

identifiant

énergie optimisée

```
#id time m(G1+G2) G1[5] G2[1] Temperature=0.65
0 2 -70.1239 180 132 3 147 2 132
1 3 -70.6378 179 132 3 147 2 132
2 2 -72.1208 179 133 3 147 2 120
```

nombre de pas

rotamères

identifiant

énergie optimisée

```
#id m(G1+G2) G1 G2 Temperature=0.65
0 -70.1239 -56.1865 -13.9374
1 -70.6378 -56.7004 -13.9374
2 -72.1208 -57.8632 -14.2576
```

énergies des groupes

identifiant

```
> 0 backbone: (null)
AA/ F K L K D K
SEQ/ 489 490 491 492 493 490
ROT/ 3 21 4 36 3 21
```

séquence d'acides aminés

positions

rotamères