

# DOCKING ANTICORPS – ANTIGENE

JANVIER 2017

Meet-U  
a meeting story

**Equipe D**

**Alexandre Albani - Romain Conte - Samia Djerroud - Jeanne Laurentie - Nathalie Lehmann**

**Enseignants référents : Elodie Laine - Anne Lopes**

# L'équipe

ROMAIN



SAMIA



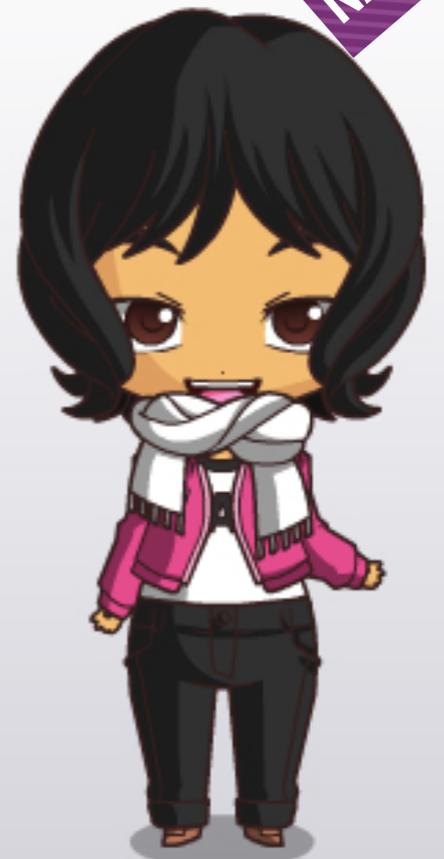
ALEXANDRE



JEANNE



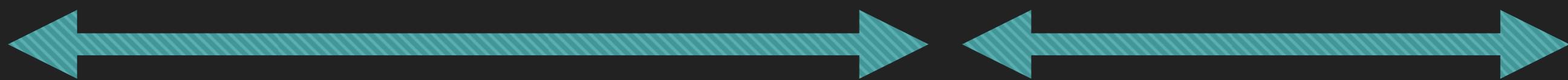
NATHALIE



Equipe technique

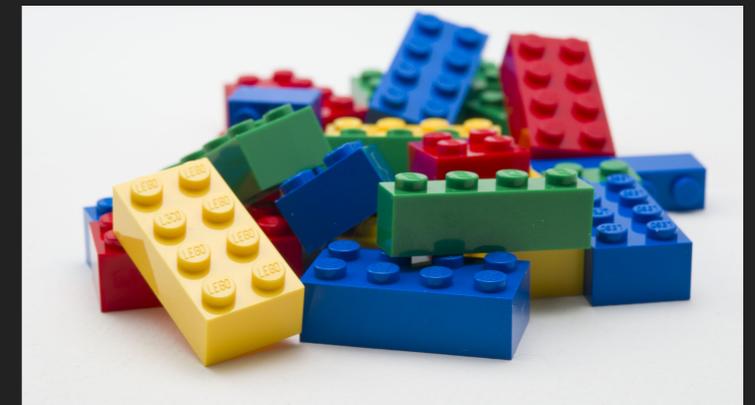
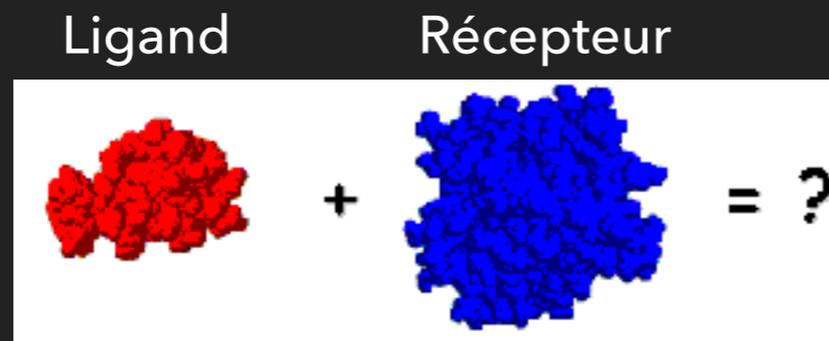
Equipe biblio - méthodologie

**Stratégie**



# Le docking moléculaire

Ce qu'on a :

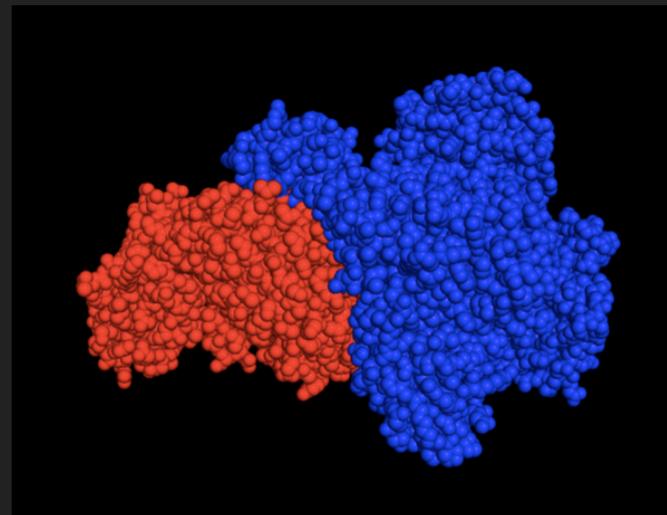


**DOCKING**

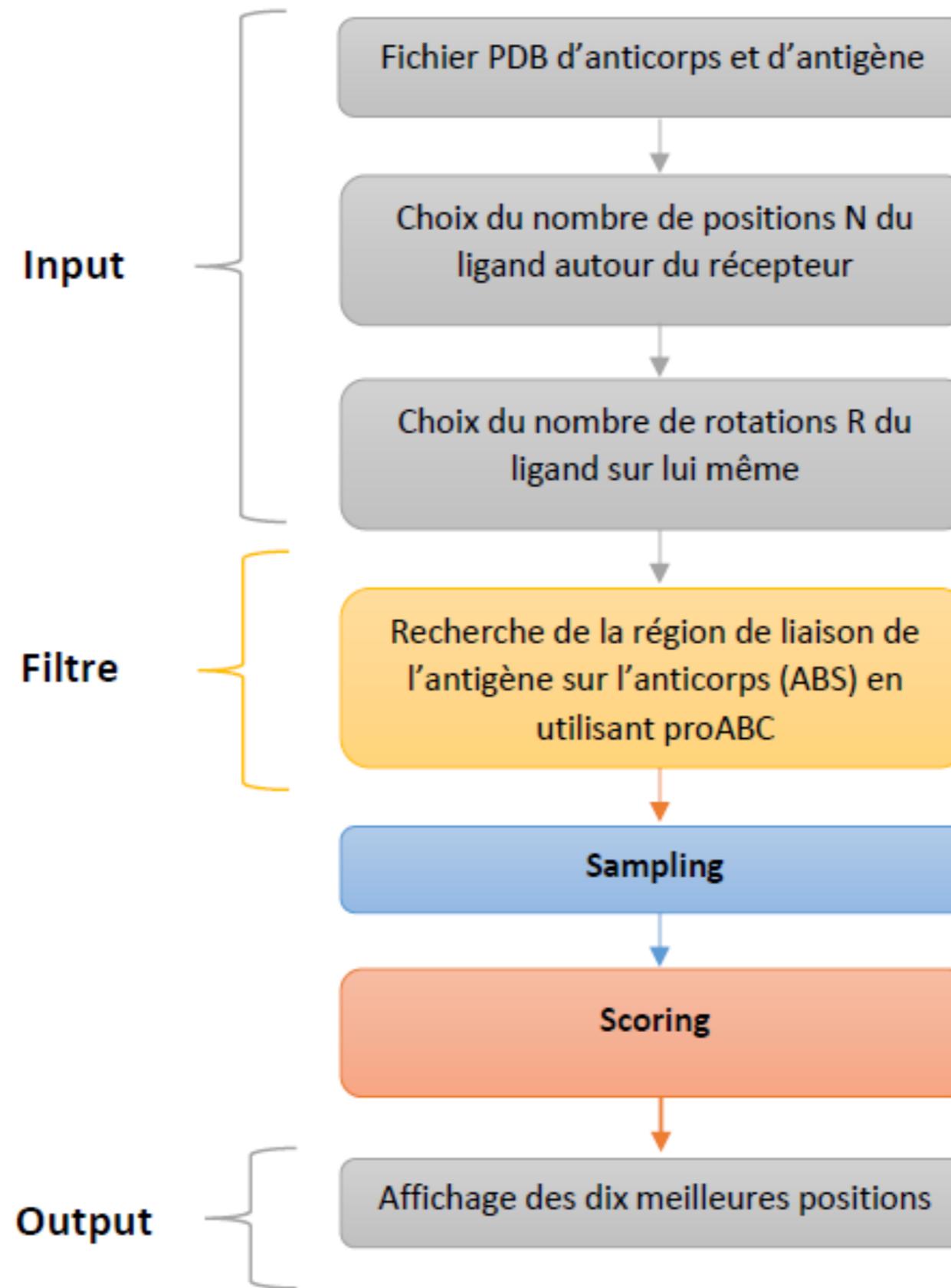
Ce qu'on veut :

