

**PROPOSITION DE STAGE**  
**Année Universitaire 2016/2017**

A envoyer à Mr Pr Taboureau  
[olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr](mailto:olivier.taboureau@univ-paris-diderot.fr)



**Nom du Responsable du Laboratoire ou de l'Entreprise:**

Affiliation administrative (CNRS, INSERM, ...) et Numéro d'affiliation de l'unité :

UMR7238, CNRS-UPMC

Adresse précise du Laboratoire :

Laboratory of Computational and Quantitative Biology  
UMR 7238 Université Pierre et Marie Curie-CNRS  
Jussieu Campus - Building C - 4th floor  
4, place Jussieu, 75005 Paris  
+33(0)1.44.27.73.45

Nom du Responsable de l'équipe d'accueil (EA) : Alessandra Carbone

E-mail : [Alessandra.Carbone@lip6.fr](mailto:Alessandra.Carbone@lip6.fr)

---

**Nom du Responsable du stage :** Elodie Laine et Alessandra Carbone

Numéro de Téléphone 01 44 27 73 25

Numéro de Télécopie

E-mail : [elodie.laine@upmc.fr](mailto:elodie.laine@upmc.fr)

---

**Titre du stage :**

**Prédiction et caractérisation des interfaces protéiques.**

**Description du sujet (quelques lignes):**

Les processus biologiques sont régulés par un réseau complexe d'interactions dynamiques entre des protéines, des acides nucléiques et des composés chimiques. Pour comprendre et moduler ces interactions, une description fine des contacts physiques entre partenaires est nécessaire. Nous avons développé une méthode, JET2 [Laine and Carbone 2015], qui, étant donnée une protéine d'intérêt, dont on connaît la séquence et la structure, prédit les patches (groupes de résidus) à sa surface qui sont susceptibles d'interagir avec des partenaires cellulaires. JET2 a été appliqué à l'ensemble non-redondant (à 40 % d'identité) des structures de protéines disponibles dans la Protein Data Bank (PDB) [Ripoche et al. 2016].

Le sujet du stage concerne l'amélioration de JET2 et l'exploitation de la base de connaissance générée par son application à toute la PDB. Plusieurs pistes de développement sont envisagées et incluent: (1) optimisation de l'algorithme de clustering des résidus en patch, (2) implémentation d'une nouvelle stratégie de détection de poches de liaison à des petites molécules, (3) incorporation d'information expérimentale pour choisir la stratégie la plus adaptée dépendamment de la protéine considérée, (4) classification des protéines selon les propriétés des patches prédits.