

## 1. Les méthodes d'apprentissage pour la prédiction des affinités de ligands

Ces articles font partie des articles publiés par Isidro Cortés Ciriano, pendant sa thèse financée par la fondation PPU (Pasteur Paris University) sous ma direction. Isidro est maintenant chef de groupe à European Bioinformatics Institute (EBI) ([www.ebi.ac.uk/research/cortes-ciriano/](http://www.ebi.ac.uk/research/cortes-ciriano/)).

Cortés-Ciriano I, van Westen GJ, Bouvier G, Nilges M, Overington JP, Bender A, **Malliavin TE**. Improved large-scale prediction of growth inhibition patterns using the NCI60 cancer cell line panel. *Bioinformatics*. 2016 Jan 1;32(1):85-95. doi: 10.1093/bioinformatics/btv529. Epub 2015 Sep 8. PMID: 26351271; PMCID: PMC4681992.

Allen CHG, Koutsoukas A, Cortés-Ciriano I, Murrell DS, **Malliavin TE**, Glen RC, Bender A. Improving the prediction of organism-level toxicity through integration of chemical, protein target and cytotoxicity qHTS data. *Toxicol Res (Camb)*. 2016 Mar 3;5(3):883-894. doi: 10.1039/c5tx00406c. PMID: 30090397; PMCID :PMC6062365.

## 2. L'échantillonnage augmenté dans les simulations de dynamique moléculaire

Ces articles ont été produits par le travail de Nathalie Duclert-Savatier, ingénieur de recherches à Pasteur, dont j'assurais l'encadrement en tant que chef de groupe à l'Institut Pasteur. Une publication dans *Biopolymers* en 2016, est le fruit du travail d'un chercheur postdoctoral, Marlet Martínez-Archundia, qui est maintenant chercheur au National Polytechnic Institute à Mexico. Une autre publication dans *BMC Struct Biol* en 2018, est le fruit du stage de M2 de Gilles Lamothe. Gilles est maintenant développeur en intelligence d'entreprise chez Unity.

Chiodo L, **Malliavin TE**, Giuffrida S, Maragliano L, Cottone G. Closed-Locked and Apo-Resting State Structures of the Human  $\alpha 7$  Nicotinic Receptor: A Computational Study. *J Chem Inf Model*. 2018 Nov 26;58(11):2278-2293. doi :10.1021/acs.jcim.8b00412. Epub 2018 Nov 7. PMID: 30359518.

Duclert-Savatier N, Bouvier G, Nilges M, **Malliavin TE**. Conformational sampling of CpxA: Connecting HAMP motions to the histidine kinase function. *PloS One*. 2018 Nov 29;13(11):e0207899. doi: 10.1371/journal.pone.0207899. PMID:30496238; PMCID: PMC6264157.

Duclert-Savatier N, Bouvier G, Nilges M, **Malliavin TE**. Building Graphs To Describe Dynamics, Kinetics, and Energetics in the d-ALA:d-Lac Ligase VanA. *J Chem Inf Model*. 2016 Sep 26;56(9):1762-75. doi: 10.1021/acs.jcim.6b00211. Epub 2016 Sep 12. PMID: 27579990; PMCID: PMC5039762.

Martinez M, Duclert-Savatier N, Betton JM, Alzari PM, Nilges M, **Malliavin TE**. Modification in hydrophobic packing of HAMP domain induces a destabilization of the auto-phosphorylation site in the histidine kinase CpxA. *Biopolymers*. 2016 Oct;105(10):670-82. doi: 10.1002/bip.22864. PMID: 27124288.

Chiodo L, **Malliavin TE**, Maragliano L, Cottone G. A possible desensitized state conformation of the human  $\alpha 7$  nicotinic receptor: A molecular dynamics study. *Biophys Chem*. 2017 Oct;229:99-109. doi: 10.1016/j.bpc.2017.06.010. Epub 2017 Jun 30. PMID: 28697974.

Lamothe G, **Malliavin TE**. re-TAMD: exploring interactions between H3 peptide and YEATS domain using enhanced sampling. *BMC Struct Biol*. 2018 Apr 3;18(1):4. doi: 10.1186/s12900-018-0083-6. PMID: 29615024; PMCID: PMC5883362.