**GROS GRAINS**

**CORPS RIGIDE**

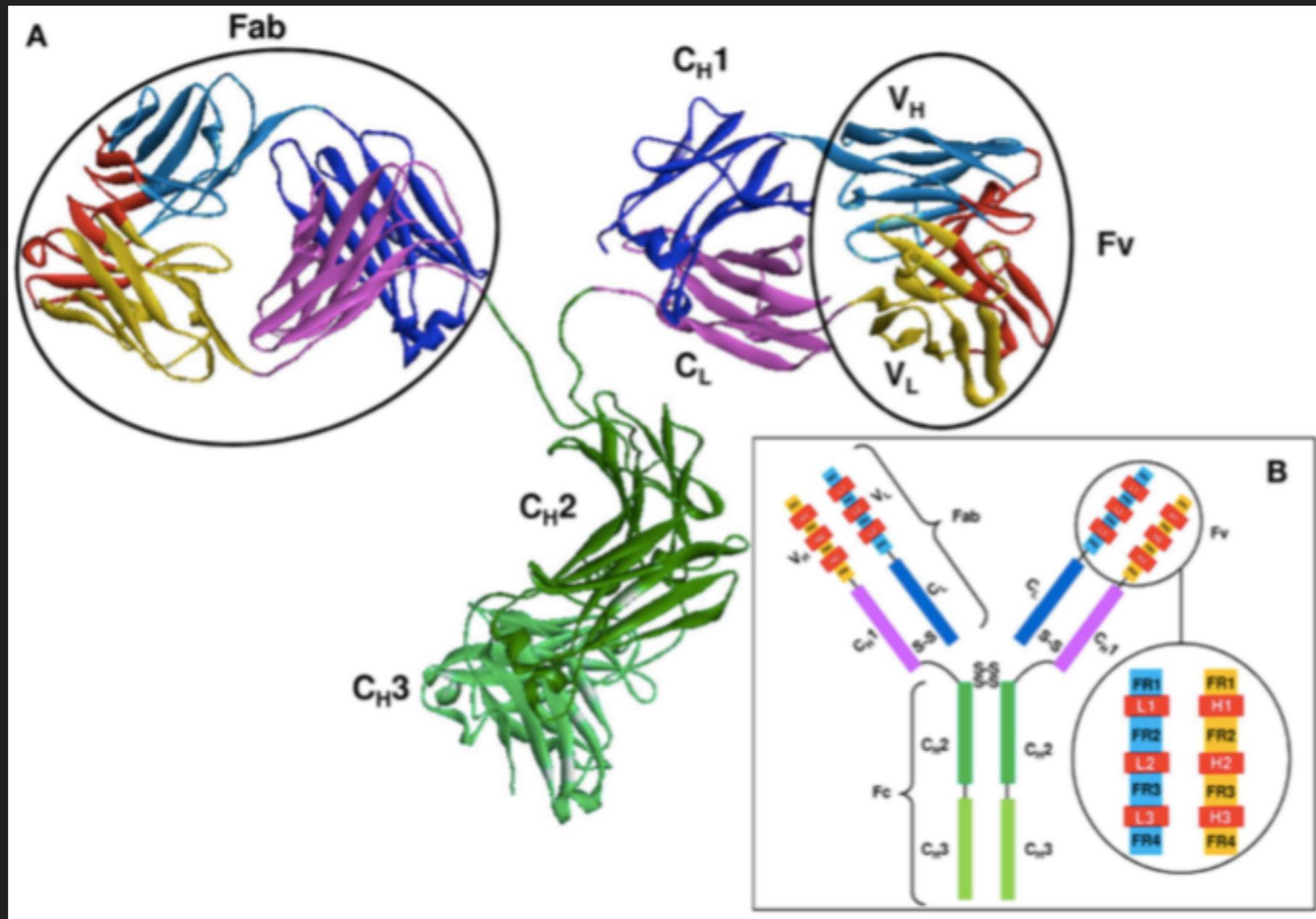


# ALGORITHME DE DOCKING

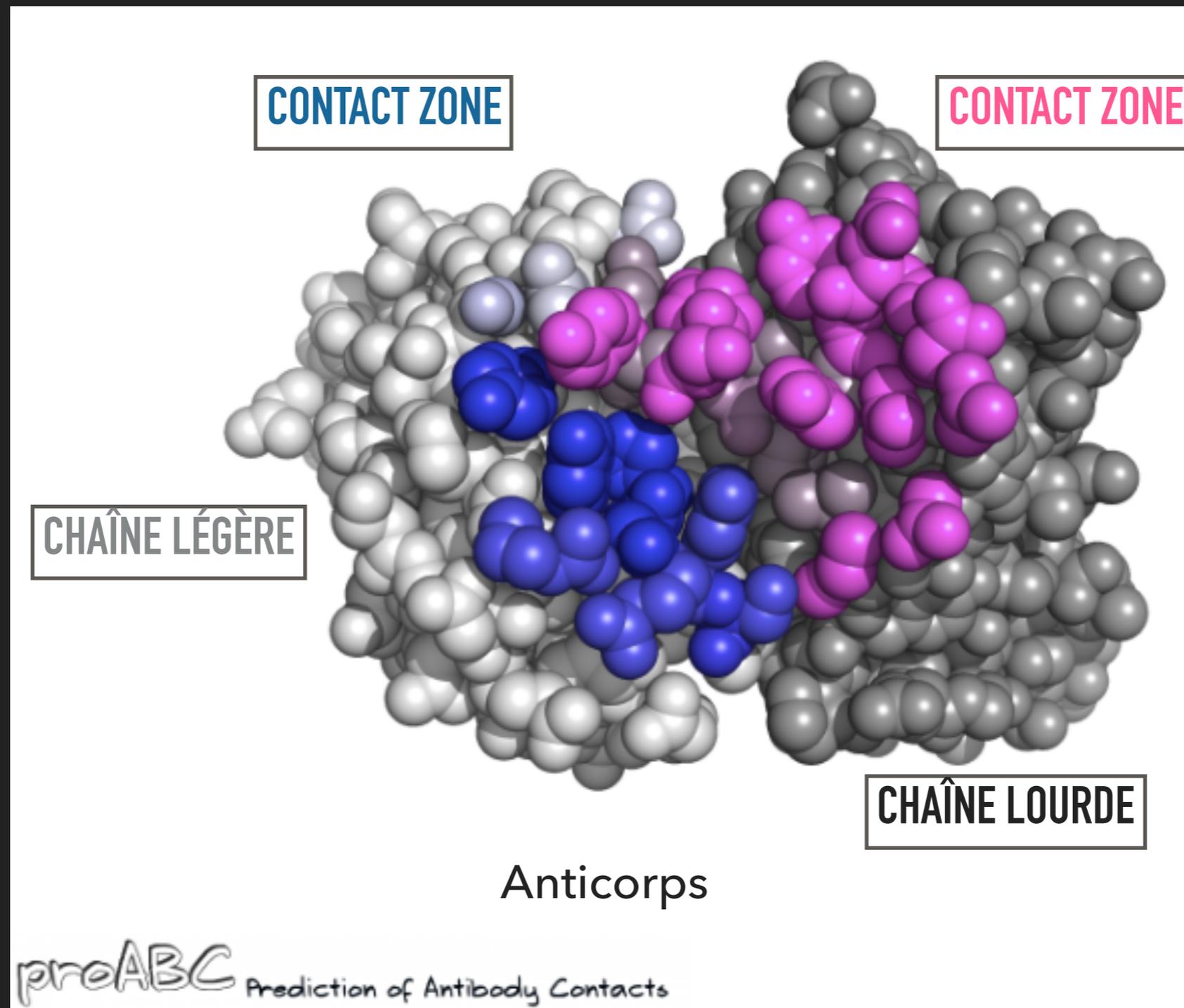


**ABS**  
**ANTIGEN**  
**BINDING SITE**

# A la recherche de l'interface anticorps - antigène 1/2



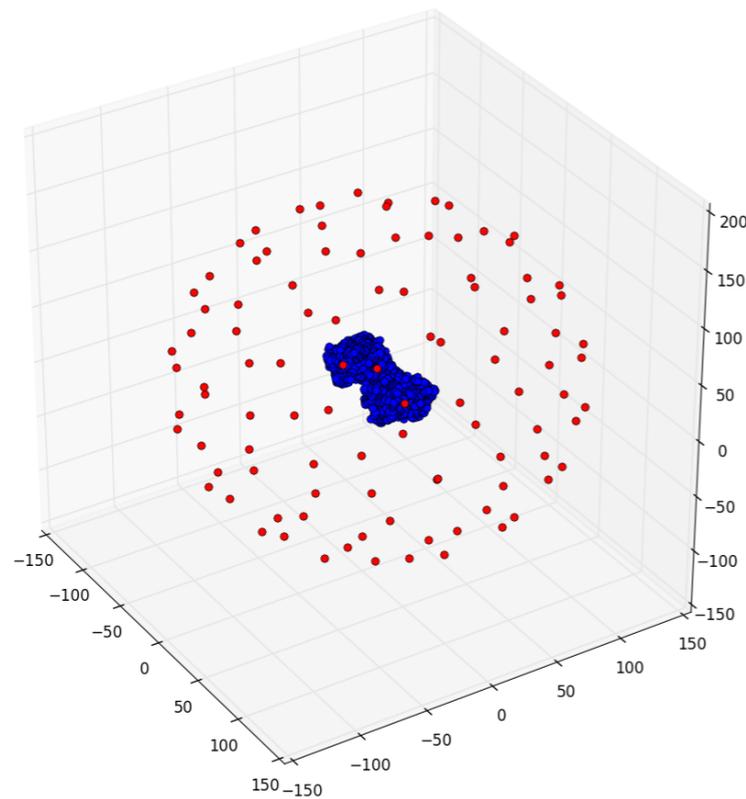
# A la recherche de l'interface anticorps - antigène 2/2



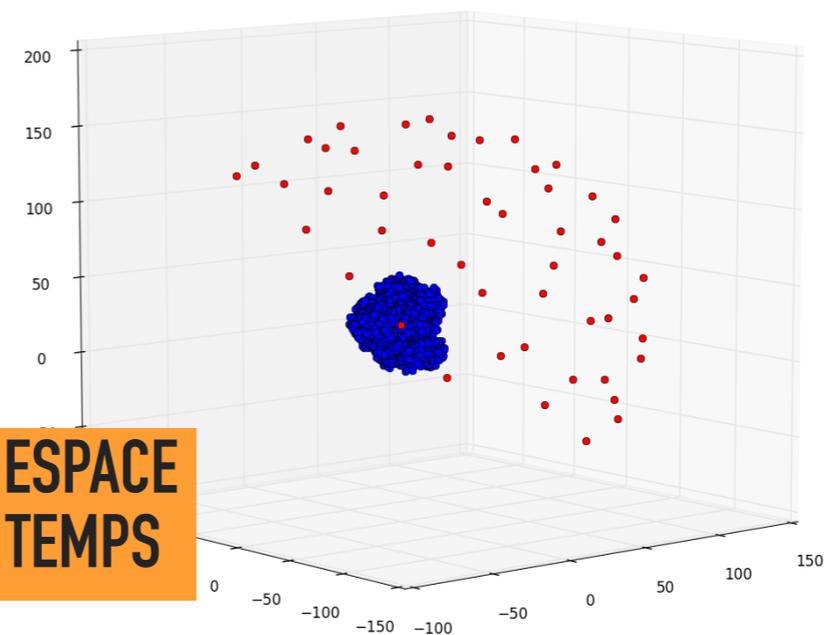
# Le sampling...

