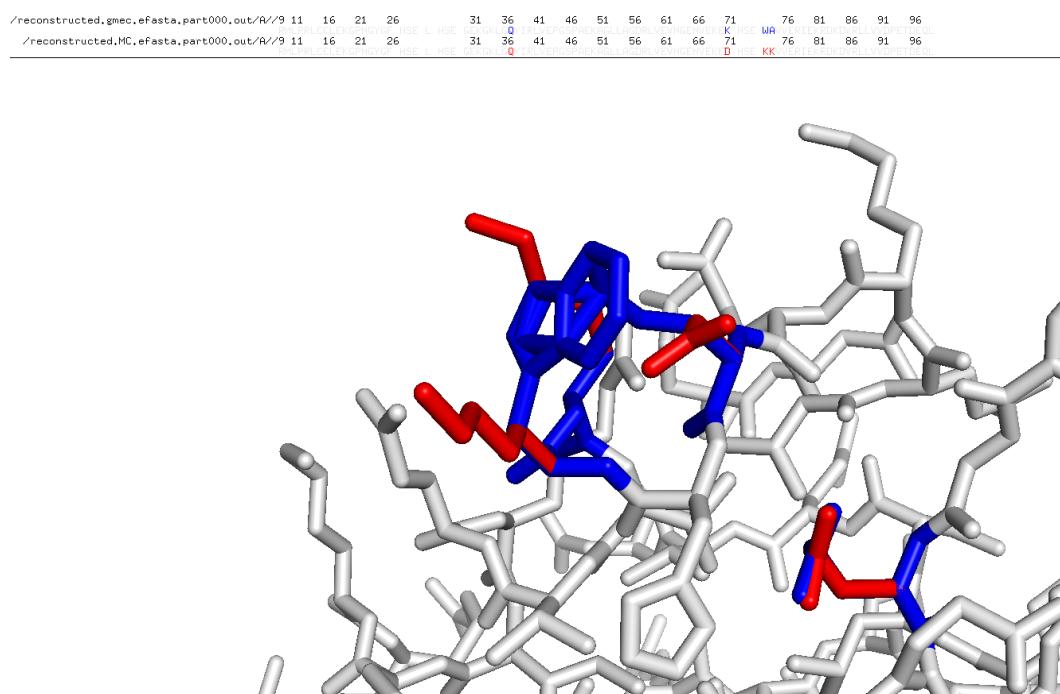


Figure 3.9 – test : 1G9O 5, GMEC vs MC

### Chapitre 3. Les comparaisons

---

```
/reconstructed.gmec.eFasta.part000.out/A//134 141 146 151 156 161 166 171 176 181 186  
R D K E  
/reconstructed.ph.eFasta.part000.out/A//134 141 146 151 156 161 166 171 176 181 186  
R D K E
```

---

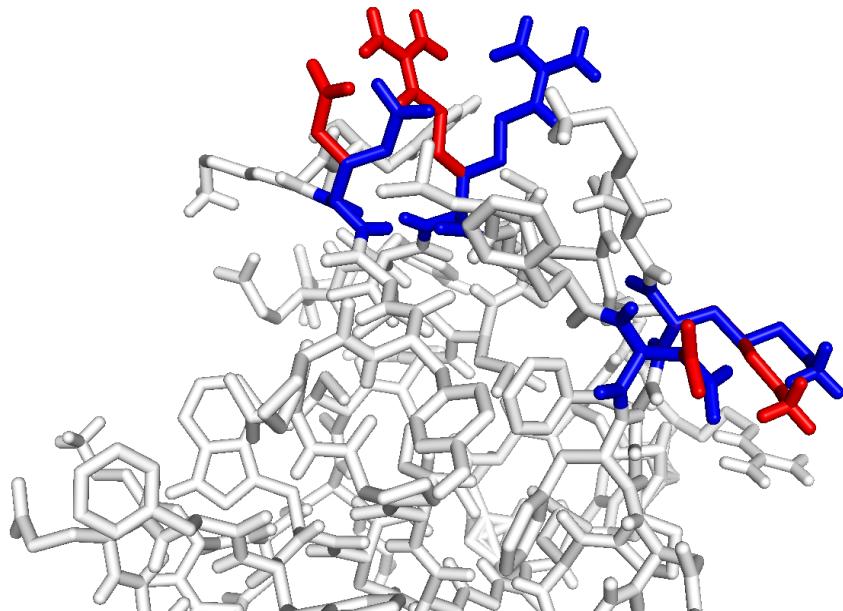


Figure 3.10 – test : 1CKA 5, GMEC vs H

```
/reconstructed.mc4.eFasta.part000.out/A//134 141 146 151 156 161 166 171 176 181 186  
/reconstructed.gmec.eFasta.part000.out/A//134 141 146 151 156 161 166 171 176 181 186  
R D K E  
R D G F
```

