

TER n°12

Docking moléculaire à l'aide d'algorithme d'optimisation : concours CAPRI

Sébastien Verel, département informatique, Sébastien Fiorucci, département de Chimie,
e-mail: sebastien.verel@unice.fr; sebastien.fiorucci@unice.fr

Nombre d'étudiants souhaités: jusqu'à 4

Description du sujet

Le docking moléculaire consiste à déterminer la position relative de deux molécules (un ligand et un récepteur). La structure obtenue confère les propriétés à l'ensemble (le complexe) ainsi formé. Par exemple, la recherche de 'bonne' structure est cruciale dans la conception de nouveau médicament. Ou encore, selon l'association de 2 protéines, le signal déclenché lors de leur association peut être différent.

D'un point de vue informatique, la prédiction de structure se traduit par un problème d'optimisation. A chaque position relative possible est associé un score. La structure la plus probable est alors celle qui minimise ce score.

CAPRI est un concours de prédiction de structure de complexe protéique. Ce concours est organisé sous forme de tour (2-3 tours /an) où la structure expérimentale d'un complexe doit être retrouvée à partir des objets isolés. Cette recherche se fait sans connaître la structure du complexe (blind test). Tous les 2 ans une conférence fait le point des meilleures méthodes proposées.

Il s'agit dans ce travail de TER de participer à ce concours en proposant de nouvelles approches d'optimisation adaptées au problème de docking.

Les méthodes d'optimisation pourront être des algorithmes évolutionnaires de type "evolution strategy" ou plus largement des métaheuristiques. On pourra envisager de paralléliser ou de distribuer ces méthodes soit en parallélisant le calcul du score, ou en utilisant des algorithmes évolutionnaires en îles.

Pour faire partager à la communauté scientifique ce travail, il sera envisageable d'intégrer ce nouvel outil sur un serveur web hébergé à Nice et qui intégrera un cloud computing déjà existant (plateforme Mobyle)

Description détaillée

1. Etude préliminaire :
 - problème de docking
 - bibliothèque PTools dédié au docking
 - concours CAPRI
2. Développement incrémental d'algorithmes d'optimisation
3. Test des différents méthodes sur le benchmark proposé par le concours CAPRI
4. Proposer une méthode parallèle ou distribué (optionnel)
5. Mise en place d'un serveur web basé sur la plateforme Mobyle

Lieu

Petit Valrose (Nice) ou Laboratoire I3S, bâtiment Luciole.

Une poursuite en stage est possible cet été.

Prérequis

programmation c++ ou python

Informations complémentaires

Lien utiles :

- Docking moléculaire : [http://en.wikipedia.org/wiki/Docking_\(molecular\)](http://en.wikipedia.org/wiki/Docking_(molecular))
- Concours CAPRI : <http://www.ebi.ac.uk/msd-srv/capri/>
- métaheuristiques : <http://fr.wikipedia.org/wiki/Métaheuristique>
- stratégies d'évolution : http://fr.wikipedia.org/wiki/Stratégies_d%27évolution
- page web du sujet de TER :

<http://www.i3s.unice.fr/~verel/TEACHING/12-13/TER/index.html>