Sujet : Regroupement par les k-means de structures à l'aide d'un alphabet structural

Objectif: Le logiciel PBxplore a été mis à disposition pour traiter des Dynamiques Moléculaires à l'aide d'un alphabet structural, les Blocs Protéiques (Barnoud *et al*, bioarxiv preprint ; https://github.com/pierrepo/PBxplore). Il permet de (i) coder chaque snapshots (structures) à l'aide des Blocs Protéiques, puis (ii) propose une analyse statistique des variations conformationnelles.

Ce projet portera donc sur le regroupement par les k-means de structures, à l'aide d'un alphabet structural. Dans Gromacs, il existe une approche nommée g_cluster qui peut regrouper des structures en utilisant plusieurs méthodes différentes. Ici le principe est de créer k groupes à l'aide de l'encodage des Blocs Protéiques. Deux niveaux de difficulté peuvent être vus (a) la distance est l'identité ou non, (b) avec l'utilisation d'une similarité (les Blocs pouvant se ressembler).

Des simulations de dynamiques moléculaires venant du domaine Calf-1 seront proposés pour tester l'approche (Goguet, Tarwani *et al*, 2017) avec une structure référence (Wild-Type) et/ou des variants associés aux pathologies.

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

Jonathan Barnoud (jonathan@barnoud.net) &

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

Référence : 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.