

Software

Open Access

ElliPro: a new structure-based tool for the prediction of antibody epitopes

Julia Ponomarenko^{*1,2}, Huynh-Hoa Bui³, Wei Li, Nicholas Fusseder, Philip E Bourne^{1,2}, Alessandro Sette⁴ and Bjoern Peters⁴

Address: ¹San Diego Supercomputer Center, University of California, San Diego, 9500 Gilman Drive, La Jolla, California 92093, USA, ²Skaggs School of Pharmacy and Pharmaceutical Sciences, University of California, San Diego, 9500 Gilman Drive, La Jolla, California 92093, USA, ³Isis Pharmaceuticals, Inc., 1896 Rutherford Road, Carlsbad, California 92008, USA and ⁴La Jolla Institute for Allergy and Immunology, 9420 Athena Circle, La Jolla, California 92037, USA

Email: Julia Ponomarenko^{*} - jpon@sdsc.edu; Huynh-Hoa Bui - hbui@isisph.com; Wei Li - weilee.li@gmail.com; Nicholas Fusseder - fusseder@gmail.com; Philip E Bourne - bourne@sdsc.edu; Alessandro Sette - alex@liai.org; Bjoern Peters - bpeters@liai.org

^{*} Corresponding author

Published: 2 December 2008

Received: 24 September 2008

BMC Bioinformatics 2008, 9:514 doi:10.1186/1471-2105-9-514

Accepted: 2 December 2008

This article is available from: <http://www.biomedcentral.com/1471-2105/9/514>

© 2008 Ponomarenko et al; licensee BioMed Central Ltd.

This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (<http://creativecommons.org/licenses/by/2.0>), which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Abstract

Background: Reliable prediction of antibody, or B-cell, epitopes remains challenging yet highly desirable for the design of vaccines and immunodiagnostics. A correlation between antigenicity, solvent accessibility, and flexibility in proteins was demonstrated. Subsequently, Thornton and colleagues proposed a method for identifying continuous epitopes in the protein regions protruding from the protein's globular surface. The aim of this work was to implement that method as a web-tool and evaluate its performance on discontinuous epitopes known from the structures of antibody-protein complexes.

Results: Here we present ElliPro, a web-tool that implements Thornton's method and, together with a residue clustering algorithm, the MODELLER program and the Jmol viewer, allows the prediction and visualization of antibody epitopes in a given protein sequence or structure. ElliPro has been tested on a benchmark dataset of discontinuous epitopes inferred from 3D structures of antibody-protein complexes. In comparison with six other structure-based methods that can be used for epitope prediction, ElliPro performed the best and gave an AUC value of 0.732, when the most significant prediction was considered for each protein. Since the rank of the best prediction was at most in the top three for more than 70% of proteins and never exceeded five, ElliPro is considered a useful research tool for identifying antibody epitopes in protein antigens. ElliPro is available at <http://tools.immuneepitope.org/tools/ElliPro>.

Conclusion: The results from ElliPro suggest that further research on antibody epitopes considering more features that discriminate epitopes from non-epitopes may further improve predictions. As ElliPro is based on the geometrical properties of protein structure and does not require training, it might be more generally applied for predicting different types of protein-protein interactions.

Background

An antibody epitope, aka B-cell epitope or antigenic determinant, is a part of an antigen recognized by either a particular antibody molecule or a particular B-cell receptor of the immune system [1]. For a protein antigen, an epitope may be either a short peptide from the protein sequence, called a continuous epitope, or a patch of atoms on the protein surface, called a discontinuous epitope. While continuous epitopes can be directly used for the design of vaccines and immunodiagnostics, the objective of discontinuous epitope prediction is to design a molecule that can mimic the structure and immunogenic properties of an epitope and replace it either in the process of antibody production—in this case an epitope mimic can be considered as a prophylactic or therapeutic vaccine—or antibody detection in medical diagnostics or experimental research [2,3].

If continuous epitopes can be predicted using sequence-dependent methods built on available collections of immunogenic peptides (for review see [4]), discontinuous epitopes—that are mostly the case when a whole protein, pathogenic virus, or bacteria is recognized by the immune system—are difficult to predict or identify from functional assays without knowledge of a three-dimensional (3D) structure of a protein [5,6]. The first attempts at epitope prediction based on 3D protein structure began in 1984 when a correlation was established between crystallographic temperature factors and several known continuous epitopes of tobacco mosaic virus protein, myoglobin and lysozyme [7]. A correlation between antigenicity, solvent accessibility, and flexibility of antigenic regions in proteins was also found [8]. Thornton and colleagues [9] proposed a method for identifying continuous epitopes in the protein regions protruding from the protein's globular surface. Regions with high protrusion index values were shown to correspond to the experimentally determined continuous epitopes in myoglobin, lysozyme and myohaemerythrin [9].

Here we present ElliPro (derived from *Ellipsoid* and *Protrusion*), a web-tool that implements a modified version of Thornton's method [9] and, together with a residue clustering algorithm, the MODELLER program [10] and the Jmol viewer, allows the prediction and visualization of antibody epitopes in protein sequences and structures. ElliPro has been tested on a benchmark dataset of epitopes inferred from 3D structures of antibody-protein complexes [11] and compared with six structure-based methods, including the only two existing methods developed specifically for epitope prediction, CEP [12] and DiscoTope [13]; two protein-protein docking methods, DOT [14] and PatchDock [15]; and two structure-based methods for protein-protein binding site prediction, PPI-

PRED [16] and ProMate [17]. ElliPro is available at <http://tools.immuneepitope.org/tools/ElliPro>.

Implementation

The tool input

ElliPro is implemented as a web accessible application and accepts two types of input data: protein sequence or structure (Fig. 1, Step 1). In the first case, the user may input either a protein SwissProt/UniProt ID or a sequence in either FASTA format or single letter codes and select threshold values for BLAST e-value and the number of structural templates from PDB that will be used to model a 3D structure of the submitted sequence (Fig. 1, Step 2a). In the second case, the user may input either a four-character PDB ID or submit her own PDB file in PDB format (Fig. 1, Step 2b). If the submitted structure consists of more than one protein chain, ElliPro will ask the user to select the chain(s) upon which to base the calculation. The user can change threshold values on the parameters used by ElliPro for epitope prediction, namely, the minimum residue score (protrusion index), denoted here as *S*, between 0.5 and 1.0 and the maximum distance, denoted as *R*, in the range 4 – 8 Å.

3D Structure Modeling

If a protein sequence is used as input, ElliPro searches for the protein or its homologues in PDB [18], using a BLAST search [19]. If a protein cannot be found in PDB that matches the BLAST criteria, MODELLER [10] is run to predict the protein 3D structure. The user may change the threshold values for BLAST e-value and a number of templates that MODELLER uses as an input (Fig. 1, Step 2a).

ElliPro Method

ElliPro implements three algorithms performing the following tasks: (i) approximation of the protein shape as an ellipsoid [20]; (ii) calculation of the residue protrusion index (PI) [9]; and (iii) clustering of neighboring residues based on their PI values.

Thornton's method for continuous epitope prediction was based on the two first algorithms and only considered C α atoms [9]. It approximated the protein surface as an ellipsoid, which can vary in sizes to include different percentages of the protein atoms; for example, the 90% ellipsoid includes 90% of the protein atoms. For each residue, a protrusion index (PI) was defined as percentage of the protein atoms enclosed in the ellipsoid at which the residue first becomes lying outside the ellipsoid; for example, all residues that are outside the 90% ellipsoid will have PI = 9 (or 0.9 in ElliPro). In implementing the first two algorithms, ElliPro differs from Thornton's method by considering each residue's center of mass rather than its C α atom.

IEDB Analysis Resource

[ElliPro Prediction](#) | [Example Data](#) | [Tutorial](#)

ElliPro: Antibody Epitope Prediction

Step 1. Input type

Choose an input type:

☒ Protein sequence (Go to step 2a)
☐ Protein structure (Go to step 2b)

Step 2a. Protein sequence

Enter a protein swiss-prot ID: (example: P02185)

Or enter a protein linear sequence in PLAIN or FASTA format:

Blast expectation value: (Default is 0.01)

Maximum number of 3D structural template(s): (Default is 5)

Step 2b. Protein structure

Enter a 4 letter code PDB ID: (example: 5LYM)

Or enter a protein structure PDB file:

Step 3. Epitope prediction parameters

Minimum score: (Default is 0.7)

Maximum distance (Angstrom): (Default is 6)

Figure 1
Screen shot of ElliPro input page.

The third algorithm for clustering residues defines a discontinuous epitope based on the threshold values for the protrusion index S and the distance R between each residue's centers of mass. All protein residues with a PI values greater than S are considered when calculating discontinuous epitopes. Clustering separate residues into discontinuous epitopes involves three steps that are recursively repeated until distinct clusters with no overlapping residues are formed. First, primary clusters are formed from single residues and their neighboring residues within the distance R . Second, secondary clusters are formed from primary clusters where at least three centers of mass are within the distance R from each other. Third, tertiary clusters are formed from secondary clusters which contain common residues. These tertiary clusters of residues represent distinct discontinuous epitopes predicted in the protein. The score for each epitope is defined as a PI value averaged over epitope residues.

3D visualization of Predicted Epitopes

An open-source molecular viewer Jmol [21] was used to visualize linear and discontinuous epitopes on the protein 3D structure. An example of epitope visualization is shown in Fig. 2.

Results and Discussion

For evaluation of ElliPro performance and comparison with other methods we used a previously established benchmark approach for discontinuous epitopes [11]. We tested ElliPro on a dataset of 39 epitopes present in 39 protein structures where only one discontinuous epitope was known based on 3D structures of two-chain antibody fragments with one-chain protein antigens [11].

Depending on the threshold values for parameters R and S , ElliPro predicted different number of epitopes in each protein; for an R of 6Å and S of 0.5, the average number

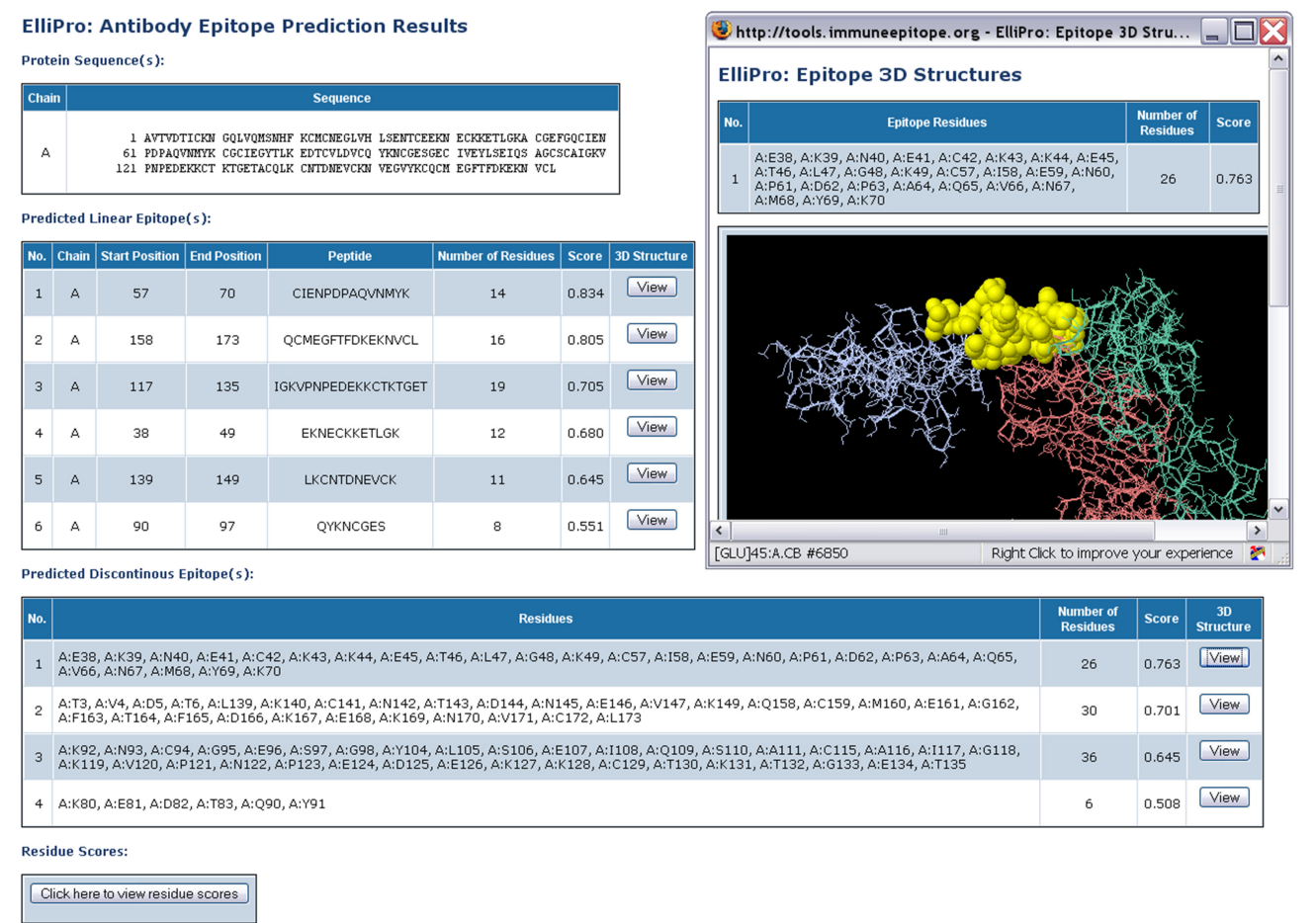


Figure 2
Screen shots of the ElliPro result page for *Plasmodium vivax* ookinete surface protein Pvs25 [PDB: 1Z3G, chain A] and Jmol visualization of the first of the four predicted epitopes. The epitope residues are in yellow, the rest of the protein is in violet, antibody chains are in green and brown.

of predicted epitopes in each protein analyzed was 4, with a variance from 2 to 8. For example, for *Plasmodium vivax* ookinete surface protein Pvs25 [PDB: 1Z3G, chain A], ElliPro predicted four epitopes with scores of 0.763, 0.701, 0.645, and 0.508, respectively (Fig. 2).

For each predicted epitope in each protein, we calculated the correctly (TP) and incorrectly predicted epitope residues (FN) and non-epitope residues, which were defined as all other protein residues (TN and FN). The statistical significance of a prediction, that is, the difference between observed and expected frequencies of an actual epitope/non-epitope residue in the predicted epitope/non-epitope, was determined using Fisher's exact test (right-tailed). The prediction was considered significant if the *P*-value was = 0.05. Then, for each prediction the following parameters were calculated:

Sensitivity (recall or true positive rate (TPR)) = $TP / (TP + FN)$ – a proportion of correctly predicted epitope residues (TP) with respect to the total number of epitope residues (TP+FN).

Specificity (or 1 – false positive rate (FPR)) = $1 - FP / (TN + FP)$ – a proportion of correctly predicted non-epitope residues (TN) with respect to the total number of non-epitope residues (TN+FP).

Positive predictive value (PPV) (precision) = $TP / (TP + FP)$ – a proportion of correctly predicted epitope residues (TP)

Table 1: Overall performance of ElliPro in comparison with other methods#.

	ElliPro (radius 6Å)				PPI-PRED		PatchDock		ClusPro (DOT)			
	Best prediction (score 0.5)	Average (score 0.5)	1st prediction (score 0.7)	ProMate (patch)	1st patch	best patch	1st model	best model of top 10	1st model	best model of top 10	CEP (average)	DiscoTope (-7.7)
Overall statistics												
sensitivity	0.601	0.165	0.093	0.091	0.153	0.331	0.300	0.425	0.258	0.453	0.310	0.416
I-specificity	0.138	0.109	0.047	0.083	0.161	0.135	0.135	0.114	0.079	0.067	0.223	0.214
precision	0.291	0.119	0.158	0.101	0.083	0.188	0.175	0.262	0.235	0.390	0.110	0.155
accuracy	0.840	0.832	0.879	0.841	0.780	0.819	0.816	0.846	0.863	0.892	0.739	0.754
AUC	0.732	0.528	0.523	0.504	0.496	0.598	0.583	0.656	0.589	0.693	0.544	0.601
P-value	0.00E+00	1.37E-04	9.52E-06	2.74E-01	1.0E+00	7.8E-30	9.0E-23	0.0E+00	7.9E-34	0.0E+00	4.3E-06	4.1E-25
Statistics averaged over epitopes												
sensitivity	0.58 ± 0.25	0.17 ± 0.10	0.10 ± 0.20	0.09 ± 0.17	0.15 ± 0.24	0.34 ± 0.32	0.29 ± 0.26	0.42 ± 0.29	0.25 ± 0.31	0.46 ± 0.28	0.34 ± 0.28	0.43 ± 0.31
I-specificity	0.12 ± 0.10	0.11 ± 0.04	0.05 ± 0.03	0.08 ± 0.03	0.16 ± 0.07	0.14 ± 0.07	0.15 ± 0.06	0.13 ± 0.07	0.10 ± 0.07	0.08 ± 0.05	0.28 ± 0.20	0.22 ± 0.15
precision	0.44 ± 0.22	0.13 ± 0.06	0.16 ± 0.28	0.11 ± 0.20	0.10 ± 0.17	0.21 ± 0.24	0.19 ± 0.20	0.30 ± 0.25	0.25 ± 0.33	0.41 ± 0.29	0.11 ± 0.08	0.18 ± 0.12
accuracy	0.85 ± 0.08	0.82 ± 0.05	0.87 ± 0.05	0.83 ± 0.05	0.77 ± 0.07	0.81 ± 0.08	0.80 ± 0.08	0.83 ± 0.09	0.84 ± 0.09	0.88 ± 0.07	0.69 ± 0.17	0.74 ± 0.12
AUC	0.73 ± 0.11	0.53 ± 0.03	0.53 ± 0.10	0.51 ± 0.09	0.50 ± 0.13	0.60 ± 0.17	0.57 ± 0.14	0.64 ± 0.17	0.58 ± 0.17	0.69 ± 0.15	0.53 ± 0.08	0.60 ± 0.13

– best prediction, patch, or model corresponds to the most significant (minimal P-value) of the predicted epitopes

with respect to the total number of predicted epitope residues (TP+FN).

Accuracy (ACC) = $(TP + TN)/(TP + FN + FP + TN)$ – a proportion of correctly predicted epitope and non-epitope residues with respect to all residues.

Area under the ROC Curve (AUC) – area under a graph representing a dependency of TPR against FPR; that is, sensitivity against 1-specificity. The AUC gives the general performance of the method and is "equivalent to the probability that the classifier will rank a randomly chosen positive instance higher than a randomly chosen negative instance" [22].

For example, for the first predicted epitope in *Plasmodium vivax* ookinete surface protein Pvs25 [PDB:1Z3G, chain A] (Fig. 2), for an *R* of 6Å and *S* of 0.5, TP = 13, FP = 13, TN = 156, FN = 4, P-value = 5.55E-10, giving a sensitivity of 0.76, a specificity of 0.92, an accuracy of 0.91, and an AUC of 0.84. The results and detailed statistics of ElliPro performance for each epitope and other threshold values for *R* and *S* are provided in the supplementary materials [see Additional file 1].

The statistics averaged over all epitopes and overall statistics calculated from FP, FN, TP, and TN values summarized for the whole pool of epitope and non-epitope residues are presented in Table 1 and Fig. 3. The results for the methods other than ElliPro have been obtained as described in [11]. ElliPro performed best, by AUC values, with the score *S* set at 0.7 and the distance *R* set at 6Å when the prediction with the highest score was considered for each protein and with the score *S* set at 0.5 and the distance *R* set at 6Å when the best by significance or average prediction was taken into account. Results are described using these thresholds (Table 1, Fig. 3); the results at other threshold values are provided in the supplementary materials [see Additional file 1].

ElliPro's top predictions, that are those with the highest scores, correlated poorly with the discontinuous epitopes known from 3D structures of antibody-protein complexes (Table 1, overall statistics, AUC = 0.523). DiscoTope and the first models from the docking methods performed better, giving AUC values above 0.6, whereas protein-protein binding site predicting methods, ProMate and PPI-PRED, performed worse. However, when the first predictions with the highest score were considered, ElliPro was the best among all the methods based on specificity (1-specificity = 0.047) and comparable with DiscoTope by precision (PPV = 0.158) (Table 1, overall statistics).

In a next set of metrics, we compared the performance between prediction methods when choosing the best hit

within the top 10 predictions of each method. This approach takes into account that each antigen harbors multiple distinct binding sites for different antibodies. Therefore it is expected that the top predicted site is not necessarily recognized by the specific antibody used in the dataset. This comparison directly applies only to the docking methods DOT and PatchDock as well as ElliPro. For DiscoTope, only one epitope is predicted, while for CEP no ranking is available to identify the top 10 predictions.

The docking methods DOT and PatchDock have an intrinsic advantage in this comparison over ElliPro, because they use structures of both protein antigen and antibody from the same antibody-protein complex in order to predict binding sites. To our surprise, when the best significant prediction was considered for each protein, ElliPro nevertheless gave the highest AUC value of 0.732, the highest sensitivity of 0.601 and the second highest precision value of 0.29 among all the compared methods (Table 1; Fig. 3, red circle). The docking methods gave the AUC values of 0.693 for DOT and 0.656 for PatchDock, when also the best prediction of the top ten was considered (Table 1, overall statistics; Fig. 3). The average number of predicted epitopes for the analyzed proteins was four, with the rank of the best prediction at most fifth; for more than a half of proteins the rank was first or second, and the rank first, second, or third for more than 70% of all proteins [see Additional file 1].

ElliPro is based on simple concepts. First, regions protruding from the globular surface of the protein are more available for interaction with an antibody [9] and second those protrusions can be determined by treating the protein as a simple ellipsoid [20]. Obviously, this is not always the case, especially for multi-domain or large single-domain proteins. However, no correlation between the protein size, which varied from 51 to 429 residues with an average value of 171, or number of domains (8 proteins among the 39 analyzed contained more than one domain) and ElliPro performance was found (data not shown).

Conclusion

ElliPro is a web-based tool for the prediction of antibody epitopes in protein antigens of a given sequence or structure. It implements a previously developed method that represents the protein structure as an ellipsoid and calculates protrusion indexes for protein residues outside of the ellipsoid. ElliPro was tested on a benchmark dataset of discontinuous epitopes inferred from 3D structures of antibody-protein complexes. In comparison with six other structure-based methods that can be used for epitope prediction, ElliPro performed the best (AUC value of 0.732) when the most significant prediction was considered for each protein. Since the rank of the best predic-

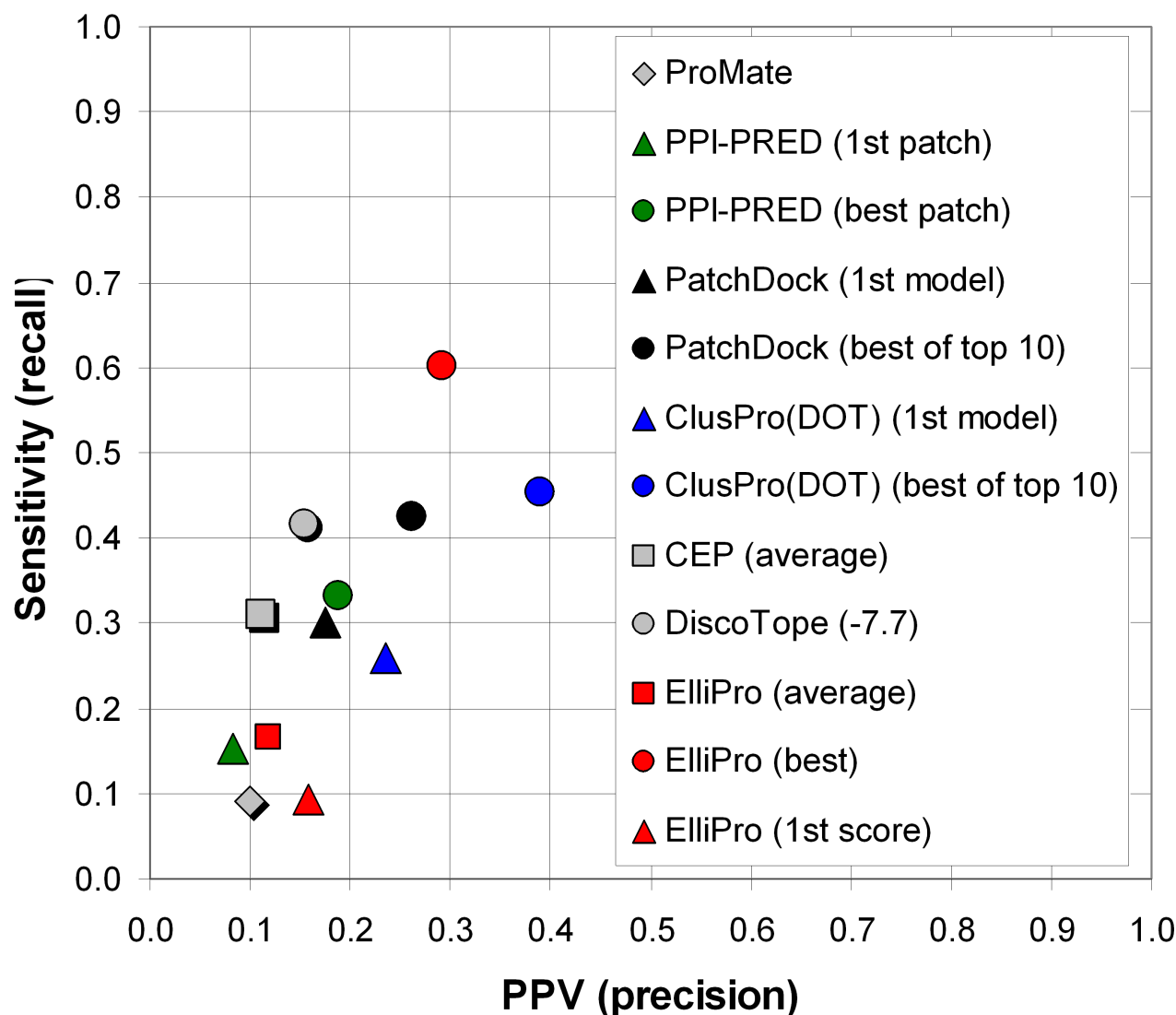


Figure 3
Overall ElliPro performance in comparison with other methods.

tion was at most three in more than 70% of proteins and never exceeded five, ElliPro is considered a potentially useful research tool for identifying antibody epitopes in protein antigens.

While ElliPro was tested on antibody-protein binding sites, it might be interesting to test it on other protein-protein interactions since it implements a method that is based on geometrical properties of protein structure and does not require training.

Comparison with DiscoTope, which is based on training and utilizes epitope features such as amino acid propensities, residue solvent accessibility, spatial distribution, and inter-molecular contacts, suggests that further research on antibody epitopes which considers more features that discriminate epitopes from non-epitopes may improve the prediction of antibody epitopes.

Availability and requirements

- Project name: ElliPro

- Project home page: <http://tools.immuneepitope.org/tools/ElliPro>
- Operating system(s): Platform independent
- Programming language: Java
- Other requirements: None
- License: None
- Any restrictions to use by non-academics: None

Abbreviations

PI: protrusion index; TP: true positives; FP: false positives; TN: true negatives; FN: false negatives; ROC: Receiver Operating Characteristics; AUC: area under the ROC curve.

Authors' contributions

HHB conceived, designed and programmed the tool. JVP tested the tool and wrote the manuscript. WL and NF participated in programming the tool. PEB, BP and AS contributed to writing the manuscript. All authors have read and approved the final version of the manuscript.

Additional material

Additional file 1

The detailed statistics on the prediction results for 39 epitopes analyzed. This table provides additional information that complements the Table 1 and Figure 3.

Click here for file

[<http://www.biomedcentral.com/content/supplementary/1471-2105-9-514-S1.xls>]

Acknowledgements

The work was supported by the National Institutes of Health Contract HHSN26620040006C.

References

- Peters B, Sidney J, Bourne P, Bui HH, Buus S, Doh G, Fleri W, Kronenberg M, Kubo R, Lund O, et al.: **The design and implementation of the immune epitope database and analysis resource.** *Immunogenetics* 2005, **57**(5):326-336.
- Bijker MS, Melief CJ, Offringa R, Burg SH van der: **Design and development of synthetic peptide vaccines: past, present and future.** *Expert Rev Vaccines* 2007, **6**(4):591-603.
- Gomara MJ, Haro I: **Synthetic peptides for the immunodiagnosis of human diseases.** *Curr Med Chem* 2007, **14**(5):531-546.
- Greenbaum JA, Andersen PH, Blythe M, Bui HH, Cachau RE, Crowe J, Davies M, Kolaskar AS, Lund O, Morrison S, et al.: **Towards a consensus on datasets and evaluation metrics for developing B-cell epitope prediction tools.** *J Mol Recognit* 2007, **20**(2):75-82.
- Laver WG, Air GM, Webster RG, Smith-Gill SJ: **Epitopes on protein antigens: misconceptions and realities.** *Cell* 1990, **61**(4):553-556.
- Van Regenmortel MHV: **Mapping Epitope Structure and Activity: From One-Dimensional Prediction to Four-Dimensional Description of Antigenic Specificity.** *Methods* 1996, **9**(3):465-472.
- Westhof E, Altschuh D, Moras D, Bloomer AC, Mondragon A, Klug A, Van Regenmortel MH: **Correlation between segmental mobility and the location of antigenic determinants in proteins.** *Nature* 1984, **311**(5982):123-126.
- Novotny J, Handschumacher M, Haber E, Brucoleri RE, Carlson WB, Fanning DW, Smith JA, Rose GD: **Antigenic determinants in proteins coincide with surface regions accessible to large probes (antibody domains).** *Proc Natl Acad Sci USA* 1986, **83**(2):226-230.
- Thornton JM, Edwards MS, Taylor WR, Barlow DJ: **Location of 'continuous' antigenic determinants in the protruding regions of proteins.** *EMBO J* 1986, **5**(2):409-413.
- Eswar NWB, Marti-Renom MA, Madhusudhan MS, Eramian D, Shen MY, Pieper U, Sali A: **Comparative Protein Structure Modeling With MODELLER.** In *Current Protocols in Bioinformatics*. 5.6.1-5.6.30 Issue Supplement 15 John Wiley & Sons, Inc; 2006.
- Ponomarenko JV, Bourne PE: **Antibody-protein interactions: benchmark datasets and prediction tools evaluation.** *BMC Struct Biol* 2007, **7**:64.
- Kulkarni-Kale U, Bhosle S, Kolaskar AS: **CEP: a conformational epitope prediction server.** *Nucleic Acids Res* 2005, **33**(Web Server issue):W168-W171.
- Haste Andersen P, Nielsen M, Lund O: **Prediction of residues in discontinuous B-cell epitopes using protein 3D structures.** *Protein Sci* 2006, **15**(11):2558-2567.
- Mandell JG, Roberts VA, Pique ME, Kotlovsky V, Mitchell JC, Nelson E, Tsigelny I, Ten Eyck LF: **Protein docking using continuum electrostatics and geometric fit.** *Protein Eng* 2001, **14**(2):105-113.
- Schneidman-Duhovny D, Inbar Y, Polak V, Shatsky M, Halperin I, Benyamini H, Barzilai A, Dror O, Haspel N, Nussinov R, et al.: **Taking geometry to its edge: fast unbound rigid (and hinge-bent) docking.** *Proteins* 2003, **52**(1):107-112.
- Bradford WD Jr: **Improved prediction of protein-protein binding sites using a support vector machines approach.** *Bioinformatics* 2005, **21**(8):1487-94.
- Neuvirth H, Raz R, Schreiber G: **ProMate: a structure based prediction program to identify the location of protein-protein binding sites.** *J Mol Biol* 2004, **338**(1):181-199.
- Berman HM, Westbrook J, Feng Z, Gilliland G, Bhat TN, Weissig H, Shindyalov IN, Bourne PE: **The Protein Data Bank.** *Nucleic Acids Res* 2000, **28**(1):235-242.
- Altschul SF, Gish W, Miller W, Myers EW, Lipman DJ: **Basic local alignment search tool.** *J Mol Biol* 1990, **215**(3):403-410.
- Taylor WR, Thornton JM, Turnell WG: **An ellipsoidal approximation of protein shape.** *Journal of Molecular Graphics* 1983, **1**:30-38.
- Jmol [<http://jmol.sourceforge.net>]
- Fawcett T: **An introduction to ROC analysis.** *Pattern Recognition Letters* 2006, **27**:861-874.