---

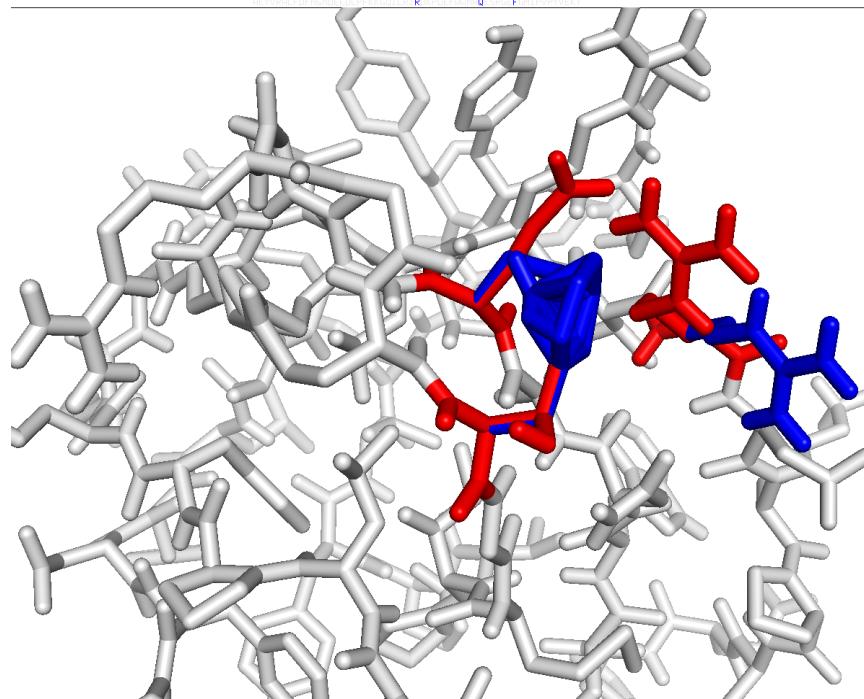


Figure 3.11 – test : 1CKA 5, GMEC vs MC

### 3.3. Les tests

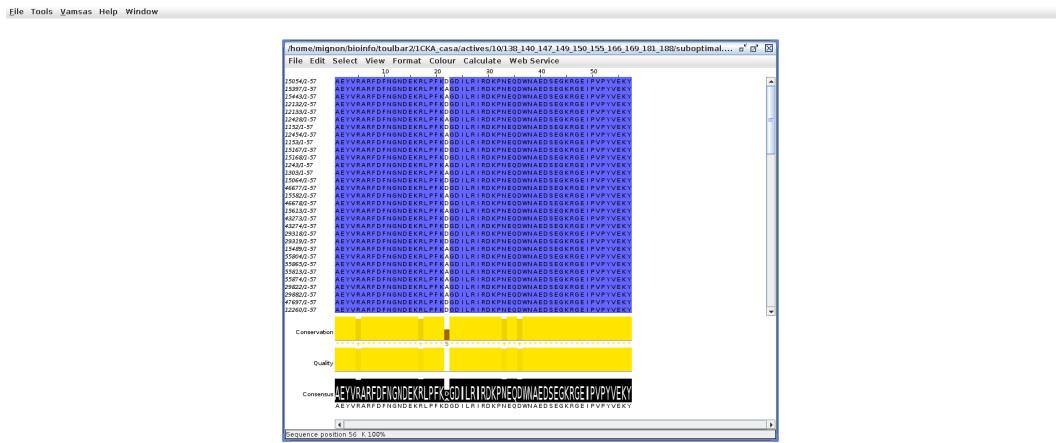


Figure 3.12 – Alignement du voisinnage : 1CKA\_5

#### 3.3.4 Résultats Superfamily

Protein	Match/seq size	Superfamily	Evalue	superfamily success	Family	Evalue	family success
1A81	no						
1ABO	51/58		4.4e-4	100%		2.8e-3	100%
1BM2	78/98		4.2e-5	100%		2.6e-3	100%
1CKA	40/57		1.1e-5	100%		3.4e-3	100%
1G9O	79/91		7.0e-7	100%		2.5e-3	100%
1M61	97/109		7.2e-7	100%		2.6e-4	100%
1O4C	95/104		2.1e-4	100%		4.5e-3	100%
1R6J	74/82		9.8e-6	100%		4.6e-3	100%
2BYG	59/97		1.4e-5	100%		7.1e-3	100%

