

1CKA, structure repliée contre structure dépliée

5 mars 2015

Trois heuristiques ont été utilisées :

L'heuristique "somme et différence" où l'optimisation est faite avec un test sur la somme des énergies des deux structures et un test sur la différence structure repliée moins structure dépliée.

L'heuristique "seuil et différence" contient un seuil sur la somme (à la valeur de -110) et un test sur la différence structure repliée moins structure dépliée.

L'heuristique "somme" contient seulement la somme des énergies des deux structures.

Pour chaque heuristique, 100000 séquences de rotamères ont été générées par proteus version 28.3. Les énergies de références utilisées : GBE4SA. pour la structure dépliée et "optref" pour la structure repliée.

1 L'heuristique "somme et différence"

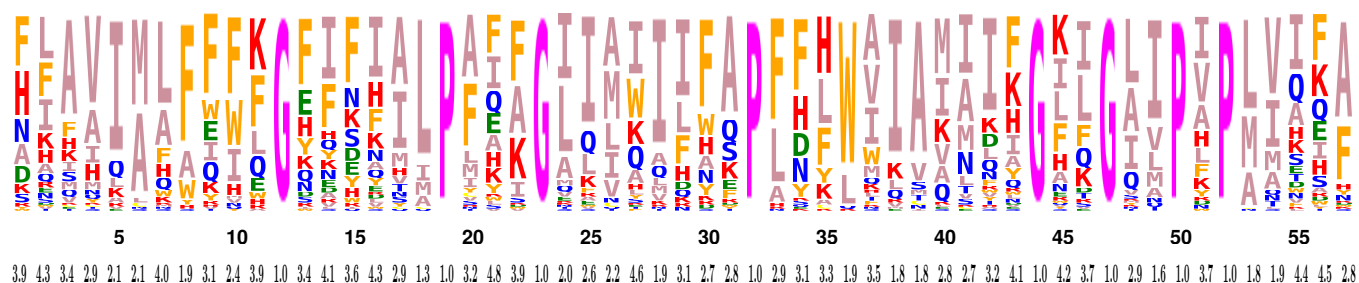


FIGURE 1 – Séquence logo et exponentiel de l'entropie par position, pour les 10000 premières séquences après un tri sur énergie de la somme.

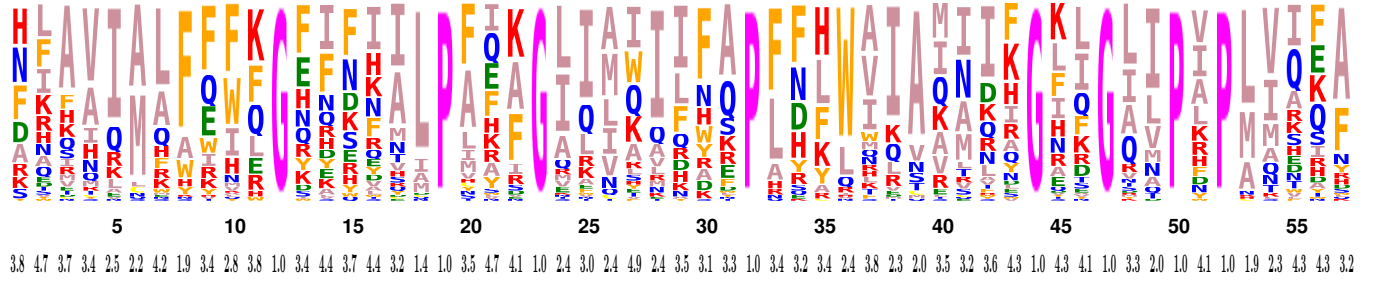


FIGURE 2 – Séquence logo et exponentiel de l'entropie par position, pour les 10000 premières séquences après un tri sur énergie de la différence.

2 L'heuristique "seuil et différence"

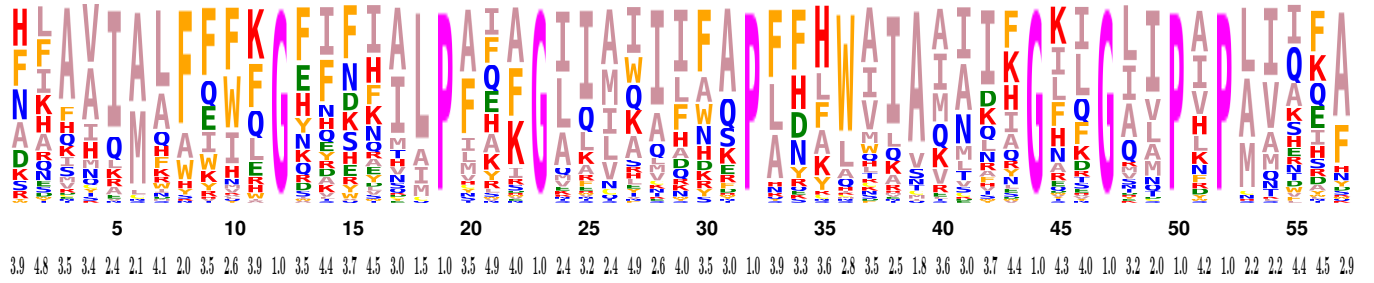


FIGURE 3 – Séquence logo et exponentiel de l'entropie par position, pour les 10000 premières séquences après un tri sur énergie de la somme.