## 3. Les mécanismes moléculaires des interactions hôte-pathogènes

Parmi les publications correspondants à cet axe, il y a celles de la thèse d'Irène Pitard, dont j'ai assuré la direction de 2018 à 2022, grâce à une bourse DGA-CNRS (Toxins en 2019 et *Frontiers in Molecular Biosciences* en 2020). J'ai aussi collaboré à une publication de Yasaman Karami, chercheur postdoctoral à l'Institut Pasteur, qui est sortie dans *Structure* en 2021. Yasaman a été recrutée comme chargé de recherches INRIA au LORIA. Je suis auteur correspondant d'un article

dans Int J Mol Sci en 2021 signé par Elea Paillares, et Landry Tsoumts Meda, qui étaient étudiante en thèse et chercheur postdoctoral sous la direction d’Emmanuel Lemichez.

**Malliavin TE.** Molecular Modeling of the Catalytic Domain of CyaA Deepened the Knowledge of Its Functional Dynamics. *Toxins (Basel)*. 2017 Jun 26;9(7):199. doi: 10.3390/toxins9070199. PMID: 28672846; PMCID: PMC5535146.

Pitard I, **Malliavin TE.** Structural Biology and Molecular Modeling to Analyze the Entry of Bacterial Toxins and Virulence Factors into Host Cells. *Toxins (Basel)*. 2019 Jun 24;11(6):369. doi: 10.3390/toxins11060369. PMID: 31238550; PMCID: PMC6628625.

Pitard I, Monet D, Goossens PL, Blondel A, **Malliavin TE.** Analyzing *In Silico* the Relationship Between the Activation of the Edema Factor and Its Interaction With Calmodulin. *Front Mol Biosci*. 2020 Dec 4;7:586544. doi: 10.3389/fmolb.2020.586544. PMID: 33344505; PMCID: PMC7746812

Paillares E, Marechal M, Swistak L, Tsoumts Meda L, Lemichez E, **Malliavin TE.** Conformational Insights into the Control of CNF1 Toxin Activity by Peptidyl-Prolyl Isomerization: A Molecular Dynamics Perspective. *Int J Mol Sci*. 2021 Sep20;22(18):10129. doi: 10.3390/ijms221810129. PMID: 34576292; PMCID: PMC8467853.

Cottone G, Chiodo L, Maragliano L, Popoff MR, Rasetti-Escargueil C, Lemichez E, **Malliavin TE.** In Silico Conformational Features of Botulinum Toxins A1 and E1 According to Intraluminal Acidification. *Toxins (Basel)*. 2022 Sep 17;14(9):644. doi: 10.3390/toxins14090644. PMID: 36136581; PMCID: PMC9500700.

Karami Y, López-Castilla A, Ori A, Thomassin JL, Bardiaux B, **Malliavin T**, Izadi-Pruneyre N, Francetic O, Nilges M. Computational and biochemical analysis of type IV pilus dynamics and stability. *Structure*. 2021 Dec 2;29(12):1397-1409.e6. doi: 10.1016/j.str.2021.07.008. Epub 2021 Sep 13. PMID: 34520738

Weill FX, Domman D, Njamkepo E, Almesbahi AA, Naji M, Nasher SS, Rakesh A, Assiri AM, Sharma NC, Kariuki S, Pourshafie MR, Rauzier J, Abubakar A, Carter JY, Wamala JF, Seguin C, Bouchier C, **Malliavin T**, Bakhshi B, Abulmaali HHN, Kumar D, Njoroge SM, Malik MR, Kiiru J, Luquero FJ, Azman AS, Ramamurthy T, Thomson NR, Quilici ML. Genomic insights into the 2016-2017 cholera epidemic in Yemen. *Nature*. 2019 Jan;565(7738):230-233. doi: 10.1038/s41586-018-0818-3. Epub 2019 Jan 2. Erratum in: *Nature*. 2019 Feb;566(7745):E14. doi: 10.1038/s41586-019-0966-0. PMID: 30602788; PMCID: PMC6420076.

