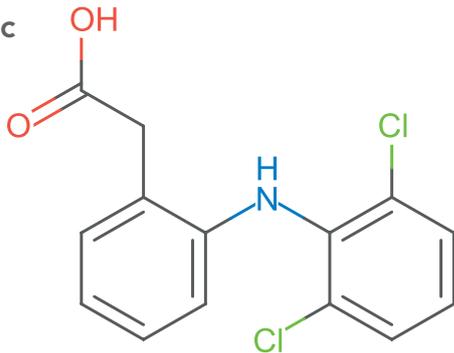




# Quels fragments se trouvent dans ces molécules ?

Diclofenac

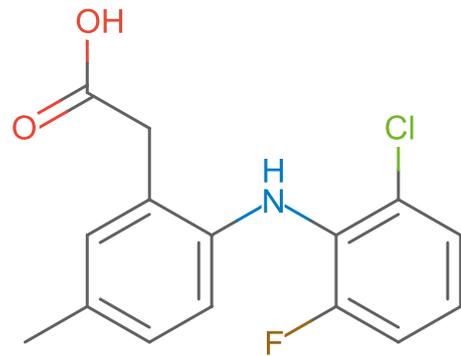


→ À l'aide de la règlette, retrouve les fragments présents dans chaque molécule. Mets un 1 dans les cases correspondantes si tu les trouves et 0 sinon. Exemple :

1	1	1	0	1	0	0	0

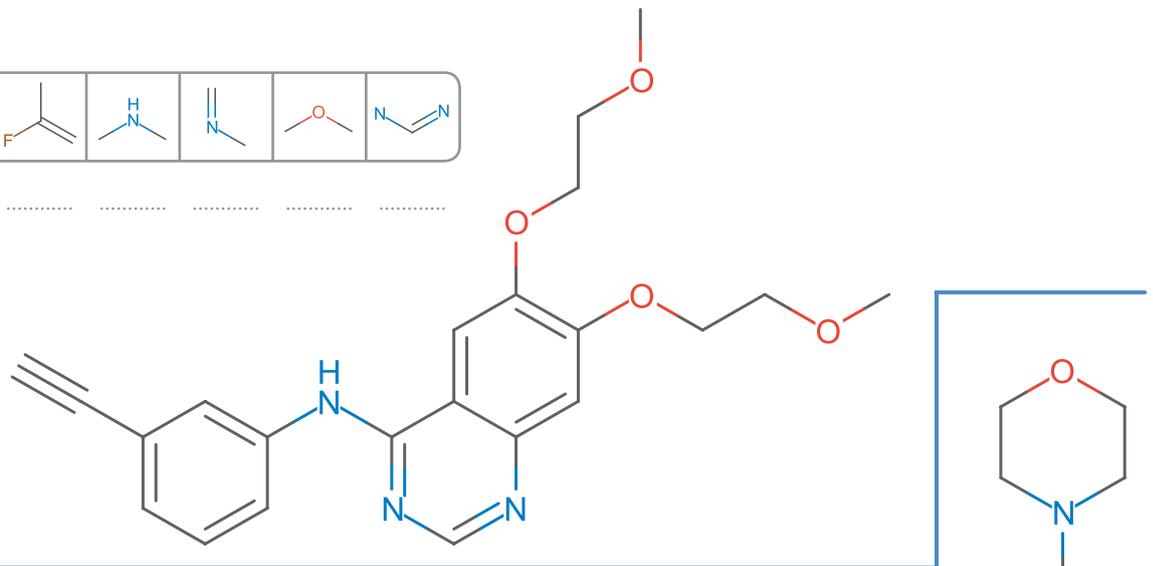
Lumiracoxib

.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....



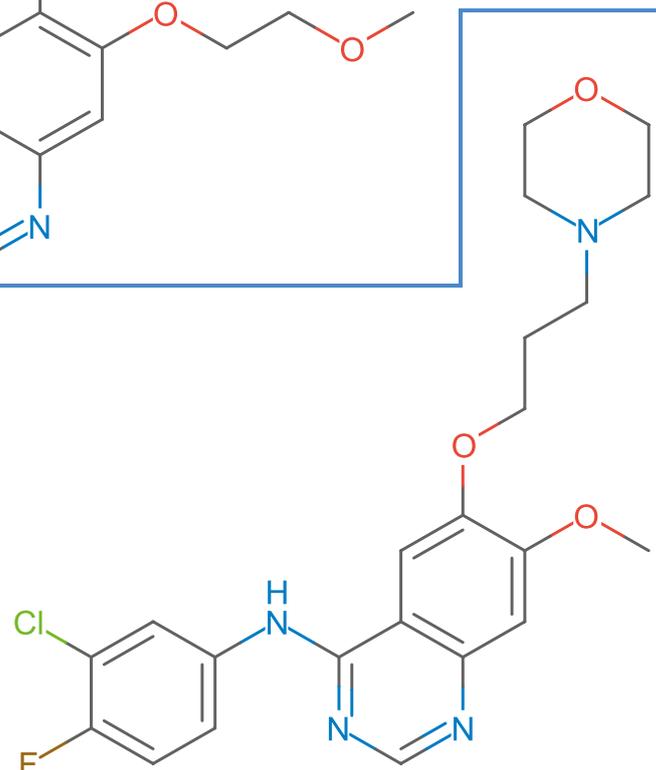
Erlotinib

.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....



Gefitinib

.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....	.....



# Calcul de similarité

## Coefficient de Tanimoto

### Formule

$$T = \frac{M_{11}}{M_{11} + M_{10} + M_{01}}$$

$M_{11}$ : nombre de cases où l'on trouve 1 à la fois chez A et chez B  
 $M_{10}$ : nombre de cases où l'on trouve 0 chez A et 1 chez B  
 $M_{01}$ : nombre de cases où l'on trouve 1 chez A et 0 chez B

$0 \leq T \leq 1$   
 $T = 0$ : molécules totalement différentes  
 $T = 1$ : molécules identiques

### Exemple

A

1	1	1	0	1	0	0	0

B

1	1	0	1	1	0	0	1

$M_{11} = 3, M_{10} = 1, M_{01} = 2$   
 $T = \frac{3}{3 + 1 + 2} = 0.5$

→ Compare les 4 molécules en remplissant le tableau ci-dessous avec les coefficients de Tanimoto calculés:



	Diclofenac	Lumiracoxib	Erlotinib	Gefitinib
Diclofenac	1			
Lumiracoxib		1		
Erlotinib			1	
Gefitinib				1

→ Quelles sont les paires de molécules les plus similaires?

.....

.....