Publish with **BioMed Central** and every scientist can read your work free of charge

"BioMed Central will be the most significant development for disseminating the results of biomedical research in our lifetime."

Sir Paul Nurse, Cancer Research UK

Your research papers will be:

- available free of charge to the entire biomedical community
- peer reviewed and published immediately upon acceptance
- cited in PubMed and archived on PubMed Central
- yours — you keep the copyright

Submit your manuscript here:
http://www.biomedcentral.com/info/publishing_adv.asp



one epitope per protein				ProMate (patch)				
antigen	how repitope	antigen size	epitope size	patch size	TP	FN	FP	TN
1AFV:A	1 1afv_A_HL	151	14	3	0	14	3	134
1E6J:P	2 1e6j_P_HL	210	12	no patch predicted				
1EGJ:A	1 1egj_A_HL	101	11	11	3	8	8	82
1FSK:A	1 1fsk_A_CB	159	17	16	0	17	16	126
1H0D:C	1 1h0d_C_BA	123	17	13	11	6	2	104
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	13	0	18	13	115
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	16	13	3	13	10	130
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	15	10	1	14	9	84
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	18	14	0	18	14	128
1MHP:B	1mhp_B_X'	192	19	no patch predicted				
1NL0:G	1nl0_G_HL	51	7	4	0	7	4	40
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	18	14	0	18	14	117
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	17	12	6	11	6	100
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	23	0	14	23	186
1ORS:C	1ors_C_BA	132	10	13	6	4	7	115
1PKQ:E	1pkq_E_BA	139	17	12	6	11	6	116
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	3	0	13	3	79
1SY6:A	2 1sy6_A_HL	204	11	4	0	11	4	189
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	4	10	0	4	10	88
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	11	11	0	11	11	83
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	12	2	12	10	116
1YNT:F	2 1ynt_F_BA	254	19	no patch predicted				
1ZA3:R	3 1za3_R_HL	134	15	10	2	13	8	111
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	11	1	15	10	82
2JEL:P	2jel_P_HL	85	15	no patch predicted				
1JPS:T	2 1jps_T_HL	219	21	10	1	20	9	189
1AR1:B	2 1ar1_B_CD	298	16	24	0	16	24	258
1EZV:E	2 1ezv_E_XY	185	17	19	0	17	19	149
1FNS:A	1fns_A_HL	196	12	no patch predicted				
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	10	0	13	10	101
1NFD:D	2 1nfd_D_HG	239	13	16	0	13	16	210
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	18	11	0	18	11	73
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	46	0	19	46	387
1V7M:V	1v7m_V_HI	163	17	5	0	17	5	141
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	18	10	0	17	10	78
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	10	7	1	9	6	63
1Z3G:A	1z3g_A_HL	186	19	18	2	15	16	153
2AEP:A	2aep_A_HL	395	21	39	0	21	39	335
1R0A:B	1r0a_B_HL	429	11	no patch predicted				

	TP	FN	FP	TN	
SUM		45	447	402	4462
<u>sens (TP/(TP + FN))</u>	0,091				
<u>(1-spec)(FP/(FP + TN))</u>	0,083				
<u>ppv (TP/(TP + FP))</u>	0,101				
<u>ACC=(TP + TN)/(TP + FN + FP + TN)</u>	0,841				
<u>AUC=(Sens + Spec)/2</u>	0,504				
P-value	2,74E-01				

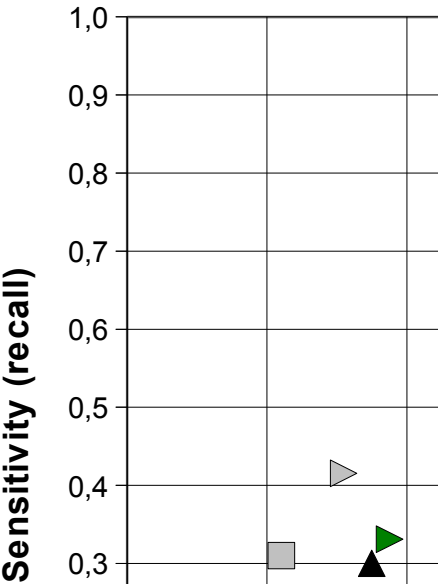
ProMate (patch)

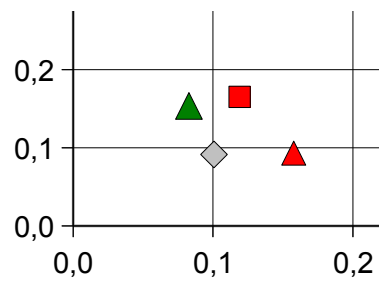
Table 4. Overall performance of patch prediction, protein-protein docking and epitope prediction n

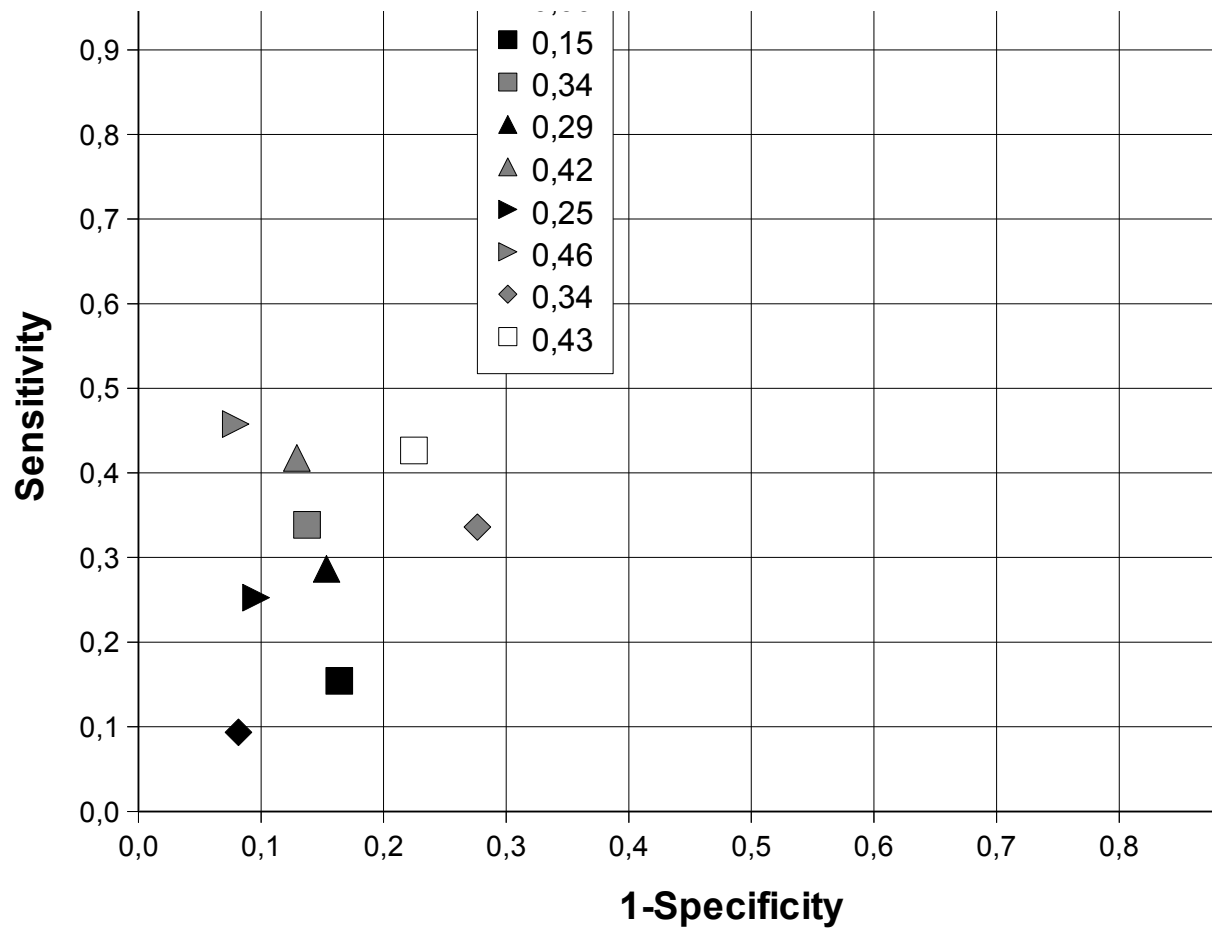
	ProMate (patch)	PPI-PRED (1st patch)	PPI-PRED (best patch)	PatchDock 1st model	PatchDock best model of 10 first	ClusPro(D OT) 1st model	ClusPro(D OT) best model of 10 first	CEP average
Overall statistics								
sensitivity	0,091	0,153	0,331	0,300	0,425	0,258	0,453	0,310
1-specificity	0,083	0,161	0,135	0,135	0,114	0,079	0,067	0,223
PPV	0,101	0,083	0,188	0,175	0,262	0,235	0,390	0,110
accuracy	0,841	0,780	0,819	0,816	0,846	0,863	0,892	0,739
AUC	0,504	0,496	0,598	0,583	0,656	0,589	0,693	0,544
P-value	2,74E-01	1,0E+00	7,8E-30	9,0E-23	0,0E+00	7,9E-34	0,0E+00	4,3E-06
Statistics averaged over epitopes								
sensitivity	0,09±0,17	0,15±0,24	0,34±0,32	0,29±0,26	0,42±0,29	0,25±0,31	0,46±0,28	0,34±0,28
1-specificity	0,08±0,03	0,16±0,07	0,14±0,07	0,15±0,06	0,13±0,07	0,10±0,07	0,08±0,05	0,28±0,20
PPV	0,11±0,20	0,10±0,17	0,21±0,24	0,19±0,20	0,30±0,25	0,25±0,33	0,41±0,29	0,11±0,08
accuracy	0,83±0,05	0,77±0,07	0,81±0,08	0,80±0,08	0,83±0,09	0,84±0,09	0,88±0,07	0,69±0,17
AUC	0,51±0,09	0,50±0,13	0,60±0,17	0,57±0,14	0,64±0,17	0,58±0,17	0,69±0,15	0,53±0,08

number of predictions

best prediction rank (STARTING FROM 0)







						PPI-PRED (1st patch)			
sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+PPV))	(1-spec)[FP]	ACC=(TP+PPV)/(TP+PPV+FP)	AUC=(Sens+Spec)/2	Fisher	1st patch siTP	FN	FP	
0	0	0,02	0,89	0,49	1,00E+00	52	8	6	44
						34	1	11	33
0,27	0,27	0,09	0,84	0,59	9,80E-02	16	7	4	9
0	0	0,11	0,79	0,44	1,00E+00	60	10	7	50
0,65	0,85	0,02	0,93	0,82	5,66E-10	22	1	16	21
0	0	0,10	0,79	0,45	1,00E+00	13	0	18	13
0,19	0,23	0,07	0,85	0,56	1,33E-01	18	0	16	18
0,07	0,1	0,10	0,79	0,49	1,00E+00	18	10	5	8
0	0	0,10	0,80	0,45	1,00E+00	29	0	18	29
						26	0	19	26
0	0	0,09	0,78	0,45	1,00E+00	7	0	7	7
0	0	0,11	0,79	0,45	1,00E+00	25	0	18	25
0,35	0,5	0,06	0,86	0,65	1,61E-03	31	10	7	21
0	0	0,11	0,83	0,44	1,00E+00	73	0	14	73
0,6	0,46	0,06	0,92	0,77	4,52E-05	28	0	10	28
0,35	0,5	0,05	0,88	0,65	8,15E-04	16	5	12	11
0	0	0,04	0,83	0,48	1,00E+00	22	0	13	22
0	0	0,02	0,93	0,49	1,00E+00	26	0	11	26
0	0	0,10	0,86	0,45	1,00E+00	26	0	4	26
0	0	0,12	0,79	0,44	1,00E+00	10	0	11	10
0,14	0,17	0,08	0,84	0,53	3,43E-01	11	7	7	4
						29	0	19	29
0,13	0,2	0,07	0,84	0,53	3,10E-01	17	7	8	10
0,06	0,09	0,11	0,77	0,48	1,00E+00	13	0	16	13
						12	0	15	12
0,05	0,1	0,05	0,87	0,50	1,00E+00	34	3	18	31
0	0	0,09	0,87	0,46	1,00E+00	31	1	15	30
0	0	0,11	0,81	0,44	1,00E+00	28	0	17	28
						20	0	12	20
0	0	0,09	0,81	0,45	1,00E+00	17	0	13	17
0	0	0,07	0,88	0,46	1,00E+00	33	0	13	33
0	0	0,13	0,72	0,43	1,00E+00	17	5	13	12
0	0	0,11	0,86	0,45	1,00E+00	57	0	19	57
0	0	0,03	0,87	0,48	1,00E+00	15	0	17	15
0	0	0,11	0,74	0,44	1,00E+00	16	0	17	16
0,1	0,14	0,09	0,81	0,51	1,00E+00	12	0	10	12
0,12	0,11	0,09	0,83	0,51	5,09E-01	35	6	11	29
0	0	0,10	0,85	0,45	1,00E+00	31	0	21	31
						96	8	3	88
0,093	0,113	0,081	0,834	0,506	av				
0,170	0,199	0,031	0,050	0,093	SD				
sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+PPV))	(1-spec)[FP]	ACC	AUC=(Sens+Spec)/2		TP	FN	FP	
SUM						89	491	987	
sens (TP/(TP+FP))	0,09	0,17				0,153			
(1-spec)[FP]	0,08	0,03				0,161			
ppv (TP/(TP+PPV))	0,11	0,20				0,083			
ACC=(TP+PPV)/(TP+PPV+FP)	0,83	0,05				0,780			
AUC=(Sens+Spec)/2	0,51	0,09				0,496			

ProMate (patch)

±
±
±

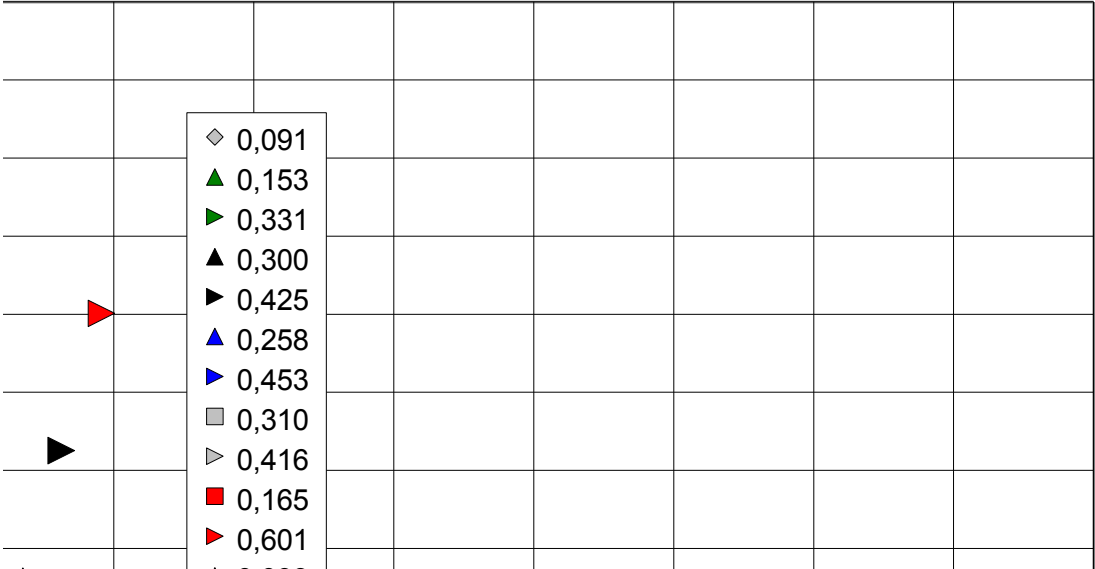
P-value 1,00E+00

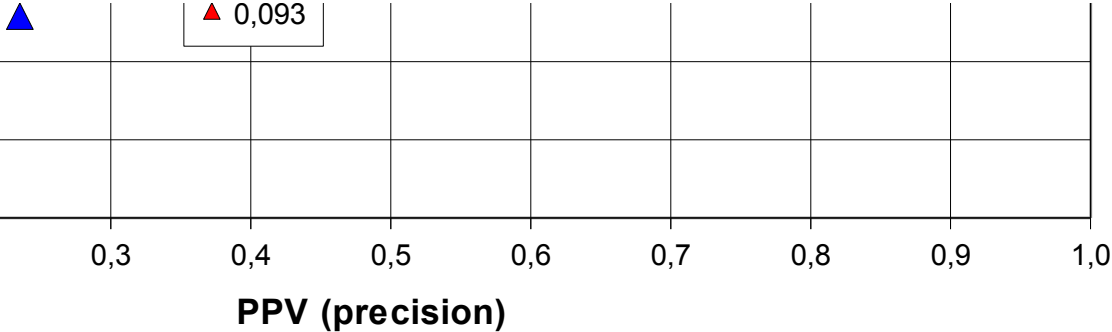
PPI-PRED (1st patch)

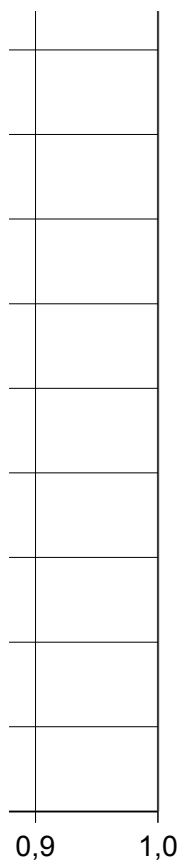
±
±

methods (only discontinuous epitopes were considered for ElliPro).

	ElliPro score 0.7 radius 6 (default)			ElliPro score 0.5 radius 6			ElliPro score 0.6 radius 6		
DiscoTope (-7.7)	best significant	average	highest score	best significant	average	highest score	best significant	average	highest score
0,416	0,329	0,073	0,093	0,601	0,165	0,098	0,462	0,116	0,107
0,214	0,039	0,048	0,047	0,138	0,109	0,116	0,060	0,068	0,066
0,155	0,444	0,121	0,158	0,291	0,119	0,074	0,420	0,134	0,133
0,754	0,907	0,880	0,879	0,840	0,832	0,817	0,899	0,865	0,863
0,601	0,645	0,513	0,523	0,732	0,528	0,491	0,701	0,524	0,521
4,1E-25	0,00E+00	9,13E-03	9,52E-06	0,00E+00	1,37E-04	1,00E+00	0,00E+00	7,27E-05	3,08E-04
0,43±0,31	0,34±0,26	0,07±0,07	0,10±0,20	0,58±0,25	0,17±0,10	0,10±0,19	0,46±0,26	0,12±0,07	0,12±0,20
0,22±0,15	0,04±0,03	0,05±0,02	0,05±0,03	0,12±0,10	0,11±0,04	0,12±0,08	0,06±0,04	0,07±0,02	0,07±0,04
0,18±0,12	0,49±0,34	0,13±0,13	0,16±0,28	0,44±0,22	0,13±0,06	0,11±0,22	0,48±0,28	0,15±0,09	0,14±0,23
0,74±0,12	0,90±0,05	0,87±0,04	0,87±0,05	0,85±0,08	0,82±0,05	0,81±0,09	0,89±0,05	0,85±0,04	0,85±0,06
0,60±0,13	0,65±0,13	0,51±0,03	0,53±0,10	0,73±0,11	0,53±0,03	0,49±0,12	0,70±0,13	0,53±0,03	0,52±0,11
	4,50±1,78			4,39±1,41			4,89±1,89		
	1,18±1,33			1,63±1,26			1,47±1,52		







						PPI-PRED (2nd patch)			
TN	sens (TP/(	ppv (TP/(T(1-spec)[F	ACC=(TP + 1	AUC=(SensFisher			2nd patch sTP	FN	
93	0,57	0,15	0,32	0,67	0,62	5,96E-02	23	0	14
165	0,08	0,03	0,17	0,79	0,46	1,00E+00	29	12	0
81	0,64	0,44	0,10	0,87	0,77	1,54E-04	16	0	11
92	0,59	0,17	0,35	0,64	0,62	5,30E-02	26	0	17
85	0,06	0,05	0,20	0,70	0,43	1,00E+00	10	10	7
115	0	0	0,10	0,79	0,45	1,00E+00	16	1	17
122	0	0	0,13	0,78	0,44	1,00E+00	20	0	16
85	0,67	0,56	0,09	0,88	0,79	2,29E-06	15	0	15
113	0	0	0,20	0,71	0,40	1,00E+00	21	0	18
147	0	0	0,15	0,77	0,42	1,00E+00	24	4	15
37	0	0	0,16	0,73	0,42	1,00E+00	5	0	7
106	0	0	0,19	0,71	0,40	1,00E+00	21	7	11
85	0,59	0,32	0,20	0,77	0,70	1,53E-03	27	0	17
136	0	0	0,35	0,61	0,33	1,00E+00	51	7	7
94	0	0	0,23	0,71	0,39	1,00E+00	23	7	3
111	0,29	0,31	0,09	0,83	0,60	2,82E-02	10	0	17
60	0	0	0,27	0,63	0,37	1,00E+00	23	0	13
167	0	0	0,13	0,82	0,43	1,00E+00	30	0	11
72	0	0	0,27	0,71	0,37	1,00E+00	10	3	1
84	0	0	0,11	0,80	0,45	1,00E+00	12	0	11
122	0,5	0,64	0,03	0,92	0,73	5,21E-06	16	0	14
206	0	0	0,12	0,81	0,44	1,00E+00	26	15	4
109	0,47	0,41	0,08	0,87	0,69	5,32E-04	18	0	15
79	0	0	0,14	0,73	0,43	1,00E+00	19	3	13
58	0	0	0,17	0,68	0,41	1,00E+00	24	0	15
167	0,14	0,09	0,16	0,78	0,49	1,00E+00	24	0	21
252	0,06	0,03	0,11	0,85	0,48	1,00E+00	24	0	16
140	0	0	0,17	0,76	0,42	1,00E+00	19	0	17
164	0	0	0,11	0,84	0,45	1,00E+00	16	0	12
94	0	0	0,15	0,76	0,42	1,00E+00	21	0	13
193	0	0	0,15	0,81	0,43	1,00E+00	37	12	1
72	0,28	0,29	0,14	0,75	0,57	1,48E-01	14	0	18
376	0	0	0,13	0,83	0,43	1,00E+00	37	0	19
131	0	0	0,10	0,80	0,45	1,00E+00	21	3	14
72	0	0	0,18	0,69	0,41	1,00E+00	14	2	15
57	0	0	0,17	0,72	0,41	1,00E+00	6	0	10
140	0,35	0,17	0,17	0,78	0,59	7,33E-02	59	0	17
343	0	0	0,08	0,87	0,46	1,00E+00	33	10	11
330	0,73	0,08	0,21	0,79	0,76	4,43E-04	83	0	11
</									

EllliPro score 0.7 radius 7

best significant	average	highest score
0,394	0,125	0,098
0,060	0,085	0,079
0,380	0,118	0,105
0,893	0,850	0,850
0,667	0,520	0,510
0,00E+00	1,73E-03	6,87E-02
0,40±0,29	0,13±0,10	0,11±0,22
0,06±0,04	0,08±0,03	0,07±0,04
0,45±0,33	0,15±0,12	0,13±0,26
0,88±0,05	0,84±0,03	0,84±0,05
0,67±0,14	0,53±0,04	0,52±0,11

3,21±1,09

1,03±1,10

							PPI-PRED (3rd patch)		
FP	TN	sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+PP))	(1-spec)	[FPAUC=(Sens Fisher		3d patch size	TP	FN
23	114	0	0	0,17	0,42	1,00E+00	39	2	12
17	181	1	0,41	0,09	0,96	4,65E-12	43	0	12
16	74	0	0	0,18	0,41	1,00E+00	18	0	11
26	116	0	0	0,18	0,41	1,00E+00	no patch predicted		
0	106	0,59	1	0,00	0,80	1,30E-10	no patch predicted		
15	113	0,06	0,06	0,12	0,47	1,00E+00	19	0	18
20	120	0	0	0,14	0,43	1,00E+00	22	0	16
15	78	0	0	0,16	0,42	1,00E+00	15	2	13
21	121	0	0	0,15	0,43	1,00E+00	no patch predicted		
20	153	0,21	0,17	0,12	0,55	1,98E-01	27	9	10
5	39	0	0	0,11	0,44	1,00E+00	10	0	7
14	117	0,39	0,33	0,11	0,64	4,77E-03	24	4	14
27	79	0	0	0,25	0,37	1,00E+00	27	6	11
44	165	0,5	0,14	0,21	0,64	2,03E-02	33	0	14
16	106	0,7	0,3	0,13	0,78	1,74E-04	24	0	10
10	112	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	13	0	17
23	59	0	0	0,28	0,36	1,00E+00	14	0	13
30	163	0	0	0,16	0,42	1,00E+00	20	0	11
7	91	0,75	0,3	0,07	0,84	2,65E-03	18	0	4
12	82	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	no patch predicted		
16	110	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	14	0	14
11	224	0,79	0,58	0,05	0,87	4,23E-14	43	0	19
18	101	0	0	0,15	0,42	1,00E+00	11	4	11
16	76	0,19	0,16	0,17	0,51	8,24E-01	16	0	16
24	46	0	0	0,34	0,33	1,00E+00	no patch predicted		
24	174	0	0	0,12	0,44	1,00E+00	20	4	17
24	258	0	0	0,09	0,46	1,00E+00	31	0	16
19	149	0	0	0,11	0,44	1,00E+00	15	0	17
16	168	0	0	0,09	0,46	1,00E+00	20	0	12
21	90	0	0	0,19	0,41	1,00E+00	18	0	13
25	201	0,92	0,32	0,11	0,90	3,95E-10	24	0	13
14	70	0	0	0,17	0,42	1,00E+00	21	12	6
37	396	0	0	0,09	0,46	1,00E+00	37	0	19
18	128	0,18	0,14	0,12	0,53	3,79E-01	19	6	11
12	76	0,12	0,14	0,14	0,49	1,00E+00	7	0	17
6	63	0	0	0,09	0,46	1,00E+00	13	1	9
59	110	0	0	0,35	0,33	1,00E+00	15	0	17
23	351	0,48	0,3	0,06	0,71	7,73E-07	33	4	17
83	335	0	0	0,20	0,40	1,00E+00	58	0	11

PPI-PRED (3rd patch)

FP	TN	sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+FP))	(1-spec)	Fisher	overall pred	PPI-PRED (best patch)		
						patch	patch size	TP	FN
37	100	0,14	0,05	0,27	1,00E+00	1	52	8	6
43	155	0	0	0,22	1,00E+00	2	29	12	0
18	72	0	0	0,20	1,00E+00	1	16	7	4
						1	60	10	7
						2	10	10	7
19	109	0	0	0,15	1,00E+00	1	13	0	18
22	118	0	0	0,16	1,00E+00	1	18	0	16
13	80	0,13	0,13	0,14	1,00E+00	1	18	10	5
						1	29	0	18
18	155	0,47	0,33	0,10	2,08E-04	3	27	9	10
10	34	0	0	0,23	1,00E+00	1	7	0	7
20	111	0,22	0,17	0,15	3,23E-01	2	21	7	11
21	85	0,35	0,22	0,20	1,33E-01	1	31	10	7
33	176	0	0	0,16	1,00E+00	2	51	7	7
24	98	0	0	0,20	1,00E+00	2	23	7	3
13	109	0	0	0,11	1,00E+00	1	16	5	12
14	68	0	0	0,17	1,00E+00	1	22	0	13
20	173	0	0	0,10	1,00E+00	1	26	0	11
18	80	0	0	0,18	1,00E+00	2	10	3	1
						1	10	0	11
14	112	0	0	0,11	1,00E+00	1	11	7	7
43	192	0	0	0,18	1,00E+00	2	26	15	4
7	112	0,27	0,36	0,06	2,14E-02	1	17	7	8
16	76	0	0	0,17	1,00E+00	1	13	0	16
						1	12	0	15
16	182	0,19	0,2	0,08	1,09E-01	1	34	3	18
31	251	0	0	0,11	1,00E+00	1	31	1	15
15	153	0	0	0,09	1,00E+00	1	28	0	17
20	164	0	0	0,11	1,00E+00	1	20	0	12
18	93	0	0	0,16	1,00E+00	1	17	0	13
24	202	0	0	0,11	1,00E+00	2	37	12	1
9	75	0,67	0,57	0,11	2,23E-06	3	21	12	6
37	396	0	0	0,09	1,00E+00	1	57	0	19
13	133	0,35	0,32	0,09	6,19E-03	3	19	6	11
7	81	0	0	0,08	1,00E+00	1	16	0	17
12	57	0,1	0,08	0,17	1,00E+00	1	12	0	10
15	154	0	0	0,09	1,00E+00	1	35	6	11
29	345	0,19	0,12	0,08	8,73E-02	2	33	10	11
58	360	0	0	0,14	1,00E+00	1	96	8	3

0,14
0,05

	TP	FN
SUM	192	388
sens (TP/(TP+FP))	0,331	
(1-spec)	0,135	
ppv (TP/(TP+FP))	0,188	
ACC=(TP + FN) / (TP + FN + FP + TN)	0,819	
AUC=(Sens + Spec) / 2	0,598	
P-value	7,79E-30	

overall pred | PPI-PRED (best patch)

FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+PPV))	(1-spec)[FP]	ACC=(TP + TN)/(TP + FN + PPV + NP)	AUC=(Sens+Spec)/2	PatchDock	
44	93	0,57	0,15	0,32	0,67	0,62	5,96E-02	24
17	181	1	0,41	0,09	0,92	0,96	4,65E-12	30
9	81	0,64	0,44	0,10	0,87	0,77	1,54E-04	28
50	92	0,59	0,17	0,35	0,64	0,62	5,30E-02	32
0	106	0,59	1	0,00	0,94	0,80	1,30E-10	27
13	115	0	0	0,10	0,79	0,45	1,00E+00	22
18	122	0	0	0,13	0,78	0,44	1,00E+00	35
8	85	0,67	0,56	0,09	0,88	0,79	2,29E-06	26
29	113	0	0	0,20	0,71	0,40	1,00E+00	21
18	155	0,47	0,33	0,10	0,85	0,68	2,08E-04	23
7	37	0	0	0,16	0,73	0,42	1,00E+00	8
14	117	0,39	0,33	0,11	0,83	0,64	4,77E-03	20
21	85	0,59	0,32	0,20	0,77	0,70	1,53E-03	24
44	165	0,5	0,14	0,21	0,77	0,64	2,03E-02	35
16	106	0,7	0,3	0,13	0,86	0,78	1,74E-04	25
11	111	0,29	0,31	0,09	0,83	0,60	2,82E-02	28
22	60	0	0	0,27	0,63	0,37	1,00E+00	21
26	167	0	0	0,13	0,82	0,43	1,00E+00	29
7	91	0,75	0,3	0,07	0,92	0,84	2,65E-03	28
10	84	0	0	0,11	0,80	0,45	1,00E+00	19
4	122	0,5	0,64	0,03	0,92	0,73	5,21E-06	22
11	224	0,79	0,58	0,05	0,94	0,87	4,23E-14	30
10	109	0,47	0,41	0,08	0,87	0,69	5,32E-04	28
13	79	0	0	0,14	0,73	0,43	1,00E+00	25
12	58	0	0	0,17	0,68	0,41	1,00E+00	20
31	167	0,14	0,09	0,16	0,78	0,49	1,00E+00	27
30	252	0,06	0,03	0,11	0,85	0,48	1,00E+00	27
28	140	0	0	0,17	0,76	0,42	1,00E+00	33
20	164	0	0	0,11	0,84	0,45	1,00E+00	27
17	94	0	0	0,15	0,76	0,42	1,00E+00	26
25	201	0,92	0,32	0,11	0,89	0,90	3,95E-10	32
9	75	0,67	0,57	0,11	0,85	0,78	2,23E-06	19
57	376	0	0	0,13	0,83	0,43	1,00E+00	31
13	133	0,35	0,32	0,09	0,85	0,63	6,19E-03	18
16	72	0	0	0,18	0,69	0,41	1,00E+00	21
12	57	0	0	0,17	0,72	0,41	1,00E+00	19
29	140	0,35	0,17	0,17	0,78	0,59	7,33E-02	33
23	351	0,48	0,3	0,06	0,91	0,71	7,73E-07	31
88	330	0,73	0,08	0,21	0,79	0,76	4,43E-04	27
		0,34	0,21	0,14	0,81	0,60 av		
		0,32	0,24	0,07	0,08	0,17 SD		
FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+PPV))	(1-spec)[FP]	ACC	AUC=(Sens+Spec)/2		
832	5310						SUM	
		sens (TP/(TP+FN))	0,34	0,32			sens (TP/(TP+FN))	
		(1-spec)[FP]	0,14	0,07			(1-spec)[FP]	
		ppv (TP/(TP+PPV))	0,21	0,24			ppv (TP/(TP+PPV))	
		ACC=(TP + TN)/(TP + FN + PPV + NP)	0,81	0,08			ACC=(TP + TN)/(TP + FN + PPV + NP)	
		AUC=(Sens+Spec)/2	0,60	0,17			AUC=(Sens+Spec)/2	
PPI-PRED (best patch)							P-value	
							PatchDock	

