

Supplementary Material: Comparing three stochastic search algorithms for computational protein design: Monte Carlo, Replica Exchange Monte Carlo, and a multistart, steepest-descent heuristic

David Mignon and Thomas Simonson*

Laboratoire de Biochimie, Dept. of Biology, Ecole Polytechnique, Palaiseau, France.

Below, we list the amino acid positions allowed to mutate in each test calculation.

Five-position tests			
test	mutated positions	test	mutated positions
1A81 1	10 13 16 84 86	1M61 1	12 20 23 24 27
1A81 2	20 21 24 27 116	1M61 2	17 20 24 37 49
1A81 3	35 38 56 105 107	1M61 3	27 33 51 100 102
1A81 4	44 47 52 65 67	1M61 4	5 8 10 11 36
1A81 5	82 84 86 87 90	1M61 5	59 71 84 87 94
1ABO 1	64 66 90 93 100	1O4C 1	20 21 32 34 46
1ABO 2	72 74 80 104 111	1O4C 2	2 71 79 81 82
1ABO 3	79 82 102 111 115	1O4C 3	33 45 63 71 73
1ABO 4	83 86 104 105 106	1O4C 4	43 45 63 71 85
1ABO 5	93 100 102 113 116	1O4C 5	8 33 82 83 86
1BM2 1	101 106 140 141 146	1R6J 1	194 237 239 270 272
1BM2 2	120 128 131 132 135	1R6J 2	199 201 211 218 232
1BM2 3	58 61 127 128 129	1R6J 3	213 218 227 232 238
1BM2 4	74 75 98 100 105	1R6J 4	221 227 232 267 269
1BM2 5	85 87 95 110 128	1R6J 5	241 254 258 267 269
1CKA 1	136 138 158 175 190	2BYG 1	189 191 221 244 246
1CKA 2	149 166 169 171 181	2BYG 2	205 224 239 245 248
1CKA 3	151 153 157 159 172	2BYG 3	232 233 265 272 274
1CKA 4	164 170 172 184 187	2BYG 4	238 240 243 276 278
1CKA 5	172 174 182 186 187	2BYG 5	253 261 264 265 274
1G9O 1	10 13 54 57 92		
1G9O 2	15 39 42 54 57		
1G9O 3	24 26 28 39 42		
1G9O 4	48 53 57 59 88		
1G9O 5	75 78 79 86 88		

Ten-position tests

test	mutated positions	test	mutated positions
1A81 1	13 15 39 41 53 86 89 90 93 103	1M61 1	10 12 20 23 24 27 35 49 102 104
1A81 2	39 41 53 55 64 66 76 89 92 103	1M61 2	17 20 21 24 37 39 40 47 49 58
1A81 3	51 53 64 66 68 74 76 82 88 92	1M61 3	34 36 46 48 59 61 71 83 84 87
1A81 4	76 82 87 88 90 91 92 95 97 99	1M61 4	5 6 11 36 46 48 61 69 83 84
1A81 5	9 10 11 16 41 51 53 66 88 89	1M61 5	59 61 70 71 75 77 83 86 87 92
1ABO 1	64 72 74 79 89 91 101 103 108 111	1O4C 1	31 33 45 47 61 63 73 86 89 100
1ABO 2	66 68 80 82 88 90 100 102 104 111	1O4C 2	50 51 52 53 63 72 73 77 85 89
1ABO 3	69 70 72 74 80 81 106 113 114 115	1O4C 3	61 62 63 71 72 73 79 85 88 89
1ABO 4	71 78 83 84 94 99 101 104 105 106	1O4C 4	73 74 75 76 77 89 92 94 96 101
1ABO 5	72 79 82 94 99 102 104 106 111 115	1O4C 5	90 91 93 96 98 99 101 102 103 104
1BM2 1	119 120 121 122 123 125 131 134 135 140	1R6J 1	193 194 195 197 199 218 232 236 267 269
1BM2 2	125 126 127 129 130 133 134 136 137 147	1R6J 2	199 209 211 213 218 227 232 238 265 267
1BM2 3	83 99 101 106 108 135 140 141 146 148	1R6J 3	201 204 205 209 211 218 241 258 265 267
1BM2 4	85 95 97 110 118 120 125 128 131 132	1R6J 4	209 211 213 218 227 238 241 258 265 267
1BM2 5	99 101 106 139 140 141 142 143 144 146	1R6J 5	238 240 241 242 246 257 258 261 265 267
1CKA 1	134 135 160 161 162 173 174 175 176 179	2BYG 1	194 196 203 205 224 233 239 245 274 276
1CKA 2	137 139 143 151 153 157 159 172 182 186	2BYG 2	203 205 207 224 227 233 239 243 245 276
1CKA 3	138 140 147 149 150 155 166 169 181 188	2BYG 3	206 207 222 245 248 253 256 261 264 265
1CKA 4	140 141 153 154 155 157 174 175 184 186	2BYG 4	221 222 245 248 251 253 256 261 264 265
1CKA 5	151 153 157 166 168 173 174 176 178 179	2BYG 5	247 248 249 250 251 252 259 262 263 275
1G9O 1	10 11 13 14 15 16 53 54 57 92		
1G9O 2	15 17 24 26 39 42 48 51 53 88		
1G9O 3	26 28 39 42 48 53 57 59 88 90		
1G9O 4	34 35 58 60 68 70 74 75 89 91		
1G9O 5	71 73 74 77 80 81 82 83 84 85		