## ou comment explorer l'espace ?

AVANT



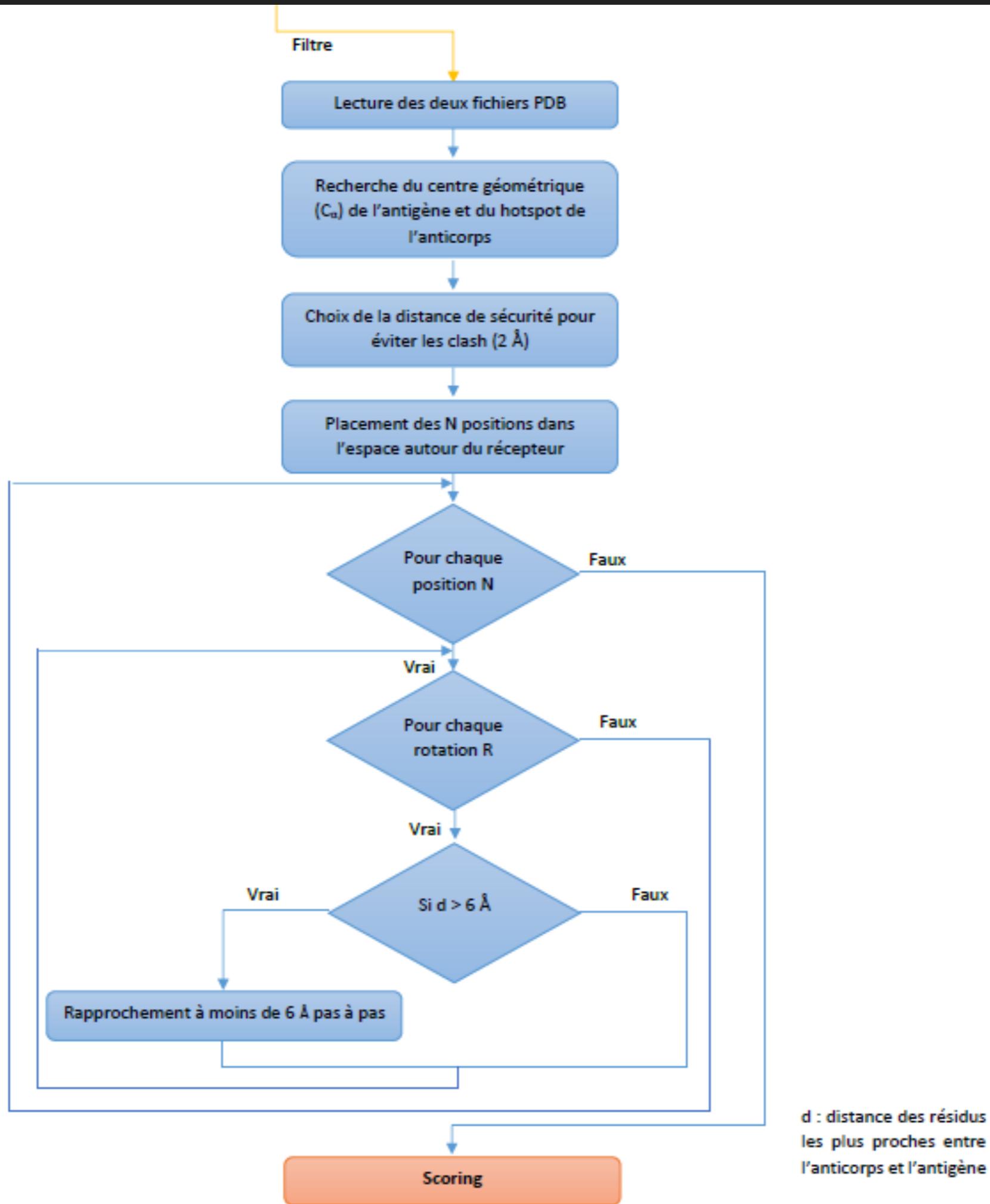
APRÈS



50% ESPACE  
50% TEMPS

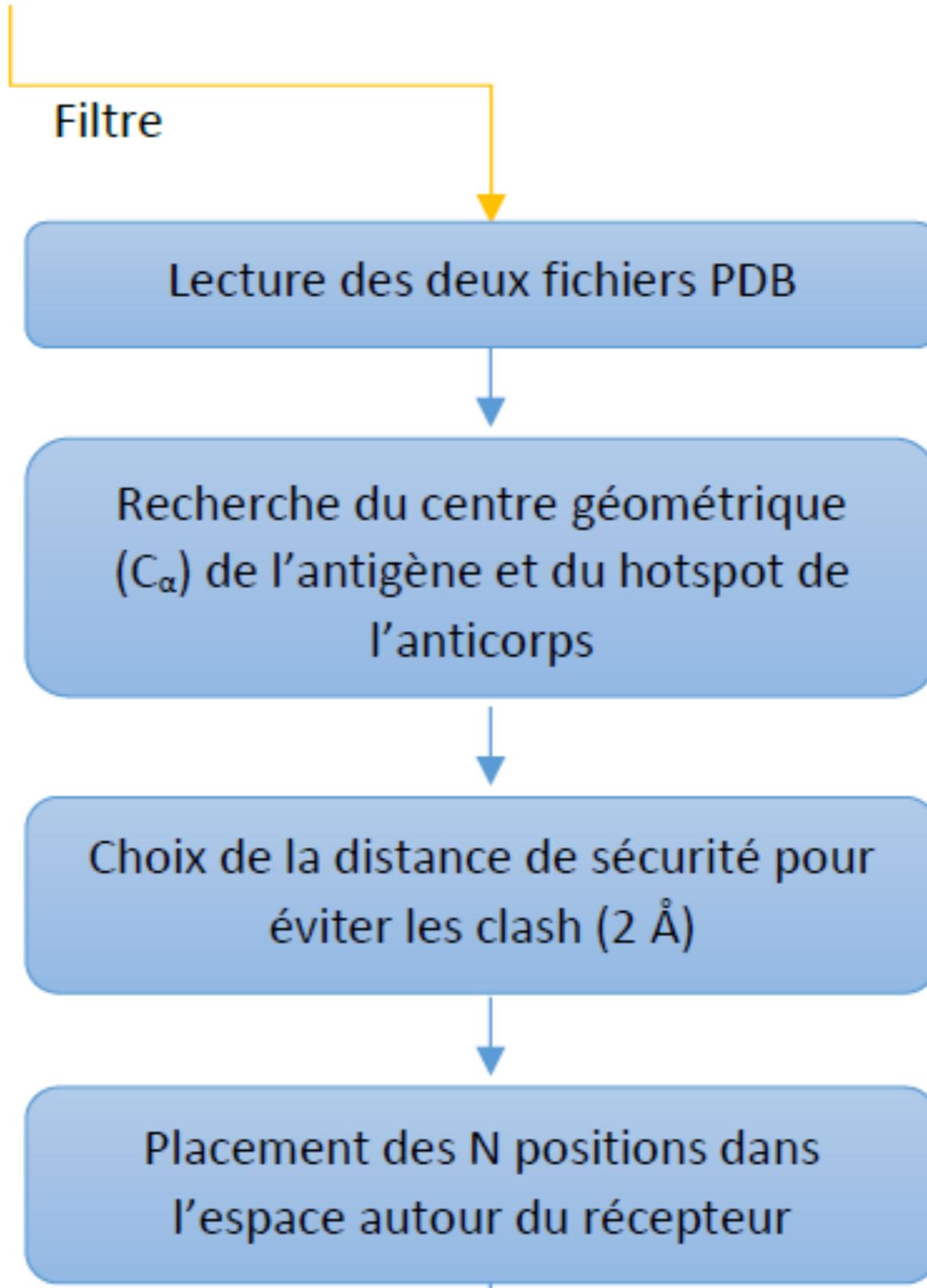
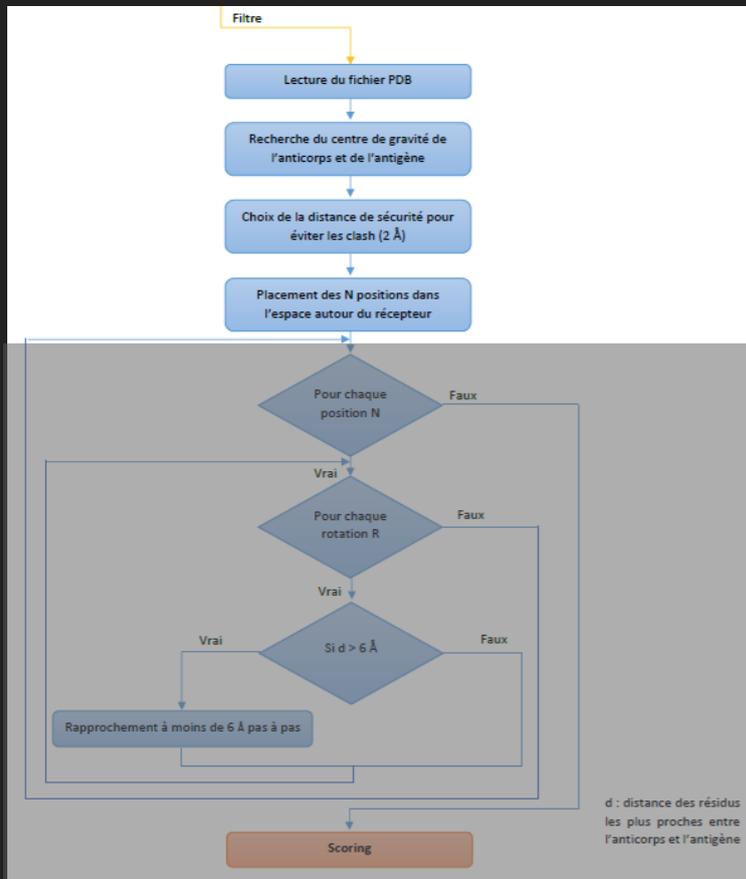


# ALGORITHME DE SAMPLING 1/3

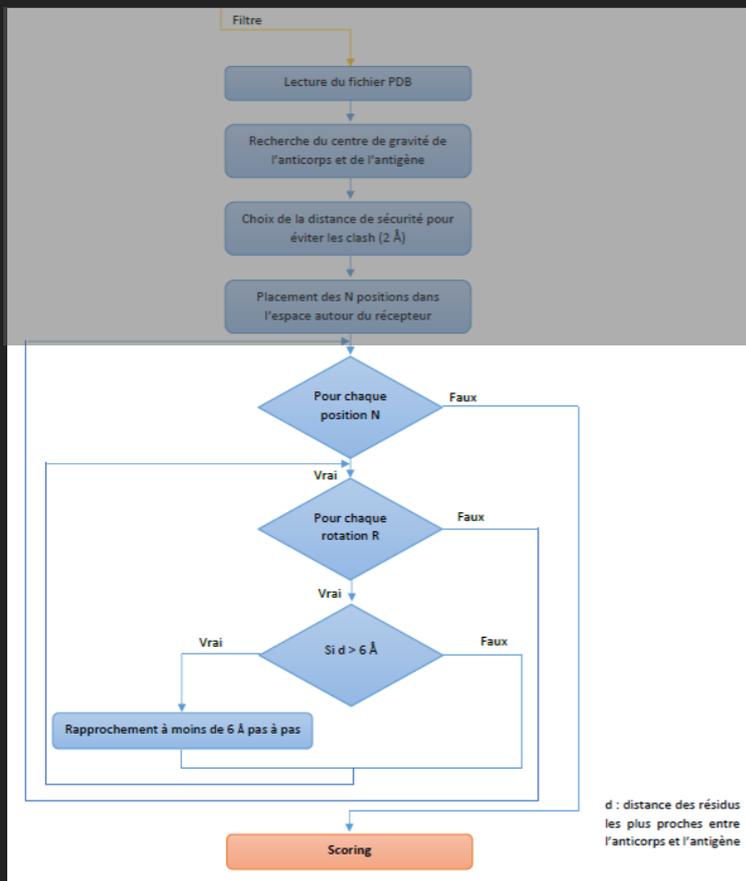


# ALGORITHME DE SAMPLING

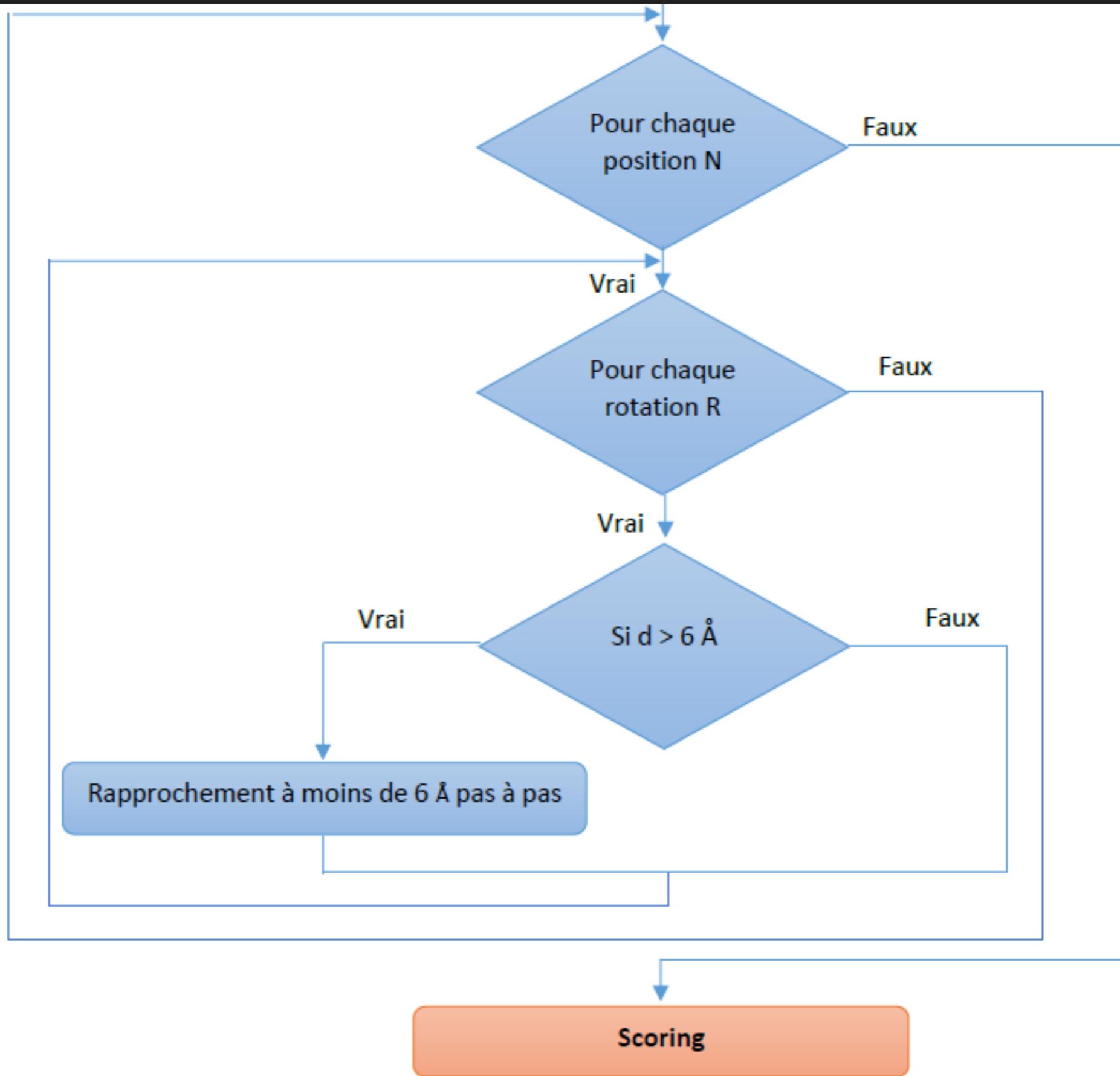
2/3



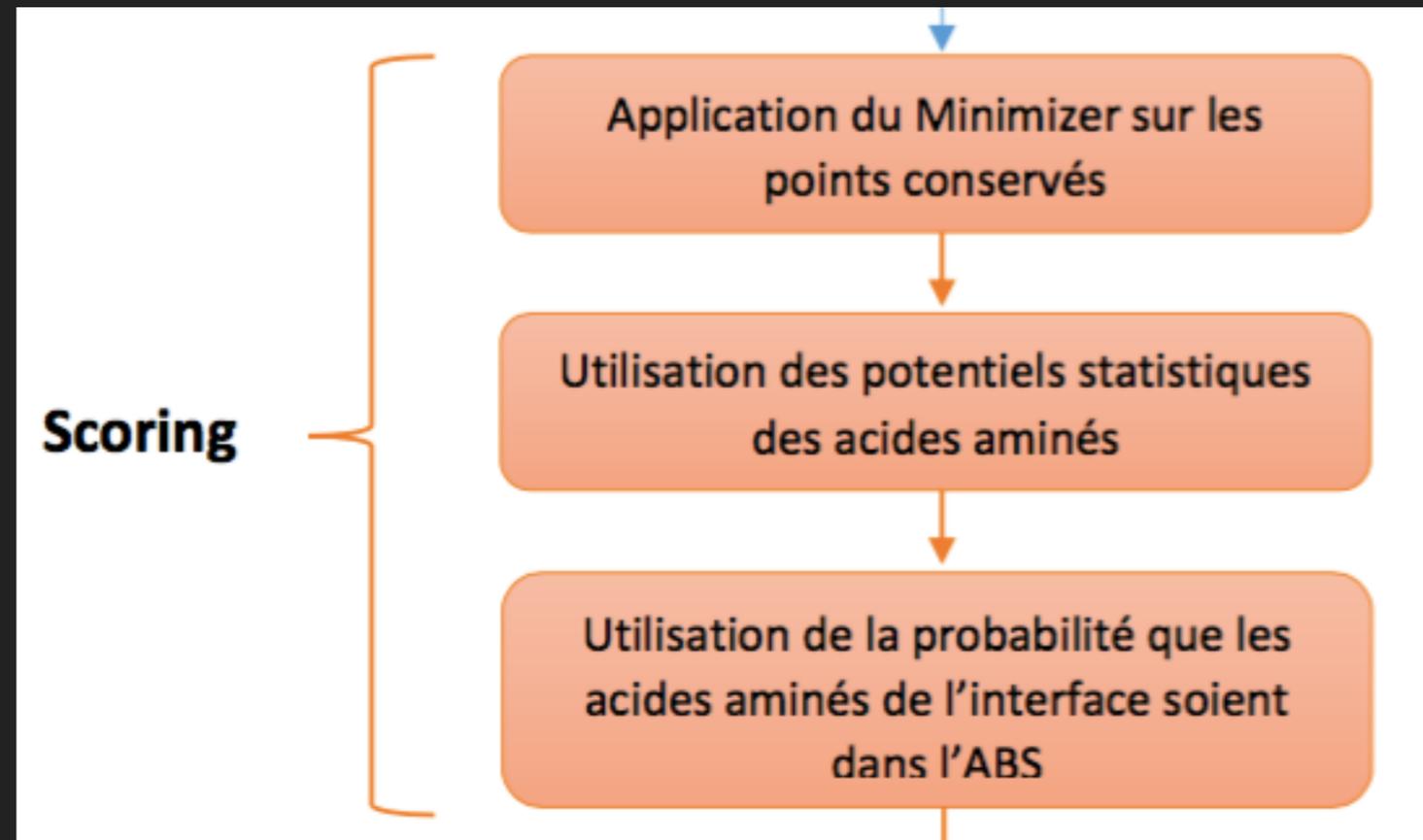
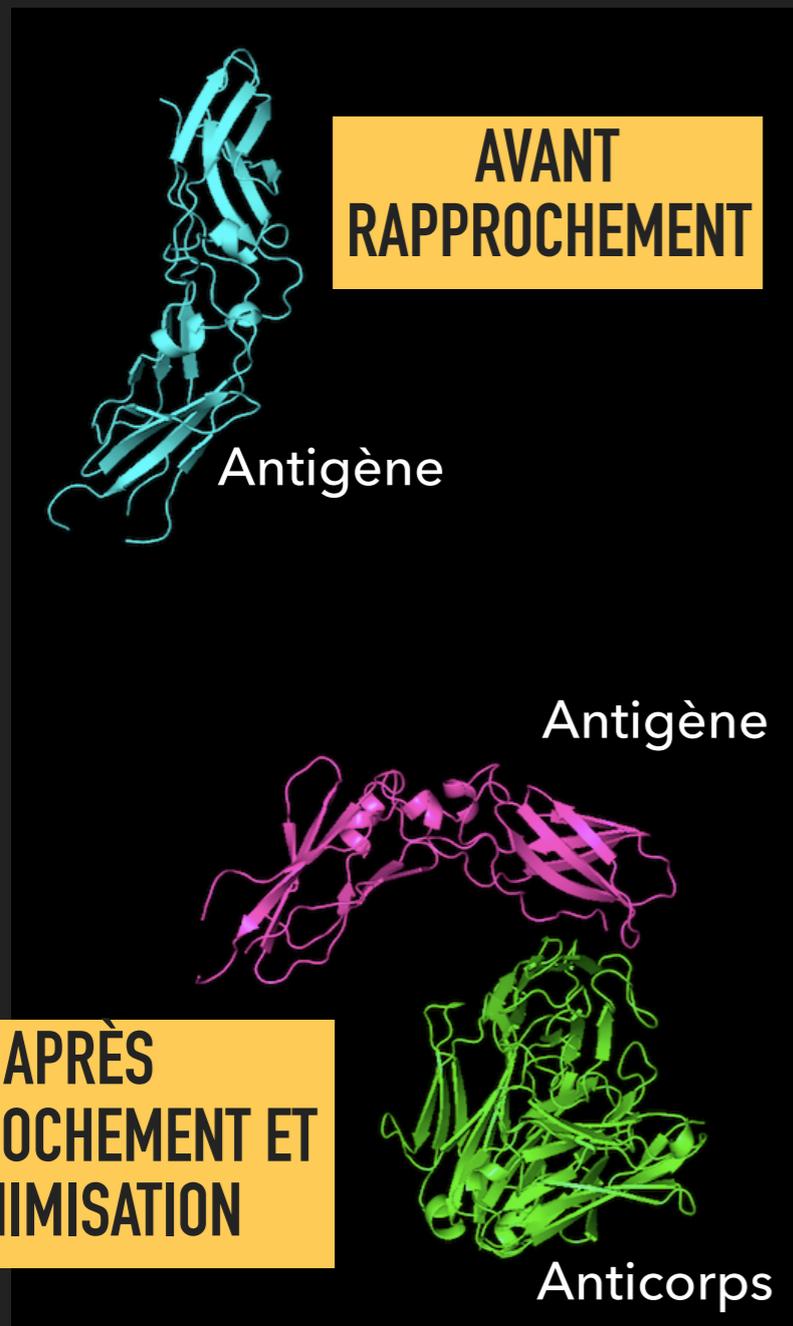
# ALGORITHME DE SAMPLING 3/3



d : distance des résidus les plus proches entre l'anticorps et l'antigène



# Le scoring... ou comment trouver les meilleures configurations ?



« MEILLEURE CONFIGURATION » ?  
MEILLEUR SCORE

# Résultats et analyse 1/6

**DATASET :**  
**1JPS**



**NOMBRE DE POSITIONS : 50**  
**NOMBRE DE ROTATIONS :  $4^3 = 64$**

**CONFORMATIONS :**  
 **$50 \times 64 = 3200$**

**MINIMIZER :**  
**2600**

**CONSERVÉES :**  
**100 MEILLEURES**

## Résultats et analyses 2/6

Parce qu'on partait de loin...

### NOTRE MEILLEURE CONFORMATION ?

OCTOBRE :  
80 ANGSTROMS

PREMIERS TESTS

NOVEMBRE :  
40 ANGSTROMS

POTENTIELS  
STATISTIQUES

DÉCEMBRE :  
18 ANGSTROMS

PRÉDICTION  
ABS

JANVIER :  
3.5 ANGSTROMS

AMELIORATIONS

# Résultats et analyse 3/6

GLASER

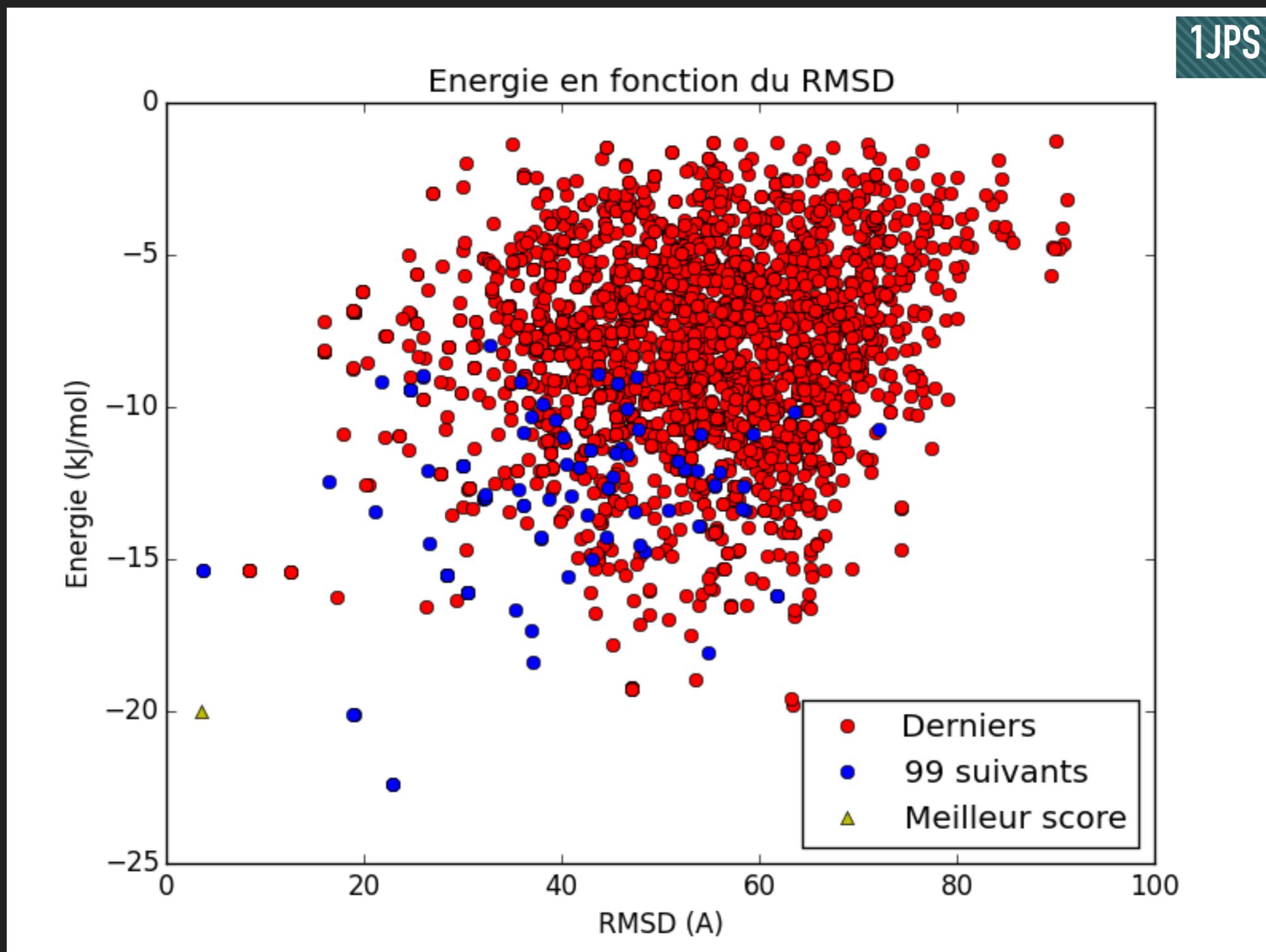
10 heures 23 minutes 52 secondes

DATASET :  
1JPS

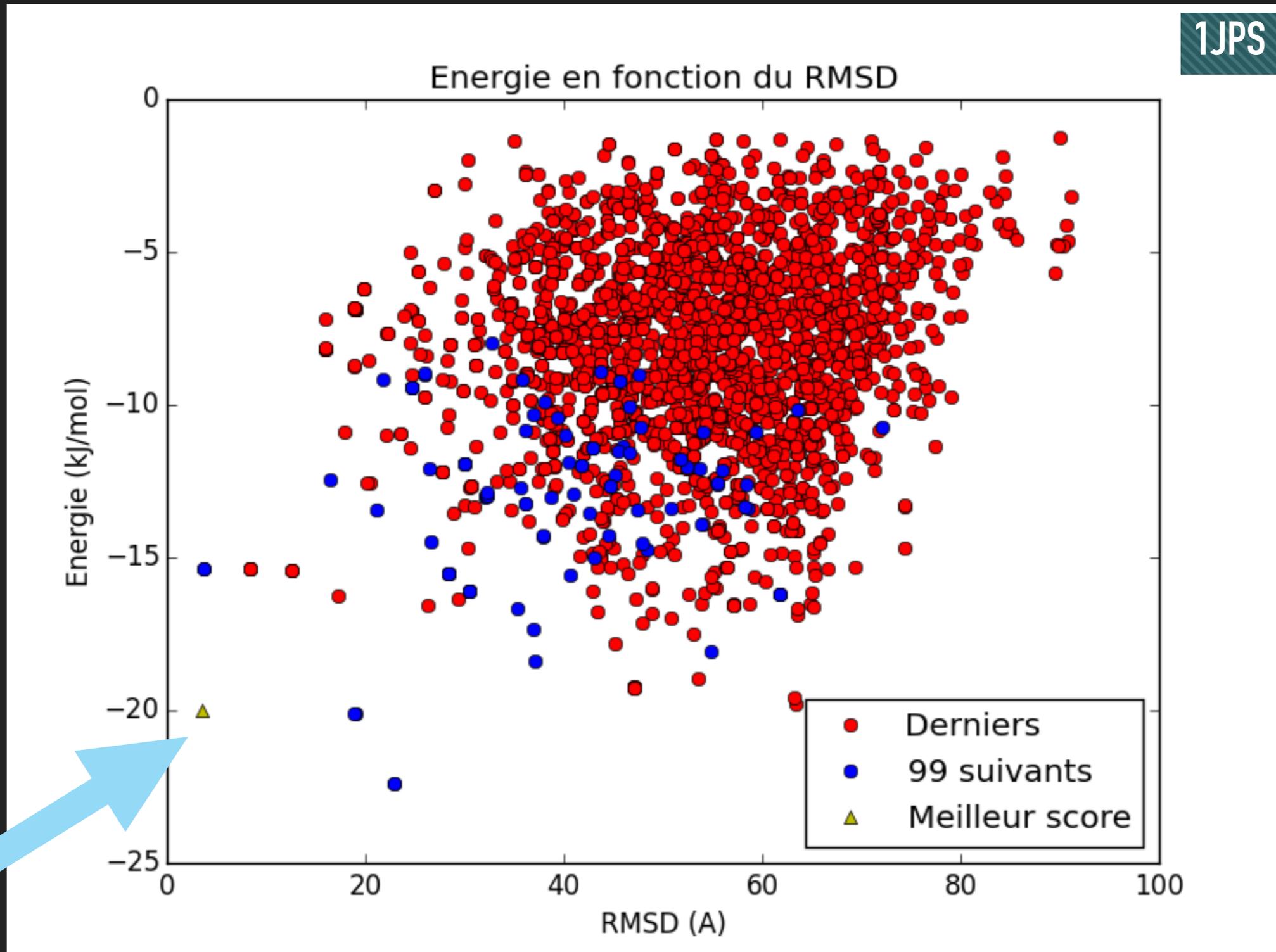
Rank	Proteine	Score general	Score potentiel statistique	Score CDR	Energie	RMSD
1	1JPS_rec_1JPS_lig_12_min1	62	58.92	865.10	-19.98	3.50
2	1JPS_rec_1JPS_lig_747_min1	83	58.66	841.06	-18.09	54.79
3	1JPS_rec_1JPS_lig_309_min1	286	58.55	750.90	-14.26	44.58
4	1JPS_rec_1JPS_lig_45_min1	342	57.77	1047.30	-12.45	16.50
5	1JPS_rec_1JPS_lig_31_min1	429	56.06	580.38	-22.38	22.98
6	1JPS_rec_1JPS_lig_28_min1	431	56.06	580.38	-22.38	22.95
51	1JPS_rec_1JPS_lig_15_min1	996	49.04	840.67	-15.35	3.65
52	1JPS_rec_1JPS_lig_60_min1	999	49.04	840.67	-15.34	3.64

Glaser, F. and al. (2001). Residue frequencies and pairing preferences at protein-protein interfaces. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, 43(2), 89-102.