1st model

TP	FN	FP	TN	sens (1ppv (TI(1-spec))			FP	ACC=(TP +	AUC=(Sens Fisher	
6	8	18	119	0,43	0,25	0,13	0,83	0,65	1,09E-02	
0	12	30	168	0,00	0,00	0,15	0,80	0,42	1,00E+00	
3	8	25	65	0,27	0,11	0,28	0,67	0,50	1,00E+00	
10	7	22	120	0,59	0,31	0,15	0,82	0,72	2,11E-04	
0	17	27	79	0,00	0,00	0,25	0,64	0,37	1,00E+00	
3	15	19	109	0,17	0,14	0,15	0,77	0,51	5,34E-01	
5	11	30	110	0,31	0,14	0,21	0,74	0,55	2,72E-01	
8	7	18	75	0,53	0,31	0,19	0,77	0,67	8,22E-03	
2	16	19	123	0,11	0,10	0,13	0,78	0,49	1,00E+00	
14	5	9	164	0,74	0,61	0,05	0,93	0,84	1,14E-11	
2	5	6	38	0,29	0,25	0,14	0,78	0,57	3,00E-01	
9	9	11	120	0,50	0,45	0,08	0,87	0,71	5,33E-05	
11	6	13	93	0,65	0,46	0,12	0,85	0,76	1,01E-05	
0	14	35	174	0,00	0,00	0,17	0,78	0,42	1,00E+00	
2	8	23	99	0,20	0,08	0,19	0,77	0,51	8,87E-01	
6	11	22	100	0,35	0,21	0,18	0,76	0,59	9,44E-02	
4	9	17	65	0,31	0,19	0,21	0,73	0,55	3,13E-01	
0	11	29	164	0,00	0,00	0,15	0,80	0,42	1,00E+00	
0	4	28	70	0,00	0,00	0,29	0,69	0,36	1,00E+00	
2	9	17	77	0,18	0,11	0,18	0,75	0,50	9,03E-01	
8	6	14	112	0,57	0,36	0,11	0,86	0,73	1,76E-04	
0	19	30	205	0,00	0,00	0,13	0,81	0,44	1,00E+00	
11	4	17	102	0,73	0,39	0,14	0,84	0,80	4,12E-06	
6	10	19	73	0,38	0,24	0,21	0,73	0,58	1,26E-01	
0	15	20	50	0,00	0,00	0,29	0,59	0,36	1,00E+00	
1	20	26	172	0,05	0,04	0,13	0,79	0,46	1,00E+00	
1	15	26	256	0,06	0,04	0,09	0,86	0,49	1,00E+00	
3	14	30	138	0,18	0,09	0,18	0,76	0,50	1,00E+00	
2	10	25	159	0,17	0,07	0,14	0,82	0,52	5,13E-01	
4	9	22	89	0,31	0,15	0,20	0,75	0,55	2,76E-01	
2	11	30	196	0,15	0,06	0,13	0,83	0,51	5,41E-01	
10	8	9	75	0,56	0,53	0,11	0,83	0,72	8,79E-05	
0	19	31	402	0,00	0,00	0,07	0,89	0,46	1,00E+00	
7	10	11	135	0,41	0,39	0,08	0,87	0,67	6,07E-04	
18	0	3	84	1,00	0,86	0,03	0,97	0,98	1,66E-17	
1	9	18	51	0,10	0,05	0,26	0,66	0,42	1,00E+00	
10	9	23	144	0,53	0,30	0,14	0,83	0,69	2,52E-04	
0	21	31	343	0,00	0,00	0,08	0,87	0,46	1,00E+00	
4	7	23	395	0,36	0,15	0,06	0,93	0,65	3,05E-03	
				0,29	0,19	0,15	0,80	0,57 av		
				0,26	0,20	0,06	0,08	0,14 SD		

TP	FN	FP	TN	sens (1ppv (TI(1-spec))			FP	ACC	AUC=(Sens+Spec)/2	
175	408	826	5313							
0,300				sens (1	0,29	0,26				
0,135				(1-spec	0,15	0,06				
0,175				ppv (TI	0,19	0,20				
0,816				ACC=(	0,80	0,08				
0,583				AUC=(	0,57	0,14				

8,98E-23

PatchDock 1st model

1st model

PatchDock best model of 10 first

attention: best model for 10-fold									
first	signific	patch size	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(T+ppv (TP/(TP+(1-spec)[FP		
1		24	6	8	18	119	0,43	0,25	0,13
9		21	5	7	16	182	0,42	0,24	0,08
1		28	3	8	25	65	0,27	0,11	0,28
1		32	10	7	22	120	0,59	0,31	0,15
10		18	0	17	27	79	0	0	0,25
3		23	0	18	24	104	0	0	0,19
5		18	15	1	3	137	0,94	0,83	0,02
1		26	8	7	18	75	0,53	0,31	0,19
2		21	12	6	9	133	0,67	0,57	0,06
1		23	14	5	9	164	0,74	0,61	0,05
1		8	2	5	6	38	0,29	0,25	0,14
1		20	9	9	11	120	0,5	0,45	0,08
1		24	11	6	13	93	0,65	0,46	0,12
7		27	7	7	20	189	0,5	0,26	0,10
4		25	6	4	19	103	0,6	0,24	0,16
3		20	11	6	9	113	0,65	0,55	0,07
6		23	0	13	25	57	0	0	0,30
1		29	0	11	29	164	0	0	0,15
1		28	0	4	28	70	0	0	0,29
4		18	8	3	10	84	0,73	0,44	0,11
1		22	8	6	14	112	0,57	0,36	0,11
1		30	0	19	38	197	0	0	0,16
1		28	11	4	17	102	0,73	0,39	0,14
3		19	7	9	12	80	0,44	0,37	0,13
3		16	0	15	20	50	0	0	0,29
2		38	12	9	26	172	0,57	0,32	0,13
1		27	1	15	26	256	0,06	0,04	0,09
7		17	9	8	8	160	0,53	0,53	0,05
6		24	5	7	19	165	0,42	0,21	0,10
5		13	11	2	2	109	0,85	0,85	0,02
1		32	2	11	30	196	0,15	0,06	0,13
1		19	10	8	9	75	0,56	0,53	0,11
1		31	0	19	31	402	0	0	0,07
1		18	7	10	11	135	0,41	0,39	0,08
1		21	18	0	3	84	1	0,86	0,03
8		19	6	4	13	56	0,6	0,32	0,19
1		33	10	9	23	144	0,53	0,3	0,14
1		31	0	21	31	343	0	0	0,08
1		27	4	7	23	395	0,36	0,15	0,06

0,42 0,3 0,13
0,29 0,25 0,07

	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN)ppv (TP/(TP+FP)(1-spec)[FP]			
SUM		248	335	697	5442			
sens (TP/(TP+FN)		0,425				sens (TP/(TP+FN)	0,42	0,29
(1-spec)[FP]		0,114				(1-spec)[FP]	0,13	0,07
ppv (TP/(TP+FP)		0,262				ppv (TP/(TP+FP)	0,30	0,25
ACC=(TP + FN + FP + TN)/4		0,846				ACC=(TP + FN + FP + TN)/4	0,83	0,09
AUC=(Sens + Spec)/2		0,656				AUC=(Sens + Spec)/2	0,64	0,17

P-value 0,00E+00

PatchDock best model of 10 first

PatchDock best model of 10 first

			ClusPro(DOT) 1st model						
ACC=(TP + 1	AUC=(SensFisher		1st patch siTP	FN	FP	TN	sens (TP/(T		
0,83	0,65	1,09E-02	18	0	14	18	119	0	
0,89	0,67	3,09E-03	13	0	12	13	185	0	
0,67	0,50	8,50E-01	10	8	3	2	88	0,73	
0,82	0,72	2,11E-04	17	0	17	17	125	0	
0,64	0,37	1,05E-02	18	10	7	8	98	0,59	
0,71	0,41	3,15E-02	14	2	16	12	116	0,11	
0,97	0,96	4,25E-17	19	6	10	13	127	0,38	
0,77	0,67	8,22E-03	9	7	8	2	91	0,47	
0,91	0,80	9,97E-09	15	4	14	11	131	0,22	
0,93	0,84	1,14E-11	17	13	6	4	169	0,68	
0,78	0,58	3,00E-01	14	1	4	13	33	0,2	
0,87	0,71	5,33E-05	15	0	18	15	116	0	
0,85	0,76	1,01E-05	17	14	3	3	103	0,82	
0,88	0,70	3,39E-04	12	4	10	8	201	0,29	
0,83	0,72	3,25E-03	17	4	6	13	109	0,4	
0,89	0,79	2,22E-07	17	1	16	16	106	0,06	
0,60	0,35	1,36E-02	18	0	13	18	64	0	
0,80	0,42	1,77E-01	19	0	11	19	174	0	
0,69	0,36	5,11E-01	23	2	2	21	77	0,5	
0,88	0,81	1,94E-05	14	5	6	9	85	0,45	
0,86	0,73	1,76E-04	14	0	14	14	112	0	
0,78	0,42	4,06E-02	16	14	5	2	233	0,74	
0,84	0,79	4,12E-06	11	0	15	11	108	0	
0,81	0,65	7,48E-03	20	0	16	20	72	0	
0,59	0,36	1,15E-02	14	0	15	14	56	0	
0,84	0,72	1,38E-05	20	18	3	2	196	0,86	
0,86	0,48	8,33E-01	18	0	16	18	264	0	
0,91	0,74	7,33E-07	6	0	17	6	162	0	
0,87	0,66	8,00E-03	18	0	12	18	166	0	
0,97	0,92	3,48E-12	12	11	2	1	110	0,85	
0,83	0,51	5,41E-01	19	0	13	19	207	0	
0,83	0,73	8,79E-05	15	3	15	12	72	0,17	
0,89	0,46	4,98E-01	26	0	19	26	407	0	
0,87	0,67	6,07E-04	16	6	11	10	136	0,35	
0,97	0,98	1,66E-17	19	15	3	4	83	0,83	
0,78	0,71	1,05E-02	15	1	9	14	55	0,1	
0,83	0,70	2,52E-04	23	0	19	23	144	0	
0,87	0,46	1,71E-01	19	1	20	18	356	0,05	
0,93	0,65	3,05E-03	21	0	11	21	397	0	
0,83	0,64 av								0,25
0,09	0,17 SD								0,31
ACC	AUC=(Sens+Spec)/2		TP	FN	FP	TN	sens (TP/(T		
	SUM		150		431	488	5653		
	sens (TP/(T		0,258				sens (TP/(T		
	(1-spec)[FP		0,079				(1-spec)[FP		
	ppv (TP/(TP		0,235				ppv (TP/(TP		
	ACC=(TP +		0,863				ACC=(TP +		
	AUC=(Sens		0,589				AUC=(Sens		
	P-value		7,94E-34				ClusPro(DC		
			ClusPro(DOT) 1st model						

				ClusPro(DOT) best model of 10 first				
ppv (TP/(TP(1-spec)[FP	ACC=(TP + 1	AUC=(Sens Fisher	first signific	patch size	TP	FN		
0	0,13	0,79	0,43	1,00E+00	1	18	0	14
0	0,07	0,88	0,47	1,00E+00	7	19	5	7
0,8	0,02	0,95	0,85	3,47E-08	1	10	8	3
0	0,12	0,79	0,44	1,00E+00	8	17	8	9
0,56	0,08	0,88	0,76	3,52E-06	1	18	10	7
0,14	0,09	0,81	0,51	5,40E-01	5	24	8	10
0,32	0,09	0,85	0,64	5,45E-03	1	19	6	10
0,78	0,02	0,91	0,72	7,20E-06	1	9	7	8
0,27	0,08	0,84	0,57	6,95E-02	5	16	10	8
0,76	0,02	0,95	0,83	1,11E-12	1	17	13	6
0,07	0,28	0,67	0,46	1,00E+00	2	10	5	0
0	0,11	0,78	0,44	1,00E+00	4	18	5	13
0,82	0,03	0,95	0,90	4,43E-13	1	17	14	3
0,33	0,04	0,92	0,63	3,66E-03	1	12	4	10
0,24	0,11	0,86	0,65	2,48E-02	1	17	4	6
0,06	0,13	0,77	0,46	1,00E+00	8	17	5	12
0	0,22	0,67	0,39	1,00E+00	1	18	0	13
0	0,10	0,85	0,45	1,00E+00	3	21	5	6
0,09	0,21	0,77	0,64	2,19E-01	6	21	3	1
0,36	0,10	0,86	0,68	5,96E-03	1	14	5	6
0	0,11	0,80	0,44	1,00E+00	4	28	9	5
0,88	0,01	0,97	0,87	3,62E-17	1	16	14	5
0	0,09	0,81	0,45	1,00E+00	2	17	15	0
0	0,22	0,67	0,39	1,00E+00	3	20	9	7
0	0,20	0,66	0,40	1,00E+00	5	19	7	8
0,9	0,01	0,98	0,92	2,40E-21	1	20	18	3
0	0,06	0,89	0,47	1,00E+00	1	18	0	16
0	0,04	0,88	0,48	1,00E+00	1	6	0	17
0	0,10	0,85	0,45	1,00E+00	8	18	4	8
0,92	0,01	0,98	0,92	5,44E-13	1	12	11	2
0	0,08	0,87	0,46	1,00E+00	5	22	4	9
0,2	0,14	0,74	0,51	5,20E-01	3	17	9	9
0	0,06	0,90	0,47	1,00E+00	7	19	10	9
0,38	0,07	0,87	0,64	2,22E-03	1	16	6	11
0,79	0,05	0,93	0,89	5,00E-12	1	19	15	3
0,07	0,20	0,71	0,45	1,00E+00	1	15	1	9
0	0,14	0,77	0,43	1,00E+00	8	20	5	14
0,05	0,05	0,90	0,50	1,00E+00	1	19	1	20
0	0,05	0,93	0,47	1,00E+00	1	21	0	11
0,25	0,10	0,84	0,58 av					
0,33	0,07	0,09	0,17 SD					
ppv (TP/(TP(1-spec)[FP	ACC	AUC=(Sens+Spec)/2						
					SUM	263	318	
0,25	0,31	=CONCATENATE(TEXT(CI46,"0.00"),\$CP\$52,TE		sens (TP/(T	0,453			
0,10	0,07	Err:508		(1-spec)[FP	0,067			
0,25	0,33	0,250,33		ppv (TP/(TP	0,390			
0,84	0,09	0,840,09		ACC=(TP +	0,892			
0,58	0,17	0,580,17		AUC=(Sens	0,693			
					P-value	0,00E+00		

±

ClusPro(DOT) best model of 10 first

								CEP best p
FP	TN	sens (TP/(T	ppv (TP/(TP(1-spec)[FP	ACC=(TP +	1AUC=(Sens Fisher			
18	119	0	0	0,13	0,79	0,43	1,00E+00	6
14	184	0,42	0,26	0,07	0,90	0,67	1,88E-03	5
2	88	0,73	0,8	0,02	0,95	0,85	3,47E-08	1
9	133	0,47	0,47	0,06	0,89	0,70	4,23E-05	6
8	98	0,59	0,56	0,08	0,88	0,76	3,52E-06	5
16	112	0,44	0,33	0,13	0,82	0,66	2,51E-03	7
13	127	0,38	0,32	0,09	0,85	0,64	5,45E-03	5
2	91	0,47	0,78	0,02	0,91	0,72	7,20E-06	1
6	136	0,56	0,62	0,04	0,91	0,76	1,14E-07	5
4	169	0,68	0,76	0,02	0,95	0,83	1,11E-12	2
5	41	1	0,5	0,11	0,90	0,95	1,07E-04	1
13	118	0,28	0,28	0,10	0,83	0,59	4,55E-02	3
3	103	0,82	0,82	0,03	0,95	0,90	4,43E-13	5
8	201	0,29	0,33	0,04	0,92	0,63	3,66E-03	6
13	109	0,4	0,24	0,11	0,86	0,65	2,48E-02	4
12	110	0,29	0,29	0,10	0,83	0,60	3,68E-02	8
18	64	0	0	0,22	0,67	0,39	1,00E+00	5
16	177	0,45	0,24	0,08	0,89	0,68	2,21E-03	8
18	80	0,75	0,14	0,18	0,81	0,78	2,68E-02	3
9	85	0,45	0,36	0,10	0,86	0,68	5,96E-03	5
19	107	0,64	0,32	0,15	0,83	0,74	1,56E-04	6
2	233	0,74	0,88	0,01	0,97	0,87	3,62E-17	16
2	117	1	0,88	0,02	0,99	0,99	4,97E-18	5
11	81	0,56	0,45	0,12	0,83	0,72	2,31E-04	1
12	58	0,47	0,37	0,17	0,76	0,65	1,99E-02	5
2	196	0,86	0,9	0,01	0,98	0,92	2,40E-21	7
18	264	0	0	0,06	0,89	0,47	1,00E+00	12
6	162	0	0	0,04	0,88	0,48	1,00E+00	7
14	170	0,33	0,22	0,08	0,89	0,63	1,57E-02	7
1	110	0,85	0,92	0,01	0,98	0,92	5,44E-13	4
18	208	0,31	0,18	0,08	0,89	0,62	2,23E-02	13
8	76	0,5	0,53	0,10	0,83	0,70	2,43E-04	2
9	424	0,53	0,53	0,02	0,96	0,75	8,12E-11	18
10	136	0,35	0,38	0,07	0,87	0,64	2,22E-03	6
4	83	0,83	0,79	0,05	0,93	0,89	5,00E-12	26
14	55	0,1	0,07	0,20	0,71	0,45	1,00E+00	26
15	152	0,26	0,25	0,09	0,84	0,59	3,71E-02	10
18	356	0,05	0,05	0,05	0,90	0,50	1,00E+00	18
21	397	0	0	0,05	0,93	0,47	1,00E+00	10
		0,46	0,41	0,08	0,88	0,69 av		
		0,28	0,29	0,05	0,07	0,15 SD		
FP	TN	sens (TP/(T	ppv (TP/(TP(1-spec)[FP	ACC	AUC=(Sens+Spec)/2			
411	5730							
		sens (TP/(T	0,46	0,28				
		(1-spec)[FP	0,08	0,05				
		ppv (TP/(TP	0,41	0,29				
		ACC=(TP +	0,88	0,07				
		AUC=(Sens	0,69	0,15				

|ClusPro(DOT) best model of 10 first

|CEP best p

atch

best patch	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	(1-spec) (FP/(FP+TN))	AUC=(Sens + Spec)/2	Fisher
35	13	1	22	115	0,93	0,37	0,16	0,88	8,79E-09
55	10	2	45	153	0,83	0,18	0,23	0,80	3,30E-05
82	11	0	71	19	1	0,13	0,79	0,61	8,82E-02
24	13	4	11	131	0,76	0,54	0,08	0,84	1,10E-09
30	9	8	21	85	0,53	0,3	0,20	0,67	6,00E-03
14	4	14	10	118	0,22	0,29	0,08	0,57	7,36E-02
18	7	9	11	129	0,44	0,39	0,08	0,68	5,07E-04
74	11	4	63	30	0,73	0,15	0,68	0,53	4,59E-01
16	8	10	8	134	0,44	0,5	0,06	0,69	3,86E-05
12	0	19	12	161	0	0	0,07	0,47	1,00E+00
12	5	2	7	37	0,71	0,42	0,16	0,78	5,39E-03
34	1	17	33	98	0,06	0,03	0,25	0,40	1,00E+00
26	11	6	15	91	0,65	0,42	0,14	0,75	2,78E-05
102	14	0	88	121	1	0,14	0,42	0,79	1,04E-05
45	10	0	35	87	1	0,22	0,29	0,86	1,02E-05
44	11	6	27	95	0,65	0,29	0,22	0,71	6,43E-04
37	10	3	27	55	0,77	0,27	0,33	0,72	3,52E-03
40	11	0	29	164	1	0,28	0,15	0,92	4,77E-09
90	4	0	86	12	1	0,04	0,88	0,56	9,34E-01
32	0	11	32	62	0	0	0,34	0,33	1,00E+00
29	6	8	23	103	0,43	0,21	0,18	0,62	4,21E-02
28	10	9	18	217	0,53	0,36	0,08	0,73	2,50E-06
44	14	1	30	89	0,93	0,32	0,25	0,84	3,87E-07
73	12	4	61	31	0,75	0,16	0,66	0,54	3,55E-01
58	9	6	49	21	0,6	0,16	0,70	0,45	1,00E+00
62	16	5	46	152	0,76	0,26	0,23	0,76	2,17E-06
35	7	9	28	254	0,44	0,2	0,10	0,67	8,99E-04
29	13	4	16	152	0,76	0,45	0,10	0,83	3,62E-09
33	0	12	33	151	0	0	0,18	0,41	1,00E+00
33	11	2	22	89	0,85	0,33	0,20	0,83	6,02E-06
59	13	0	46	180	1	0,22	0,20	0,90	4,23E-09
23	2	16	21	63	0,11	0,09	0,25	0,43	1,00E+00
47	14	5	33	400	0,74	0,3	0,08	0,83	1,98E-11
43	10	7	33	113	0,59	0,23	0,23	0,68	2,88E-03
33	0	17	33	55	0	0	0,38	0,31	1,00E+00
33	0	10	0	69	0	0	0,00	0,50	1,00E+00
41	17	0	24	145	1	0,41	0,14	0,93	3,00E-13
30	8	13	22	352	0,38	0,27	0,06	0,66	4,40E-05
40	0	0	40	389	0	0	0,09	0,45	1,00E+00

	SUM
sens (TP/(TP + FN))	
(1-spec)(FP/(FP + TN))	
ppv (TP/(TP + FP))	
ACC=(TP + TN)/(TP + TN + FP + FN)	
AUC=(Sens + Spec)/2	
P-value	

atch

CEP average

TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	(1-spec)[FP]	ACC=(TP + TN)/(TP + FN + FP + TN)	AUC=(Sens + Spec)/2
6	7	28	109	0,46	0,18	0,20	0,77	0,63
4	8	45	152	0,33	0,08	0,23	0,75	0,55
11	0	71	19	1	0,13	0,79	0,30	0,61
2	14	17	125	0,12	0,11	0,12	0,80	0,50
7	9	37	69	0,44	0,16	0,35	0,62	0,55
2	16	18	109	0,11	0,1	0,14	0,77	0,48
1	14	23	117	0,07	0,04	0,16	0,76	0,45
11	4	63	30	0,73	0,15	0,68	0,38	0,53
3	15	19	122	0,17	0,14	0,13	0,79	0,52
2	17	13	159	0,11	0,13	0,08	0,84	0,52
5	2	7	37	0,71	0,42	0,16	0,82	0,78
1	16	30	100	0,06	0,03	0,23	0,69	0,41
10	7	33	72	0,59	0,23	0,31	0,67	0,64
7	6	71	137	0,54	0,09	0,34	0,65	0,60
7	2	57	65	0,78	0,11	0,47	0,55	0,66
7	9	39	82	0,44	0,15	0,32	0,65	0,56
7	5	42	39	0,58	0,14	0,52	0,49	0,53
3	7	26	166	0,3	0,1	0,14	0,84	0,58
4	0	77	20	1	0,05	0,79	0,24	0,60
1	9	29	64	0,1	0,03	0,31	0,63	0,39
5	9	40	85	0,36	0,11	0,32	0,65	0,52
2	16	19	215	0,11	0,1	0,08	0,86	0,51
8	6	33	85	0,57	0,2	0,28	0,70	0,65
12	4	61	31	0,75	0,16	0,66	0,40	0,54
6	8	38	31	0,43	0,14	0,55	0,45	0,44
5	15	33	165	0,25	0,13	0,17	0,78	0,54
2	13	41	240	0,13	0,05	0,15	0,82	0,49
5	11	62	105	0,31	0,07	0,37	0,60	0,47
0	12	23	160	0	0	0,13	0,82	0,44
5	7	42	68	0,42	0,11	0,38	0,60	0,52
3	9	33	192	0,25	0,08	0,15	0,82	0,55
2	16	24	59	0,11	0,08	0,29	0,60	0,41
2	16	32	400	0,11	0,06	0,07	0,89	0,52
5	11	29	116	0,31	0,15	0,20	0,75	0,56
0	16	9	78	0	0	0,10	0,76	0,45
0	9	3	65	0	0	0,04	0,84	0,48
4	12	33	135	0,25	0,11	0,20	0,76	0,53
2	19	25	348	0,1	0,07	0,07	0,89	0,52
0	0	40	389	0	0	0,09	0,91	0,45

0,34 0,11 0,28 0,69 0,53
0,28 0,08 0,20 0,17 0,08

TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	(1-spec)[FP]	ACC=(TP + TN)/(TP + FN + FP + TN)	AUC=(Sens + Spec)/2
169	376	1365	4760					
0,310				sens (TP/(TP+FN))	0,34	0,28		
0,223				(1-spec)[FP]	0,28	0,20		
0,110				ppv (TP/(TP+FP))	0,11	0,08		
0,739				ACC=(TP + TN)/(TP + FN + FP + TN)	0,69	0,17		
0,544				AUC=(Sens + Spec)/2	0,53	0,08		

4,32E-06

CEP

CEP average

DiscoTope (-3.1)										
Fisher	patch size	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	(1-spec)	FP AUC=(Sens+Spec)/2	
4,48E-02	11	0	14	11	126	0	0	0,08	0,46	
3,00E-01	14	0	12	14	184	0	0	0,07	0,46	
8,82E-02	13	8	3	5	85	0,73	0,62	0,06	0,84	
8,85E-01	3	2	15	1	141	0,12	0,67	0,01	0,56	
3,36E-01	16	0	17	16	90	0	0	0,15	0,42	
1,00E+00	1	0	18	1	127	0	0	0,01	0,50	
1,00E+00	2	0	16	2	138	0	0	0,01	0,49	
4,59E-01	2	0	15	2	91	0	0	0,02	0,49	
4,69E-01	6	2	16	4	138	0,11	0,33	0,03	0,54	
4,54E-01	3	1	18	2	171	0,05	0,33	0,01	0,52	
5,39E-03	4	0	7	4	40	0	0	0,09	0,45	
1,00E+00	21	1	17	20	111	0,06	0,05	0,15	0,45	
2,95E-02	9	2	15	7	99	0,12	0,22	0,07	0,53	
1,27E-01	no epitope predicted									
7,18E-02	2	0	10	2	120	0	0	0,02	0,49	
2,58E-01	6	1	16	5	117	0,06	0,17	0,04	0,51	
4,58E-01	2	0	13	2	80	0	0	0,02	0,49	
1,59E-01	13	3	8	10	183	0,27	0,23	0,05	0,61	
4,08E-01	11	0	4	11	87	0	0	0,11	0,44	
1,00E+00	4	0	11	4	90	0	0	0,04	0,48	
4,96E-01	2	0	14	2	124	0	0	0,02	0,49	
4,55E-01	1	0	19	1	234	0	0	0,00	0,50	
3,05E-02	2	0	15	2	117	0	0	0,02	0,49	
3,55E-01	1	0	16	1	91	0	0	0,01	0,49	
1,00E+00	no epitope predicted									
2,55E-01	no epitope predicted									
1,00E+00	9	0	16	9	273	0	0	0,03	0,48	
1,00E+00	18	1	16	17	151	0,06	0,06	0,10	0,48	
1,00E+00	4	2	10	2	182	0,17	0,5	0,01	0,58	
7,54E-01	6	0	13	6	105	0	0	0,05	0,47	
2,68E-01	12	8	5	4	222	0,62	0,67	0,02	0,80	
1,00E+00	23	3	15	20	64	0,17	0,13	0,24	0,47	
4,01E-01	no epitope predicted									
2,27E-01	no epitope predicted									
1,00E+00	10	6	11	4	84	0,35	0,6	0,05	0,65	
1,00E+00	no epitope predicted									
4,06E-01	2	0	17	2	167	0	0	0,01	0,49	
4,30E-01	4	2	19	2	372	0,1	0,5	0,01	0,55	
1,00E+00	37	9	2	28	390	0,82	0,24	0,07	0,88	
av					av	0,12	0,16	0,05	0,53	
SD					SD	0,21	0,23	0,05	0,11	
+Spec)/2										

DiscoTope (-3.1)

DiscoTope (-7.7)									
Fisher P-value	patch size	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	(1-spec)[FP]	
1	59	6	8	53	84	0,43	0,1	0,39	
1	79	0	12	79	119	0	0	0,40	
9,07E-07	62	10	1	52	38	0,91	0,16	0,58	
3,04E-02	60	13	4	47	95	0,76	0,22	0,33	
1	45	6	11	39	67	0,35	0,13	0,37	
1	13	3	15	10	118	0,17	0,23	0,08	
1	30	9	7	21	119	0,56	0,3	0,15	
1	34	9	6	25	68	0,6	0,26	0,27	
0,14	34	11	7	23	119	0,61	0,32	0,16	
0,27	37	10	9	27	146	0,53	0,27	0,16	
1	12	4	3	8	36	0,57	0,33	0,18	
1	49	7	11	42	89	0,39	0,14	0,32	
0,36	25	5	12	20	86	0,29	0,2	0,19	
	26	0	14	26	183	0	0	0,12	
1	20	0	10	20	102	0	0	0,16	
0,55	34	8	9	26	96	0,47	0,24	0,21	
1	31	7	6	24	58	0,54	0,23	0,29	
2,49E-02	71	10	1	61	132	0,91	0,14	0,32	
1	43	2	2	41	57	0,5	0,05	0,42	
1	57	5	6	52	42	0,45	0,09	0,55	
1	19	3	11	16	110	0,21	0,16	0,13	
1	19	0	19	19	216	0	0	0,08	
1	8	2	13	6	113	0,13	0,25	0,05	
1	14	3	13	11	81	0,19	0,21	0,12	
	5	1	14	4	66	0,07	0,2	0,06	
	36	7	14	29	169	0,33	0,19	0,15	
1	30	0	16	30	252	0	0	0,11	
1	58	17	0	41	127	1	0,29	0,24	
1,93E-02	27	8	4	19	165	0,67	0,3	0,10	
1	11	1	12	10	101	0,08	0,09	0,09	
2,51E-09	62	10	3	52	174	0,77	0,16	0,23	
1	68	14	4	54	30	0,78	0,21	0,64	
	60	10	9	50	383	0,53	0,17	0,12	
	9	1	16	8	138	0,06	0,11	0,05	
1,08E-03	35	15	2	20	68	0,88	0,43	0,23	
	9	4	6	5	64	0,4	0,44	0,07	
1	17	6	11	11	158	0,35	0,35	0,07	
1,52E-02	60	3	18	57	317	0,14	0,05	0,15	
4,85E-09	190	11	0	179	239	1	0,06	0,43	
						0,43	0,18	0,22	
						0,31	0,12	0,15	
	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	(1-spec)[FP]		
SUM	241	339	1317	4825					
sens (TP/(TP+FN))	0,416					0,43	0,31		
(1-spec)[FP]	0,214					0,22	0,15		
ppv (TP/(TP+FP))	0,155					0,18	0,12		
ACC=(TP + TN)/(TP + FN + FP + TN)	0,754					0,74	0,12		
AUC=(Sens + Spec)/2	0,601					0,60	0,13		

P-value **4,13E-25**

DiscoTope (-7.7)

DiscoTope (-7.7)