20-position tests

test	mutated positions
1A81 1	9 11 12 13 15 16 17 19 20 25 28 39 40 41 42 43 44 45 114 117
1A81 2	9 11 12 13 15 16 17 19 20 25 28 39 40 41 42 43 44 45 47 117
1A81 3	9 11 12 13 15 16 17 19 19 41 43 48 51 68 74 84 86 109 114 117
1A81 4	12 13 15 16 17 19 20 25 28 39 40 41 42 43 44 45 47 86 114 117
1A81 5	13 15 16 19 41 43 48 51 60 64 68 70 71 74 84 86 87 88 109 114 117
1ABO 1	64 66 67 68 82 86 87 88 89 90 91 101 102 102 103 103 108 111 113 116
1ABO 2	64 65 65 66 67 84 87 88 89 90 91 93 100 101 102 103 108 111 113 116
1ABO 3	65 66 67 87 88 89 90 91 93 94 95 100 101 102 103 106 108 111 113 116
1ABO 4	64 65 66 67 69 87 88 89 90 91 93 100 101 102 103 106 108 111 113 116
1ABO 5	66 67 68 82 86 87 88 89 90 91 93 100 101 102 103 106 108 111 113 116
1BM2 1	55 56 60 61 62 83 84 85 86 87 95 97 99 110 118 125 127 133 150 152
1BM2 2	55 56 60 61 62 83 84 85 86 87 95 97 99 110 118 125 127 128 129 152
1BM2 3	55 56 58 60 61 62 64 67 69 73 83 84 85 86 87 129 132 133 150 152
1BM2 4	55 56 60 61 62 69 83 84 85 86 87 95 97 99 110 129 132 133 150 152
1BM2 5	58 60 60 61 61 62 64 67 69 73 75 83 84 85 86 129 132 133 150 152
1CKA 1	134 135 136 137 138 139 150 151 160 161 162 163 164 170 171 172 173 179 189 190
1CKA 2	134 135 136 137 139 150 151 153 160 161 162 163 164 170 171 172 173 179 189 190
1CKA 3	134 136 137 139 150 151 157 158 160 161 162 163 164 170 171 172 173 179 189 190
1CKA 4	136 137 139 150 151 153 158 159 160 161 162 163 164 170 171 172 173 179 189 190
1CKA 5	137 139 150 151 153 158 160 161 162 163 164 170 171 172 173 174 175 179 189 190
1G9O 1	9 10 11 13 14 15 31 34 38 54 57 58 60 68 90 91 92 94 95 96
1G9O 2	9 11 13 14 15 16 31 34 38 54 57 58 60 68 90 91 92 94 95 96
1G9O 3	9 11 13 14 15 31 34 38 54 55 57 58 60 68 90 91 92 94 95 96
1G9O 4	9 11 13 15 16 17 54 57 58 59 60 61 68 89 90 91 92 94 95 96
1G9O 5	10 11 13 15 16 17 54 57 58 60 61 68 89 90 90 91 92 94 95 96
1M61 1	34 35 36 37 38 39 42 46 47 48 49 50 61 63 69 71 77 78 81 82
1M61 2	35 36 37 38 39 42 46 47 48 49 50 61 63 69 71 77 78 81 82 83
1M61 3	38 39 42 46 47 48 49 50 61 63 69 71 77 78 81 82 83 84 85 87
1M61 4	42 46 47 48 49 50 61 63 69 71 77 78 81 82 83 84 85 87 88 98
1M61 5	5 7 50 61 63 69 71 77 78 81 82 83 84 85 87 88 98 103 104 109
1O4C 1	32 33 34 35 43 45 63 65 71 73 79 80 81 82 83 84 85 86 87 89
1O4C 2	3 4 5 7 8 9 11 17 31 32 33 34 35 43 45 63 65 71 73 79
1O4C 3	1 3 4 5 6 7 8 9 11 17 31 32 33 35 43 45 65 81 82 83
1O4C 4	1 2 3 4 5 6 7 8 9 11 12 13 14 17 19 35 65 81 82 83
1O4C 5	1 3 4 5 6 7 8 9 11 12 17 31 32 33 34 35 65 81 82 83
1R6J 1	193 194 195 197 214 215 217 218 233 235 236 237 239 240 241 242 247 269 270 273
1R6J 2	193 194 197 198 199 217 233 235 236 237 238 239 240 241 242 247 268 270 272 273
1R6J 3	193 195 197 217 233 235 236 239 240 241 242 244 245 247 268 269 270 270 272 273
1R6J 4	193 195 197 217 233 235 236 237 239 241 242 244 245 247 268 269 270 272 273 273
1R6J 5	193 194 197 198 199 233 236 237 239 239 240 241 247 268 268 269 270 270 272 273
2BYG 1	186 187 188 189 190 191 192 215 216 219 244 246 270 271 273 274 278 280 281 282
2BYG 2	186 187 188 189 190 215 216 219 221 223 240 243 270 271 273 274 278 280 281 282
2BYG 3	186 187 188 189 190 215 216 219 221 223 240 243 244 270 271 273 278 280 281 282
2BYG 4	186 187 188 189 190 215 216 219 221 223 240 243 244 270 274 276 278 280 281 282
2BYG 5	187 189 190 191 192 215 216 219 221 223 240 243 244 270 274 276 278 280 281 282