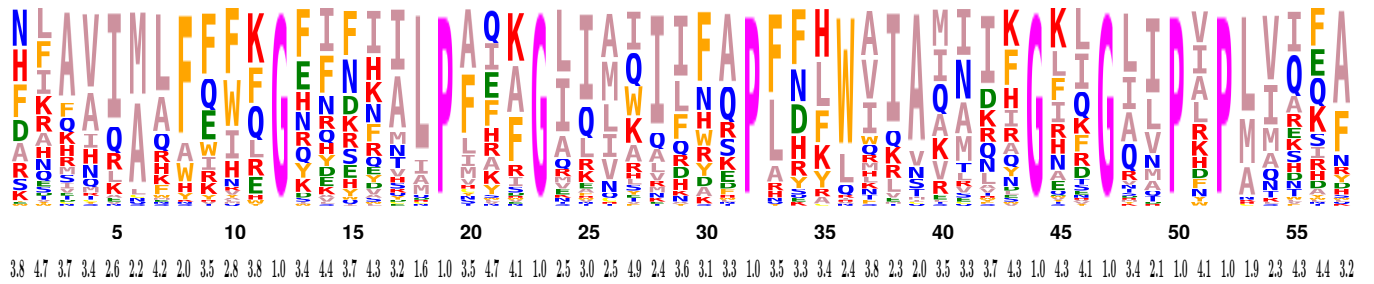


FIGURE 4 – Séquence logo et exponentiel de l'entropie par position, pour les 10000 premières séquences après un tri sur énergie de la différence.

3 L'heuristique "somme "

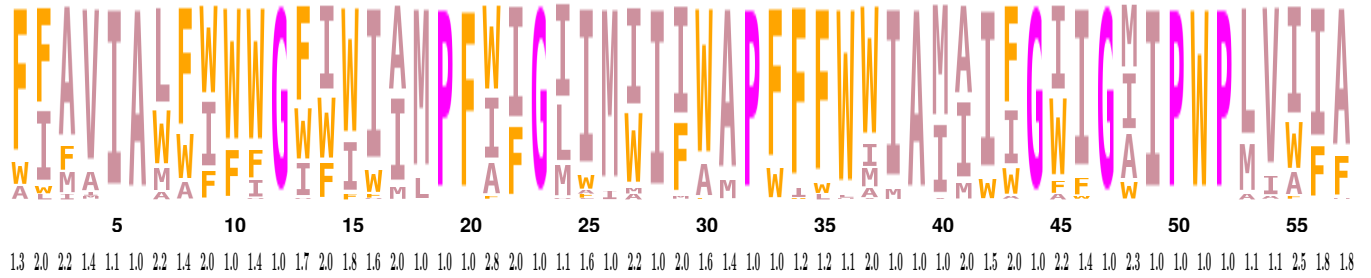


FIGURE 5 – Séquence logo et exponentiel de l'entropie par position, pour les 10000 premières séquences après un tri sur énergie de la somme.

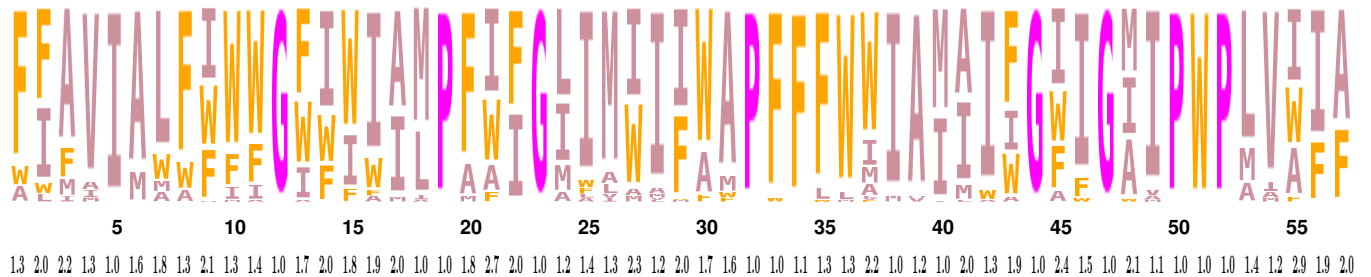


FIGURE 6 – Séquence logo et exponentiel de l'entropie par position, pour les 10000 premières séquences après un tri sur énergie de la différence.

4 Moyennes et écarts-types des énergies

Pour chaque heuristique, les séquences de rotamères générées sont triées de deux façons différentes :

- un tri sur la somme des énergies des deux groupes pliés et déplié.
- un tri sur la différence d'énergie des deux groupes.

		Somme et différence		Seuil et différence		Somme	
Energies		tri somme	tri différence	tri somme	tri différence	tri somme	tri différence
somme	max	70	-77	-105	-117	170	170
	moyenne	-67	-165	-117	-204	161	157
	écart type	28	28	9	36	2	5
différence	max	617	670	647	732	328	328
	moyenne	533	628	570	665	299	305
	écart type	31	21	25	29	9	5

TABLE 1 – Moyennes et écarts-types calculés pour les 20000 premières séquences après tri.