			DiscoTope (-10.5)						
ACC=(TP + 1	AUC=(Sens	Fisher P-val	patch size	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(T	
0,60	0,52	0,49	94	11	3	83	54	0,79	
0,57	0,30	1	132	3	9	129	69	0,25	
0,48	0,67	2,96E-02	92	11	0	81	9	1	
0,68	0,71	7,30E-04	102	17	0	85	57	1	
0,59	0,49	1	70	11	6	59	47	0,65	
0,83	0,55	0,2	33	7	11	26	102	0,39	
0,82	0,71	5,17E-04	61	14	2	47	93	0,88	
0,71	0,67	1,39E-02	57	10	5	47	46	0,67	
0,81	0,72	9,92E-05	61	16	2	45	97	0,89	
0,81	0,69	5,79E-04	76	15	4	61	112	0,79	
0,78	0,69	4,45E-02	26	6	1	20	24	0,86	
0,64	0,53	0,37	77	14	4	63	68	0,78	
0,74	0,55	0,24	49	11	6	38	68	0,65	
0,82	0,44	1	52	0	14	52	157	0	
0,77	0,42	1	35	0	10	35	87	0	
0,75	0,63	2,65E-02	63	15	2	48	74	0,88	
0,68	0,62	0,08	60	12	1	48	34	0,92	
0,70	0,80	1,32E-04	102	11	0	91	102	1	
0,58	0,54	0,89	58	3	1	55	43	0,75	
0,45	0,45	1	81	8	3	73	21	0,73	
0,81	0,54	0,29	41	7	7	34	92	0,5	
0,85	0,46	1	53	4	15	49	186	0,21	
0,86	0,54	0,22	23	7	8	16	103	0,47	
0,78	0,54	0,34	28	3	13	25	67	0,19	
0,79	0,51	1	19	6	9	13	57	0,4	
0,80	0,59	3,67E-02	82	12	9	70	128	0,57	
0,85	0,45	1	54	2	14	52	230	0,12	
0,78	0,88	4,31E-10	91	17	0	74	94	1	
0,88	0,78	1,61E-05	47	10	2	37	147	0,83	
0,82	0,49	1	17	2	11	15	96	0,15	
0,77	0,77	1,11E-04	107	11	2	96	130	0,85	
0,43	0,57	0,21	83	17	1	66	18	0,94	
0,87	0,71	2,94E-05	114	16	3	98	335	0,84	
0,85	0,50	1	32	3	14	29	117	0,18	
0,79	0,83	4,97E-07	49	16	1	33	55	0,94	
0,86	0,66	1,26E-02	25	6	4	19	50	0,6	
0,88	0,64	1,58E-03	35	8	9	27	142	0,47	
0,81	0,49	1	116	10	11	106	268	0,48	
0,58	0,79	1,09E-04	290	11	0	279	139	1	
0,74	0,60 av						av	0,63	
0,12	0,13 SD						SD	0,31	
ACC	AUC=(Sens+Spec)/2								

|DiscoTope (-10.5)

ppv (TP/(TP(1-spec)+FP))AUC=(Sens Fisher P-val) in DiscoTope training set?			
0,12	0,61	0,59	0,15-
0,02	0,65	0,30	1-
0,12	0,90	0,55	0,34*
0,17	0,60	0,70	3,12E-04*
0,16	0,56	0,55	0,33*
0,21	0,20	0,59	0,08-
0,23	0,34	0,77	4,05E-05*
0,18	0,51	0,58	0,19-
0,26	0,32	0,79	3,80E-06*
0,2	0,35	0,72	2,96E-04-
0,23	0,45	0,70	0,06-
0,18	0,48	0,65	1,59E-02-
0,22	0,36	0,65	2,43E-02*
0	0,25	0,38	1-
0	0,29	0,36	1*
0,24	0,39	0,74	1,38E-04-
0,2	0,59	0,67	1,55E-02-
0,11	0,47	0,76	3,67E-04-
0,05	0,56	0,59	0,42-
0,1	0,78	0,48	1-
0,17	0,27	0,62	0,07-
0,08	0,21	0,50	0,8-
0,3	0,13	0,67	4,64E-03-
0,11	0,27	0,46	1-
0,32	0,19	0,61	0,08-
0,15	0,35	0,61	4,41E-02*
0,04	0,18	0,47	1*
0,19	0,44	0,78	2,50E-06*
0,21	0,20	0,81	1,26E-05*
0,12	0,14	0,51	0,87*
0,1	0,42	0,71	3,16E-03*
0,2	0,79	0,58	0,1*
0,14	0,23	0,81	5,51E-08*
0,09	0,20	0,49	1-
0,33	0,38	0,78	1,18E-05-
0,24	0,28	0,66	4,83E-02-
0,23	0,16	0,66	5,01E-03-
0,09	0,28	0,60	0,05-
0,04	0,67	0,67	1,27E-02*
0,16	0,4	0,62	
0,08	0,2	0,13	

Ellipro default score 0.7, default radius 6. Epitope definition: Discontinuous Epitopes: Best by significance

antigen	epitope	antigen size	epitope size	number of rank best	best patch	TP	FN
1AFV:A	1afv_A_HL	151	14	4	0	15	4
1E6J:P	1e6j_P_HL	210	12	7	2	24	11
1EGJ:A	1egj_A_HL	101	11	4	0	9	6
1FSK:A	1fsk_A_CB	159	17	5	4	10	10
1H0D:C	1h0d_C_B/	123	17	4	2	14	12
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	6	0	4	3
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	16	4	3	11	4
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	15	3	0	12	10
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	18	4	0	3	0
1MHP:B	1mhp_B_X	192	19	7	0	7	1
1NL0:G	1nl0_G_HL	51	7	1	0	3	0
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	18	4	0	4	0
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	17	4	0	7	2
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	5	1	22	7
1ORS:C	1ors_C_BA	132	10	5	1	8	6
1PKQ:E	1pkq_E_B/	139	17	4	0	4	0
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	3	2	12	6
1SY6:A	1sy6_A_HL	204	11	6	2	3	3
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	4	4	0	7	2
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	11	2	0	4	0
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	4	0	15	1
1YNT:F	1ynt_F_BA	254	19	4	3	6	5
1ZA3:R	1za3_R_HL	134	15	4	2	6	3
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	4	2	14	8
2JEL:P	2jel_P_HL	85	15	2	0	6	3
1JPS:T	1jps_T_HL	219	0 no epitope predicted				
1AR1:B	1ar1_B_CL	298	16	4	0	38	0
1EZV:E	1ezv_E_XY	185	17	5	3	10	5
1FNS:A	1fns_A_HL	196	12	4	0	4	3
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	3	0	10	0
1NFD:D	1nfd_D_HC	239	13	6	3	12	8
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	18	5	3	8	7
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	11	0	42	14
1V7M:V	1v7m_V_H	163	17	5	3	4	4
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	17	3	2	10	7
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	10	3	0	3	3
1Z3G:B	1z3g_B_IM	186	17	4	1	21	11
2AEP:A	2aep_A_HI	395	21	6	3	13	7
1R0A:B	1r0a_AB_H	429	11	8	3	9	8

4,500 1,184
1,782 1,333

	TP	FN
SUM	184	375
sens (TP/(TP+FN))	0,329	
(1-spec)[FP/(FP+TN)]	0,039	
ppv (TP/(TP+FP))	0,444	
ACC=(TP+TN)/(TP+FP+FN+TN)	0,907	
AUC=(Sen+Spec)/2	0,645	

TP	FN	FP	TN
184	375	230	5714
39	494	283	5635
52	507	278	5666

0,00E+00 9,13E-03 9,52E-06

discontinuous epitope	Average of							Significant?
FP	TN	sens (TP/(	ppv (TP/(	TI1-spec (FP	accuracy ((AUC (sens	Fisher		
11	126	0,29	0,27	0,08	0,86	0,6	3,51E-02	Yes
13	185	0,92	0,46	0,07	0,93	0,93	4,19E-11	Yes
3	87	0,55	0,67	0,03	0,92	0,76	2,67E-05	Yes
0	142	0,59	1	0	0,96	0,79	9,12E-12	Yes
2	104	0,71	0,86	0,02	0,94	0,84	3,59E-11	Yes
1	127	0,17	0,75	0,01	0,89	0,58	5,92E-03	Yes
7	133	0,25	0,36	0,05	0,88	0,6	1,60E-02	Yes
2	91	0,67	0,83	0,02	0,94	0,82	4,66E-09	Yes
3	139	0	0	0,02	0,87	0,49	1,00E+00	-
6	167	0,05	0,14	0,03	0,88	0,51	5,24E-01	-
3	41	0	0	0,07	0,8	0,47	1,00E+00	-
4	127	0	0	0,03	0,85	0,48	1,00E+00	-
5	101	0,12	0,29	0,05	0,84	0,54	2,49E-01	-
15	194	0,5	0,32	0,07	0,9	0,71	7,60E-05	Yes
2	120	0,6	0,75	0,02	0,95	0,79	8,50E-07	Yes
4	118	0	0	0,03	0,85	0,48	1,00E+00	-
6	76	0,46	0,5	0,07	0,86	0,69	1,19E-03	Yes
0	193	0,27	1	0	0,96	0,64	1,18E-04	Yes
5	93	0,5	0,29	0,05	0,93	0,72	2,29E-02	Yes
4	90	0	0	0,04	0,86	0,48	1,00E+00	-
14	112	0,07	0,07	0,11	0,81	0,48	1,00E+00	-
1	234	0,26	0,83	0	0,94	0,63	7,85E-06	Yes
3	116	0,2	0,5	0,03	0,89	0,59	1,87E-02	Yes
6	86	0,5	0,57	0,07	0,87	0,72	6,99E-05	Yes
3	67	0,2	0,5	0,04	0,82	0,58	6,50E-02	-
38	244	0	0	0,13	0,82	0,43	1,00E+00	-
5	163	0,29	0,5	0,03	0,91	0,63	6,84E-04	Yes
1	183	0,25	0,75	0,01	0,95	0,62	6,87E-04	Yes
10	101	0	0	0,09	0,81	0,45	1,00E+00	-
4	222	0,62	0,67	0,02	0,96	0,8	2,51E-09	Yes
1	83	0,39	0,88	0,01	0,88	0,69	1,24E-05	Yes
28	405	0,74	0,33	0,06	0,93	0,84	3,25E-12	Yes
0	146	0,24	1	0	0,92	0,62	8,40E-05	Yes
3	85	0,41	0,7	0,03	0,88	0,69	7,73E-05	Yes
0	69	0,3	1	0	0,91	0,65	1,52E-03	Yes
10	159	0,65	0,52	0,06	0,91	0,79	1,84E-08	Yes
6	368	0,33	0,54	0,02	0,95	0,66	5,83E-07	Yes
1	417	0,73	0,89	0	0,99	0,86	5,54E-14	Yes
		0,338	0,493	0,039	0,895	0,649	av	
		0,258	0,338	0,032	0,049	0,133	SD	
FP	TN	sens (TP/(	ppv (TP/(	T (1-spec)[FI	ACC	AUC=(Sens+Spec)/2		
230	5714					SUM		
		sens (TP/(	0,34	0,26		sens (TP/(		
		(1-spec)[FI	0,04	0,03		(1-spec)[FI		
		ppv (TP/(	0,49	0,34		ppv (TP/(		
		ACC=(TP +	0,90	0,05		ACC=(TP +		
		AUC=(Sen	0,65	0,13		AUC=(Sen		

n all predicted epitopes.

TP_av	FN_av	FP_av	TN_av	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1-spec (FP/(FP+TN))	FIACC	AUC (sens+spec)/2	sens+spec
1	13	6	130	0,07	0,14	0,04	0,87	0,51	0,11
1	10	6	191	0,09	0,14	0,03	0,92	0,53	0,13
2	8	6	84	0,2	0,25	0,07	0,86	0,57	0,27
2	15	6	135	0,12	0,25	0,04	0,87	0,54	0,21
3	14	5	101	0,18	0,38	0,05	0,85	0,56	0,23
1	17	5	122	0,06	0,17	0,04	0,85	0,51	0,11
1	15	6	133	0,06	0,14	0,04	0,86	0,51	0,11
3	11	7	85	0,21	0,3	0,08	0,83	0,57	0,29
0	17	5	137	0	0	0,04	0,86	0,48	0,04
0	18	5	167	0	0	0,03	0,88	0,49	0,03
0	7	3	41	0	0	0,07	0,8	0,47	0,07
0	17	6	124	0	0	0,05	0,84	0,48	0,05
1	16	6	100	0,06	0,14	0,06	0,82	0,5	0,12
1	12	10	198	0,08	0,09	0,05	0,9	0,51	0,13
1	8	6	115	0,11	0,14	0,05	0,89	0,53	0,15
0	16	3	118	0	0	0,02	0,86	0,49	0,02
3	9	5	77	0,25	0,38	0,06	0,85	0,59	0,31
1	9	6	186	0,1	0,14	0,03	0,93	0,53	0,13
0	3	6	92	0	0	0,06	0,91	0,47	0,06
0	11	4	89	0	0	0,04	0,86	0,48	0,04
0	13	9	117	0	0	0,07	0,84	0,46	0,07
2	16	21	213	0,11	0,09	0,09	0,85	0,51	0,2
1	13	5	113	0,07	0,17	0,04	0,86	0,51	0,11
2	14	5	86	0,12	0,29	0,05	0,82	0,54	0,21
1	13	5	64	0,07	0,17	0,07	0,78	0,5	0,14
0	16	13	268	0	0	0,05	0,9	0,48	0,05
1	16	8	159	0,06	0,11	0,05	0,87	0,51	0,11
0	11	10	173	0	0	0,05	0,89	0,47	0,05
0	13	7	104	0	0	0,06	0,84	0,47	0,06
1	11	11	215	0,08	0,08	0,05	0,91	0,52	0,13
1	16	4	79	0,06	0,2	0,05	0,8	0,51	0,11
1	17	13	419	0,06	0,07	0,03	0,93	0,51	0,1
0	16	8	138	0	0	0,05	0,85	0,47	0,05
3	13	3	84	0,19	0,5	0,03	0,84	0,58	0,22
1	8	2	67	0,11	0,33	0,03	0,87	0,54	0,14
2	14	12	156	0,12	0,14	0,07	0,86	0,53	0,21
1	19	21	352	0,05	0,05	0,06	0,9	0,5	0,11
1	9	14	403	0,1	0,07	0,03	0,95	0,53	0,13

0,073	0,130	0,049	0,865	0,512
0,068	0,129	0,016	0,038	0,033

TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1-spec (FP/(FP+TN))	FIACC	AUC=(Sens+Spec)/2
39	494	283	5635	0,073	0,048	0,121	0,880	0,513
				sens (TP/(TP+FN))	0,07	0,07		
				(1-spec)[FIACC]	0,05	0,02		
				ppv (TP/(TP+FP))	0,13	0,13		
				ACC=(TP+FP+TN)/(TP+FN+FP+TN)	0,87	0,04		
				AUC=(Sens+Spec)/2	0,51	0,03		



First best score								
Fisher	Significant first patch ϵ TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))		
5,04E-01 -	15	4	10	11	126	0,29	0,27	
3,20E-01 -	12	0	12	12	186	0	0	
1,82E-01 -	9	6	5	3	87	0,55	0,67	
2,07E-01 -	3	0	17	3	139	0	0	
7,96E-02 -	7	0	17	7	99	0	0	
5,55E-01 -	4	3	15	1	127	0,17	0,75	
5,41E-01 -	7	0	16	7	133	0	0	
1,26E-01 -	12	10	5	2	91	0,67	0,83	
1,00E+00 -	3	0	18	3	139	0	0	
1,00E+00 -	7	1	18	6	167	0,05	0,14	
1,00E+00 -	3	0	7	3	41	0	0	
1,00E+00 -	4	0	18	4	127	0	0	
9,99E-01 -	7	2	15	5	101	0,12	0,29	
4,95E-01 -	15	0	14	15	194	0	0	
4,02E-01 -	7	0	10	7	115	0	0	
1,00E+00 -	4	0	17	4	118	0	0	
6,24E-02 -	4	0	13	4	78	0	0	
3,03E-01 -	10	0	11	10	183	0	0	
1,00E+00 -	7	2	2	5	93	0,5	0,29	
1,00E+00 -	4	0	11	4	90	0	0	
1,00E+00 -	15	1	13	14	112	0,07	0,07	
5,05E-01 -	9	0	19	9	226	0	0	
4,97E-01 -	3	0	15	3	116	0	0	
2,81E-01 -	5	0	16	5	87	0	0	
1,00E+00 -	6	3	12	3	67	0,2	0,5	
1,00E+00 -	38	0	16	38	244	0	0	
5,91E-01 -	5	0	17	5	163	0	0	
1,00E+00 -	4	3	9	1	183	0,25	0,75	
1,00E+00 -	10	0	13	10	101	0	0	
4,71E-01 -	4	0	13	4	222	0	0	
1,00E+00 -	4	0	18	4	80	0	0	
4,40E-01 -	42	14	5	28	405	0,74	0,33	
1,00E+00 -	5	0	17	5	141	0	0	
4,66E-02 Yes	7	0	17	7	81	0	0	
3,11E-01 -	3	3	7	0	69	0,3	1	
3,49E-01 -	5	0	17	5	164	0	0	
1,00E+00 -	10	0	21	10	364	0	0	
3,03E-01 -	11	0	11	11	407	0	0	
av							0,103	0,155
SD							0,200	0,284
s+Spec)/2		TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	
SUM		52	507	278	5666			
sens (TP/(TP+FN))		0,093						0,10
(1-spec)[FN/(FN+TN)]		0,047						0,05
ppv (TP/(TP+FP))		0,158						0,16
ACC=(TP+TN)/(TP+FP+FN+TN)		0,879						0,87
AUC=(Sen+Spec)/2		0,523						0,53

1-spec (FPaccuracy ((AUC (sens Fisher Significant?

0,08	0,86	0,6	3,51E-02	Yes
0,06	0,89	0,47	1,00E+00	-
0,03	0,92	0,76	2,67E-05	Yes
0,02	0,87	0,49	1,00E+00	-
0,07	0,8	0,47	1,00E+00	-
0,01	0,89	0,58	5,92E-03	Yes
0,05	0,85	0,47	1,00E+00	-
0,02	0,94	0,82	4,66E-09	Yes
0,02	0,87	0,49	1,00E+00	-
0,03	0,88	0,51	5,24E-01	-
0,07	0,8	0,47	1,00E+00	-
0,03	0,85	0,48	1,00E+00	-
0,05	0,84	0,54	2,49E-01	-
0,07	0,87	0,46	1,00E+00	-
0,06	0,87	0,47	1,00E+00	-
0,03	0,85	0,48	1,00E+00	-
0,05	0,82	0,48	1,00E+00	-
0,05	0,9	0,47	1,00E+00	-
0,05	0,93	0,72	2,29E-02	Yes
0,04	0,86	0,48	1,00E+00	-
0,11	0,81	0,48	1,00E+00	-
0,04	0,89	0,48	1,00E+00	-
0,03	0,87	0,49	1,00E+00	-
0,05	0,81	0,47	1,00E+00	-
0,04	0,82	0,58	6,50E-02	-

0,13	0,82	0,43	1,00E+00	-
0,03	0,88	0,49	1,00E+00	-
0,01	0,95	0,62	6,87E-04	Yes
0,09	0,81	0,45	1,00E+00	-
0,02	0,93	0,49	1,00E+00	-
0,05	0,78	0,48	1,00E+00	-
0,06	0,93	0,84	3,25E-12	Yes
0,03	0,87	0,48	1,00E+00	-
0,08	0,77	0,46	1,00E+00	-
0	0,91	0,65	1,52E-03	Yes
0,03	0,88	0,49	1,00E+00	-
0,03	0,92	0,49	1,00E+00	-
0,03	0,95	0,49	1,00E+00	-

0,046 0,867 0,528 av

0,027 0,048 0,102 SD

(1-spec)[F|ACC AUC=(Sens+Spec)/2

0,20
0,03
0,28
0,05
0,10

Ellipro score 0.5, default radius 6. Epitope dDiscontinuous Epitopes: Best by significance discontinuous e

antigen	how repitope	antigen	epitope	numbr	rank	b	best	pa	TP	FN	FP	TN	sens (T	ppv (TP/(T
1AFV:A	1	1afv_A	151	14	5	0	18	7	7	7	11	126	0,5	0,39
1E6J:P	2	1e6j_P	210	12	4	1	52	12	0	40	158	1	0,23	
1EGJ:A	1	1egj_A	101	11	2	1	23	9	2	14	76	0,82	0,39	
1FSK:A	1	1fsk_A	159	17	6	3	17	13	4	4	138	0,76	0,76	
1H0D:C	1	1h0d_C	123	17	5	3	39	14	3	25	81	0,82	0,36	
1I9R:A	1	1i9r_A	146	18	4	3	12	6	12	6	122	0,33	0,5	
1IQD:C	1	1iqd_C	156	16	6	4	28	11	5	17	123	0,69	0,39	
1JRH:I	1	1jrh_I	108	15	2	1	27	10	5	17	76	0,67	0,37	
1LK3:A	1	1lk3_A	160	18	7	4	8	6	12	2	140	0,33	0,75	
1MHP:B	1	1mhp_	192	19	4	3	59	18	1	41	132	0,95	0,31	
1NL0:G	1	1nl0_G	51	7	3	0	8	0	7	8	36	0	0	
1NSN:S	1	1nsn_S	149	18	6	4	37	8	10	29	102	0,44	0,22	
1OAZ:A	1	1oaz_A	123	17	5	2	8	4	13	4	102	0,24	0,5	
1ORQ:C	1	1orq_C	223	14	5	1	38	9	5	29	180	0,64	0,24	
1ORS:C	1	1ors_C	132	10	5	2	15	8	2	7	115	0,8	0,53	
1PKQ:E	1	1pkq_E	139	17	4	1	27	8	9	19	103	0,47	0,3	
1RJL:C	1	1rjl_C	95	13	6	2	13	7	6	6	76	0,54	0,54	
1SY6:A	2	1sy6_A	204	11	5	0	5	4	7	1	192	0,36	0,8	
1TZI:V	1	1tzi_V	102	4	3	0	9	2	2	7	91	0,5	0,22	
1WEJ:F	1	1wej_F	105	11	4	1	4	3	8	1	93	0,27	0,75	
1YJD:C	1	1yjd_C	140	14	5	3	5	4	10	1	125	0,29	0,8	
1YNT:F	2	1ynt_F	254	19	2	1	68	19	0	49	186	1	0,28	
1ZA3:R	3	1za3_F	134	15	3	2	23	11	4	12	107	0,73	0,48	
1ZTX:E	1	1ztx_E	108	16	3	1	25	14	2	11	81	0,88	0,56	
2JEL:P	2	2jel_P	85	15	4	1	14	9	6	5	65	0,6	0,64	
1JPS:T	2	1jps_T	219	0 no epitope predicted										
1AR1:B	2	1ar1_E	298	16	5	3	35	6	10	29	253	0,38	0,17	
1EZV:E	2	1ezv_E	185	17	4	3	38	8	9	30	138	0,47	0,21	
1FNS:A	1	1fns_A	196	12	4	1	8	4	8	4	180	0,33	0,5	
1R3J:C	1	1r3j_C	124	13	3	2	28	11	2	17	94	0,85	0,39	
1NFD:D	2	1nfd_C	239	13	5	2	15	8	5	7	219	0,62	0,53	
1TQB:A	1	1tqb_A	102	18	3	0	12	9	9	3	81	0,5	0,75	
1TXV:A	1	1txv_A	452	19	5	2	229	19	0	210	223	1	0,08	
1V7M:V	1	1v7m_V	163	17	3	1	42	9	8	33	113	0,53	0,21	
1XIW:A	1	1xiw_A	105	17	4	0	12	7	10	5	83	0,41	0,58	
1XIW:F	1	1xiw_F	79	10	4	0	4	2	8	2	67	0,2	0,5	
1Z3G:A	1	1z3g_A	186	17	4	0	26	13	4	13	156	0,76	0,5	
2AEP:A	2	2aep_A	395	21	8	3	112	15	6	97	277	0,71	0,13	
1R0A:B	1	1r0a_A	429	11	7	1	11	9	2	2	416	0,82	0,82	

1,632
1,261

	TP	FN	FP	TN	sens (T	ppv (TP/(T
SUM	336	223	818	5126		
sens (T	0,601				sens (T	0,58
(1-spec	0,138				(1-spec	0,12
ppv (T	0,291				ppv (T	0,44
ACC=(T	0,840				ACC=(T	0,85
AUC=(S	0,732				AUC=(S	0,73

TP	FN	FP	TN
336	223	818	5126
87	440	645	5270
55	504	688	5256

0,00E+00 ### ###

—

pitope

Average on all predicted epitopes.

1-spec (FP accuracy ((AUC (sens Fisher					Significant?TP_av		FN_av	FP_av	TN_av
0,08	0,88	0,71	2,17E-04	Yes		1	12	14	122
0,2	0,81	0,9	1,85E-08	Yes		3	9	21	176
0,16	0,84	0,83	1,60E-05	Yes		4	6	22	68
0,03	0,95	0,87	1,27E-12	Yes		2	14	12	130
0,24	0,77	0,79	5,13E-06	Yes		2	14	9	96
0,05	0,88	0,64	8,90E-04	Yes		3	14	13	114
0,12	0,86	0,78	2,27E-06	Yes		2	13	12	127
0,18	0,8	0,74	2,74E-04	Yes		5	10	18	75
0,01	0,91	0,66	2,14E-05	Yes		1	16	7	134
0,24	0,78	0,86	1,11E-09	Yes		4	14	22	150
0,18	0,71	0,41	1,00E+00	-		1	6	5	38
0,22	0,74	0,61	4,37E-02	Yes		1	16	11	119
0,04	0,86	0,6	1,27E-02	Yes		2	14	10	95
0,14	0,85	0,75	5,32E-05	Yes		1	12	19	189
0,06	0,93	0,87	1,42E-07	Yes		1	8	9	112
0,16	0,8	0,66	5,39E-03	Yes		2	14	13	108
0,07	0,87	0,73	1,83E-04	Yes		1	11	5	76
0,01	0,96	0,68	2,29E-05	Yes		2	9	15	177
0,07	0,91	0,71	3,81E-02	Yes		1	2	12	85
0,01	0,91	0,63	3,31E-03	Yes		1	9	16	78
0,01	0,92	0,64	3,07E-04	Yes		1	12	11	114
0,21	0,81	0,9	1,65E-12	Yes		9	9	63	171
0,1	0,88	0,82	3,07E-07	Yes		3	11	12	106
0,12	0,88	0,88	3,04E-09	Yes		4	11	13	78
0,07	0,87	0,76	1,67E-05	Yes		2	12	8	62
0,1	0,87	0,64	5,75E-03	Yes		1	14	27	255
0,18	0,79	0,65	9,22E-03	Yes		2	15	21	146
0,02	0,94	0,66	5,07E-04	Yes		1	10	24	159
0,15	0,85	0,85	7,35E-07	Yes		3	9	11	99
0,03	0,95	0,79	3,08E-08	Yes		2	10	23	203
0,04	0,88	0,73	3,55E-06	Yes		3	14	12	71
0,48	0,54	0,76	1,67E-06	Yes		3	15	48	384
0,23	0,75	0,65	1,07E-02	Yes		4	13	20	126
0,06	0,86	0,68	4,21E-04	Yes		2	14	8	80
0,03	0,87	0,59	7,59E-02	-		1	8	6	62
0,08	0,91	0,84	5,55E-10	Yes		3	13	21	147
0,26	0,74	0,73	3,16E-05	Yes		2	18	23	350
0	0,99	0,91	2,41E-15	Yes		1	9	29	388
0,117	0,851	0,734	av						
0,099	0,085	0,110	SD						
(1-spec)[FIACC					AUC=(Sens+Spec)/2	TP	FN	FP	TN
					SUM	87	440	645	5270
0,25					sens (TP/(	0,165			
0,10					(1-spec)[FI	0,109			
0,22					ppv (TP/(T	0,119			
0,08					ACC=(TP +	0,832			
0,11					AUC=(Sen	0,528			

First best score									
sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1-specificity (FN/(FN+TN))	accuracy ((TP+TN)/(TP+FP+FN+TN))	AUC (sensitivity vs 1-specificity)	Fisher	Significant?	first patch	TP	εTP
0,08	0,07	0,1	0,83	0,49	1,00E+00	-	18	7	
0,25	0,12	0,11	0,86	0,57	1,46E-01	-	16	0	
0,4	0,15	0,24	0,72	0,58	2,39E-01	-	30	0	
0,12	0,14	0,08	0,84	0,52	4,27E-01	-	20	0	
0,12	0,18	0,09	0,81	0,52	4,43E-01	-	8	0	
0,18	0,19	0,1	0,81	0,54	2,87E-01	-	22	3	
0,13	0,14	0,09	0,84	0,52	4,07E-01	-	11	0	
0,33	0,22	0,19	0,74	0,57	1,85E-01	-	19	0	
0,06	0,12	0,05	0,85	0,5	1,00E+00	-	8	0	
0,22	0,15	0,13	0,81	0,55	2,18E-01	-	6	0	
0,14	0,17	0,12	0,78	0,51	1,00E+00	-	8	0	
0,06	0,08	0,08	0,82	0,49	1,00E+00	-	11	0	
0,12	0,17	0,1	0,8	0,51	4,92E-01	-	12	3	
0,08	0,05	0,09	0,86	0,49	1,00E+00	-	19	0	
0,11	0,1	0,07	0,87	0,52	5,25E-01	-	10	0	
0,12	0,13	0,11	0,8	0,51	5,49E-01	-	3	0	
0,08	0,17	0,06	0,83	0,51	5,74E-01	-	8	0	
0,18	0,12	0,08	0,88	0,55	2,32E-01	-	5	4	
0,33	0,08	0,12	0,86	0,6	3,44E-01	-	9	2	
0,1	0,06	0,17	0,76	0,46	1,00E+00	-	14	0	
0,08	0,08	0,09	0,83	0,49	1,00E+00	-	17	0	
0,5	0,12	0,27	0,71	0,62	3,87E-02	Yes	78	0	
0,21	0,2	0,1	0,83	0,56	1,99E-01	-	15	0	
0,27	0,24	0,14	0,77	0,56	1,97E-01	-	27	0	
0,14	0,2	0,11	0,76	0,51	5,27E-01	-	8	0	
0,07	0,04	0,1	0,86	0,49	1,00E+00	-	60	3	
0,12	0,09	0,13	0,8	0,5	1,00E+00	-	5	0	
0,09	0,04	0,13	0,82	0,48	1,00E+00	-	41	0	
0,25	0,21	0,1	0,84	0,57	1,41E-01	-	13	0	
0,17	0,08	0,1	0,86	0,53	3,66E-01	-	40	0	
0,18	0,2	0,14	0,74	0,52	4,91E-01	-	12	9	
0,17	0,06	0,11	0,86	0,53	3,34E-01	-	6	0	
0,24	0,17	0,14	0,8	0,55	2,25E-01	-	16	0	
0,12	0,2	0,09	0,79	0,52	4,77E-01	-	12	7	
0,11	0,14	0,09	0,82	0,51	1,00E+00	-	4	2	
0,19	0,12	0,12	0,82	0,53	3,47E-01	-	26	13	
0,1	0,08	0,06	0,9	0,52	3,68E-01	-	42	2	
0,1	0,03	0,07	0,91	0,52	5,21E-01	-	64	0	
0,166	0,129	0,112	0,818	0,527	av		19,55		
0,098	0,057	0,045	0,047	0,034	SD				
sens (TP/(TP+FN)) ppv (TP/(TP+FP)) 1-specificity (FN/(FN+TN)) F1-ACC					AUC=(Sens+Spec)/2				
sens (TP/(TP+FN))					SUM				
0,17					55				
(1-specificity) F1					sens (TP/(TP+FN))				
0,11					0,098				
ppv (TP/(TP+FP))					(1-specificity) F1				
0,13					0,116				
ACC=(TP+TN)/(TP+FP+FN+TN)					ppv (TP/(TP+FP))				
0,82					0,074				
AUC=(Sens+Spec)/2					ACC=(TP+TN)/(TP+FP+FN+TN)				
0,53					0,817				
0,03					AUC=(Sens+Spec)/2				
					0,491				

FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1-spec (FP/(FP+TN))	accuracy ((TP+TN)/(TP+FP+TN))	AUC (sens+1-spec)/2	sens Fisher
7	11	126	0,5	0,39	0,08	0,88	0,71	2,17E-04
12	16	182	0	0	0,08	0,87	0,46	1,00E+00
11	30	60	0	0	0,33	0,59	0,33	1,00E+00
17	20	122	0	0	0,14	0,77	0,43	1,00E+00
17	8	98	0	0	0,08	0,8	0,46	1,00E+00
15	19	109	0,17	0,14	0,15	0,77	0,51	5,34E-01
16	11	129	0	0	0,08	0,83	0,46	1,00E+00
15	19	74	0	0	0,2	0,69	0,4	1,00E+00
18	8	134	0	0	0,06	0,84	0,47	1,00E+00
19	6	167	0	0	0,03	0,87	0,48	1,00E+00
7	8	36	0	0	0,18	0,71	0,41	1,00E+00
18	11	120	0	0	0,08	0,81	0,46	1,00E+00
14	9	97	0,18	0,25	0,08	0,81	0,55	2,17E-01
14	19	190	0	0	0,09	0,85	0,45	1,00E+00
10	10	112	0	0	0,08	0,85	0,46	1,00E+00
17	3	119	0	0	0,02	0,86	0,49	1,00E+00
13	8	74	0	0	0,1	0,78	0,45	1,00E+00
7	1	192	0,36	0,8	0,01	0,96	0,68	2,29E-05
2	7	91	0,5	0,22	0,07	0,91	0,71	3,81E-02
11	14	80	0	0	0,15	0,76	0,43	1,00E+00
14	17	109	0	0	0,13	0,78	0,43	1,00E+00
19	78	157	0	0	0,33	0,62	0,33	1,00E+00
15	15	104	0	0	0,13	0,78	0,44	1,00E+00
16	27	65	0	0	0,29	0,6	0,35	1,00E+00
15	8	62	0	0	0,11	0,73	0,44	1,00E+00
13	57	225	0,19	0,05	0,2	0,77	0,49	1,00E+00
17	5	163	0	0	0,03	0,88	0,49	1,00E+00
12	41	143	0	0	0,22	0,73	0,39	1,00E+00
13	13	98	0	0	0,12	0,79	0,44	1,00E+00
13	40	186	0	0	0,18	0,78	0,41	1,00E+00
9	3	81	0,5	0,75	0,04	0,88	0,73	3,55E-06
19	6	427	0	0	0,01	0,94	0,49	1,00E+00
17	16	130	0	0	0,11	0,8	0,45	1,00E+00
10	5	83	0,41	0,58	0,06	0,86	0,68	4,21E-04
8	2	67	0,2	0,5	0,03	0,87	0,59	7,59E-02
4	13	156	0,76	0,5	0,08	0,91	0,84	5,55E-10
19	40	334	0,1	0,05	0,11	0,85	0,49	1,00E+00
11	64	354	0	0	0,15	0,83	0,42	1,00E+00
			0,102	0,111	0,116	0,806	0,492 av	
			0,193	0,224	0,080	0,086	0,116 SD	
FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1-spec (FP/(FP+TN))	ACC=(TP+TN)/(TP+FP+TN)	AUC=(Sens+Spec)/2	
504	688	5256						
			sens (TP/(TP+FN))	0,10	0,19			
			1-spec (FP/(FP+TN))	0,12	0,08			
			ppv (TP/(TP+FP))	0,11	0,22			
			ACC=(TP+TN)/(TP+FP+TN)	0,81	0,09			
			AUC=(Sens+Spec)/2	0,49	0,12			

Significant?

