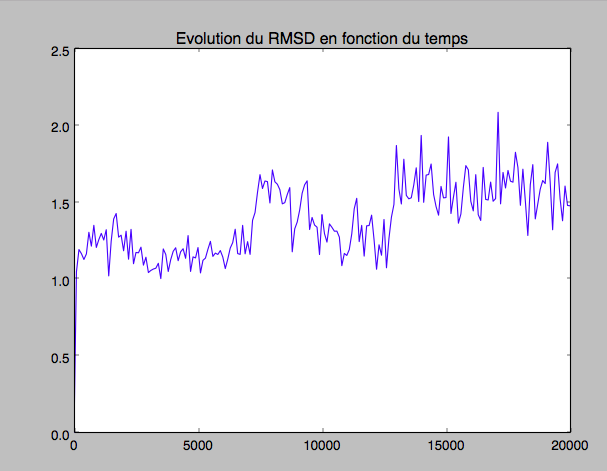
Etude de la Barstar

I. **Analyse des changements conformationnels globaux**

Le but ici est d’étudier si la Barstar subit des changements conformationnels majeurs en solution.

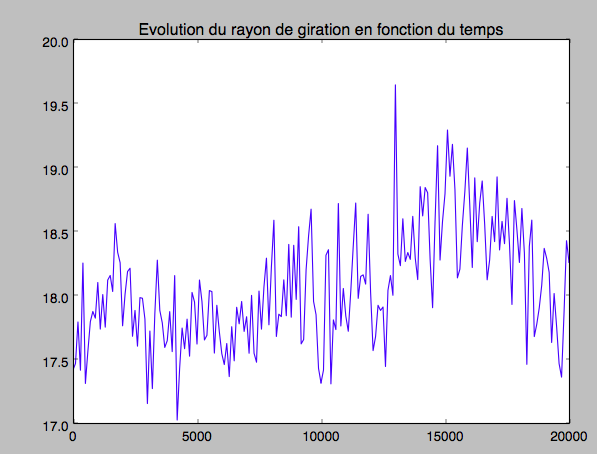
Pour cela, nous avons regardé l'évolution du RMSD et du rayon de giration en fonction du temps et en fonction de la conformation.

Le RMSD (Root Mean Square deviation) rend compte de la ressemblance entre 2 structures (et donc de la déviation). En effet, plus le RMSD est petit, plus 2 structures comparées se ressemblent.



**Mettre la formule de base et expliquer ce que l'on fait.**

Quand on représente l’évolution du RMSD au cours temps, on se rend compte que celui-ci varie entre 1 et 2. Au cours du temps la valeur du RMSD reste donc petite, ce qui nous amène dans un premier temps à penser qu’il n’y a pas de grande différence entre les structures comparées aux différents temps.

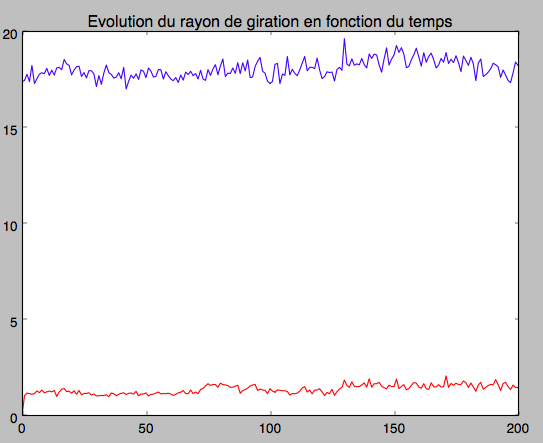
Le rayon de giration rend compte du rayon de la protéine. On peut le définir comme étant la différence entre le centre de masse et le résidu le plus éloigné du centre de masse de la protéine.

Pour le calculer, on a donc décider de calculer pour chaque résidu la distance entre le centre de masse et chaque résidu. Le rayon de giration correspond au rayon le plus grand.

Quand on regarde l’évolution du rayon de giration au cours du temps,

Une fois ces deux mesures calculées, on peut facilement estimer comment ces 2 métriques varient par rapport à la structure d'origine.

Comme il est difficile d'interpréter la sortie (format texte), nous avons donc décider de représenter les résultats sous forme d'un graphique :



Analyse et interprétation : On peut remarquer que pour ces 3 mesures, les variations ne sont pas très grandes. De plus,

**II. Analyse des changements conformationnels locaux**