### 3.3.5 Résultats Heuristic (protocoles longs)

Proteins	GMEC	H	H+	H++
1ABO 1	-309.1670	-0.0675	-0.0675	0
1CKA 5	-299.2329	-0.2859	-0.0640	0
1G9O 3	-477.2503	-0.1366	0	0
1M61 2	-538.6026	-3.5105	-2.1673	-0.0188

Table 3.16 – Résultats pour 3 fois (resp 9 fois) plus de cycles heuristiques protocole H+ (resp H++)

### 3.3.6 densité en séquences

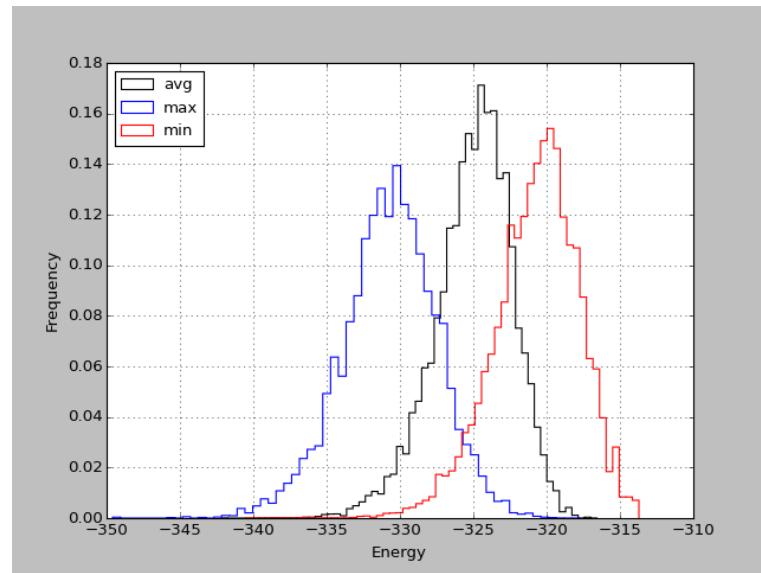


Figure 3.13 – .

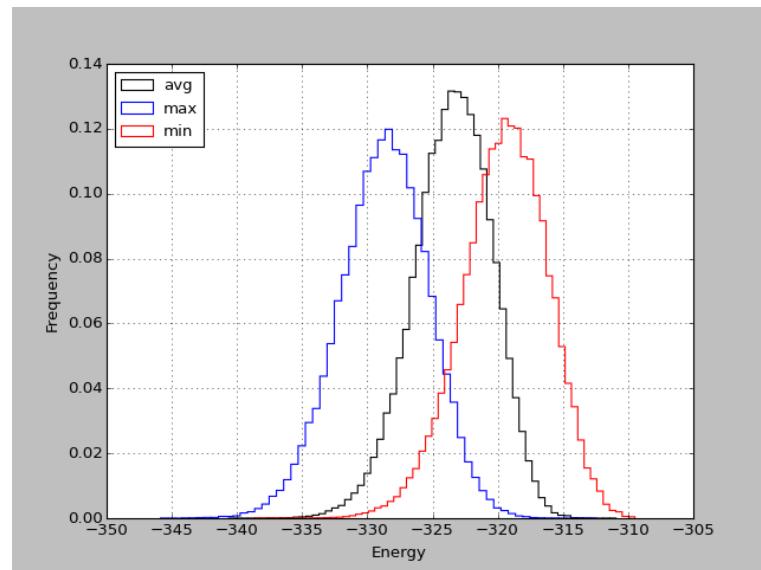


Figure 3.14 – .



# Conclusion

XXX



# **Titre d'une annexe**

XXX



# Bibliographie

Name1a A., Name1b B. & Name1c C. (1980). Title1. *Journal1* **10**, 100–110.

cité page 3

Name2a A., Name2b B. & Name2c C. (1990). Title2. *Journal2* **20**, 200–210.

cité page 3

Name3a A., Name3b B. & Name3c C. (2000). Title3. *Journal3* **30**, 300–310.

cité page 3



## Résum

**Titre de la thèse**

XXX

**Mots-clés :** motclé1, motclé2, motclé3

## Abstract

**Thesis title**

XXX

**Keywords:** keyword1, keyword2, keyword3