Yes

-
-
-
-
-
-
-
-
-
-
-
-
-
-
-
-

Yes

Yes

-
-
-
-
-
-
-
-
-
-
-
-
-
-
-
-

Yes

-
-

Yes

-

Yes

-
-

ElliPro score 0.6, radius 6. Epitope definition #2.

Discontinuous Epitopes: Best by significance

antigen	epitope	antigen size	epitope size	number of	rank best	best patch	TP	FN
1AFV:A	1afv_A_HL	151	14	4	0	18	7	7
1E6J:P	1e6j_P_HL	210	12	5	1	31	11	1
1EGJ:A	1egj_A_HL	101	11	3	2	18	9	2
1FSK:A	1fsk_A_CB	159	17	7	4	11	11	6
1H0D:C	1h0d_C_B/	123	17	6	2	15	12	5
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	4	1	5	4	14
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	16	5	4	24	9	7
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	15	4	0	12	10	5
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	18	7	0	3	0	18
1MHP:B	1mhp_B_X	192	19	8	7	18	12	7
1NL0:G	1nl0_G_HL	51	7	3	0	6	0	7
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	18	6	2	8	4	14
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	17	5	2	8	4	13
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	5	2	33	9	5
1ORS:C	1ors_C_BA	132	10	5	1	11	6	4
1PKQ:E	1pkq_E_B/	139	17	5	0	4	0	17
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	5	2	12	6	7
1SY6:A	1sy6_A_HL	204	11	8	0	7	4	7
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	4	3	0	9	2	2
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	11	3	2	4	3	8
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	4	0	17	1	13
1YNT:F	1ynt_F_BA	254	19	3	2	54	14	5
1ZA3:R	1za3_R_HL	134	15	3	2	22	11	4
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	3	1	14	8	8
2JEL:P	2jel_P_HL	85	15	2	1	12	8	7
1JPS:T	1jps_T_HL	219	0 no epitope predicted					
1AR1:B	1ar1_B_CL	298	16	6	3	20	4	12
1EZV:E	1ezv_E_XY	185	17	5	0	5	0	17
1FNS:A	1fns_A_HL	196	12	4	0	6	4	8
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	4	3	5	4	9
1NFD:D	1nfd_D_HC	239	13	5	3	15	8	5
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	18	5	2	12	9	9
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	9	1	67	18	1
1V7M:V	1v7m_V_H	163	17	4	3	7	6	11
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	17	3	0	10	7	10
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	10	3	0	10	3	7
1Z3G:B	1z3g_B_IM	186	17	4	0	23	12	5
2AEP:A	2aep_A_HI	395	21	8	2	49	9	12
1R0A:B	1r0a_AB_H	429	11	10	1	10	9	2

4,895
1,886

1,474
1,520

	TP	FN
SUM	258	301
sens (TP/(TP+FN))	0,462	
(1-spec)[FP/(FP+TN)]	0,060	
ppv (TP/(TP+FP))	0,420	
ACC=(TP+TN)/(TP+FP+FN+TN)	0,899	
AUC=(Sen+Spec)/2	0,701	

TP	FN	FP	TN
258	301	357	5587
62	472	401	5514
60	499	390	5554

0,00E+00 7,27E-05 3,08E-04

discontinuous epitope								Average of	
FP	TN	sens (TP/(	ppv (TP/(T	1-spec (FP	accuracy ((AUC	(sens Fisher	Significant?		
11	126	0,5	0,39	0,08	0,88	0,71	2,17E-04	Yes	
20	178	0,92	0,35	0,1	0,9	0,91	1,37E-09	Yes	
9	81	0,82	0,5	0,1	0,89	0,86	1,06E-06	Yes	
0	142	0,65	1	0	0,96	0,82	4,29E-13	Yes	
3	103	0,71	0,8	0,03	0,93	0,84	1,72E-10	Yes	
1	127	0,22	0,8	0,01	0,9	0,61	7,76E-04	Yes	
15	125	0,56	0,38	0,11	0,86	0,73	6,32E-05	Yes	
2	91	0,67	0,83	0,02	0,94	0,82	4,66E-09	Yes	
3	139	0	0	0,02	0,87	0,49	1,00E+00	-	
6	167	0,63	0,67	0,03	0,93	0,8	2,03E-10	Yes	
6	38	0	0	0,14	0,75	0,43	1,00E+00	-	
4	127	0,22	0,5	0,03	0,88	0,6	7,87E-03	Yes	
4	102	0,24	0,5	0,04	0,86	0,6	1,27E-02	Yes	
24	185	0,64	0,27	0,11	0,87	0,76	1,42E-05	Yes	
5	117	0,6	0,55	0,04	0,93	0,78	1,29E-05	Yes	
4	118	0	0	0,03	0,85	0,48	1,00E+00	-	
6	76	0,46	0,5	0,07	0,86	0,69	1,19E-03	Yes	
3	190	0,36	0,57	0,02	0,95	0,67	1,51E-04	Yes	
7	91	0,5	0,22	0,07	0,91	0,71	3,81E-02	Yes	
1	93	0,27	0,75	0,01	0,91	0,63	3,31E-03	Yes	
16	110	0,07	0,06	0,13	0,79	0,47	1,00E+00	-	
40	195	0,74	0,26	0,17	0,82	0,78	4,35E-07	Yes	
11	108	0,73	0,5	0,09	0,89	0,82	1,66E-07	Yes	
6	86	0,5	0,57	0,07	0,87	0,72	6,99E-05	Yes	
4	66	0,53	0,67	0,06	0,87	0,74	4,70E-05	Yes	
16	266	0,25	0,2	0,06	0,91	0,6	1,60E-02	Yes	
5	163	0	0	0,03	0,88	0,49	1,00E+00	-	
2	182	0,33	0,67	0,01	0,95	0,66	1,16E-04	Yes	
1	110	0,31	0,8	0,01	0,92	0,65	3,58E-04	Yes	
7	219	0,62	0,53	0,03	0,95	0,79	3,08E-08	Yes	
3	81	0,5	0,75	0,04	0,88	0,73	3,55E-06	Yes	
49	384	0,95	0,27	0,11	0,89	0,92	2,31E-15	Yes	
1	145	0,35	0,86	0,01	0,93	0,67	3,43E-06	Yes	
3	85	0,41	0,7	0,03	0,88	0,69	7,73E-05	Yes	
7	62	0,3	0,3	0,1	0,82	0,6	1,09E-01	-	
11	158	0,71	0,52	0,07	0,91	0,82	2,48E-09	Yes	
40	334	0,43	0,18	0,11	0,87	0,66	3,14E-04	Yes	
1	417	0,82	0,9	0	0,99	0,91	4,39E-16	Yes	
		0,461	0,482	0,058	0,891	0,702 av			
		0,261	0,279	0,044	0,047	0,127 SD			
FP	TN	sens (TP/(				ppv (TP/(T (1-spec)[FIACC AUC=(Sens+Spec)/2			
357	5587								SUM
		sens (TP/(	0,46	0,26					sens (TP/(
		(1-spec)[FI	0,06	0,04					(1-spec)[FI
		ppv (TP/(T	0,48	0,28					ppv (TP/(T
		ACC=(TP +	0,89	0,05					ACC=(TP +
		AUC=(Sen	0,70	0,13					AUC=(Sen

n all predicted epitopes.

TP_av	FN_av	FP_av	TN_av	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1-spec (FP/(FP+TN))	FIACC	AUC=(sens+1-spec)/2	sens-spec
1	12	14	122	0,08	0,07	0,1	0,83	0,49	
2	9	13	185	0,18	0,13	0,07	0,89	0,56	
3	8	10	79	0,27	0,23	0,11	0,82	0,58	
1	15	7	134	0,06	0,12	0,05	0,86	0,51	
2	15	5	100	0,12	0,29	0,05	0,84	0,54	
2	16	12	115	0,11	0,14	0,09	0,81	0,51	
2	13	9	130	0,13	0,18	0,06	0,86	0,53	
2	12	7	86	0,14	0,22	0,08	0,82	0,53	
0	17	4	137	0	0	0,03	0,87	0,49	
2	17	7	166	0,11	0,22	0,04	0,88	0,53	
1	6	4	39	0,14	0,2	0,09	0,8	0,52	
1	16	9	122	0,06	0,1	0,07	0,83	0,5	
1	15	8	97	0,06	0,11	0,08	0,81	0,49	
1	12	15	193	0,08	0,06	0,07	0,88	0,5	
1	8	7	114	0,11	0,12	0,06	0,88	0,53	
1	16	6	116	0,06	0,14	0,05	0,84	0,5	
2	11	5	76	0,15	0,29	0,06	0,83	0,55	
1	9	6	186	0,1	0,14	0,03	0,93	0,53	
1	2	10	87	0,33	0,09	0,1	0,88	0,62	
1	10	3	90	0,09	0,25	0,03	0,88	0,53	
0	13	9	116	0	0	0,07	0,84	0,46	
4	14	33	201	0,22	0,11	0,14	0,81	0,54	
3	11	9	109	0,21	0,25	0,08	0,85	0,57	
2	13	8	83	0,13	0,2	0,09	0,8	0,52	
4	11	6	64	0,27	0,4	0,09	0,8	0,59	
0	15	18	263	0	0	0,06	0,89	0,47	
1	15	13	154	0,06	0,07	0,08	0,85	0,49	
1	10	19	164	0,09	0,05	0,1	0,85	0,49	
2	10	7	103	0,17	0,22	0,06	0,86	0,55	
1	11	16	210	0,08	0,06	0,07	0,89	0,51	
2	15	6	77	0,12	0,25	0,07	0,79	0,52	
2	17	20	412	0,11	0,09	0,05	0,92	0,53	
2	15	12	134	0,12	0,14	0,08	0,83	0,52	
3	13	7	80	0,19	0,3	0,08	0,81	0,55	
1	8	4	64	0,11	0,2	0,06	0,84	0,53	
3	14	17	152	0,18	0,15	0,1	0,83	0,54	
2	18	20	353	0,1	0,09	0,05	0,9	0,52	
1	10	16	401	0,09	0,06	0,04	0,94	0,53	
				0,122	0,151	0,071	0,851	0,526	
				0,072	0,093	0,024	0,038	0,032	

TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1-spec (FP/(FP+TN))	FIACC	AUC=(sens+1-spec)/2
62	472	401	5514					
0,116				sens (TP/(TP+FN))	0,12	0,07		
0,068				(1-spec)[FP/(FP+TN)]	0,07	0,02		
0,134				ppv (TP/(TP+FP))	0,15	0,09		
0,865				ACC=(TP+TN)/(TP+FN+FP+TN)	0,85	0,04		
0,524				AUC=(sens+1-spec)/2	0,53	0,03		

First best score								
Fisher	Significant first patch ϵ TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))		
1,00E+00 -	18	7	7	11	126	0,5	0,39	
1,81E-01 -	16	0	12	16	182	0	0	
1,53E-01 -	13	0	11	13	77	0	0	
5,86E-01 -	18	0	17	18	124	0	0	
2,52E-01 -	8	0	17	8	98	0	0	
5,44E-01 -	19	2	16	17	111	0,11	0,11	
2,91E-01 -	8	0	16	8	132	0	0	
3,34E-01 -	12	10	5	2	91	0,67	0,83	
1,00E+00 -	3	0	18	3	139	0	0	
2,20E-01 -	8	2	17	6	167	0,11	0,25	
5,46E-01 -	6	0	7	6	38	0	0	
1,00E+00 -	5	0	18	5	126	0	0	
1,00E+00 -	7	2	15	5	101	0,12	0,29	
1,00E+00 -	18	0	14	18	191	0	0	
4,46E-01 -	7	0	10	7	115	0	0	
1,00E+00 -	4	0	17	4	118	0	0	
2,48E-01 -	6	0	13	6	76	0	0	
3,03E-01 -	7	4	7	3	190	0,36	0,57	
2,98E-01 -	9	2	2	7	91	0,5	0,22	
3,65E-01 -	4	0	11	4	90	0	0	
1,00E+00 -	17	1	13	16	110	0,07	0,06	
2,62E-01 -	12	0	19	12	223	0	0	
1,18E-01 -	4	0	15	4	115	0	0	
4,29E-01 -	6	0	16	6	86	0	0	
7,04E-02 -	8	0	15	8	62	0	0	
1,00E+00 -	42	0	16	42	240	0	0	
1,00E+00 -	5	0	17	5	163	0	0	
1,00E+00 -	6	4	8	2	182	0,33	0,67	
2,16E-01 -	10	0	13	10	101	0	0	
5,98E-01 -	34	0	13	34	192	0	0	
4,09E-01 -	5	0	18	5	79	0	0	
2,36E-01 -	5	0	19	5	428	0	0	
4,43E-01 -	10	2	15	8	138	0,12	0,2	
1,85E-01 -	10	7	10	3	85	0,41	0,7	
4,72E-01 -	10	3	7	7	62	0,3	0,3	
2,70E-01 -	23	12	5	11	158	0,71	0,52	
3,10E-01 -	40	2	19	38	336	0,1	0,05	
3,63E-01 -	7	0	11	7	411	0	0	
av						0,116	0,136	
SD						0,202	0,234	
s+Spec)/2								
SUM		TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	
		60	499	390	5554			
sens (TP/(TP+FN))		0,107				sens (TP/(TP+FN))	0,12	
(1-spec)[F]		0,066				(1-spec)[F]	0,07	
ppv (TP/(TP+FP))		0,133				ppv (TP/(TP+FP))	0,14	
ACC=(TP+TN)/(TP+FP+TN+FN)		0,863				ACC=(TP+TN)/(TP+FP+TN+FN)	0,85	
AUC=(Sen+Spec)/2		0,521				AUC=(Sen+Spec)/2	0,52	

1-spec (FPaccuracy ((AUC (sens Fisher Significant?

0,08	0,88	0,71	2,17E-04	Yes
0,08	0,87	0,46	1,00E+00	-
0,14	0,76	0,43	1,00E+00	-
0,13	0,78	0,44	1,00E+00	-
0,08	0,8	0,46	1,00E+00	-
0,13	0,77	0,49	1,00E+00	-
0,06	0,85	0,47	1,00E+00	-
0,02	0,94	0,82	4,66E-09	Yes
0,02	0,87	0,49	1,00E+00	-
0,03	0,88	0,54	1,81E-01	-
0,14	0,75	0,43	1,00E+00	-
0,04	0,85	0,48	1,00E+00	-
0,05	0,84	0,54	2,49E-01	-
0,09	0,86	0,46	1,00E+00	-
0,06	0,87	0,47	1,00E+00	-
0,03	0,85	0,48	1,00E+00	-
0,07	0,8	0,46	1,00E+00	-
0,02	0,95	0,67	1,51E-04	Yes
0,07	0,91	0,71	3,81E-02	Yes
0,04	0,86	0,48	1,00E+00	-
0,13	0,79	0,47	1,00E+00	-
0,05	0,88	0,47	1,00E+00	-
0,03	0,86	0,48	1,00E+00	-
0,07	0,8	0,47	1,00E+00	-
0,11	0,73	0,44	1,00E+00	-

0,15	0,81	0,43	1,00E+00	-
0,03	0,88	0,49	1,00E+00	-
0,01	0,95	0,66	1,16E-04	Yes
0,09	0,81	0,45	1,00E+00	-
0,15	0,8	0,42	1,00E+00	-
0,06	0,77	0,47	1,00E+00	-
0,01	0,95	0,49	1,00E+00	-
0,05	0,86	0,53	2,80E-01	-
0,03	0,88	0,69	7,73E-05	Yes
0,1	0,82	0,6	1,09E-01	-
0,07	0,91	0,82	2,48E-09	Yes
0,1	0,86	0,5	1,00E+00	-
0,02	0,96	0,49	1,00E+00	-

0,069	0,849	0,523 av
0,042	0,060	0,107 SD

(1-spec)[F|ACC AUC=(Sens+Spec)/2

0,20
0,04
0,23
0,06
0,11

Ellipro score 0.7, radius 7. Epitope definition #2.

Discontinuous Epitopes: Best by significance

antigen	epitope	antigen size	epitope size	number of	rank best	best patch	TP	FN
1AFV:A	1afv_A_HL	151	14	4	0	8	0	14
1E6J:P	1e6j_P_HL	210	12	4	1	28	11	1
1EGJ:A	1egj_A_HL	101	11	3	0	15	9	2
1FSK:A	1fsk_A_CB	159	17	4	2	10	10	7
1H0D:C	1h0d_C_B/	123	17	3	2	15	13	4
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	5	2	5	4	14
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	16	3	0	11	0	16
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	15	2	1	24	11	4
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	18	5	3	12	6	12
1MHP:B	1mhp_B_X	192	19	3	0	10	3	16
1NL0:G	1nl0_G_HL	51	7	1	0	3	0	7
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	18	3	0	5	0	18
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	17	4	3	18	8	9
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	5	1	25	8	6
1ORS:C	1ors_C_BA	132	10	5	1	9	7	3
1PKQ:E	1pkq_E_B/	139	17	3	2	27	9	8
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	3	2	17	6	7
1SY6:A	1sy6_A_HL	204	11	3	1	14	7	4
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	4	3	0	8	2	2
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	11	2	0	5	0	11
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	3	0	17	2	12
1YNT:F	1ynt_F_BA	254	19	3	2	49	12	7
1ZA3:R	1za3_R_HI	134	15	3	2	13	7	8
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	3	2	16	9	7
2JEL:P	2jel_P_HL	85	15	2	0	10	6	9
1JPS:T	1jps_T_HL	219	0 no epitope predicted					
1AR1:B	1ar1_B_CI	298	16	3	1	3	3	13
1EZV:E	1ezv_E_X/	185	17	4	3	12	5	12
1FNS:A	1fns_A_HL	196	12	3	0	3	3	9
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	3	0	11	0	13
1NFD:D	1nfd_D_HC	239	13	4	3	21	10	3
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	18	2	0	3	3	15
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	5	0	56	17	2
1V7M:V	1v7m_V_H	163	17	4	3	5	5	12
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	17	1	0	7	0	17
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	10	1	0	8	3	7
1Z3G:B	1z3g_B_IM	186	17	4	1	21	11	6
2AEP:A	2aep_A_HI	395	21	2	0	46	2	19
1R0A:B	1r0a_AB_I	429	11	4	1	10	8	3

3,211 1,026
1,094 1,102

	TP	FN
SUM	220	339
sens (TP/(TP+FN))	0,394	
(1-spec)[FP/(FP+TN)]	0,060	
ppv (TP/(TP+FP))	0,380	
ACC=(TP+TN)/(TP+FP+FN+TN)	0,893	
AUC=(Sen+Spec)/2	0,667	

TP	FN	FP	TN
220	339	359	5585
67	471	501	5421
55	504	471	5473

0,00E+00 1,73E-03 6,87E-02

discontinuous epitope									Average of
FP	TN	sens (TP/(	ppv (TP/(T	1-spec (FP	accuracy ((AUC	(sens Fisher		Significant?	
8	129	0	0	0,06	0,85	0,47	1,00E+00	-	
17	181	0,92	0,39	0,09	0,91	0,92	3,53E-10	Yes	
6	84	0,82	0,6	0,07	0,92	0,88	1,17E-07	Yes	
0	142	0,59	1	0	0,96	0,79	9,12E-12	Yes	
2	104	0,76	0,87	0,02	0,95	0,87	1,90E-12	Yes	
1	127	0,22	0,8	0,01	0,9	0,61	7,76E-04	Yes	
11	129	0	0	0,08	0,83	0,46	1,00E+00	-	
13	80	0,73	0,46	0,14	0,84	0,8	5,81E-06	Yes	
6	136	0,33	0,5	0,04	0,89	0,65	5,32E-04	Yes	
7	166	0,16	0,3	0,04	0,88	0,56	6,33E-02	-	
3	41	0	0	0,07	0,8	0,47	1,00E+00	-	
5	126	0	0	0,04	0,85	0,48	1,00E+00	-	
10	96	0,47	0,44	0,09	0,85	0,69	4,90E-04	Yes	
17	192	0,57	0,32	0,08	0,9	0,75	1,56E-05	Yes	
2	120	0,7	0,78	0,02	0,96	0,84	3,51E-08	Yes	
17	105	0,53	0,35	0,14	0,82	0,7	6,67E-04	Yes	
11	71	0,46	0,35	0,13	0,81	0,66	1,10E-02	Yes	
7	186	0,64	0,5	0,04	0,95	0,8	3,79E-07	Yes	
6	92	0,5	0,25	0,06	0,92	0,72	3,01E-02	Yes	
5	89	0	0	0,05	0,85	0,47	1,00E+00	-	
15	111	0,14	0,12	0,12	0,81	0,51	5,31E-01	-	
37	198	0,63	0,24	0,16	0,83	0,74	1,37E-05	Yes	
6	113	0,47	0,54	0,05	0,9	0,71	5,95E-05	Yes	
7	85	0,56	0,56	0,08	0,87	0,74	2,09E-05	Yes	
4	66	0,4	0,6	0,06	0,85	0,67	1,58E-03	Yes	
0	282	0,19	1	0	0,96	0,59	1,28E-04	Yes	
7	161	0,29	0,42	0,04	0,9	0,63	1,91E-03	Yes	
0	184	0,25	1	0	0,95	0,62	1,78E-04	Yes	
11	100	0	0	0,1	0,81	0,45	1,00E+00	-	
11	215	0,77	0,48	0,05	0,94	0,86	6,37E-10	Yes	
0	84	0,17	1	0	0,85	0,58	4,76E-03	Yes	
39	394	0,89	0,3	0,09	0,91	0,9	4,93E-15	Yes	
0	146	0,29	1	0	0,93	0,65	6,87E-06	Yes	
7	81	0	0	0,08	0,77	0,46	1,00E+00	-	
5	64	0,3	0,38	0,07	0,85	0,61	5,92E-02	-	
10	159	0,65	0,52	0,06	0,91	0,79	1,84E-08	Yes	
44	330	0,1	0,04	0,12	0,84	0,49	1,00E+00	-	
2	416	0,73	0,8	0	0,99	0,86	2,75E-13	Yes	
		0,401	0,445	0,062	0,882	0,670 av			
		0,289	0,328	0,044	0,055	0,145 SD			
FP	TN	sens (TP/(	ppv (TP/(T	1-spec)[FI	ACC	AUC=(Sens+Spec)/2			
359	5585							SUM	
		<u>sens (TP/(</u>	<u>0,40</u>	<u>0,29</u>				<u>sens (TP/(</u>	
		<u>(1-spec)[FI</u>	<u>0,06</u>	<u>0,04</u>				<u>(1-spec)[FI</u>	
		<u>ppv (TP/(T</u>	<u>0,45</u>	<u>0,33</u>				<u>ppv (TP/(T</u>	
		<u>ACC=(TP +</u>	<u>0,88</u>	<u>0,05</u>				<u>ACC=(TP +</u>	
		<u>AUC=(Sen</u>	<u>0,67</u>	<u>0,14</u>				<u>AUC=(Sen</u>	

n all predicted epitopes.

TP_av	FN_av	FP_av	TN_av	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1-spec (FP/(FP+TN))	FIACC	AUC (sens+spec)/2	sens+spec
1	13	10	126	0,07	0,09	0,07	0,85	0,5	0,16
2	9	14	183	0,18	0,12	0,07	0,89	0,56	0,25
3	8	9	80	0,27	0,25	0,1	0,83	0,59	0,37
2	14	9	132	0,12	0,18	0,06	0,85	0,53	0,25
4	12	5	101	0,25	0,44	0,05	0,86	0,6	0,35
1	16	8	120	0,06	0,11	0,06	0,83	0,5	0,16
0	16	9	130	0	0	0,06	0,84	0,47	0,06
5	9	15	78	0,36	0,25	0,16	0,78	0,6	0,41
1	16	5	136	0,06	0,17	0,04	0,87	0,51	0,17
1	17	14	158	0,06	0,07	0,08	0,84	0,49	0,13
0	7	3	41	0	0	0,07	0,8	0,47	0,07
1	17	9	121	0,06	0,1	0,07	0,82	0,49	0,13
2	14	9	96	0,12	0,18	0,09	0,81	0,52	0,21
1	12	11	197	0,08	0,08	0,05	0,9	0,51	0,13
1	8	6	115	0,11	0,14	0,05	0,89	0,53	0,17
3	13	12	109	0,19	0,2	0,1	0,82	0,54	0,29
3	9	7	75	0,25	0,3	0,09	0,83	0,58	0,34
3	8	17	176	0,27	0,15	0,09	0,88	0,59	0,36
1	3	10	88	0,25	0,09	0,1	0,87	0,57	0,34
0	11	5	89	0	0	0,05	0,85	0,47	0,05
0	13	11	114	0	0	0,09	0,83	0,46	0,09
4	15	32	202	0,21	0,11	0,14	0,81	0,54	0,32
2	12	7	111	0,14	0,22	0,06	0,86	0,54	0,36
3	13	6	85	0,19	0,33	0,07	0,82	0,56	0,42
3	12	6	64	0,2	0,33	0,09	0,79	0,56	0,42
1	15	24	257	0,06	0,04	0,09	0,87	0,49	0,15
1	15	10	157	0,06	0,09	0,06	0,86	0,5	0,15
2	10	18	166	0,17	0,1	0,1	0,86	0,53	0,27
1	12	7	103	0,08	0,12	0,06	0,85	0,51	0,2
2	10	18	207	0,17	0,1	0,08	0,88	0,54	0,27
1	16	1	82	0,06	0,5	0,01	0,83	0,52	0,57
3	15	34	399	0,17	0,08	0,08	0,89	0,54	0,25
1	15	11	135	0,06	0,08	0,08	0,84	0,49	0,14
0	17	7	81	0	0	0,08	0,77	0,46	0,08
3	7	5	64	0,3	0,38	0,07	0,85	0,61	0,68
2	14	13	155	0,12	0,13	0,08	0,85	0,52	0,25
1	20	71	303	0,05	0,01	0,19	0,77	0,43	0,24
2	8	33	385	0,2	0,06	0,08	0,9	0,56	0,26
				0,132	0,147	0,079	0,843	0,526	
				0,095	0,124	0,032	0,034	0,044	
TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))					AUC=(sens+spec)/2
67	471	501	5421						
0,125				sens (TP/(TP+FN))	0,13	0,10			
0,085				(1-spec)[FIACC]	0,08	0,03			
0,118				ppv (TP/(TP+FP))	0,15	0,12			
0,850				ACC=(TP+TN)/(TP+FN+FP+TN)	0,84	0,03			
0,520				AUC=(sens+spec)/2	0,53	0,04			

		First best score					
Fisher	Significant	first patch ϵ TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+TN))
1,00E+00 -		8	0	14	8	129	0
2,03E-01 -		22	0	12	22	176	0
1,25E-01 -		15	9	2	6	84	0,82
3,11E-01 -		8	0	17	8	134	0
1,70E-02 Yes		3	0	17	3	103	0
1,00E+00 -		17	2	16	15	113	0,11
1,00E+00 -		11	0	16	11	129	0
8,84E-02 -		17	0	15	17	76	0
5,01E-01 -		8	0	18	8	134	0
1,00E+00 -		10	3	16	7	166	0,16
1,00E+00 -		3	0	7	3	41	0
1,00E+00 -		5	0	18	5	126	0
4,43E-01 -		18	2	15	16	90	0,12
5,26E-01 -		15	0	14	15	194	0
4,02E-01 -		7	0	10	7	115	0
2,46E-01 -		4	1	16	3	119	0,06
1,14E-01 -		5	0	13	5	77	0
8,00E-02 -		17	0	11	17	176	0
3,71E-01 -		8	2	2	6	92	0,5
1,00E+00 -		5	0	11	5	89	0
1,00E+00 -		17	2	12	15	111	0,14
2,77E-01 -		11	0	19	11	224	0
2,44E-01 -		3	0	15	3	116	0
1,31E-01 -		6	0	16	6	86	0
1,92E-01 -		10	6	9	4	66	0,4
1,00E+00 -		38	0	16	38	244	0
1,00E+00 -		5	0	17	5	163	0
3,52E-01 -		3	3	9	0	184	0,25
1,00E+00 -		11	0	13	11	100	0
2,68E-01 -		30	0	13	30	196	0
3,13E-01 -		3	3	15	0	84	0,17
1,76E-01 -		56	17	2	39	394	0,89
1,00E+00 -		9	0	17	9	137	0
1,00E+00 -		7	0	17	7	81	0
5,92E-02 -		8	3	7	5	64	0,3
3,83E-01 -		5	0	17	5	164	0
1,00E+00 -		46	2	19	44	330	0,1
1,93E-01 -		52	0	11	52	366	0
av						0,106	0,133
SD						0,215	0,262
s+Spec)/2							
SUM		55	504	471	5473		
sens (TP/(TP+FP))		0,098				sens (TP/(TP+FP))	0,11
(1-spec)[F]		0,079				(1-spec)[F]	0,07
ppv (TP/(TP+TN))		0,105				ppv (TP/(TP+TN))	0,13
ACC=(TP+TN)/(TP+FP+TN)		0,850				ACC=(TP+TN)/(TP+FP+TN)	0,84
AUC=(Sen+Spec)/2		0,510				AUC=(Sen+Spec)/2	0,52

1-spec (FP accuracy ((AUC (sens Fisher Significant?

