**REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE**

**MINISTERE DE L’ENSEIGNEMENT SUPERIEUR**

**ET DE LA RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

**Université de Jijel**

**2éme Année Master**

**TP N°04**

**Optimisation Par Méthode de monte et carlo**

**C**e TP vise à illustrer l’emploi de la méthode Monté Carlo dans le contexte de l’optimisation structurale.

1. **Optimisation structurale d’un dipeptide sous forme zwiterionique par la méthode monté carlo (conformational serch).**

Le recuit simulé consiste à refroidir lentement un systèe, afin d’en déterminer les configurations de plus basse énergie. Pour permettre au système de s’échapper de bassins métastables, on chauffe périodiquement. Les étapes de refroidissement et de chauffage son caractérisés souvent par des règles géométriques (T’= T, avec >1 pour un chauffage et <1 pour un refroisissement).

Le système choisi ici est le dipeptide tryptophane alanine décrit par le champ de force Ambre3.

1. Extraire de la base de donnée la structure du dipeptide
2. Mettre la structure sous forme zwetterionique
3. Calculer le signal point
4. Optimiser la structure avec Polack Ribiere comme algorithme, sauvegarder la structure (struc\_init)
5. Sélectionner et nommer les différents angles de torsions
6. Ouvrir Conformational search
7. Déterminer les différentes configurations à l’aide de la méthode Monté Carlo Métropolis.
8. Relever les populations de Boltzmann
9. Indiquer les configurations les plus favorables
10. Mettre chaque structure sur lécran de Hyperchem
11. Noter son moment dipolaire (Option : Propriétés)
12. Optimiser chaque structure avec AM1, même algorithme)
13. Noter l’énergie et la valeur des moments dipolaires calculés par AM1
14. Comparer les résultats
15. **Optimisation structurale d’un dipeptide sous forme zwetterionique par la méthode Monté carlo (Recuit simulé)**
16. Ouvrir le fichier : struct\_init
17. Dans compute ouvrir Monté carlo
18. On va réaliser des recuits simulés de la dipeptide en utilisant les conditions suivantes :

|  |  |
| --- | --- |
| Heat = 100 | Starting T = 300 |
| Run = 1000 | Siulation T = 1000 |
| Cool = 50000 | Final T = 700 |
| Max delta = 0.05 | Temperature Step = 20 |
|  | Data Collection Period = 10 |
|  | Screen refrech period = 10 |

1. Au départ de la strucrure finale obtenu par le premier recuit, réaliser un deuxième recuit sous les conditions suivantes :

|  |  |
| --- | --- |
| Heat = 100 | Starting T = 300 |
| Run = 1000 | Siulation T = 800 |
| Cool = 50000 | Final T = 500 |
| Max delta = 0.05 | Temperature Step = 20 |
|  | Data Collection Period = 10 |
|  | Screen refrech period = 10 |

1. Au départ de la structure finale obtenu par le deuxième recuit, réaliser un troisième recuit sous les conditions suivantes :

|  |  |
| --- | --- |
| Heat = 100 | Starting T = 300 |
| Run = 1000 | Siulation T = 600 |
| Cool = 50000 | Final T = 300 |
| Max delta = 0.05 | Temperature Step = 20 |
|  | Data Collection Period = 10 |
|  | Screen refrech period = 10 |

1. Au départ de la structure finale obtenue par le deuxième recuit, réaliser un quatrième recuit sous les conditions suivantes :

|  |  |
| --- | --- |
| Heat = 100 | Starting T = 300 |
| Run = 1000 | Siulation T = 400 |
| Cool = 50000 | Final T = 100 |
| Max delta = 0.05 | Temperature Step = 20 |
|  | Data Collection Period = 10 |
|  | Screen refrech period = 10 |

1. Optimiser la structure finale, la comparer avec les structures obtenues par conformational search.
2. Les fichiers des résultats des simulations Monté carlo sont sauvegardés avec extension CSV (tableaux) et SNV (pour le play back).
3. A l’aide du logiciel ORIGIN 7.5 regrouper les resultats dans un même tableau.
4. Tracer et commenter le graphe
5. Conclusion.