30-position tests

test	mutated positions
1A81 1	9 11 12 13 15 16 17 19 20 25 26 27 28 29 36 38 39 40 41 42 43 48 51 68 74 84 86 109 114 117
1A81 2	9 10 11 12 13 15 16 17 19 20 25 28 39 41 43 48 51 68 74 83 84 86 87 88 90 91 93 109 114 117
1A81 3	9 11 12 13 15 16 17 19 20 25 27 28 36 38 39 40 41 41 42 43 43 48 51 68 74 84 86 109 114 117
1A81 4	9 10 11 12 13 15 16 17 19 20 25 28 36 39 40 41 42 43 43 44 45 48 51 68 74 84 86 109 114 117
1A81 5	9 10 11 12 13 15 16 17 19 20 25 28 39 40 41 42 43 44 45 47 48 51 52 68 74 84 86 109 114 117
1ABO 1	64 65 66 67 68 70 71 72 75 78 79 80 81 82 83 86 87 88 89 90 91 93 100 101 102 103 108 111 113 116
1ABO 2	64 65 66 67 68 72 75 78 80 81 82 83 84 86 87 88 89 90 91 93 94 100 101 102 103 104 108 111 113 116
1ABO 3	64 66 67 68 70 71 72 78 82 86 87 88 89 90 91 93 94 95 96 99 100 101 102 103 104 105 108 111 113 116
1ABO 4	64 65 66 67 70 71 72 68 82 86 87 88 89 90 91 93 94 95 96 99 100 101 102 103 104 105 108 111 113 116
1ABO 5	65 66 67 70 71 72 75 78 80 82 86 87 88 89 90 91 93 94 95 96 99 100 101 102 103 108 111 113 116
1BM2 1	55 56 58 60 61 62 83 84 85 86 87 95 97 99 110 118 119 120 121 122 125 127 128 129 130 131 132 133 150 152
1BM2 2	56 58 60 61 62 83 84 85 86 87 95 97 99 110 118 119 120 121 122 123 125 127 128 129 130 131 132 133 150 152
1BM2 3	58 60 61 62 83 84 85 86 87 95 97 99 108 109 110 118 120 121 122 123 125 127 128 129 132 133 134 135 150 152
1BM2 4	55 56 58 60 61 62 83 84 85 86 87 95 97 99 108 109 110 118 120 121 125 127 128 129 130 131 132 133 150 152
1BM2 5	56 58 60 61 62 67 83 84 85 86 87 95 97 99 110 111 112 113 115 118 125 127 128 129 130 131 132 133 150 152
1CKA 1	134 135 136 137 139 140 141 142 143 144 146 147 148 149 150 151 158 159 160 161 162 163 164 170 171 172 173 179 189 190
1CKA 2	134 135 136 137 139 143 144 146 147 148 149 150 151 158 159 160 161 162 163 164 170 171 172 173 179 186 187 188 189 190
1CKA 3	135 136 137 139 144 146 147 148 149 150 151 157 158 159 160 161 162 163 163 164 170 171 172 173 179 186 187 188 189 190
1CKA 4	136 137 139 140 141 142 143 144 146 147 148 151 158 159 160 161 162 163 164 170 171 172 173 179 184 186 187 188 189 190
1CKA 5	134 136 137 139 140 141 142 143 144 146 147 148 151 158 159 160 161 162 163 164 170 171 172 173 179 182 187 188 189 190
1G9O 1	9 10 11 13 15 24 31 34 38 40 41 42 43 46 48 49 50 51 54 57 58 60 68 89 90 91 92 94 95 96
1G9O 2	9 11 13 15 31 32 34 38 40 41 42 43 46 48 49 50 51 54 57 58 60 68 89 90 90 91 92 94 95 96