0,06	0,85	0,47	1,00E+00	-
0,11	0,84	0,44	1,00E+00	-
0,07	0,92	0,88	1,17E-07	Yes
0,06	0,84	0,47	1,00E+00	-
0,03	0,84	0,49	1,00E+00	-
0,12	0,79	0,5	1,00E+00	-
0,08	0,83	0,46	1,00E+00	-
0,18	0,7	0,41	1,00E+00	-
0,06	0,84	0,47	1,00E+00	-
0,04	0,88	0,56	6,33E-02	-
0,07	0,8	0,47	1,00E+00	-
0,04	0,85	0,48	1,00E+00	-
0,15	0,75	0,48	1,00E+00	-
0,07	0,87	0,46	1,00E+00	-
0,06	0,87	0,47	1,00E+00	-
0,02	0,86	0,52	4,10E-01	-
0,06	0,81	0,47	1,00E+00	-
0,09	0,86	0,46	1,00E+00	-
0,06	0,92	0,72	3,01E-02	Yes
0,05	0,85	0,47	1,00E+00	-
0,12	0,81	0,51	5,31E-01	-
0,05	0,88	0,48	1,00E+00	-
0,03	0,87	0,49	1,00E+00	-
0,07	0,8	0,47	1,00E+00	-
0,06	0,85	0,67	1,58E-03	Yes

0,13	0,82	0,43	1,00E+00	-
0,03	0,88	0,49	1,00E+00	-
0	0,95	0,62	1,78E-04	Yes
0,1	0,81	0,45	1,00E+00	-
0,13	0,82	0,43	1,00E+00	-
0	0,85	0,58	4,76E-03	Yes
0,09	0,91	0,9	4,93E-15	Yes
0,06	0,84	0,47	1,00E+00	-
0,08	0,77	0,46	1,00E+00	-
0,07	0,85	0,61	5,92E-02	-
0,03	0,88	0,49	1,00E+00	-
0,12	0,84	0,49	1,00E+00	-
0,12	0,85	0,44	1,00E+00	-

0,073	0,843	0,517 av
0,041	0,047	0,111 SD

(1-spec)[F|ACC AUC=(Sens+Spec)/2

0,22
0,04
0,26
0,05
0,11

Ellipro default score 0.7, default radius 6. Epitope definition: Discontinuous Epitopes: Best by significance

antigen	epitope	antigen size	epitope size	number of rank best	best ebest patch	TP	FN	
1AFV:A	1afv_A_HL	151	14	4	0	15	4	10
1FSK:A	1fsk_A_CB	159	17	5	4	10	10	7
1H0D:C	1h0d_C_B/	123	17	4	2	14	12	5
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	6	0	4	3	15
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	16	4	3	11	4	12
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	15	3	0	12	10	5
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	18	4	0	3	0	18
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	18	4	0	4	0	18
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	17	4	0	7	2	15
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	5	1	22	7	7
1PKQ:E	1pkq_E_B/	139	17	4	0	4	0	17
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	3	2	12	6	7
1SY6:A	1sy6_A_HL	204	11	6	2	3	3	8
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	4	4	0	7	2	2
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	11	2	0	4	0	11
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	4	0	15	1	13
1ZA3:R	1za3_R_HL	134	15	4	2	6	3	12
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	4	2	14	8	8
1A14:N	1a14_N_HL	388	17	6	0	3	0	17
1A14:N	1nca_N_HL	388	21	6	0	3	0	21
1RJC:B	1bvk_C_B/	129	17	3	0	8	5	12
1RJC:B	1jhl_A_HL	129	11	3	0	8	4	7
1RJC:B	1ndg_C_B/	129	21	3	1	3	3	18
1RJC:B	1p2c_C_B/	129	18	3	2	16	10	8
1JPS:T	1jps_T_HL	219	0 no epitope predicted					
1AR1:B	1ar1_B_CL	298	16	4	0	38	0	16
1EO8:A	1eo8_A_HL	328	15	4	0	40	0	15
1EO8:A	1ken_A_HL	328	16	4	3	27	8	8
1EO8:A	1qfu_A_HL	328	19	4	0	40	0	19
1EO8:A	2vit_C_BA	328	18	4	0	40	0	18
1EZV:E	1ezv_E_X/	185	17	5	3	10	5	12
1G9M:G	1g9m_G_H/	321	12	4	3	42	9	3
1G9M:G	2b4c_G_HL	321	12	4	3	42	9	3
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	3	0	10	0	13
1NFD:D	1nfd_D_HC	239	13	6	3	12	8	5
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	18	5	3	8	7	11
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	11	0	42	14	5
1V7M:V	1v7m_V_H/	163	17	5	3	4	4	13
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	17	3	2	10	7	10
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	10	3	0	3	3	7
1Z3G:B	1z3g_B_IM	186	17	4	1	21	11	6
2AEP:A	2aep_A_HL	395	21	6	3	13	7	14

discontinuous epitope		Average on all predict					
FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	TI1-spec (FP/(FP+TN))	AUC (sens+spec)/2	Fisher	Significant:TP_av
11	126	0,29	0,27	0,08	0,6	3,51E-02	Yes
0	142	0,59	1	0	0,79	9,12E-12	Yes
2	104	0,71	0,86	0,02	0,84	3,59E-11	Yes
1	127	0,17	0,75	0,01	0,58	5,92E-03	Yes
7	133	0,25	0,36	0,05	0,6	1,60E-02	Yes
2	91	0,67	0,83	0,02	0,82	4,66E-09	Yes
3	139	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
4	127	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
5	101	0,12	0,29	0,05	0,54	2,49E-01	-
15	194	0,5	0,32	0,07	0,71	7,60E-05	Yes
4	118	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
6	76	0,46	0,5	0,07	0,69	1,19E-03	Yes
0	193	0,27	1	0	0,64	1,18E-04	Yes
5	93	0,5	0,29	0,05	0,72	2,29E-02	Yes
4	90	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-
14	112	0,07	0,07	0,11	0,48	1,00E+00	-
3	116	0,2	0,5	0,03	0,59	1,87E-02	Yes
6	86	0,5	0,57	0,07	0,72	6,99E-05	Yes
3	368	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-
3	364	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-
3	109	0,29	0,62	0,03	0,63	9,77E-04	Yes
4	114	0,36	0,5	0,03	0,66	1,74E-03	Yes
0	108	0,14	1	0	0,57	3,81E-03	Yes
6	105	0,56	0,62	0,05	0,75	9,69E-07	Yes
38	244	0	0	0,13	0,43	1,00E+00	-
40	273	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	-
19	293	0,5	0,3	0,06	0,72	6,05E-06	Yes
40	269	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	-
40	270	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	-
5	163	0,29	0,5	0,03	0,63	6,84E-04	Yes
33	276	0,75	0,21	0,11	0,82	8,16E-07	Yes
33	276	0,75	0,21	0,11	0,82	8,16E-07	Yes
10	101	0	0	0,09	0,45	1,00E+00	-
4	222	0,62	0,67	0,02	0,8	2,51E-09	Yes
1	83	0,39	0,88	0,01	0,69	1,24E-05	Yes
28	405	0,74	0,33	0,06	0,84	3,25E-12	Yes
0	146	0,24	1	0	0,62	8,40E-05	Yes
3	85	0,41	0,7	0,03	0,69	7,73E-05	Yes
0	69	0,3	1	0	0,65	1,52E-03	Yes
10	159	0,65	0,52	0,06	0,79	1,84E-08	Yes
6	368	0,33	0,54	0,02	0,66	5,83E-07	Yes

ed epitopes.

FN_av	FP_av	TN_av	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1-spec (1-TN)	AUC (FAUC)	sens Fisher	Significant?
13	6	130	0,07	0,14	0,04	0,51	5,04E-01	-
15	6	135	0,12	0,25	0,04	0,54	2,07E-01	-
14	4	101	0,18	0,43	0,04	0,57	5,57E-02	-
17	5	122	0,06	0,17	0,04	0,51	5,55E-01	-
15	6	133	0,06	0,14	0,04	0,51	5,41E-01	-
11	7	85	0,21	0,3	0,08	0,57	1,26E-01	-
17	5	137	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-
17	6	124	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-
16	6	100	0,06	0,14	0,06	0,5	9,99E-01	-
12	10	198	0,08	0,09	0,05	0,51	4,95E-01	-
16	3	118	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
9	5	77	0,25	0,38	0,06	0,59	6,24E-02	-
9	6	186	0,1	0,14	0,03	0,53	3,03E-01	-
3	6	92	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
11	4	89	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-
13	9	117	0	0	0,07	0,46	1,00E+00	-
13	5	113	0,07	0,17	0,04	0,51	4,97E-01	-
14	5	86	0,12	0,29	0,05	0,54	2,81E-01	-
17	17	353	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-
21	17	349	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-
15	7	105	0,12	0,22	0,06	0,53	3,37E-01	-
9	7	110	0,1	0,12	0,06	0,52	4,91E-01	-
19	7	100	0,05	0,12	0,07	0,49	1,00E+00	-
14	5	105	0,18	0,38	0,05	0,57	7,34E-02	-
16	13	268	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-
15	24	289	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	-
13	21	290	0,13	0,09	0,07	0,53	2,86E-01	-
18	23	285	0	0	0,07	0,46	1,00E+00	-
17	23	286	0	0	0,07	0,46	1,00E+00	-
16	8	159	0,06	0,11	0,05	0,51	5,91E-01	-
9	22	287	0,18	0,08	0,07	0,56	1,96E-01	-
9	22	287	0,18	0,08	0,07	0,56	1,96E-01	-
13	7	104	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
11	11	215	0,08	0,08	0,05	0,52	4,71E-01	-
16	4	79	0,06	0,2	0,05	0,51	1,00E+00	-
17	13	419	0,06	0,07	0,03	0,51	4,40E-01	-
16	8	138	0	0	0,05	0,47	1,00E+00	-
13	3	84	0,19	0,5	0,03	0,58	4,66E-02	Yes
8	2	67	0,11	0,33	0,03	0,54	3,11E-01	-
14	12	156	0,12	0,14	0,07	0,53	3,49E-01	-
19	21	352	0,05	0,05	0,06	0,5	1,00E+00	-

Fist best score first patch ϵ TP	FN	FP	TN		sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+FP))	1-spec (FP/(FP+TN))	AUC (sens+spec)/2
15	4	10	11	126	0,29	0,27	0,08	0,6
3	0	17	3	139	0	0	0,02	0,49
7	0	17	7	99	0	0	0,07	0,47
4	3	15	1	127	0,17	0,75	0,01	0,58
7	0	16	7	133	0	0	0,05	0,47
12	10	5	2	91	0,67	0,83	0,02	0,82
3	0	18	3	139	0	0	0,02	0,49
4	0	18	4	127	0	0	0,03	0,48
7	2	15	5	101	0,12	0,29	0,05	0,54
15	0	14	15	194	0	0	0,07	0,46
4	0	17	4	118	0	0	0,03	0,48
4	0	13	4	78	0	0	0,05	0,48
10	0	11	10	183	0	0	0,05	0,47
7	2	2	5	93	0,5	0,29	0,05	0,72
4	0	11	4	90	0	0	0,04	0,48
15	1	13	14	112	0,07	0,07	0,11	0,48
3	0	15	3	116	0	0	0,03	0,49
5	0	16	5	87	0	0	0,05	0,47
3	0	17	3	368	0	0	0,01	0,5
3	0	21	3	364	0	0	0,01	0,5
8	5	12	3	109	0,29	0,62	0,03	0,63
8	4	7	4	114	0,36	0,5	0,03	0,66
8	0	21	8	100	0	0	0,07	0,46
8	0	18	8	103	0	0	0,07	0,46
38	0	16	38	244	0	0	0,13	0,43
40	0	15	40	273	0	0	0,13	0,44
40	0	16	40	272	0	0	0,13	0,44
40	0	19	40	269	0	0	0,13	0,44
40	0	18	40	270	0	0	0,13	0,44
5	0	17	5	163	0	0	0,03	0,49
5	0	12	5	304	0	0	0,02	0,49
5	0	12	5	304	0	0	0,02	0,49
10	0	13	10	101	0	0	0,09	0,45
4	0	13	4	222	0	0	0,02	0,49
4	0	18	4	80	0	0	0,05	0,48
42	14	5	28	405	0,74	0,33	0,06	0,84
5	0	17	5	141	0	0	0,03	0,48
7	0	17	7	81	0	0	0,08	0,46
3	3	7	0	69	0,3	1	0	0,65
5	0	17	5	164	0	0	0,03	0,49
10	0	21	10	364	0	0	0,03	0,49

Second best score								
Fisher	Significant	second pat TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+FN))	TI
3,51E-02	Yes	8	0	14	8	129	0	0
1,00E+00	-	17	0	17	17	125	0	0
1,00E+00	-	3	0	17	2	104	0	0
5,92E-03	Yes	16	2	16	14	114	0,11	0,12
1,00E+00	-	8	0	16	8	132	0	0
4,66E-09	Yes	12	0	15	12	81	0	0
1,00E+00	-	8	1	17	7	135	0,06	0,12
1,00E+00	-	4	0	18	4	127	0	0
2,49E-01	-	9	2	15	7	99	0,12	0,22
1,00E+00	-	22	7	7	15	194	0,5	0,32
1,00E+00	-	3	0	17	3	119	0	0
1,00E+00	-	9	4	9	5	77	0,31	0,44
1,00E+00	-	7	4	7	3	190	0,36	0,57
2,29E-02	Yes	9	0	4	9	89	0	0
1,00E+00	-	5	0	11	5	89	0	0
1,00E+00	-	13	0	14	13	113	0	0
1,00E+00	-	4	2	13	2	117	0,13	0,5
1,00E+00	-	5	0	16	5	87	0	0
1,00E+00	-	37	0	17	37	334	0	0
1,00E+00	-	37	0	21	37	330	0	0
9,77E-04	Yes	3	1	16	2	110	0,06	0,33
1,74E-03	Yes	3	0	11	3	115	0	0
1,00E+00	-	3	3	18	0	108	0,14	1
1,00E+00	-	3	0	18	3	108	0	0
1,00E+00	-	9	0	16	9	273	0	0
1,00E+00	-	22	0	15	22	291	0	0
1,00E+00	-	22	0	16	22	290	0	0
1,00E+00	-	22	0	19	22	287	0	0
1,00E+00	-	22	0	18	22	288	0	0
1,00E+00	-	21	0	17	21	147	0	0
1,00E+00	-	33	0	12	33	276	0	0
1,00E+00	-	33	0	12	33	276	0	0
1,00E+00	-	3	0	13	3	108	0	0
1,00E+00	-	29	0	13	29	197	0	0
1,00E+00	-	3	0	18	3	81	0	0
3,25E-12	Yes	5	0	19	5	428	0	0
1,00E+00	-	7	0	17	7	139	0	0
1,00E+00	-	4	3	14	1	87	0,18	0,75
1,52E-03	Yes	4	0	10	4	65	0	0
1,00E+00	-	21	11	6	10	159	0,65	0,52
1,00E+00	-	37	2	19	35	339	0,1	0,05

1-spec (FPAUC (sensFisher Significant?

0,06	0,47	1,00E+00	-
0,12	0,44	1,00E+00	-
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,11	0,5	8,93E-01	-
0,06	0,47	1,00E+00	-
0,13	0,44	1,00E+00	-
0,05	0,5	1,00E+00	-
0,03	0,48	1,00E+00	-
0,07	0,53	3,61E-01	-
0,07	0,71	7,60E-05	Yes
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,06	0,62	1,87E-02	Yes
0,02	0,67	1,51E-04	Yes
0,09	0,45	1,00E+00	-
0,05	0,47	1,00E+00	-
0,1	0,45	1,00E+00	-
0,02	0,56	6,17E-02	-
0,05	0,47	1,00E+00	-
0,1	0,45	1,00E+00	-
0,1	0,45	1,00E+00	-
0,02	0,52	3,48E-01	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0	0,57	3,81E-03	Yes
0,03	0,49	1,00E+00	-
0,03	0,48	1,00E+00	-
0,07	0,46	1,00E+00	-
0,07	0,46	1,00E+00	-
0,07	0,46	1,00E+00	-
0,07	0,46	1,00E+00	-
0,12	0,44	1,00E+00	-
0,11	0,45	1,00E+00	-
0,11	0,45	1,00E+00	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0,13	0,44	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-
0,01	0,49	1,00E+00	-
0,05	0,48	1,00E+00	-
0,01	0,58	1,30E-02	Yes
0,06	0,47	1,00E+00	-
0,06	0,79	1,84E-08	Yes
0,09	0,5	8,80E-01	-

Ellipro default score 0.7, radius 4. Epitope definition #2. Discontinuous Epitopes: Best by significance

antigen	epitope	antigen size	epitope size	number of	rank best	ebest	patch	TP	FN
1AFV:A	1afv_A_HL	151	14	2	0	3		0	14
1FSK:A	1fsk_A_CB	159	17	1	0	3		0	17
1H0D:C	1h0d_C_B/	123	17	1	0	3		3	14
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	3	1	3		2	16
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	0 no discontinuous epitope predicted						
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	0 no discontinuous epitope predicted						
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	0 no discontinuous epitope predicted						
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	0 no discontinuous epitope predicted						
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	0 no discontinuous epitope predicted						
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	1	0	3		3	11
1PKQ:E	1pkq_E_B/	139	17	4	0	3		0	17
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	2	0	4		0	13
1SY6:A	1sy6_A_HL	204	11	1	0	3		0	11
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	0 no discontinuous epitope predicted						
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	0 no discontinuous epitope predicted						
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	2	0	4		1	13
1ZA3:R	1za3_R_HL	134	0 no discontinuous epitope predicted						
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	2	0	3		0	16
1A14:N	1a14_N_HL	388	17	2	0	3		0	17
1A14:N	1nca_N_HL	388	21	2	0	3		0	21
1RJC:B	1bvk_C_B/	129	17	1	0	3		0	17
1RJC:B	1jhl_A_HL	129	11	1	0	3		0	11
1RJC:B	1ndg_C_B/	129	21	1	0	3		2	19
1RJC:B	1p2c_C_B/	129	18	1	0	3		0	18
1JPS:T	1jps_T_HL	219	0 no epitope predicted						
1AR1:B	1ar1_B_CL	298	16	1	0	3		0	16
1EO8:A	1eo8_A_HL	328	15	4	0	3		0	15
1EO8:A	1ken_A_HL	328	16	4	2	3		3	13
1EO8:A	1qfu_A_HL	328	19	4	0	3		0	19
1EO8:A	2vit_C_BA	328	18	4	0	3		0	18
1EZV:E	1ezv_E_X/	185	0 no discontinuous epitope predicted						
1G9M:G	1g9m_G_H	321	12	1	0	3		0	12
1G9M:G	2b4c_G_HL	321	12	1	0	3		0	12
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	1	0	3		0	13
1NFD:D	1nfd_D_HC	239	13	2	1	3		3	10
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	0 no discontinuous epitope predicted						
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	2	0	4		0	19
1V7M:V	1v7m_V_H	163	17	1	0	3		0	17
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	0 no discontinuous epitope predicted						
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	0 no discontinuous epitope predicted						
1Z3G:B	1z3g_B_IM	186	0 no discontinuous epitope predicted						
2AEP:A	2aep_A_HL	395	21	1	0	3		0	21

discontinuous epitope		Average on all predict							
FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	TI1-spec (FP/(FP+TN))	AUC	sens	Fisher	Significant	TP_av
3	134	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-		0
3	139	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-		0
0	106	0,18	1	0	0,59	2,25E-03	Yes		3
1	127	0,11	0,67	0,01	0,55	4,02E-02	Yes		0
0	209	0,21	1	0	0,61	2,00E-04	Yes		3
3	119	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-		0
4	78	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-		0
3	190	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-		0
3	123	0,07	0,25	0,02	0,52	3,47E-01	-		0
3	89	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-		0
3	368	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-		0
3	364	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-		0
3	109	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-		0
3	115	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-		0
1	107	0,1	0,67	0,01	0,54	6,87E-02	-		2
3	108	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-		0
3	279	0	0	0,01	0,49	1,00E+00	-		0
3	310	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-		0
0	312	0,19	1	0	0,59	9,61E-05	Yes		1
3	306	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-		0
3	307	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-		0
3	306	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-		0
3	306	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-		0
3	108	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-		0
0	226	0,23	1	0	0,62	1,27E-04	Yes		1
4	429	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-		0
3	143	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-		0
3	371	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-		0

ed epitopes.

FN_av	FP_av	TN_av	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1-spec (1-TN)	AUC (FAUC)	sens Fisher	Significant?
14	3	134	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
17	3	139	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
14	0	106	0,18	1	0	0,59	2,25E-03	Yes
17	2	125	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
11	0	209	0,21	1	0	0,61	2,00E-04	Yes
16	4	118	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
13	3	78	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-
11	3	190	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
13	3	123	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
16	3	89	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
17	3	368	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-
21	3	364	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-
17	3	109	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
11	3	115	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
19	1	107	0,1	0,67	0,01	0,54	6,87E-02	-
18	3	108	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
16	3	279	0	0	0,01	0,49	1,00E+00	-
15	3	310	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-
15	2	310	0,06	0,33	0,01	0,53	1,40E-01	-
19	3	306	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-
18	3	307	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-
12	3	306	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-
12	3	306	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-
13	3	108	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
11	1	224	0,08	0,5	0	0,54	9,89E-02	-
19	3	429	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-
17	3	143	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
21	3	371	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-

Fist best score first patch ϵ TP	FN	FP	TN		sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+FN))	1-spec (FP/(FP+TN))	FPAUC (sens+spec)/2	(sens+spec)/2
3	0	14	3	134	0	0	0,02	0,49	
3	0	17	3	139	0	0	0,02	0,49	
3	3	14	0	106	0,18	1	0	0,59	
3	0	18	3	125	0	0	0,02	0,49	
3	3	11	0	209	0,21	1	0	0,61	
3	0	17	3	119	0	0	0,02	0,49	
4	0	13	4	78	0	0	0,05	0,48	
3	0	11	3	190	0	0	0,02	0,49	
4	1	13	3	123	0,07	0,25	0,02	0,52	
3	0	16	3	89	0	0	0,03	0,48	
3	0	17	3	368	0	0	0,01	0,5	
3	0	21	3	364	0	0	0,01	0,5	
3	0	17	3	109	0	0	0,03	0,49	
3	0	11	3	115	0	0	0,03	0,49	
3	2	19	1	107	0,1	0,67	0,01	0,54	
3	0	18	3	108	0	0	0,03	0,49	
3	0	16	3	279	0	0	0,01	0,49	
3	0	15	3	310	0	0	0,01	0,5	
3	0	16	3	309	0	0	0,01	0,5	
3	0	19	3	306	0	0	0,01	0,5	
3	0	18	3	307	0	0	0,01	0,5	
3	0	12	3	306	0	0	0,01	0,5	
3	0	12	3	306	0	0	0,01	0,5	
3	0	13	3	108	0	0	0,03	0,49	
3	0	13	3	223	0	0	0,01	0,49	
4	0	19	4	429	0	0	0,01	0,5	
3	0	17	3	143	0	0	0,02	0,49	
3	0	21	3	371	0	0	0,01	0,5	

Fisher	Significant?	Second best score second pat TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))
1,00E+00 -	-	3	0	14	3	134	0
1,00E+00 -	-						0
2,25E-03 Yes							
1,00E+00 -	-	3	2	16	1	127	0,11
							0,67
2,00E-04 Yes							
1,00E+00 -	-	3	0	17	3	119	0
1,00E+00 -	-	3	0	13	3	79	0
1,00E+00 -	-						
3,47E-01 -	-	3	0	14	3	123	0
1,00E+00 -	-	3	0	16	3	89	0
1,00E+00 -	-	3	0	17	3	368	0
1,00E+00 -	-	3	0	21	3	364	0
1,00E+00 -	-						
1,00E+00 -	-						
6,87E-02 -	-						
1,00E+00 -	-						
1,00E+00 -	-						
1,00E+00 -	-	3	0	15	3	310	0
1,00E+00 -	-	3	1	15	2	310	0,06
1,00E+00 -	-	3	0	19	3	306	0
1,00E+00 -	-	3	0	18	3	307	0
1,00E+00 -	-						
1,00E+00 -	-						
1,00E+00 -	-						
1,00E+00 -	-	3	3	10	0	226	0,23
							1
1,00E+00 -	-	3	0	19	3	430	0
1,00E+00 -	-						
1,00E+00 -	-						

1-spec (FP.AUC	(sens	Fisher	Significant?
0,02	0,49	1,00E+00	-

0,01	0,55	4,02E-02	Yes
------	------	----------	-----

0,02	0,49	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-

0,02	0,49	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0,03	0,48	1,00E+00	-
0,01	0,5	1,00E+00	-
0,01	0,5	1,00E+00	-

0,01	0,5	1,00E+00	-
0,01	0,53	1,40E-01	-
0,01	0,5	1,00E+00	-
0,01	0,5	1,00E+00	-

0	0,62	1,27E-04	Yes
---	------	----------	-----

0,01	0,5	1,00E+00	-
------	-----	----------	---

Ellipro default score 0.7, radius 5. Epitope definition #2. Discontinuous Epitopes: Best by significance

antigen	epitope	antigen size	epitope size	number of	rank best	ebest	patch	TP	FN
1AFV:A	1afv_A_HL	151	14	6	4	4	3	11	
1FSK:A	1fsk_A_CB	159	17	8	4	3	3	14	
1H0D:C	1h0d_C_B/	123	17	3	1	8	8	9	
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	5	0	3	0	18	
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	16	4	1	5	4	12	
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	15	5	0	4	4	11	
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	18	1	0	3	0	18	
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	18	3	0	4	0	18	
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	17	2	1	6	4	13	
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	6	1	4	3	11	
1PKQ:E	1pkq_E_B/	139	17	4	0	3	0	17	
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	4	3	8	6	7	
1SY6:A	1sy6_A_HL	204	11	7	2	4	2	9	
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	4	3	0	3	2	2	
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	11	1	0	3	0	11	
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	3	0	3	0	14	
1ZA3:R	1za3_R_HL	134	15	2	0	7	0	15	
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	5	3	13	7	9	
1A14:N	1a14_N_HL	388	17	15	0	5	0	17	
1A14:N	1nca_N_HL	388	21	15	0	5	0	21	
1RJC:B	1bvk_C_B/	129	17	3	0	4	1	16	
1RJC:B	1jhl_A_HL	129	11	3	0	4	0	11	
1RJC:B	1ndg_C_B/	129	21	3	0	4	0	21	
1RJC:B	1p2c_C_B/	129	18	3	1	3	3	15	
1JPS:T	1jps_T_HL	219	0 no epitope predicted						
1AR1:B	1ar1_B_CL	298	16	7	0	8	0	16	
1EO8:A	1eo8_A_HL	328	15	11	0	4	0	15	
1EO8:A	1ken_A_HL	328	16	11	6	15	8	8	
1EO8:A	1qfu_A_HL	328	19	11	0	4	0	19	
1EO8:A	2vit_C_BA	328	18	11	0	4	0	18	
1EZV:E	1ezv_E_X/	185	17	5	0	5	0	17	
1G9M:G	1g9m_G_H/	321	12	10	8	8	4	8	
1G9M:G	2b4c_G_HL	321	12	10	8	8	3	9	
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	4	0	10	0	13	
1NFD:D	1nfd_D_HC	239	13	8	2	3	3	10	
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	18	2	0	3	3	15	
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	21	2	5	5	14	
1V7M:V	1v7m_V_H/	163	17	5	0	3	3	14	
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	17	3	1	4	4	13	
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	0 no discontinuous epitope predicted						
1Z3G:B	1z3g_B_IM	186	17	6	0	7	6	11	
2AEP:A	2aep_A_HL	395	21	15	13	6	4	17	

discontinuous epitope		Average on all predict					
FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	TI1-spec (FP/AUC)	(sens Fisher)	Significant?	TP_av
1	136	0,21	0,75	0,01	0,6	2,44E-03 Yes	0
0	142	0,18	1	0	0,59	1,03E-03 Yes	0
0	106	0,47	1	0	0,74	2,36E-08 Yes	3
3	125	0	0	0,02	0,49	1,00E+00 -	0
1	139	0,25	0,8	0,01	0,62	3,59E-04 Yes	1
0	93	0,27	1	0	0,63	2,55E-04 Yes	1
3	139	0	0	0,02	0,49	1,00E+00 -	0
4	127	0	0	0,03	0,48	1,00E+00 -	0
2	104	0,24	0,67	0,02	0,61	3,27E-03 Yes	2
1	208	0,21	0,75	0	0,6	7,69E-04 Yes	1
3	119	0	0	0,02	0,49	1,00E+00 -	0
2	80	0,46	0,75	0,02	0,72	4,81E-05 Yes	2
2	191	0,18	0,5	0,01	0,59	1,50E-02 Yes	0
1	97	0,5	0,67	0,01	0,74	3,45E-03 Yes	1
3	91	0	0	0,03	0,48	1,00E+00 -	0
3	123	0	0	0,02	0,49	1,00E+00 -	0
7	112	0	0	0,06	0,47	1,00E+00 -	1
6	86	0,44	0,54	0,07	0,69	4,29E-04 Yes	1
5	366	0	0	0,01	0,49	1,00E+00 -	0
5	362	0	0	0,01	0,49	1,00E+00 -	0
3	109	0,06	0,25	0,03	0,52	4,36E-01 -	0
4	114	0	0	0,03	0,48	1,00E+00 -	0
4	104	0	0	0,04	0,48	1,00E+00 -	0
0	111	0,17	1	0	0,58	2,33E-03 Yes	1
8	274	0	0	0,03	0,49	1,00E+00 -	0
4	309	0	0	0,01	0,49	1,00E+00 -	0
7	305	0,5	0,53	0,02	0,74	2,32E-08 Yes	0
4	305	0	0	0,01	0,49	1,00E+00 -	0
4	306	0	0	0,01	0,49	1,00E+00 -	0
5	163	0	0	0,03	0,49	1,00E+00 -	0
4	305	0,33	0,5	0,01	0,66	7,35E-05 Yes	0
5	304	0,25	0,38	0,02	0,62	2,03E-03 Yes	0
10	101	0	0	0,09	0,45	1,00E+00 -	0
0	226	0,23	1	0	0,62	1,27E-04 Yes	0
0	84	0,17	1	0	0,58	4,76E-03 Yes	1
0	433	0,26	1	0	0,63	7,56E-08 Yes	0
0	146	0,18	1	0	0,59	9,60E-04 Yes	0
0	88	0,24	1	0	0,62	4,98E-04 Yes	2
1	168	0,35	0,86	0,01	0,67	1,55E-06 Yes	1
2	372	0,19	0,67	0,01	0,59	8,37E-05 Yes	0

ed epitopes.

