

SUJET: REPLIEMENT D'UN MODELE SIMPLIFIE DE PROTEINE PAR UN ALGORITHME DE MONTE-

CARLO ET ECHANGE DE REPLIQUES

Objectif : Réalisez un programme reprenant la méthode décrite dans l'article. Dans un premier temps l'algorithme de Monte-Carlo simple sera implémenté, ensuite le RE. Une séquence arbitraire de protéine pourra être soumis au programme afin de calculer son repliement par ce modèle.

:

Référence: Thachuk C, Shmygelska A, Hoos HH. A replica exchange Monte Carlo algorithm for protein folding in the HP model. BMC Bioinformatics. 2007 Sep 17;8:342. PuProfessional Address: