

1.7	Principe de l'algorithme du Depth-First Branch and Bound Les solutions d'un CFN sont représentées sous forme d'un arbre dans lequel le sommet S_0 représente l'ensemble des solutions et les fils S_1 et S_4 une partition de S_0 , avec pour chacun une première variable v_1 fixée. Le DFBB, descend jusqu'au sommet S_2 qu'il peut évaluer : un minorant de S_2 est 25. 25 devient le nouveau majorant du GMEC. L'algorithme remonte et redescend vers S_3 . Ici le coût constant plus le coût des affectations de v_1 et v_2 est supérieur au majorant : On peut élaguer l'arbre au sommet S_3	18
1.8	Exemple de transformations EPT sur un CFN composé de 2 variables v_i et v_j ayant deux valeurs possibles. La transformation de A vers B est une projection de v_j vers le coût constant C_0 . Puis une projection des fonctions binaires mène en C . La seconde valeur de v_j est distribuée sur les arcs en D . Cela permet deux nouvelles projections qui mènent à E puis à F . A et F sont en cohérence locale.	19
1.9	L'algorithme génétique	21
2.1	Cycle thermodynamique qui définit la stabilité relative de deux séquences-conformations S_A et S_B	28
2.2	Une représentation de la surface accessible de trois résidus. Les résidus A et B réduisent mutuellement leur surface exposée au solvant : c'est la zone verte. De même pour B, C : la zone rouge et A, C, la zone bleue. Un calcul par paires de résidus naïf surestime la surface accessible en comptant deux fois la zone noire.	30
2.3	La matrice d'énergie. Cet exemple montre un polypeptide de 6 résidus, chaque position possède 2 types d'acides aminés possibles et 3 rotamères possibles (2 pour le type A et 1 pour le type B). La matrice organise toutes les interactions de paires de chaînes latérales possibles. Les interactions de la bande jaune de la matrice impliquent le résidu numéro 3, celles de la bande bleue impliquent le résidu numéro 4. Les points rouge et vert correspondent aux interactions notées respectivement par les flèches rouge et verte à gauche.	32
2.4	Les fichiers d'énergies en mode CASA	35
2.5	Les fichiers d'énergies en mode GB/FDB	36
2.6	Cycle thermodynamique qui définit l'affinité.	38
2.7	Les fichiers en sortie de proteus en haut pour le mode MONTECARLO, en bas pour le mode POSTPROCESS	39
2.8	Les principales structures « physiques » dans proteus	44
2.9	Les principales structures « logiques » dans proteus	45
2.10	Les principales structures « dynamiques » dans proteus	46