FN_av	FP_av	TN_av	sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+FN))	1-spec (1-TN)	AUC (FAUC)	sens Fisher	Significant?
13	3	133	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
16	3	138	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
13	2	103	0,19	0,6	0,02	0,58	1,64E-02	Yes
17	4	123	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
15	2	137	0,06	0,33	0,01	0,52	2,80E-01	-
13	2	90	0,07	0,33	0,02	0,52	3,49E-01	-
18	3	139	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
18	3	127	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
14	2	103	0,12	0,5	0,02	0,55	8,43E-02	-
13	4	204	0,07	0,2	0,02	0,53	2,80E-01	-
16	4	118	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
11	3	78	0,15	0,4	0,04	0,56	1,39E-01	-
10	4	188	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
3	2	95	0,25	0,33	0,02	0,61	1,15E-01	-
11	3	91	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
13	6	120	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-
14	5	114	0,07	0,17	0,04	0,51	5,17E-01	-
14	3	88	0,07	0,25	0,03	0,52	4,62E-01	-
16	5	365	0	0	0,01	0,49	1,00E+00	-
21	5	361	0	0	0,01	0,49	1,00E+00	-
16	4	107	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-
11	4	113	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
20	4	104	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-
16	3	107	0,06	0,25	0,03	0,52	4,41E-01	-
16	6	275	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
15	7	305	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
15	6	305	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
18	7	301	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
17	6	303	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
16	4	163	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
11	6	302	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
11	6	302	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
13	5	106	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-
12	5	220	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
16	1	82	0,06	0,5	0,01	0,52	3,13E-01	-
18	4	428	0	0	0,01	0,5	1,00E+00	-
16	4	141	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
14	1	87	0,12	0,67	0,01	0,56	6,11E-02	-
15	4	164	0,06	0,2	0,02	0,52	3,69E-01	-
20	5	368	0	0	0,01	0,49	1,00E+00	-

Fist best score first patch ϵ TP	FN	FP	TN		sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+TN))	1-spec (FP/(FP+TN))	AUC (sens+spec)/2	(sens+spec)/2
8	1	13	7	130	0,07	0,12	0,05	0,51	
3	0	17	3	139	0	0	0,02	0,49	
7	0	17	7	99	0	0	0,07	0,47	
3	0	18	3	125	0	0	0,02	0,49	
4	0	16	4	136	0	0	0,03	0,49	
4	4	11	0	93	0,27	1	0	0,63	
3	0	18	3	139	0	0	0,02	0,49	
4	0	18	4	127	0	0	0,03	0,48	
4	1	16	3	103	0,06	0,25	0,03	0,52	
5	0	14	5	204	0	0	0,02	0,49	
3	0	17	3	119	0	0	0,02	0,49	
4	0	13	4	78	0	0	0,05	0,48	
3	0	11	3	190	0	0	0,02	0,49	
3	2	2	1	97	0,5	0,67	0,01	0,74	
3	0	11	3	91	0	0	0,03	0,48	
3	0	14	3	123	0	0	0,02	0,49	
7	0	15	7	112	0	0	0,06	0,47	
3	0	16	3	89	0	0	0,03	0,48	
5	0	17	5	366	0	0	0,01	0,49	
5	0	21	5	362	0	0	0,01	0,49	
4	1	16	3	109	0,06	0,25	0,03	0,52	
4	0	11	4	114	0	0	0,03	0,48	
4	0	21	4	104	0	0	0,04	0,48	
4	0	18	4	107	0	0	0,04	0,48	
8	0	16	8	274	0	0	0,03	0,49	
4	0	15	4	309	0	0	0,01	0,49	
4	0	16	4	308	0	0	0,01	0,49	
4	0	19	4	305	0	0	0,01	0,49	
4	0	18	4	306	0	0	0,01	0,49	
5	0	17	5	163	0	0	0,03	0,49	
7	0	12	7	302	0	0	0,02	0,49	
7	0	12	7	302	0	0	0,02	0,49	
10	0	13	10	101	0	0	0,09	0,45	
3	0	13	3	223	0	0	0,01	0,49	
3	3	15	0	84	0,17	1	0	0,58	
3	0	19	3	430	0	0	0,01	0,5	
3	3	14	0	146	0,18	1	0	0,59	
3	0	17	3	85	0	0	0,03	0,48	
7	6	11	1	168	0,35	0,86	0,01	0,67	
3	0	21	3	371	0	0	0,01	0,5	

Second best score								
Fisher	Significant	second pat TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+TN))	
5,50E-01	-	5	0	14	5	132	0	
1,00E+00	-	6	0	17	6	136	0	
1,00E+00	-	8	8	9	0	106	0,47	
1,00E+00	-	4	0	18	4	124	0	
1,00E+00	-	5	4	12	1	139	0,25	
2,55E-04	Yes	3	3	12	0	93	0,2	
1,00E+00	-						1	
1,00E+00	-	3	0	18	3	128	0	
4,53E-01	-	6	4	13	2	104	0,24	
1,00E+00	-	4	3	11	1	208	0,21	
1,00E+00	-	3	0	17	3	119	0	
1,00E+00	-	7	2	11	5	77	0,15	
1,00E+00	-	4	0	11	4	189	0	
3,45E-03	Yes	3	1	3	2	96	0,25	
1,00E+00	-						0,33	
1,00E+00	-	11	1	13	10	116	0,07	
1,00E+00	-	5	2	13	3	116	0,13	
1,00E+00	-	3	2	14	1	91	0,12	
1,00E+00	-	3	0	17	3	368	0	
1,00E+00	-	3	0	21	3	364	0	
4,36E-01	-	3	0	17	3	109	0	
1,00E+00	-	3	0	11	3	115	0	
1,00E+00	-	3	0	21	3	105	0	
1,00E+00	-	3	3	15	0	111	0,17	
1,00E+00	-	4	0	16	4	278	0	
1,00E+00	-	5	0	15	5	308	0	
1,00E+00	-	5	0	16	5	307	0	
1,00E+00	-	5	0	19	5	304	0	
1,00E+00	-	5	0	18	5	305	0	
1,00E+00	-	3	0	17	3	165	0	
1,00E+00	-	5	0	12	5	304	0	
1,00E+00	-	5	0	12	5	304	0	
1,00E+00	-	3	0	13	3	108	0	
1,00E+00	-	7	0	13	7	219	0	
4,76E-03	Yes	3	0	18	3	81	0	
1,00E+00	-	3	1	18	2	431	0,05	
9,60E-04	Yes	4	0	17	4	142	0	
1,00E+00	-	4	4	13	0	88	0,24	
1,00E+00	-						1	
1,55E-06	Yes	3	0	17	3	166	0	
1,00E+00	-	6	0	21	6	368	0	

1-spec (FPAUC (sensFisher Significant?

0,04	0,48	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-
0	0,74	2,36E-08	Yes
0,03	0,48	1,00E+00	-
0,01	0,62	3,59E-04	Yes
0	0,6	2,23E-03	Yes

0,02	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,61	3,27E-03	Yes
0	0,6	7,69E-04	Yes
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,06	0,55	2,44E-01	-
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,61	1,14E-01	-

0,08	0,5	1,00E+00	-
0,03	0,55	9,62E-02	-
0,01	0,56	5,68E-02	-
0,01	0,5	1,00E+00	-
0,01	0,5	1,00E+00	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0	0,58	2,33E-03	Yes

0,01	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0,03	0,48	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-
0	0,52	1,21E-01	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0	0,62	4,98E-04	Yes

0,02	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,49	1,00E+00	-

Ellipro default score 0.7, radius 7. Epitope definition #2. Discontinuous Epitopes: Best by significance

antigen	epitope	antigen size	epitope size	number of	rank best	ebest	patch	TP	FN
1AFV:A	1afv_A_HL	151	14	4	0	8	0	14	
1FSK:A	1fsk_A_CB	159	17	4	2	10	10	7	
1H0D:C	1h0d_C_B/	123	17	3	2	15	13	4	
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	5	2	5	4	14	
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	16	3	0	11	0	16	
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	15	2	1	24	11	4	
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	18	5	3	12	6	12	
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	18	3	0	5	0	18	
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	17	4	3	18	8	9	
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	5	1	25	8	6	
1PKQ:E	1pkq_E_B/	139	17	3	2	27	9	8	
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	3	2	17	6	7	
1SY6:A	1sy6_A_HL	204	11	3	1	14	7	4	
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	4	3	0	8	2	2	
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	11	2	0	5	0	11	
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	3	0	17	2	12	
1ZA3:R	1za3_R_HL	134	15	3	2	13	7	8	
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	3	2	16	9	7	
1A14:N	1a14_N_HL	388	17	3	0	34	0	17	
1A14:N	1nca_N_HL	388	21	3	0	34	0	21	
1RJC:B	1bvk_C_B/	129	17	3	0	13	6	11	
1RJC:B	1jhl_A_HL	129	11	3	0	13	6	5	
1RJC:B	1ndg_C_B/	129	21	3	1	7	5	16	
1RJC:B	1p2c_C_B/	129	18	3	2	17	10	8	
1JPS:T	1jps_T_HL	219	0 no epitope predicted						
1AR1:B	1ar1_B_CL	298	16	3	1	3	3	13	
1EO8:A	1eo8_A_HL	328	15	3	0	41	0	15	
1EO8:A	1ken_A_HL	328	16	3	2	58	10	6	
1EO8:A	1qfu_A_HL	328	19	3	0	41	0	19	
1EO8:A	2vit_C_BA	328	18	3	0	41	0	18	
1EZV:E	1ezv_E_X/	185	17	4	3	12	5	12	
1G9M:G	1g9m_G_H/	321	12	4	3	47	9	3	
1G9M:G	2b4c_G_HL	321	12	4	3	47	9	3	
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	3	0	11	0	13	
1NFD:D	1nfd_D_HC	239	13	4	3	21	10	3	
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	18	2	0	3	3	15	
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	5	0	56	17	2	
1V7M:V	1v7m_V_H/	163	17	4	3	5	5	12	
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	17	1	0	7	0	17	
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	10	1	0	8	3	7	
1Z3G:B	1z3g_B_IM	186	17	4	1	21	11	6	
2AEP:A	2aep_A_HL	395	21	2	0	46	2	19	

discontinuous epitope		Average on all predict					
FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	TI1-spec (FP/(FP+TN))	AUC (sens+spec)/2	sens Fisher	Significant:TP_av
8	129	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
0	142	0,59	1	0	0,79	9,12E-12	Yes
2	104	0,76	0,87	0,02	0,87	1,90E-12	Yes
1	127	0,22	0,8	0,01	0,61	7,76E-04	Yes
11	129	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	-
13	80	0,73	0,46	0,14	0,8	5,81E-06	Yes
6	136	0,33	0,5	0,04	0,65	5,32E-04	Yes
5	126	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-
10	96	0,47	0,44	0,09	0,69	4,90E-04	Yes
17	192	0,57	0,32	0,08	0,75	1,56E-05	Yes
17	105	0,53	0,35	0,14	0,7	6,67E-04	Yes
11	71	0,46	0,35	0,13	0,66	1,10E-02	Yes
7	186	0,64	0,5	0,04	0,8	3,79E-07	Yes
6	92	0,5	0,25	0,06	0,72	3,01E-02	Yes
5	89	0	0	0,05	0,47	1,00E+00	-
15	111	0,14	0,12	0,12	0,51	5,31E-01	-
6	113	0,47	0,54	0,05	0,71	5,95E-05	Yes
7	85	0,56	0,56	0,08	0,74	2,09E-05	Yes
34	337	0	0	0,09	0,45	1,00E+00	-
34	333	0	0	0,09	0,45	1,00E+00	-
7	105	0,35	0,46	0,06	0,65	2,12E-03	Yes
7	111	0,55	0,46	0,06	0,74	1,08E-04	Yes
2	106	0,24	0,71	0,02	0,61	1,24E-03	Yes
7	104	0,56	0,59	0,06	0,75	2,20E-06	Yes
0	282	0,19	1	0	0,59	1,28E-04	Yes
41	272	0	0	0,13	0,43	1,00E+00	-
48	264	0,62	0,17	0,15	0,74	4,97E-05	Yes
41	268	0	0	0,13	0,43	1,00E+00	-
41	269	0	0	0,13	0,43	1,00E+00	-
7	161	0,29	0,42	0,04	0,63	1,91E-03	Yes
38	271	0,75	0,19	0,12	0,81	2,37E-06	Yes
38	271	0,75	0,19	0,12	0,81	2,37E-06	Yes
11	100	0	0	0,1	0,45	1,00E+00	-
11	215	0,77	0,48	0,05	0,86	6,37E-10	Yes
0	84	0,17	1	0	0,58	4,76E-03	Yes
39	394	0,89	0,3	0,09	0,9	4,93E-15	Yes
0	146	0,29	1	0	0,65	6,87E-06	Yes
7	81	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	-
5	64	0,3	0,38	0,07	0,61	5,92E-02	-
10	159	0,65	0,52	0,06	0,79	1,84E-08	Yes
44	330	0,1	0,04	0,12	0,49	1,00E+00	-

ed epitopes.

FN_av	FP_av	TN_av	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1- spec (1-TN)	AUC (FAUC)	sens Fisher	Significant?
13	10	126	0,07	0,09	0,07	0,5	1,00E+00	-
14	9	132	0,12	0,18	0,06	0,53	3,11E-01	-
12	4	101	0,25	0,5	0,04	0,61	1,06E-02	Yes
16	8	120	0,06	0,11	0,06	0,5	1,00E+00	-
16	9	130	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
9	15	78	0,36	0,25	0,16	0,6	8,84E-02	-
16	5	136	0,06	0,17	0,04	0,51	5,01E-01	-
17	9	121	0,06	0,1	0,07	0,49	1,00E+00	-
14	9	96	0,12	0,18	0,09	0,52	4,43E-01	-
12	11	197	0,08	0,08	0,05	0,51	5,26E-01	-
13	12	109	0,19	0,2	0,1	0,54	2,46E-01	-
9	7	75	0,25	0,3	0,09	0,58	1,14E-01	-
8	17	176	0,27	0,15	0,09	0,59	8,00E-02	-
3	10	88	0,25	0,09	0,1	0,57	3,71E-01	-
11	5	89	0	0	0,05	0,47	1,00E+00	-
13	11	114	0	0	0,09	0,46	1,00E+00	-
12	7	111	0,14	0,22	0,06	0,54	2,44E-01	-
13	6	85	0,19	0,33	0,07	0,56	1,31E-01	-
17	31	339	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	-
20	31	336	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	-
13	9	103	0,19	0,25	0,08	0,55	1,74E-01	-
8	10	108	0,2	0,17	0,08	0,56	2,37E-01	-
18	9	98	0,1	0,18	0,08	0,51	5,44E-01	-
14	9	102	0,18	0,25	0,08	0,55	1,99E-01	-
15	24	257	0,06	0,04	0,09	0,49	1,00E+00	-
15	35	277	0	0	0,11	0,44	1,00E+00	-
12	31	280	0,25	0,11	0,1	0,58	7,87E-02	-
18	35	274	0	0	0,11	0,44	1,00E+00	-
16	34	276	0,06	0,03	0,11	0,47	1,00E+00	-
15	10	157	0,06	0,09	0,06	0,5	1,00E+00	-
9	24	284	0,18	0,08	0,08	0,55	2,23E-01	-
9	24	284	0,18	0,08	0,08	0,55	2,23E-01	-
12	7	103	0,08	0,12	0,06	0,51	1,00E+00	-
10	18	207	0,17	0,1	0,08	0,54	2,68E-01	-
16	1	82	0,06	0,5	0,01	0,52	3,13E-01	-
15	34	399	0,17	0,08	0,08	0,54	1,76E-01	-
15	11	135	0,06	0,08	0,08	0,49	1,00E+00	-
17	7	81	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	-
7	5	64	0,3	0,38	0,07	0,61	5,92E-02	-
14	13	155	0,12	0,13	0,08	0,52	3,83E-01	-
20	71	303	0,05	0,01	0,19	0,43	1,00E+00	-

Fist best score first patch ϵ TP	FN	FP	TN		sens (TP/($\neg$ ppv (TP/(TI1-spec (FPAUC (sens-			
8	0	14	8	129	0	0	0,06	0,47
8	0	17	8	134	0	0	0,06	0,47
3	0	17	2	104	0	0	0,02	0,49
17	2	16	15	113	0,11	0,12	0,12	0,5
11	0	16	11	129	0	0	0,08	0,46
17	0	15	17	76	0	0	0,18	0,41
8	0	18	8	134	0	0	0,06	0,47
5	0	18	5	126	0	0	0,04	0,48
18	2	15	16	90	0,12	0,11	0,15	0,48
15	0	14	15	194	0	0	0,07	0,46
4	1	16	3	119	0,06	0,25	0,02	0,52
5	0	13	5	77	0	0	0,06	0,47
17	0	11	17	176	0	0	0,09	0,46
8	2	2	6	92	0,5	0,25	0,06	0,72
5	0	11	5	89	0	0	0,05	0,47
17	2	12	15	111	0,14	0,12	0,12	0,51
3	0	15	3	116	0	0	0,03	0,49
6	0	16	6	86	0	0	0,07	0,47
34	0	17	34	337	0	0	0,09	0,45
34	0	21	34	333	0	0	0,09	0,45
13	6	11	7	105	0,35	0,46	0,06	0,65
13	6	5	7	111	0,55	0,46	0,06	0,74
13	0	21	13	95	0	0	0,12	0,44
13	0	18	13	98	0	0	0,12	0,44
38	0	16	38	244	0	0	0,13	0,43
41	0	15	41	272	0	0	0,13	0,43
41	0	16	41	271	0	0	0,13	0,43
41	0	19	41	268	0	0	0,13	0,43
41	0	18	41	269	0	0	0,13	0,43
5	0	17	5	163	0	0	0,03	0,49
6	0	12	6	303	0	0	0,02	0,49
6	0	12	6	303	0	0	0,02	0,49
11	0	13	11	100	0	0	0,1	0,45
30	0	13	30	196	0	0	0,13	0,43
3	3	15	0	84	0,17	1	0	0,58
56	17	2	39	394	0,89	0,3	0,09	0,9
9	0	17	9	137	0	0	0,06	0,47
7	0	17	7	81	0	0	0,08	0,46
8	3	7	5	64	0,3	0,38	0,07	0,61
5	0	17	5	164	0	0	0,03	0,49
46	2	19	44	330	0,1	0,04	0,12	0,49

Second best score							
Fisher	Significant	second pat TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))
1,00E+00 -		17	4	10	13	124	0,29
1,00E+00 -		8	0	17	8	134	0
1,00E+00 -		10	0	17	10	96	0
1,00E+00 -		5	0	18	5	123	0
1,00E+00 -		6	0	16	6	134	0
1,00E+00 -		24	11	4	13	80	0,73
1,00E+00 -		8	1	17	7	135	0,06
1,00E+00 -		12	0	18	12	119	0
1,00E+00 -		10	0	17	10	96	0
1,00E+00 -		25	8	6	17	192	0,57
4,10E-01 -		17	0	17	17	105	0
1,00E+00 -		9	4	9	5	77	0,31
1,00E+00 -		14	7	4	7	186	0,64
3,01E-02 Yes		10	1	3	9	89	0,25
1,00E+00 -		5	0	11	5	89	0
5,31E-01 -		14	0	14	14	112	0
1,00E+00 -		13	0	15	13	106	0
1,00E+00 -		6	0	16	6	86	0
1,00E+00 -		47	0	17	47	324	0
1,00E+00 -		47	1	20	46	321	0,05
2,12E-03 Yes		7	4	13	3	109	0,24
1,08E-04 Yes		7	1	10	6	112	0,09
1,00E+00 -		7	5	16	2	106	0,24
1,00E+00 -		7	0	18	7	104	0
1,00E+00 -		3	3	13	0	282	0,19
1,00E+00 -		7	0	15	7	306	0
1,00E+00 -		7	2	14	5	307	0,12
1,00E+00 -		7	1	18	6	303	0,05
1,00E+00 -		7	2	16	5	305	0,11
1,00E+00 -		22	0	17	22	146	0
1,00E+00 -		19	0	12	19	290	0
1,00E+00 -		19	0	12	19	290	0
1,00E+00 -		3	0	13	3	108	0
1,00E+00 -		29	0	13	29	197	0
4,76E-03 Yes		3	0	18	3	81	0
4,93E-15 Yes		12	0	19	12	421	0
1,00E+00 -		21	0	17	21	125	0
1,00E+00 -							
5,92E-02 -							
1,00E+00 -		21	11	6	10	159	0,65
1,00E+00 -		98	0	21	98	276	0

1-spec (FPAUC (sensFisher Significant?

0,09	0,6	5,45E-02	-
0,06	0,47	1,00E+00	-
0,09	0,45	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-
0,14	0,8	5,81E-06	Yes
0,05	0,5	1,00E+00	-
0,09	0,45	1,00E+00	-
0,09	0,45	1,00E+00	-
0,08	0,75	1,56E-05	Yes
0,14	0,43	1,00E+00	-
0,06	0,62	1,87E-02	Yes
0,04	0,8	3,79E-07	Yes
0,09	0,58	3,43E-01	-
0,05	0,47	1,00E+00	-
0,11	0,44	1,00E+00	-
0,11	0,45	1,00E+00	-
0,07	0,47	1,00E+00	-
0,13	0,44	1,00E+00	-
0,13	0,46	1,00E+00	-
0,03	0,6	5,83E-03	Yes
0,05	0,52	4,73E-01	-
0,02	0,61	1,24E-03	Yes
0,06	0,47	1,00E+00	-

0	0,59	1,28E-04	Yes
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,55	4,07E-02	Yes
0,02	0,52	3,44E-01	-
0,02	0,55	5,08E-02	-
0,13	0,43	1,00E+00	-
0,06	0,47	1,00E+00	-
0,06	0,47	1,00E+00	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0,13	0,44	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0,14	0,43	1,00E+00	-

0,06	0,79	1,84E-08	Yes
0,26	0,37	1,00E+00	-

Ellipro default score 0.7, radius 8. Epitope definition #2. Discontinuous Epitopes: Best by significance

antigen	epitope	antigen size	epitope size	number of	rank best	ebest	patch	TP	FN
1AFV:A	1afv_A_HL	151	14	2	0	18	4	10	
1FSK:A	1fsk_A_CB	159	17	3	1	10	10	7	
1H0D:C	1h0d_C_B/	123	17	2	0	3	0	17	
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	4	0	5	4	14	
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	16	1	0	11	0	16	
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	15	1	0	17	0	15	
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	18	5	2	12	6	12	
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	18	2	0	5	0	18	
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	17	3	0	10	0	17	
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	5	1	25	8	6	
1PKQ:E	1pkq_E_B/	139	17	3	2	27	9	8	
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	2	1	10	4	9	
1SY6:A	1sy6_A_HL	204	11	3	1	16	7	4	
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	4	3	0	8	2	2	
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	11	2	0	6	0	11	
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	3	0	18	2	12	
1ZA3:R	1za3_R_HL	134	15	2	0	3	0	15	
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	3	2	16	9	7	
1A14:N	1a14_N_HL	388	17	1	0	190	11	6	
1A14:N	1nca_N_HL	388	21	1	0	190	11	10	
1RJC:B	1bvk_C_B/	129	17	2	0	14	6	11	
1RJC:B	1jhl_A_HL	129	11	2	0	14	6	5	
1RJC:B	1ndg_C_B/	129	21	2	0	14	1	20	
1RJC:B	1p2c_C_B/	129	18	2	1	23	11	7	
1JPS:T	1jps_T_HL	219	0 no epitope predicted						
1AR1:B	1ar1_B_CL	298	16	1	0	38	0	16	
1EO8:A	1eo8_A_HL	328	15	3	0	42	0	15	
1EO8:A	1ken_A_HL	328	16	3	1	61	10	6	
1EO8:A	1qfu_A_HL	328	19	3	0	42	0	19	
1EO8:A	2vit_C_BA	328	18	3	2	9	3	15	
1EZV:E	1ezv_E_X/	185	17	1	0	28	0	17	
1G9M:G	1g9m_G_H/	321	12	4	3	49	9	3	
1G9M:G	2b4c_G_HL	321	12	4	3	49	9	3	
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	2	0	11	0	13	
1NFD:D	1nfd_D_HC	239	13	2	0	30	0	13	
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	18	4	3	8	7	11	
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	3	1	78	18	1	
1V7M:V	1v7m_V_H/	163	17	3	2	20	6	11	
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	17	1	0	9	0	17	
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	10	1	0	8	3	7	
1Z3G:B	1z3g_B_IM	186	17	4	1	21	11	6	
2AEP:A	2aep_A_HL	395	21	2	1	125	12	9	

discontinuous epitope		Average on all predict					
FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	TI1-spec (FP/(FP+TN))	AUC (sens+spec)/2	Fisher	Significant:TP_av
14	123	0,29	0,22	0,1	0,59	6,62E-02	-
0	142	0,59	1	0	0,79	9,12E-12	Yes
2	104	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
1	127	0,22	0,8	0,01	0,61	7,76E-04	Yes
11	129	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	-
17	76	0	0	0,18	0,41	1,00E+00	-
6	136	0,33	0,5	0,04	0,65	5,32E-04	Yes
5	126	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-
10	96	0	0	0,09	0,45	1,00E+00	-
17	192	0,57	0,32	0,08	0,75	1,56E-05	Yes
17	105	0,53	0,35	0,14	0,7	6,67E-04	Yes
6	76	0,31	0,4	0,07	0,62	2,86E-02	Yes
9	184	0,64	0,44	0,05	0,79	1,22E-06	Yes
6	92	0,5	0,25	0,06	0,72	3,01E-02	Yes
6	88	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
16	110	0,14	0,11	0,13	0,51	8,69E-01	-
3	116	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
7	85	0,56	0,56	0,08	0,74	2,09E-05	Yes
179	192	0,65	0,06	0,48	0,58	1,40E-01	-
179	188	0,52	0,06	0,49	0,52	4,61E-01	-
8	104	0,35	0,43	0,07	0,64	3,41E-03	Yes
8	110	0,55	0,43	0,07	0,74	1,82E-04	Yes
13	95	0,05	0,07	0,12	0,46	1,00E+00	-
12	99	0,61	0,48	0,11	0,75	8,02E-06	Yes
38	244	0	0	0,13	0,43	1,00E+00	-
42	271	0	0	0,13	0,43	1,00E+00	-
51	261	0,62	0,16	0,16	0,73	8,08E-05	Yes
42	267	0	0	0,14	0,43	1,00E+00	-
6	304	0,17	0,33	0,02	0,57	9,52E-03	Yes
28	140	0	0	0,17	0,42	1,00E+00	-
40	269	0,75	0,18	0,13	0,81	3,51E-06	Yes
40	269	0,75	0,18	0,13	0,81	3,51E-06	Yes
11	100	0	0	0,1	0,45	1,00E+00	-
30	196	0	0	0,13	0,43	1,00E+00	-
1	83	0,39	0,88	0,01	0,69	1,24E-05	Yes
60	373	0,95	0,23	0,14	0,9	5,11E-14	Yes
14	132	0,35	0,3	0,1	0,63	8,29E-03	Yes
9	79	0	0	0,1	0,45	1,00E+00	-
5	64	0,3	0,38	0,07	0,61	5,92E-02	-
10	159	0,65	0,52	0,06	0,79	1,84E-08	Yes
113	261	0,57	0,1	0,3	0,63	1,17E-02	Yes

ed epitopes.

FN_av	FP_av	TN_av	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1-spec (1-TN)	AUC (FAUC)	sens Fisher	Significant?
12	17	119	0,14	0,11	0,12	0,51	5,55E-01	-
13	12	129	0,19	0,2	0,09	0,55	1,84E-01	-
17	6	99	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
16	11	116	0,11	0,15	0,09	0,51	5,01E-01	-
16	11	129	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	-
15	17	76	0	0	0,18	0,41	1,00E+00	-
16	6	135	0,06	0,14	0,04	0,51	5,57E-01	-
16	14	116	0,06	0,07	0,11	0,48	1,00E+00	-
16	9	96	0,06	0,1	0,09	0,49	1,00E+00	-
12	12	197	0,08	0,08	0,06	0,51	5,54E-01	-
13	12	109	0,19	0,2	0,1	0,54	2,46E-01	-
11	5	76	0,15	0,29	0,06	0,55	2,48E-01	-
8	19	173	0,27	0,14	0,1	0,59	1,03E-01	-
3	10	88	0,25	0,09	0,1	0,57	3,71E-01	-
11	6	88	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
13	11	114	0	0	0,09	0,46	1,00E+00	-
15	8	111	0	0	0,07	0,47	1,00E+00	-
13	6	85	0,19	0,33	0,07	0,56	1,31E-01	-
6	179	192	0,65	0,06	0,48	0,58	1,40E-01	-
10	179	188	0,52	0,06	0,49	0,52	4,61E-01	-
14	15	96	0,18	0,17	0,14	0,52	4,40E-01	-
8	15	102	0,27	0,17	0,13	0,57	1,86E-01	-
17	15	93	0,15	0,17	0,14	0,51	8,17E-01	-
12	13	98	0,29	0,28	0,12	0,59	6,46E-02	-
16	38	244	0	0	0,13	0,43	1,00E+00	-
15	37	275	0	0	0,12	0,44	1,00E+00	-
12	33	278	0,25	0,11	0,11	0,57	9,32E-02	-
18	37	272	0	0	0,12	0,44	1,00E+00	-
16	35	274	0,06	0,03	0,11	0,47	1,00E+00	-
17	28	140	0	0	0,17	0,42	1,00E+00	-
9	25	283	0,18	0,07	0,08	0,55	2,36E-01	-
9	25	283	0,18	0,07	0,08	0,55	2,36E-01	-
13	7	104	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
13	31	194	0	0	0,14	0,43	1,00E+00	-
16	5	79	0,06	0,17	0,06	0,5	1,00E+00	-
13	51	381	0,32	0,11	0,12	0,6	2,28E-02	Yes
15	14	131	0,12	0,12	0,1	0,51	5,22E-01	-
17	9	79	0	0	0,1	0,45	1,00E+00	-
7	5	64	0,3	0,38	0,07	0,61	5,92E-02	-
14	14	155	0,12	0,12	0,08	0,52	4,13E-01	-
14	79	295	0,33	0,08	0,21	0,56	1,48E-01	-

Fist best score first patch ϵ TP	FN	FP	TN		sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+TN))	1-spec (FP/(FP+TN))	FPAUC (sens+ppv)
18	4	10	14	123	0,29	0,22	0,1	0,59
16	0	17	16	126	0	0	0,11	0,44
3	0	17	2	104	0	0	0,02	0,49
5	4	14	1	127	0,22	0,8	0,01	0,61
11	0	16	11	129	0	0	0,08	0,46
17	0	15	17	76	0	0	0,18	0,41
8	1	17	7	135	0,06	0,12	0,05	0,5
5	0	18	5	126	0	0	0,04	0,48
10	0	17	10	96	0	0	0,09	0,45
15	0	14	15	194	0	0	0,07	0,46
4	1	16	3	119	0,06	0,25	0,02	0,52
5	0	13	5	77	0	0	0,06	0,47
23	0	11	23	170	0	0	0,12	0,44
8	2	2	6	92	0,5	0,25	0,06	0,72
6	0	11	6	88	0	0	0,06	0,47
18	2	12	16	110	0,14	0,11	0,13	0,51
3	0	15	3	116	0	0	0,03	0,49
6	0	16	6	86	0	0	0,07	0,47
190	11	6	179	192	0,65	0,06	0,48	0,58
190	11	10	179	188	0,52	0,06	0,49	0,52
14	6	11	8	104	0,35	0,43	0,07	0,64
14	6	5	8	110	0,55	0,43	0,07	0,74
14	1	20	13	95	0,05	0,07	0,12	0,46
14	0	18	14	97	0	0	0,13	0,44
38	0	16	38	244	0	0	0,13	0,43
42	0	15	42	271	0	0	0,13	0,43
42	0	16	42	270	0	0	0,13	0,43
42	0	19	42	267	0	0	0,14	0,43
42	0	18	42	268	0	0	0,14	0,43
28	0	17	28	140	0	0	0,17	0,42
6	0	12	6	303	0	0	0,02	0,49
6	0	12	6	303	0	0	0,02	0,49
11	0	13	11	100	0	0	0,1	0,45
30	0	13	30	196	0	0	0,13	0,43
4	0	18	4	80	0	0	0,05	0,48
12	0	19	12	421	0	0	0,03	0,49
9	0	17	9	137	0	0	0,06	0,47
9	0	17	9	79	0	0	0,1	0,45
8	3	7	5	64	0,3	0,38	0,07	0,61
5	0	17	5	164	0	0	0,03	0,49
47	2	19	45	329	0,1	0,04	0,12	0,49

Second best score								
Fisher	Significant	second pat TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	
6,62E-02	-	21	0	14	21	116	0	0
1,00E+00	-	10	10	7	0	142	0,59	1
1,00E+00	-	11	0	17	11	95	0	0
7,76E-04	Yes	18	2	16	16	112	0,11	0,11
1,00E+00	-							
1,00E+00	-							
1,00E+00	-	4	0	18	4	138	0	0
1,00E+00	-	27	3	15	24	107	0,17	0,11
1,00E+00	-	3	0	17	3	103	0	0
1,00E+00	-	25	8	6	17	192	0,57	0,32
4,10E-01	-	17	0	17	17	105	0	0
1,00E+00	-	10	4	9	6	76	0,31	0,4
1,00E+00	-	16	7	4	9	184	0,64	0,44
3,01E-02	Yes	10	1	3	9	89	0,25	0,1
1,00E+00	-	6	0	11	6	88	0	0
8,69E-01	-	14	0	14	14	112	0	0
1,00E+00	-	13	0	15	13	106	0	0
1,00E+00	-	6	0	16	6	86	0	0
1,40E-01	-							
4,61E-01	-							
3,41E-03	Yes	23	0	17	23	89	0	0
1,82E-04	Yes	23	0	11	23	95	0	0
1,00E+00	-	23	6	15	17	91	0,29	0,26
1,00E+00	-	23	11	7	12	99	0,61	0,48
1,00E+00	-							
1,00E+00	-	61	0	15	61	252	0	0
1,00E+00	-	61	10	6	51	261	0,62	0,16
1,00E+00	-	61	0	19	61	248	0	0
1,00E+00	-	61	2	16	59	251	0,11	0,03
1,00E+00	-							
1,00E+00	-	20	0	12	20	289	0	0
1,00E+00	-	20	0	12	20	289	0	0
1,00E+00	-	3	0	13	3	108	0	0
1,00E+00	-	33	0	13	33	193	0	0
1,00E+00	-	3	0	18	3	81	0	0
1,00E+00	-	78	18	1	60	373	0,95	0,23
1,00E+00	-	21	0	17	21	125	0	0
1,00E+00	-							
5,92E-02	-							
1,00E+00	-	21	11	6	10	159	0,65	0,52
1,00E+00	-	125	12	9	113	261	0,57	0,1

1-spec (FPAUC (sensFisher Significant?

