

Sujet : Analyse de la communication allostérique à l'aide d'un alphabet structural

Objectif: En 2013, le groupe de Fraternali propose l'implémentation d'une approche d'analyse des trajectoires de dynamiques moléculaires nommées GSAtools (Pandani *et al*, *Bioinformatics*, 2013, <http://mathbio.nimr.mrc.ac.uk/wiki/GSATools>, <http://people.brunel.ac.uk/~csstaap2/gsatools.html>). Cette approche a été précédemment utilisée sur des ensembles de dynamiques moléculaires (Baussand *et al*, 2012 ; Pandini *et al*, 2012 ; Kleinjung *et al*, 2012). Cette approche est basée sur un ensemble successif d'analyses statistiques (souvent du R). Malheureusement, GSA_tools est dédié à une version ancienne de Gromacs (et n'était d'ailleurs pas réellement utilisable).

Le principe de ce projet est de reproduire les différentes étapes du programme GSAtools, en se basant sur un autre alphabet structural, les Blocs Protéiques. Un logiciel nommé PBxplore a été mis à disposition de la communauté pour traiter des Dynamiques Moléculaires (Barnoud *et al*, bioarxiv preprint ; <https://github.com/pierrepo/PBxplore>). Des simulations de dynamiques moléculaires venant du domaine Calf-1 seront proposés pour tester l'approche (Goguet, Tarwani *et al*, 2017)

Contacts : Alexandre de Brevern (alexandre.debrevern@univ-paris-diderot.fr),

Jean-Christophe Gelly (jean-christophe.gelly@univ-paris-diderot.fr)

Références:

Pandini A, Fornili A, Fraternali F, Kleinjung J "GSATools: analysis of allosteric communication and functional local motions using a Structural Alphabet" *Bioinformatics* 29(16):2053-2055, 2013

Références Complémentaires :

Baussand J, Kleinjung J. Specific Conformational States of Ras GTPase upon Effector Binding. *J Chem Theory Comput.* 2013 Jan 8;9(1):738-749.

Pandini A, Fornili A, Fraternali F, Kleinjung J. Detection of allosteric signal transmission by information-theoretic analysis of protein dynamics. *FASEB J.* 2012 Feb;26(2):868-81.

Kleinjung J, Scott WR, Allison JR, van Gunsteren WF, Fraternali F. Implicit Solvation Parameters Derived from Explicit Water Forces in Large-Scale Molecular Dynamics Simulations. *J Chem Theory Comput.* 2012 Jul 10;8(7):2391-2403.

Jonathan Barnoud, Hubert Santuz, Pierrick Craveur, Agnel Praveen Joseph, Vincent Jallu, Alexandre G. de Brevern, Pierre Poulain, PBxplore: A Tool To Analyze Local Protein Structure And Deformability With Protein Blocks (bioRxiv 136408; doi: <https://doi.org/10.1101/136408>).

Matthieu Goguet, Tarun Narwani, Rachel Petermann, Vincent Jallu, Alexandre G. de Brevern (2017) *Scientific Reports*, sous presse.