

### Projet 3: Prédiction des interactions Protéine-Protéine Contact C. Etchebest

L'objectif du projet est de proposer un outil capable de prédire les zones d'interaction potentielles entre deux protéines sachant leur séquence et leur structure sans pour autant utiliser d'outils d'arrimage moléculaire. L'apprentissage s'appuiera sur une banque de données protéine-protéine connue et disponible dans la littérature. La méthode d'apprentissage pourra être choisie librement (DeepLearning ou autre) ainsi que les propriétés utilisées mais un travail d'analyse important devra être mené pour sélectionner les caractéristiques et paramètres pertinents. A titre d'exemples en termes de propriétés :

- La description locale en termes de blocs protéiques (BP)
- Les propriétés des acides aminés choisies dans la base de données AAIndex.
- La conservation et la co-évolution.
- Longueur des protéines.
- Appartenance à un repliement donné défini par la base de données Scop. Il pourra être nécessaire de spécialiser l'approche en fonction du type de repliement.
- Régions Hot-Spot et RIM

Etc ...

La réponse attendue sera la probabilité d'un acide aminé d'appartenir à l'interface. Cette réponse pourra par la suite être utilisée pour générer des contraintes et pondérer une fonction de score lors d'étapes ultérieures de docking.