#### 4. Géométrie de Distance pour le calcul de conformations de protéines

Les publications reliées à l’axe Géométrie de Distance comprennent les articles produits par Bradley Worley, chercheur postdoctoral financé par la Fondation Pasteur de 2016 à 2019 dans mon groupe à l’Institut Pasteur. Par ailleurs, plusieurs chercheurs postdoctoraux recrutés dans le cadre de l’ANR PRCI multiBioStruct : Sammy Khalife, Daniel Förster, Wagner da Rocha, ainsi d’un étudiant en thèse d’Antonio Mucherino aussi recruté par multiBioStruct : Simon Hengeveld, ont participé à la production des articles dans *Bioinformatics Advances* en 2021, dans *Scientific Reports* en 2022 à la production de papiers de conférences à GSI 2023. Daniel Förster est maintenant maître de conférences à l’Université d’Orléans, et Sammy Khalife est chercheur postdoctoral à l’université Johns Hopkins.

Lavor C, Liberti L, Donald B, Worley B, Bardiaux B, **Malliavin TE**, Nilges M. Minimal NMR distance information for rigidity of protein graphs. *Discrete Appl Math*. 2019 Mar 15;256:91-104. doi: 10.1016/j.dam.2018.03.071. Epub 2018 Apr 26. PMID: 30799888; PMCID: PMC6380886.

Worley B, Delhommel F, Cordier F, **Malliavin T**, Bardiaux B, Wolff N, Nilges M, Lavor C, Liberti L. Tuning interval Branch-and-Prune for protein structure determination. *Journal of Global Optimization*, (2018) <https://doi.org/10.1007/s10898-018-0635-0>

**Malliavin TE**, Mucherino A, Lavor C, Liberti L. Systematic Exploration of Protein Conformational Space Using a Distance Geometry Approach. *J Chem Inf Model*. 2019 Oct 28;59(10):4486-4503. doi: 10.1021/acs.jcim.9b00215. Epub 2019 Sep 6. PMID: 31442036.

**Malliavin TE**. Tandem domain structure determination based on a systematic enumeration of conformations. *Sci Rep*. 2021 Aug 19;11(1):16925. doi: 10.1038/s41598-021-96370-z. PMID: 34413388; PMCID: PMC8376923.

Khalife S, **Malliavin T**, Liberti L. Secondary structure assignment of proteins in the absence of sequence information. *Bioinform Adv*. 2021 Nov 29;1(1):vbab038. doi: 10.1093/bioadv/vbab038. PMID: 36700087; PMCID: PMC9710659.

Förster D, Idier J, Liberti L, Mucherino A, Lin JH, **Malliavin\* TE**. Low-resolution description of the conformational space for intrinsically disordered proteins. *Sci Rep*. 2022 Nov 9;12(1):19057. doi: 10.1038/s41598-022-21648-9. PMID: 36352011; PMCID: PMC9646904.

Hengeveld SB, Merabti M, Pascale F, **Malliavin\* TE**. A Study on the Covalent Geometry of Proteins and Its Impact on Distance Geometry. In: Nielsen, F., Barbaresco, F. (eds) *Geometric Science of Information*. GSI 2023. Lecture Notes in Computer Science, vol 14072, pp.520-530, [10.1007/978-3-031-38299-4\\_54](https://doi.org/10.1007/978-3-031-38299-4_54). [hal-04183511](https://arxiv.org/abs/2304.04183)

da Rocha W, Lavor C, Liberti L, **Malliavin\* T**. Pseudo-dihedral Angles in Proteins Providing a New Description of the Ramachandran Map. In: Nielsen, F., Barbaresco, F. (eds) *Geometric Science of Information*. GSI 2023. Lecture Notes in Computer Science, vol 14072, pp.511-519. Springer, Cham [10.1007/978-3-031-38299-4\\_53](https://doi.org/10.1007/978-3-031-38299-4_53). [hal-04185420](https://arxiv.org/abs/2304.04185)

Huang, SY., Chang, CF., Lin, JH., **Malliavin\* TE** (2023). Exploration of Conformations for an Intrinsically Disordered Protein. In: Nielsen, F., Barbaresco, F. (eds) *Geometric Science of Information*. GSI 2023. Lecture Notes in Computer Science, vol 14072, pp 532-540. Springer, Cham. [https://doi.org/10.1007/978-3-031-38299-4\\_55](https://doi.org/10.1007/978-3-031-38299-4_55)