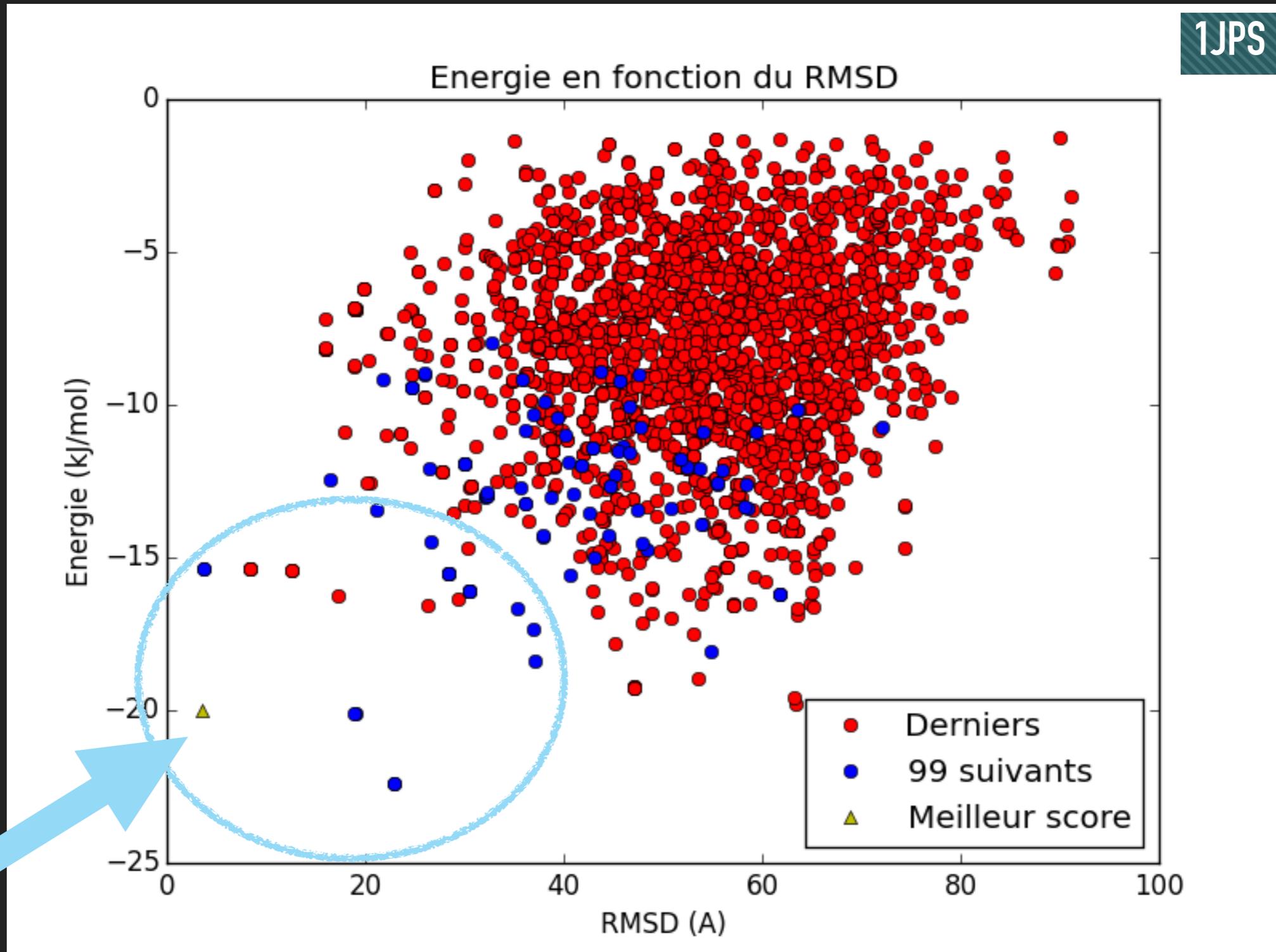
# Résultats et analyse 4/6



# Résultats et analyse 4/6

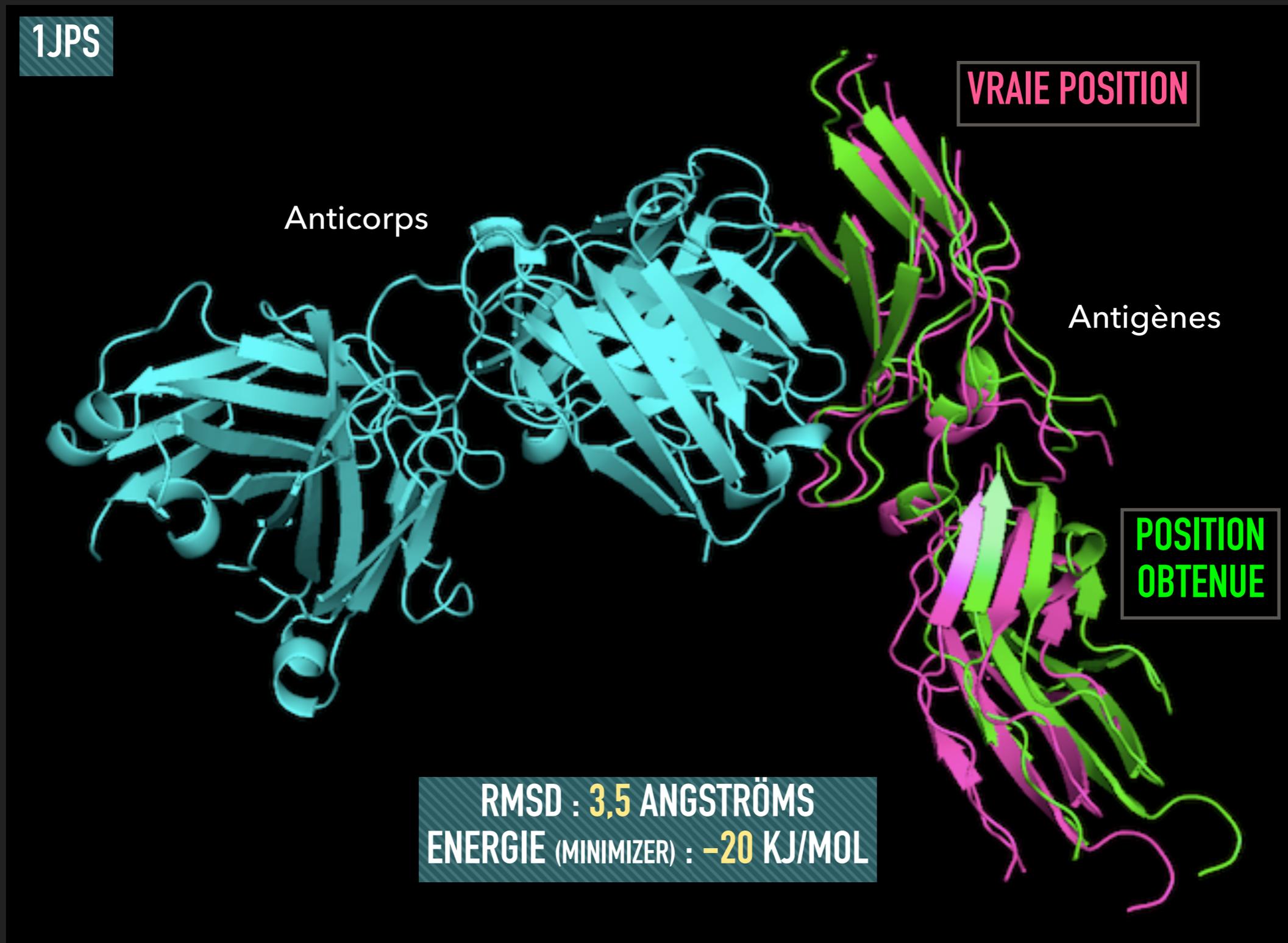


