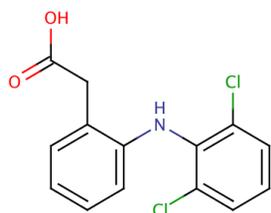


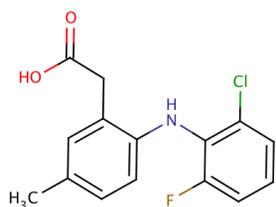
Retrouve ces fragments dans les molécules. Mets un 1 dans les cases correspondantes si tu les trouves et 0 sinon.

Diclofenac

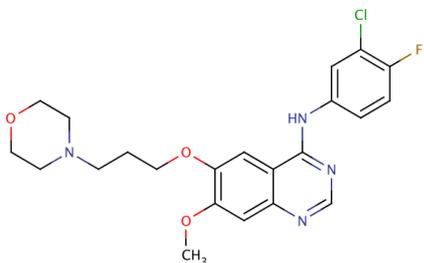


1	1	1	0	1	0	0	0

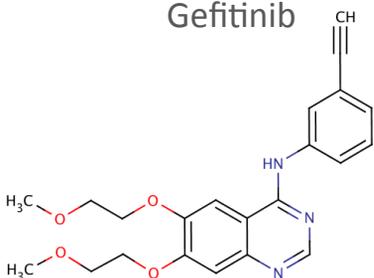
Lumiracoxib



Erlotinib



Gefitinib



Calcul de similarité

Coefficient de Tanimoto

$$T = \frac{M_{11}}{M_{11} + M_{10} + M_{01}}$$

M_{11} : nombre de cases où l'on trouve 1 à la fois chez A et chez B

M_{10} : nombre de cases où l'on trouve 1 chez A et 0 chez B

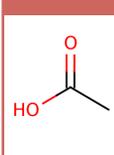
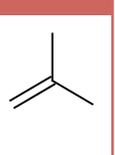
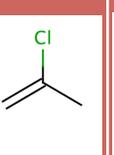
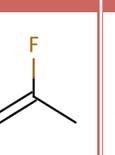
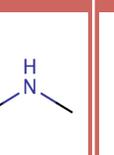
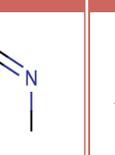
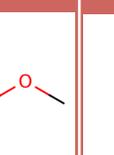
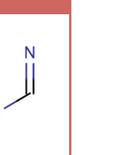
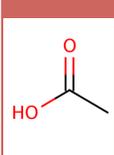
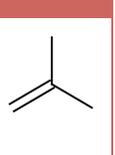
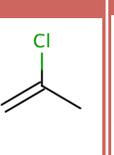
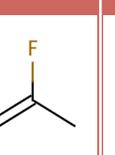
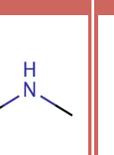
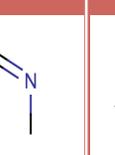
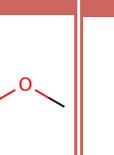
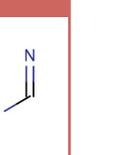
M_{01} : nombre de cases où l'on trouve 0 chez A et 1 chez B

$$0 \leq T \leq 1$$

T = 0 : molécules totalement différentes

T = 1 : molécules identiques

Exemple:

A								
	1	1	1	0	1	0	0	0
B								
	1	1	0	1	1	0	0	1

$$M_{11} = 3$$

$$M_{10} = 1$$

$$M_{01} = 2$$



$$T = \frac{3}{3+1+2} = 0.5$$



Calcul de similarité

Coefficient de Tanimoto

$$T = \frac{M_{11}}{M_{11} + M_{10} + M_{01}}$$

M_{11} : nombre de cases où l'on trouve 1 à la fois chez A et chez B

M_{10} : nombre de cases où l'on trouve 1 chez A et 0 chez B

M_{01} : nombre de cases où l'on trouve 0 chez A et 1 chez B

$$0 \leq T \leq 1$$

T = 0 : molécules totalement différentes

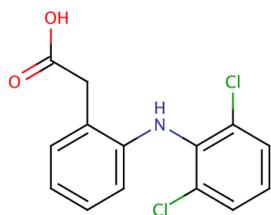
T = 1 : molécules identiques

	Diclofenac	Lumiracoxib	Erlotinib	Gefinitib
Diclofenac				
Lumiracoxib				
Erlotinib				
Gefinitib				

Quelles sont les paires de molécules les plus similaires?

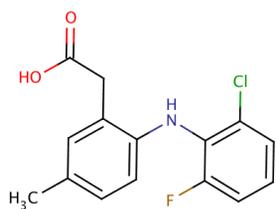
Réponse

Diclofenac



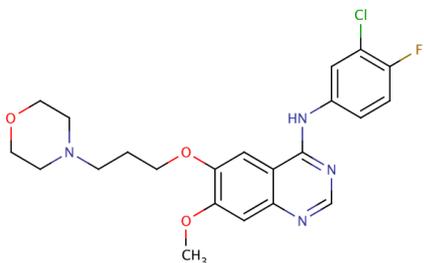
1	1	1	0	1	0	0	0

Lumiracoxib



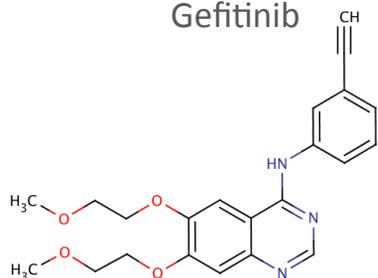
1	1	1	1	1	0	0	0

Erlotinib



0	1	1	1	1	1	1	1

Gefitinib



0	1	0	0	1	1	1	1

Calcul de similarité

Coefficient de Tanimoto

$$T = \frac{M_{11}}{M_{11} + M_{10} + M_{01}}$$

M_{11} : nombre de cases où l'on trouve 1 à la fois chez A et chez B

M_{10} : nombre de cases où l'on trouve 1 chez A et 0 chez B

M_{01} : nombre de cases où l'on trouve 0 chez A et 1 chez B

$$0 \leq T \leq 1$$

T = 0 : molécules totalement différentes

T = 1 : molécules identiques

	Diclofenac	Lumiracoxib	Erlotinib	Gefinitib
Diclofenac	1	0.80	0.37	0.29
Lumiracoxib		1	0.50	0.25
Erlotinib			1	0.71
Gefinitib				1

Les paires de molécules les plus similaires sont:

- diclofenac et lumiracoxib, tous deux inhibiteurs de COX
- erlotinib et gefinitib, tous deux inhibiteurs d'EGFR