1G9O 3	9 10 11 13 15 31 32 34 38 40 41 42 43 46 48 49 50 51 54 57 58 60 68 89 90 91 92 94 95 96
1G9O 4	10 11 13 14 15 31 32 34 38 40 41 42 43 46 48 49 50 51 54 57 58 60 61 68 89 90 91 92 94 95 96
1G9O 5	10 11 13 14 15 31 32 40 41 42 43 46 48 49 50 51 54 57 58 60 61 62 68 87 89 90 91 92 94 95 96
1M61 1	12 14 15 20 34 35 36 37 38 39 42 46 47 48 49 50 61 63 69 71 77 78 81 82 83 84 85 87 88 98
1M61 2	6 7 8 10 11 12 14 15 20 21 34 35 36 37 38 39 42 46 47 48 49 50 61 63 69 71 77 78 81 82
1M61 3	5 7 35 36 37 38 39 42 46 47 48 49 50 61 63 69 71 77 78 81 82 83 84 85 87 88 98 103 104 109
1M61 4	7 8 10 11 12 14 15 20 34 35 36 37 38 39 42 46 47 48 49 50 61 63 69 71 77 78 81 82 83 84
1M61 5	8 10 11 12 14 15 20 34 35 36 37 38 39 42 46 47 48 49 50 61 63 69 71 77 78 81 82 83 84 85
1O4C 1	1 2 3 4 5 6 7 8 9 11 17 31 32 33 34 35 43 45 63 65 71 81 82 83 90 91 92 93 94 96
1O4C 2	1 3 4 5 7 8 9 11 17 31 32 33 34 35 43 45 63 65 71 73 79 80 81 82 83 90 91 92 93 96
1O4C 3	1 3 4 5 6 7 8 9 11 17 31 32 33 34 35 43 45 63 65 71 73 79 80 81 82 83 90 91 92 93 96
1O4C 4	1 3 4 5 7 8 9 11 17 31 32 33 34 35 43 45 63 65 71 73 79 80 81 82 83 84 91 92 93 96
1O4C 5	1 3 4 5 6 7 8 9 11 17 31 32 33 34 35 43 45 63 65 71 73 79 80 81 82 83 84 92 93 96
1R6J 1	193 194 195 197 198 199 217 218 219 220 221 222 223 224 225 226 227 228 229 233 235 236 237 239 247 268 269 270 272 273
1R6J 2	193 194 195 197 198 199 217 220 221 222 223 224 225 226 227 228 229 233 235 235 236 237 239 240 247 268 269 270 272 273
1R6J 3	193 194 195 197 198 199 208 217 220 221 222 223 224 225 226 227 228 229 230 233 235 236 237 239 247 268 269 270 272 273
1R6J 4	193 194 195 197 198 199 217 220 221 222 223 224 225 226 227 228 229 233 235 236 237 239 240 247 249 268 269 270 272 273
1R6J 5	194 195 197 198 199 217 220 221 222 223 224 225 226 227 228 229 233 235 236 237 239 240 247 249 250 268 269 270 272 273
2BYG 1	186 187 188 189 190 191 192 215 216 219 221 223 240 243 244 246 250 251 252 253 254 255 256 257 259 260 278 280 281 282
2BYG 2	186 187 188 189 190 191 192 198 215 216 219 221 223 240 243 244 251 252 253 254 255 256 257 259 260 278 278 280 281 282
2BYG 3	186 187 188 189 190 190 191 192 215 216 219 221 223 240 243 244 251 252 253 254 255 256 257 259 260 278 246 280 281 282
2BYG 4	186 187 188 189 190 191 192 215 216 219 221 223 240 243 244 245 246 251 252 253 254 255 256 257 259 260 278 278 281 282
2BYG 5	186 187 188 189 190 191 192 215 216 219 221 223 240 243 244 251 252 253 254 255 256 257 259 260 278 246 278 280 281 282