## Résultats et analyse 4/6

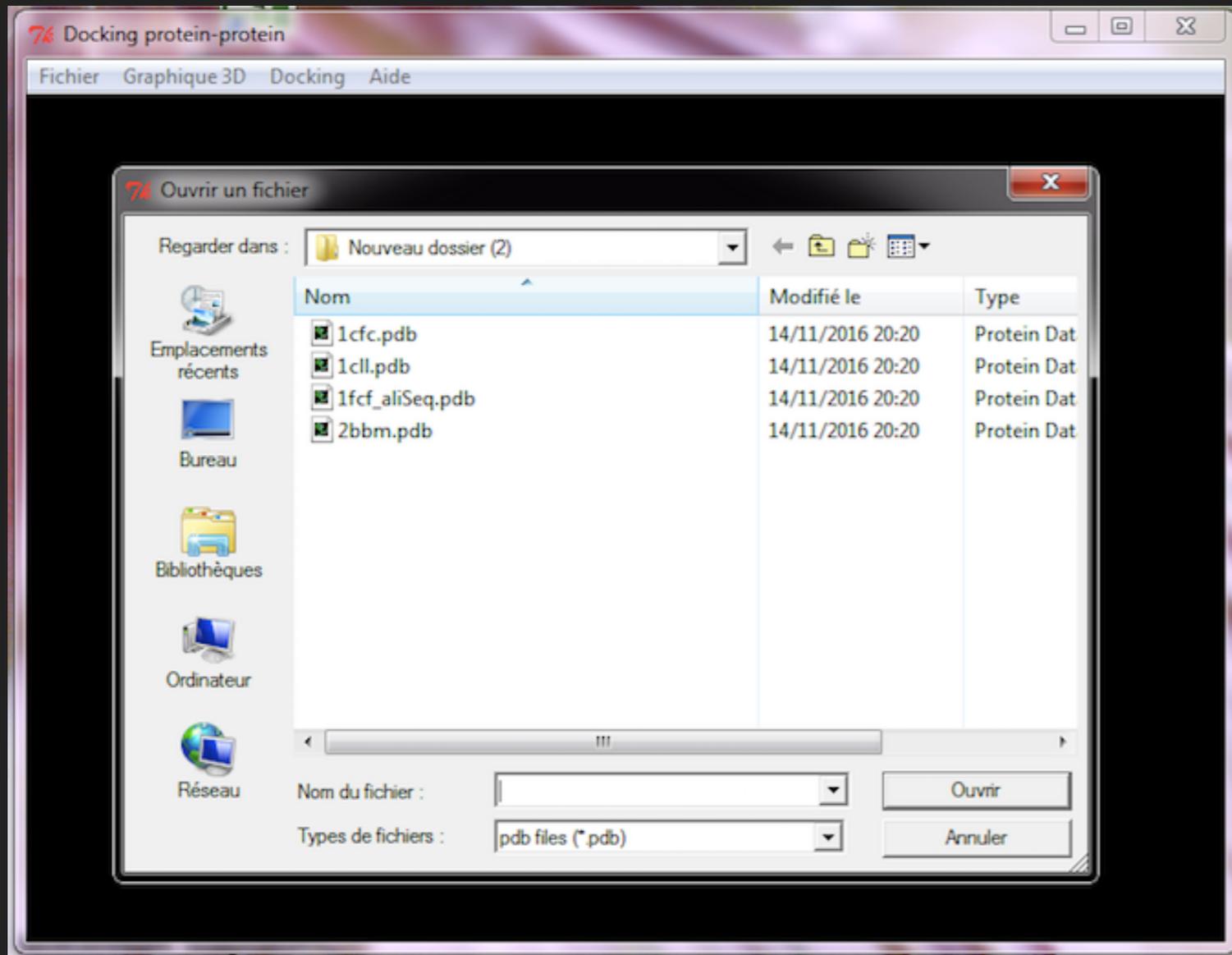
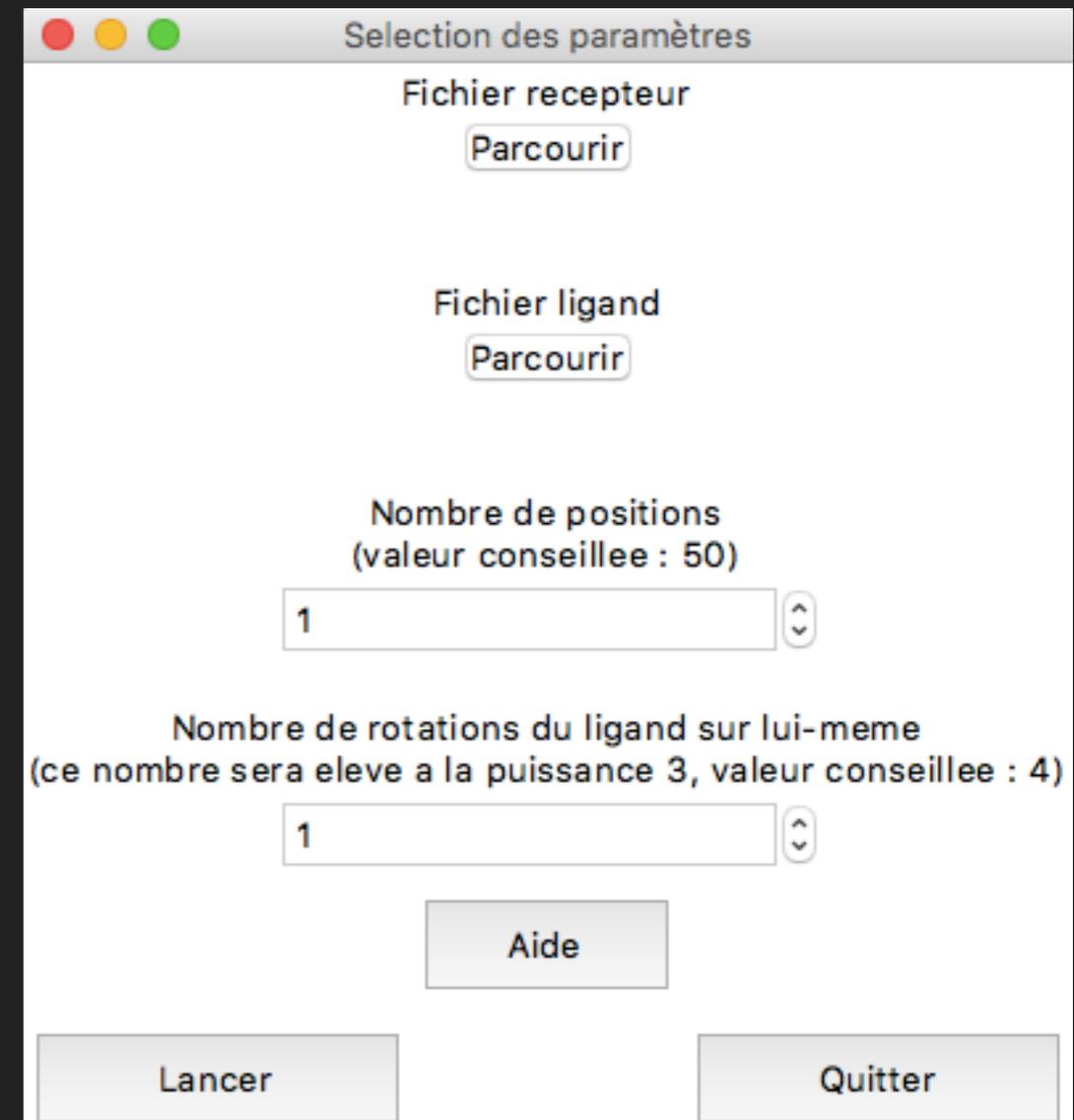




## Résultats et analyse 6/6



# Et pour finir : le petit plus

**VERSION 1.1****VERSION 1.2**

# Perspectives d'avenir

- ▶ **PRÉDICTION DE L'ÉPITOPE**
- ▶ **AFFINER LA RÉOLUTION**
- ▶ **POIDS DANS LE SCORING**
- ▶ **COMPLÉMENTARITÉ STÉRIQUE**

**MERCI POUR VOTRE ATTENTION...**

**ET BON DOCKING !**

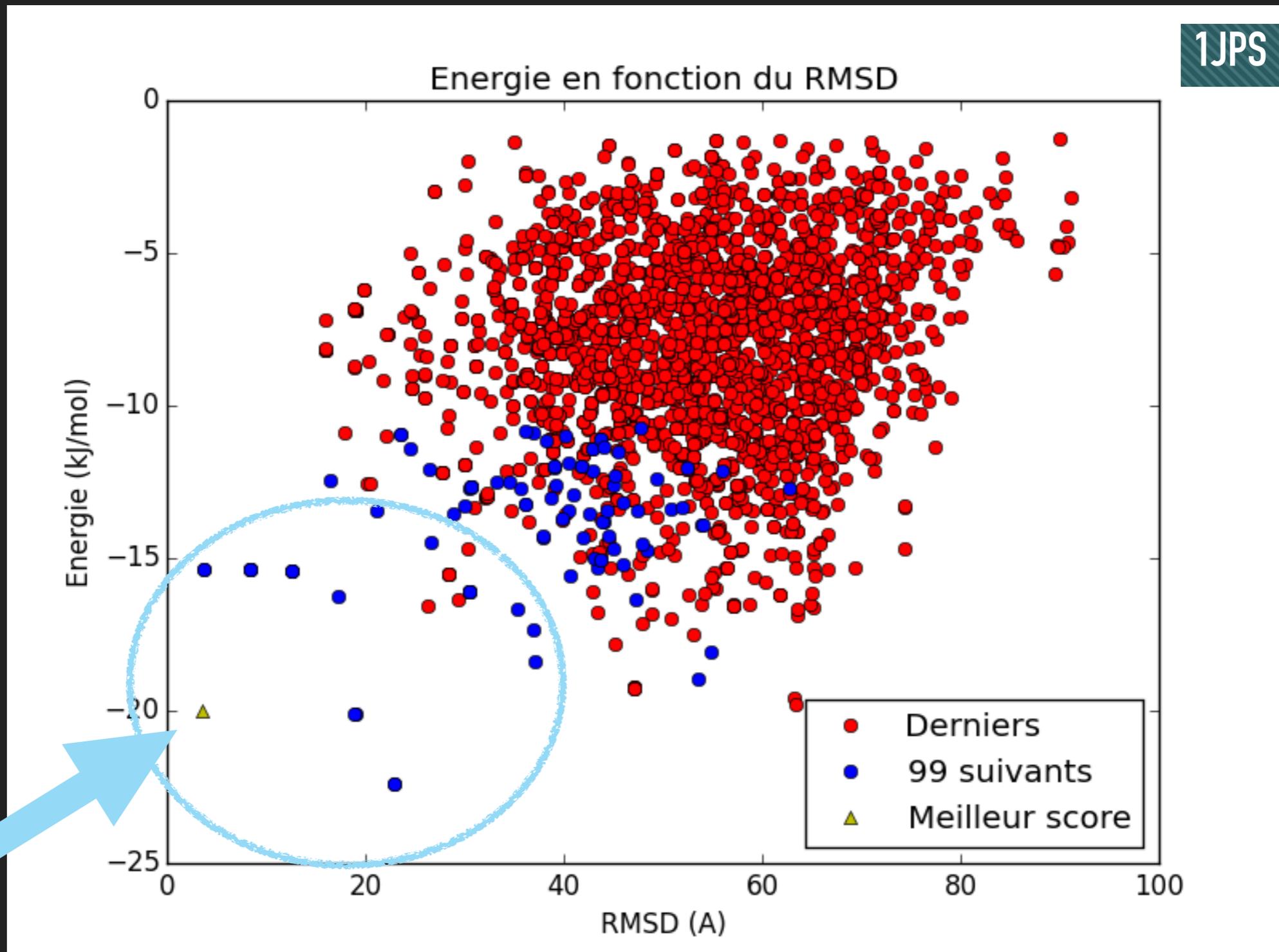
**L'ÉQUIPE D**

**ET LA CITATION DU JOUR :**

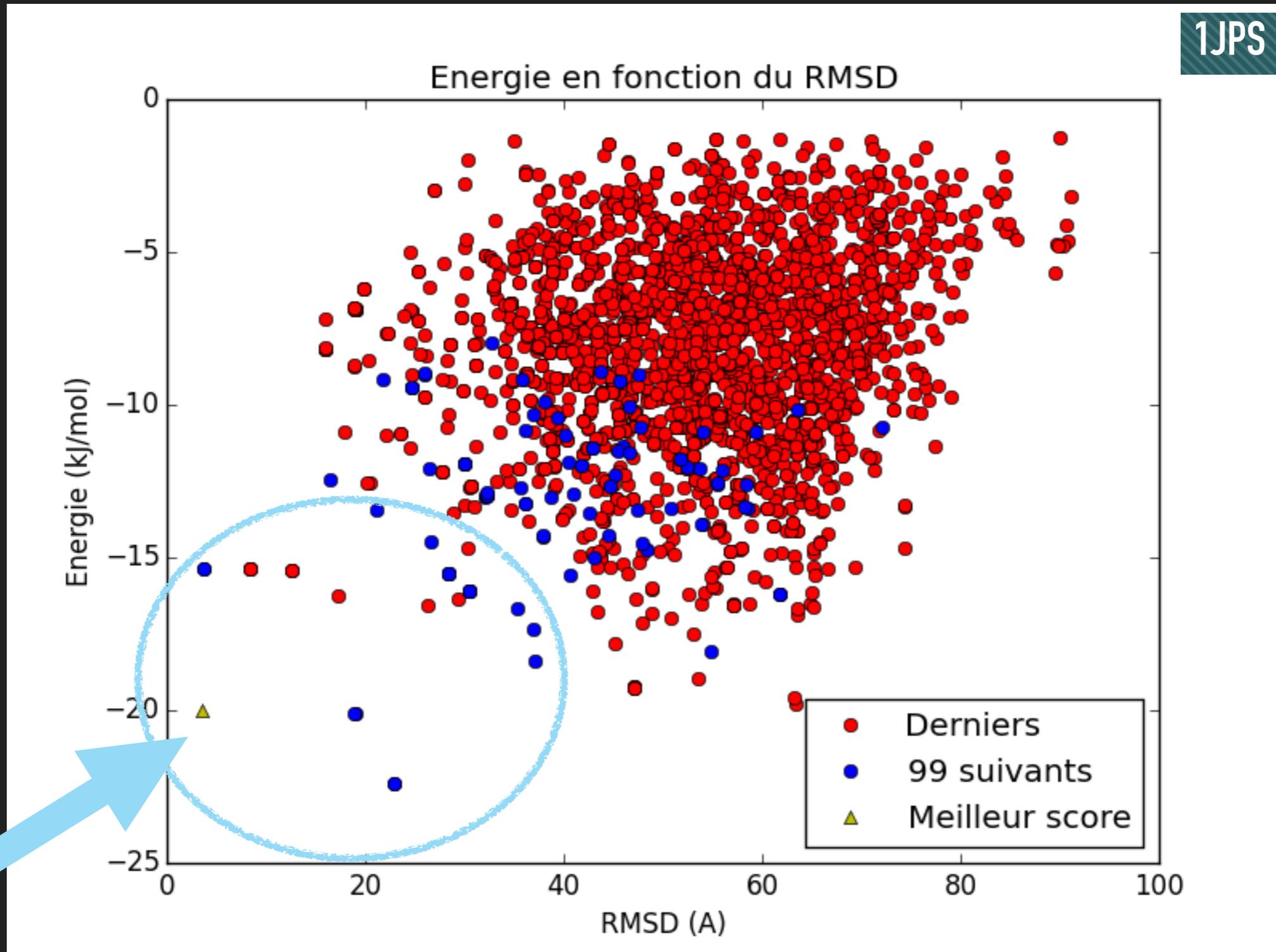
**« TOUT SEUL, ON VA PLUS VITE.  
ENSEMBLE, ON VA PLUS LOIN »»**

**PROVERBE AFRICAIN**

## Annexe 1

SCORING SANS  
POTENTIELS STATISTIQUES

# Résultats et analyse 4/6



## Annexe 2

1JPS

SCORING SANS  
POTENTIELS STATISTIQUES

Rank	Proteine	Score general	CDR	Energie	RMSD	CAPRI	ALGO
1	lig_12_min1	28	10.49	865.10	-19.98	N° 1	N° 1
2	lig_747_min1	46	9.85	841.06	-18.09	N°41	N° 2
3	lig_128_min1	103	8.81	778.65	-20.09	N° 5	N° 3
4	lig_173_min1	103	8.81	778.65	-20.11	N° 4	N° 4
5	lig_15_min1	109	9.26	840.67	-15.35	N° 2	N° 5
6	lig_60_min1	111	9.26	840.67	-15.34	N° 3	N° 6
7	lig_791_min1	142	9.58	837.60	-14.73	N°87	N° 7
8	lig_18_min1	143	9.03	810.70	-15.37	X	N° 8

## Annexe 3

SCORING SANS  
POTENTIELS STATISTIQUES