0,15	0,42	1,00E+00	-
0	0,79	9,12E-12	Yes
0,1	0,45	1,00E+00	-
0,12	0,49	1,00E+00	-

0,03	0,49	1,00E+00	-
0,18	0,49	1,00E+00	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0,08	0,75	1,56E-05	Yes
0,14	0,43	1,00E+00	-
0,07	0,62	2,86E-02	Yes
0,05	0,79	1,22E-06	Yes
0,09	0,58	3,43E-01	-
0,06	0,47	1,00E+00	-
0,11	0,44	1,00E+00	-
0,11	0,45	1,00E+00	-
0,07	0,47	1,00E+00	-

0,21	0,4	1,00E+00	-
0,19	0,4	1,00E+00	-
0,16	0,56	1,38E-01	-
0,11	0,75	8,02E-06	Yes

0,19	0,4	1,00E+00	-
0,16	0,73	8,08E-05	Yes
0,2	0,4	1,00E+00	-
0,19	0,46	1,00E+00	-

0,06	0,47	1,00E+00	-
0,06	0,47	1,00E+00	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0,15	0,43	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-
0,14	0,9	5,11E-14	Yes
0,14	0,43	1,00E+00	-

0,06	0,79	1,84E-08	Yes
0,3	0,63	1,17E-02	Yes

ElliPro score 0.5, default radius 6. Epitope definition #2. Discontinuous Epitopes: Best by significance

antigen	epitope	antigen size	epitope size	number of	rank best	ebest	patch	TP	FN
1AFV:A	1afv_A_HL	151	14	5	0	18	7	7	
1FSK:A	1fsk_A_CB	159	17	6	3	17	13	4	
1H0D:C	1h0d_C_B/	123	17	5	3	39	14	3	
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	4	3	12	6	12	
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	16	6	4	28	11	5	
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	15	2	1	27	10	5	
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	18	7	4	8	6	12	
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	18	6	4	37	8	10	
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	17	5	2	8	4	13	
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	5	1	38	9	5	
1PKQ:E	1pkq_E_B/	139	17	4	1	27	8	9	
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	6	2	13	7	6	
1SY6:A	1sy6_A_HL	204	11	5	0	5	4	7	
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	4	3	0	9	2	2	
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	11	4	1	4	3	8	
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	5	3	5	4	10	
1ZA3:R	1za3_R_HL	134	15	3	2	23	11	4	
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	3	1	25	14	2	
1A14:N	1a14_N_HL	388	17	4	3	10	3	14	
1A14:N	1nca_N_HL	388	21	4	3	10	6	15	
1RJC:B	1bvk_C_B/	129	17	4	1	8	4	13	
1RJC:B	1jhl_A_HL	129	11	4	0	7	4	7	
1RJC:B	1ndg_C_B/	129	21	4	0	7	3	18	
1RJC:B	1p2c_C_B/	129	18	4	3	26	12	6	
1JPS:T	1jps_T_HL	219	0 no epitope predicted						
1AR1:B	1ar1_B_CL	298	16	5	3	35	6	10	
1EO8:A	1eo8_A_HL	328	15	3	0	49	0	15	
1EO8:A	1ken_A_HL	328	16	3	1	98	15	1	
1EO8:A	1qfu_A_HL	328	19	3	2	13	5	14	
1EO8:A	2vit_C_BA	328	18	3	1	98	10	8	
1EZV:E	1ezv_E_X/	185	17	4	3	38	8	9	
1G9M:G	1g9m_G_H/	321	12	3	0	65	10	2	
1G9M:G	2b4c_G_HL	321	12	3	0	65	11	1	
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	3	2	28	11	2	
1NFD:D	1nfd_D_HC	239	13	5	2	15	8	5	
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	18	3	0	12	9	9	
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	5	2	229	19	0	
1V7M:V	1v7m_V_H/	163	17	3	1	42	9	8	
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	17	4	0	12	7	10	
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	10	4	0	4	2	8	
1Z3G:B	1z3g_B_IM	186	17	4	0	26	13	4	
2AEP:A	2aep_A_HL	395	21	8	3	112	15	6	

discontinuous epitope		Average on all predict					
FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	TI1-spec (FP/AUC)	(sens Fisher)	Significant	TP_av
11	126	0,5	0,39	0,08	0,71 2,17E-04	Yes	1
4	138	0,76	0,76	0,03	0,87 1,27E-12	Yes	2
25	81	0,82	0,36	0,24	0,79 5,13E-06	Yes	2
6	122	0,33	0,5	0,05	0,64 8,90E-04	Yes	3
17	123	0,69	0,39	0,12	0,78 2,27E-06	Yes	2
17	76	0,67	0,37	0,18	0,74 2,74E-04	Yes	5
2	140	0,33	0,75	0,01	0,66 2,14E-05	Yes	1
29	102	0,44	0,22	0,22	0,61 4,37E-02	Yes	1
4	102	0,24	0,5	0,04	0,6 1,27E-02	Yes	2
29	180	0,64	0,24	0,14	0,75 5,32E-05	Yes	1
19	103	0,47	0,3	0,16	0,66 5,39E-03	Yes	2
6	76	0,54	0,54	0,07	0,73 1,83E-04	Yes	1
1	192	0,36	0,8	0,01	0,68 2,29E-05	Yes	2
7	91	0,5	0,22	0,07	0,71 3,81E-02	Yes	1
1	93	0,27	0,75	0,01	0,63 3,31E-03	Yes	1
1	125	0,29	0,8	0,01	0,64 3,07E-04	Yes	1
12	107	0,73	0,48	0,1	0,82 3,07E-07	Yes	3
11	81	0,88	0,56	0,12	0,88 3,04E-09	Yes	4
7	364	0,18	0,3	0,02	0,58 6,96E-03	Yes	4
4	363	0,29	0,6	0,01	0,64 2,18E-06	Yes	5
4	108	0,24	0,5	0,04	0,6 1,07E-02	Yes	3
3	115	0,36	0,57	0,03	0,67 9,14E-04	Yes	2
4	104	0,14	0,43	0,04	0,55 8,48E-02	-	3
14	97	0,67	0,46	0,13	0,77 3,35E-06	Yes	3
29	253	0,38	0,17	0,1	0,64 5,75E-03	Yes	1
49	264	0	0	0,16	0,42 1,00E+00	-	0
83	229	0,94	0,15	0,27	0,84 7,27E-08	Yes	5
8	301	0,26	0,38	0,03	0,62 3,63E-04	Yes	2
88	222	0,56	0,1	0,28	0,64 1,75E-02	Yes	3
30	138	0,47	0,21	0,18	0,65 9,22E-03	Yes	2
55	254	0,83	0,15	0,18	0,83 2,99E-06	Yes	3
54	255	0,92	0,17	0,17	0,87 1,15E-07	Yes	3
17	94	0,85	0,39	0,15	0,85 7,35E-07	Yes	3
7	219	0,62	0,53	0,03	0,79 3,08E-08	Yes	2
3	81	0,5	0,75	0,04	0,73 3,55E-06	Yes	3
210	223	1	0,08	0,48	0,76 1,67E-06	Yes	3
33	113	0,53	0,21	0,23	0,65 1,07E-02	Yes	4
5	83	0,41	0,58	0,06	0,68 4,21E-04	Yes	2
2	67	0,2	0,5	0,03	0,59 7,59E-02	-	1
13	156	0,76	0,5	0,08	0,84 5,55E-10	Yes	3
97	277	0,71	0,13	0,26	0,73 3,16E-05	Yes	2

ed epitopes.

FN_av	FP_av	TN_av	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1- spec (1-TN)	FFAUC (sens+spec)/2	sens Fisher	Significant?
12	14	122	0,08	0,07	0,1	0,49	1,00E+00	-
14	12	130	0,12	0,14	0,08	0,52	4,27E-01	-
14	9	96	0,12	0,18	0,09	0,52	4,43E-01	-
14	13	114	0,18	0,19	0,1	0,54	2,87E-01	-
13	12	127	0,13	0,14	0,09	0,52	4,07E-01	-
10	18	75	0,33	0,22	0,19	0,57	1,85E-01	-
16	7	134	0,06	0,12	0,05	0,5	1,00E+00	-
16	11	119	0,06	0,08	0,08	0,49	1,00E+00	-
14	10	95	0,12	0,17	0,1	0,51	4,92E-01	-
12	19	189	0,08	0,05	0,09	0,49	1,00E+00	-
14	13	108	0,12	0,13	0,11	0,51	5,49E-01	-
11	5	76	0,08	0,17	0,06	0,51	5,74E-01	-
9	15	177	0,18	0,12	0,08	0,55	2,32E-01	-
2	12	85	0,33	0,08	0,12	0,6	3,44E-01	-
9	16	78	0,1	0,06	0,17	0,46	1,00E+00	-
12	11	114	0,08	0,08	0,09	0,49	1,00E+00	-
11	12	106	0,21	0,2	0,1	0,56	1,99E-01	-
11	13	78	0,27	0,24	0,14	0,56	1,97E-01	-
12	53	317	0,25	0,07	0,14	0,55	1,98E-01	-
15	52	314	0,25	0,09	0,14	0,55	1,57E-01	-
14	13	99	0,18	0,19	0,12	0,53	3,53E-01	-
8	13	104	0,2	0,13	0,11	0,54	3,35E-01	-
18	13	95	0,14	0,19	0,12	0,51	5,04E-01	-
14	12	98	0,18	0,2	0,11	0,53	3,22E-01	-
14	27	255	0,07	0,04	0,1	0,49	1,00E+00	-
14	52	260	0	0	0,17	0,42	1,00E+00	-
11	48	263	0,31	0,09	0,15	0,58	9,79E-02	-
17	51	257	0,11	0,04	0,17	0,47	1,00E+00	-
14	50	260	0,18	0,06	0,16	0,51	5,40E-01	-
15	21	146	0,12	0,09	0,13	0,5	1,00E+00	-
8	48	261	0,27	0,06	0,16	0,56	2,48E-01	-
8	47	261	0,27	0,06	0,15	0,56	2,40E-01	-
9	11	99	0,25	0,21	0,1	0,57	1,41E-01	-
10	23	203	0,17	0,08	0,1	0,53	3,66E-01	-
14	12	71	0,18	0,2	0,14	0,52	4,91E-01	-
15	48	384	0,17	0,06	0,11	0,53	3,34E-01	-
13	20	126	0,24	0,17	0,14	0,55	2,25E-01	-
14	8	80	0,12	0,2	0,09	0,52	4,77E-01	-
8	6	62	0,11	0,14	0,09	0,51	1,00E+00	-
13	21	147	0,19	0,12	0,12	0,53	3,47E-01	-
18	23	350	0,1	0,08	0,06	0,52	3,68E-01	-

Fist best score first patch ϵ TP	FN	FP	TN		sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+FP))	1-spec (FP/(FP+TN))	FPAUC (sens+spec)/2	(sens+spec)/2
18	7	7	11	126	0,5	0,39	0,08	0,71	
20	0	17	20	122	0	0	0,14	0,43	
8	0	17	8	98	0	0	0,08	0,46	
22	3	15	19	109	0,17	0,14	0,15	0,51	
11	0	16	11	129	0	0	0,08	0,46	
19	0	15	19	74	0	0	0,2	0,4	
8	0	18	8	134	0	0	0,06	0,47	
11	0	18	11	120	0	0	0,08	0,46	
12	3	14	9	97	0,18	0,25	0,08	0,55	
19	0	14	19	190	0	0	0,09	0,45	
3	0	17	3	119	0	0	0,02	0,49	
8	0	13	8	74	0	0	0,1	0,45	
5	4	7	1	192	0,36	0,8	0,01	0,68	
9	2	2	7	91	0,5	0,22	0,07	0,71	
14	0	11	14	80	0	0	0,15	0,43	
17	0	14	17	109	0	0	0,13	0,43	
15	0	15	15	104	0	0	0,13	0,44	
27	0	16	27	65	0	0	0,29	0,35	
55	2	15	53	318	0,12	0,04	0,14	0,49	
55	3	18	52	315	0,14	0,05	0,14	0,5	
7	2	15	5	107	0,12	0,29	0,04	0,54	
7	4	7	3	115	0,36	0,57	0,03	0,67	
7	3	18	4	104	0,14	0,43	0,04	0,55	
7	0	18	7	104	0	0	0,06	0,47	
60	3	13	57	225	0,19	0,05	0,2	0,49	
49	0	15	49	264	0	0	0,16	0,42	
49	0	16	49	263	0	0	0,16	0,42	
49	0	19	49	260	0	0	0,16	0,42	
49	0	18	49	261	0	0	0,16	0,42	
5	0	17	5	163	0	0	0,03	0,49	
65	10	2	55	254	0,83	0,15	0,18	0,83	
65	11	1	54	255	0,92	0,17	0,17	0,87	
13	0	13	13	98	0	0	0,12	0,44	
40	0	13	40	186	0	0	0,18	0,41	
12	9	9	3	81	0,5	0,75	0,04	0,73	
6	0	19	6	427	0	0	0,01	0,49	
16	0	17	16	130	0	0	0,11	0,45	
12	7	10	5	83	0,41	0,58	0,06	0,68	
4	2	8	2	67	0,2	0,5	0,03	0,59	
26	13	4	13	156	0,76	0,5	0,08	0,84	
42	2	19	40	334	0,1	0,05	0,11	0,49	

Second best score								
Fisher	Significant	second pat TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	TI
2,17E-04	Yes	3	0	14	3	134	0	0
1,00E+00	-	5	0	17	5	137	0	0
1,00E+00	-	4	0	17	3	103	0	0
5,34E-01	-	6	4	14	2	126	0,22	0,67
1,00E+00	-	14	0	16	14	126	0	0
1,00E+00	-	27	10	5	17	76	0,67	0,37
1,00E+00	-	3	0	18	3	139	0	0
1,00E+00	-	9	0	18	9	122	0	0
2,17E-01	-	10	4	13	6	100	0,24	0,4
1,00E+00	-	38	9	5	29	180	0,64	0,24
1,00E+00	-	27	8	9	19	103	0,47	0,3
1,00E+00	-	10	4	9	6	76	0,31	0,4
2,29E-05	Yes	24	0	11	24	169	0	0
3,81E-02	Yes	20	0	4	20	78	0	0
1,00E+00	-	4	3	8	1	93	0,27	0,75
1,00E+00	-	31	3	11	28	98	0,21	0,1
1,00E+00	-	10	0	15	10	109	0	0
1,00E+00	-	25	14	2	11	81	0,88	0,56
1,00E+00	-	161	12	5	149	222	0,71	0,07
8,28E-01	-	161	12	9	149	218	0,57	0,07
2,31E-01	-	8	4	13	4	108	0,24	0,5
9,14E-04	Yes	8	0	11	8	110	0	0
8,48E-02	-	8	2	19	6	102	0,1	0,25
1,00E+00	-	8	0	18	8	103	0	0
1,00E+00	-	3	0	16	3	279	0	0
1,00E+00	-	98	0	15	98	215	0	0
1,00E+00	-	98	15	1	83	229	0,94	0,15
1,00E+00	-	98	1	18	97	212	0,05	0,01
1,00E+00	-	98	10	8	88	222	0,56	0,1
1,00E+00	-	24	0	17	24	144	0	0
2,99E-06	Yes	49	0	12	49	260	0	0
1,15E-07	Yes	49	0	12	49	260	0	0
1,00E+00	-	4	0	13	4	107	0	0
1,00E+00	-	42	0	13	42	184	0	0
3,55E-06	Yes	14	0	18	14	70	0	0
1,00E+00	-	13	0	19	13	420	0	0
1,00E+00	-	42	9	8	33	113	0,53	0,21
4,21E-04	Yes	5	4	13	1	87	0,24	0,8
7,59E-02	-	14	3	7	11	58	0,3	0,21
5,55E-10	Yes	30	0	17	30	139	0	0
1,00E+00	-	16	0	21	16	358	0	0

1-spec (FPAUC (sensFisher Significant?

0,02	0,49	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,6	2,14E-03	Yes
0,1	0,45	1,00E+00	-
0,18	0,74	2,74E-04	Yes
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,07	0,47	1,00E+00	-
0,06	0,59	3,17E-02	Yes
0,14	0,75	5,32E-05	Yes
0,16	0,66	5,39E-03	Yes
0,07	0,62	2,86E-02	Yes
0,12	0,44	1,00E+00	-
0,2	0,4	1,00E+00	-
0,01	0,63	3,31E-03	Yes
0,22	0,5	1,00E+00	-
0,08	0,46	1,00E+00	-
0,12	0,88	3,04E-09	Yes
0,4	0,65	1,30E-02	Yes
0,41	0,58	1,03E-01	-
0,04	0,6	1,07E-02	Yes
0,07	0,47	1,00E+00	-
0,06	0,52	3,85E-01	-
0,07	0,46	1,00E+00	-
0,01	0,49	1,00E+00	-
0,31	0,34	1,00E+00	-
0,27	0,84	7,27E-08	Yes
0,31	0,37	1,00E+00	-
0,28	0,64	1,75E-02	Yes
0,14	0,43	1,00E+00	-
0,16	0,42	1,00E+00	-
0,16	0,42	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-
0,19	0,41	1,00E+00	-
0,17	0,42	1,00E+00	-
0,03	0,48	1,00E+00	-
0,23	0,65	1,07E-02	Yes
0,01	0,61	2,23E-03	Yes
0,16	0,57	2,46E-01	-
0,18	0,41	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-

ElliPro score 0.6, default radius 6. Epitope definition #2. Discontinuous Epitopes: Best by significance

antigen	epitope	antigen size	epitope size	number of	rank best e	best patch	TP	FN
1AFV:A	1afv_A_HL	151	14	4	0	18	7	7
1FSK:A	1fsk_A_CB	159	17	7	4	11	11	6
1H0D:C	1h0d_C_B/	123	17	6	2	15	12	5
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	4	1	5	4	14
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	16	5	4	24	9	7
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	15	4	0	12	10	5
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	18	7	0	3	0	18
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	18	6	2	8	4	14
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	17	5	2	8	4	13
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	5	2	33	9	5
1PKQ:E	1pkq_E_B/	139	17	5	0	4	0	17
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	5	2	12	6	7
1SY6:A	1sy6_A_HL	204	11	8	0	7	4	7
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	4	3	0	9	2	2
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	11	3	2	4	3	8
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	4	0	17	1	13
1ZA3:R	1za3_R_HL	134	15	3	2	22	11	4
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	3	1	14	8	8
1A14:N	1a14_N_HL	388	17	6	5	81	9	8
1A14:N	1nca_N_HL	388	21	6	5	81	8	13
1RJC:B	1bvk_C_B/	129	17	4	0	10	6	11
1RJC:B	1jhl_A_HL	129	11	4	0	10	5	6
1RJC:B	1ndg_C_B/	129	21	4	1	4	3	18
1RJC:B	1p2c_C_B/	129	18	4	3	24	10	8
1JPS:T	1jps_T_HL	219	0 no epitope predicted					
1AR1:B	1ar1_B_CL	298	16	6	3	20	4	12
1EO8:A	1eo8_A_HL	328	15	5	0	40	0	15
1EO8:A	1ken_A_HL	328	16	5	2	49	12	4
1EO8:A	1qfu_A_HL	328	19	5	0	40	0	19
1EO8:A	2vit_C_BA	328	18	5	3	4	3	15
1EZV:E	1ezv_E_X/	185	17	5	0	5	0	17
1G9M:G	1g9m_G_H/	321	12	4	3	52	9	3
1G9M:G	2b4c_G_HL	321	12	4	3	52	9	3
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	4	3	5	4	9
1NFD:D	1nfd_D_HC	239	13	5	3	15	8	5
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	18	5	2	12	9	9
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	9	1	67	18	1
1V7M:V	1v7m_V_H	163	17	4	3	7	6	11
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	17	3	0	10	7	10
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	10	3	0	10	3	7
1Z3G:B	1z3g_B_IM	186	17	4	0	23	12	5
2AEP:A	2aep_A_HL	395	21	8	2	49	9	12

discontinuous epitope		Average on all predict					
FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	TI1-spec (FP/(FP+TN))	AUC (sens+spec)/2	Fisher	Significant:TP_av
11	126	0,5	0,39	0,08	0,71	2,17E-04	Yes
0	142	0,65	1	0	0,82	4,29E-13	Yes
3	103	0,71	0,8	0,03	0,84	1,72E-10	Yes
1	127	0,22	0,8	0,01	0,61	7,76E-04	Yes
15	125	0,56	0,38	0,11	0,73	6,32E-05	Yes
2	91	0,67	0,83	0,02	0,82	4,66E-09	Yes
3	139	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
4	127	0,22	0,5	0,03	0,6	7,87E-03	Yes
4	102	0,24	0,5	0,04	0,6	1,27E-02	Yes
24	185	0,64	0,27	0,11	0,76	1,42E-05	Yes
4	118	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
6	76	0,46	0,5	0,07	0,69	1,19E-03	Yes
3	190	0,36	0,57	0,02	0,67	1,51E-04	Yes
7	91	0,5	0,22	0,07	0,71	3,81E-02	Yes
1	93	0,27	0,75	0,01	0,63	3,31E-03	Yes
16	110	0,07	0,06	0,13	0,47	1,00E+00	-
11	108	0,73	0,5	0,09	0,82	1,66E-07	Yes
6	86	0,5	0,57	0,07	0,72	6,99E-05	Yes
72	299	0,53	0,11	0,19	0,67	2,83E-03	Yes
73	294	0,38	0,1	0,2	0,59	4,90E-02	Yes
4	108	0,35	0,6	0,04	0,66	3,31E-04	Yes
5	113	0,45	0,5	0,04	0,71	3,43E-04	Yes
1	107	0,14	0,75	0,01	0,57	1,36E-02	Yes
14	97	0,56	0,42	0,13	0,71	1,38E-04	Yes
16	266	0,25	0,2	0,06	0,6	1,60E-02	Yes
40	273	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	-
37	275	0,75	0,24	0,12	0,82	4,02E-08	Yes
40	269	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	-
1	309	0,17	0,75	0	0,58	5,41E-04	Yes
5	163	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
43	266	0,75	0,17	0,14	0,81	6,10E-06	Yes
43	266	0,75	0,17	0,14	0,81	6,10E-06	Yes
1	110	0,31	0,8	0,01	0,65	3,58E-04	Yes
7	219	0,62	0,53	0,03	0,79	3,08E-08	Yes
3	81	0,5	0,75	0,04	0,73	3,55E-06	Yes
49	384	0,95	0,27	0,11	0,92	2,31E-15	Yes
1	145	0,35	0,86	0,01	0,67	3,43E-06	Yes
3	85	0,41	0,7	0,03	0,69	7,73E-05	Yes
7	62	0,3	0,3	0,1	0,6	1,09E-01	-
11	158	0,71	0,52	0,07	0,82	2,48E-09	Yes
40	334	0,43	0,18	0,11	0,66	3,14E-04	Yes

ed epitopes.

FN_av	FP_av	TN_av	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1- spec (1-TN)	AUC (FAUC)	sens Fisher	Significant?
12	14	122	0,08	0,07	0,1	0,49	1,00E+00	-
15	7	134	0,06	0,12	0,05	0,51	5,86E-01	-
15	5	100	0,12	0,29	0,05	0,54	2,52E-01	-
16	12	115	0,11	0,14	0,09	0,51	5,44E-01	-
13	9	130	0,13	0,18	0,06	0,53	2,91E-01	-
12	7	86	0,14	0,22	0,08	0,53	3,34E-01	-
17	4	137	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
16	9	122	0,06	0,1	0,07	0,5	1,00E+00	-
15	8	97	0,06	0,11	0,08	0,49	1,00E+00	-
12	15	193	0,08	0,06	0,07	0,5	1,00E+00	-
16	6	116	0,06	0,14	0,05	0,5	1,00E+00	-
11	5	76	0,15	0,29	0,06	0,55	2,48E-01	-
9	6	186	0,1	0,14	0,03	0,53	3,03E-01	-
2	10	87	0,33	0,09	0,1	0,62	2,98E-01	-
10	3	90	0,09	0,25	0,03	0,53	3,65E-01	-
13	9	116	0	0	0,07	0,46	1,00E+00	-
11	9	109	0,21	0,25	0,08	0,57	1,18E-01	-
13	8	83	0,13	0,2	0,09	0,52	4,29E-01	-
15	30	341	0,06	0,03	0,08	0,49	1,00E+00	-
19	30	337	0,05	0,03	0,08	0,48	1,00E+00	-
14	8	104	0,18	0,27	0,07	0,55	1,60E-01	-
9	9	108	0,1	0,1	0,08	0,51	5,73E-01	-
18	8	99	0,1	0,2	0,07	0,51	4,89E-01	-
15	8	102	0,12	0,2	0,07	0,52	3,98E-01	-
15	18	263	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
14	25	287	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	-
13	22	289	0,13	0,08	0,07	0,53	3,04E-01	-
18	25	284	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	-
16	24	286	0,06	0,04	0,08	0,49	1,00E+00	-
15	13	154	0,06	0,07	0,08	0,49	1,00E+00	-
9	28	281	0,18	0,07	0,09	0,55	2,76E-01	-
9	28	281	0,18	0,07	0,09	0,55	2,76E-01	-
10	7	103	0,17	0,22	0,06	0,55	2,16E-01	-
11	16	210	0,08	0,06	0,07	0,51	5,98E-01	-
15	6	77	0,12	0,25	0,07	0,52	4,09E-01	-
17	20	412	0,11	0,09	0,05	0,53	2,36E-01	-
15	12	134	0,12	0,14	0,08	0,52	4,43E-01	-
13	7	80	0,19	0,3	0,08	0,55	1,85E-01	-
8	4	64	0,11	0,2	0,06	0,53	4,72E-01	-
14	17	152	0,18	0,15	0,1	0,54	2,70E-01	-
18	20	353	0,1	0,09	0,05	0,52	3,10E-01	-

Fist best score first patch ϵ TP	FN	FP	TN		sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+FN))	1-spec (FP/(FP+TN))	FPAUC (sens+spec)/2
18	7	7	11	126	0,5	0,39	0,08	0,71
18	0	17	18	124	0	0	0,13	0,44
8	0	17	8	98	0	0	0,08	0,46
19	2	16	17	111	0,11	0,11	0,13	0,49
8	0	16	8	132	0	0	0,06	0,47
12	10	5	2	91	0,67	0,83	0,02	0,82
3	0	18	3	139	0	0	0,02	0,49
5	0	18	5	126	0	0	0,04	0,48
7	2	15	5	101	0,12	0,29	0,05	0,54
18	0	14	18	191	0	0	0,09	0,46
4	0	17	4	118	0	0	0,03	0,48
6	0	13	6	76	0	0	0,07	0,46
7	4	7	3	190	0,36	0,57	0,02	0,67
9	2	2	7	91	0,5	0,22	0,07	0,71
4	0	11	4	90	0	0	0,04	0,48
17	1	13	16	110	0,07	0,06	0,13	0,47
4	0	15	4	115	0	0	0,03	0,48
6	0	16	6	86	0	0	0,07	0,47
3	0	17	3	368	0	0	0,01	0,5
3	0	21	3	364	0	0	0,01	0,5
10	6	11	4	108	0,35	0,6	0,04	0,66
10	5	6	5	113	0,45	0,5	0,04	0,71
10	0	21	10	98	0	0	0,09	0,45
10	0	18	10	101	0	0	0,09	0,45
42	0	16	42	240	0	0	0,15	0,43
40	0	15	40	273	0	0	0,13	0,44
40	0	16	40	272	0	0	0,13	0,44
40	0	19	40	269	0	0	0,13	0,44
40	0	18	40	270	0	0	0,13	0,44
5	0	17	5	163	0	0	0,03	0,49
5	0	12	5	304	0	0	0,02	0,49
5	0	12	5	304	0	0	0,02	0,49
10	0	13	10	101	0	0	0,09	0,45
34	0	13	34	192	0	0	0,15	0,42
5	0	18	5	79	0	0	0,06	0,47
5	0	19	5	428	0	0	0,01	0,49
10	2	15	8	138	0,12	0,2	0,05	0,53
10	7	10	3	85	0,41	0,7	0,03	0,69
10	3	7	7	62	0,3	0,3	0,1	0,6
23	12	5	11	158	0,71	0,52	0,07	0,82
40	2	19	38	336	0,1	0,05	0,1	0,5

Second best score								
Fisher	Significant	second pat TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	TI
2,17E-04	Yes	15	0	14	15	122	0	0
1,00E+00	-	5	0	17	5	137	0	0
1,00E+00	-	4	0	17	3	103	0	0
1,00E+00	-	5	4	14	1	127	0,22	0,8
1,00E+00	-	11	0	16	11	129	0	0
4,66E-09	Yes	12	0	15	12	81	0	0
1,00E+00	-	8	1	17	7	135	0,06	0,12
1,00E+00	-	11	0	18	11	120	0	0
2,49E-01	-	12	3	14	9	97	0,18	0,25
1,00E+00	-	6	0	14	6	203	0	0
1,00E+00	-	3	0	17	3	119	0	0
1,00E+00	-	10	4	9	6	76	0,31	0,4
1,51E-04	Yes	14	0	11	14	179	0	0
3,81E-02	Yes	16	0	4	16	82	0	0
1,00E+00	-	5	0	11	5	89	0	0
1,00E+00	-	13	0	14	13	113	0	0
1,00E+00	-	13	0	15	13	106	0	0
1,00E+00	-	14	8	8	6	86	0,5	0,57
1,00E+00	-	35	0	17	35	336	0	0
1,00E+00	-	35	0	21	35	332	0	0
3,31E-04	Yes	4	2	15	2	110	0,12	0,5
3,43E-04	Yes	4	1	10	3	115	0,09	0,25
1,00E+00	-	4	3	18	1	107	0,14	0,75
1,00E+00	-	4	0	18	4	107	0	0
1,00E+00	-	3	0	16	3	279	0	0
1,00E+00	-	28	0	15	28	285	0	0
1,00E+00	-	28	0	16	28	284	0	0
1,00E+00	-	28	0	19	28	281	0	0
1,00E+00	-	28	0	18	28	282	0	0
1,00E+00	-	23	0	17	23	145	0	0
1,00E+00	-	37	0	12	37	272	0	0
1,00E+00	-	37	0	12	37	272	0	0
1,00E+00	-	4	0	13	4	107	0	0
1,00E+00	-	30	0	13	30	196	0	0
1,00E+00	-	4	0	18	4	80	0	0
1,00E+00	-	67	18	1	49	384	0,95	0,27
2,80E-01	-	24	0	17	24	122	0	0
7,73E-05	Yes	5	4	13	1	87	0,24	0,8
1,09E-01	-	4	2	8	2	67	0,2	0,5
2,48E-09	Yes	7	0	17	7	162	0	0
1,00E+00	-	13	0	21	13	361	0	0

1-spec (FPAUC (sensFisher Significant?

0,11	0,45	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0,01	0,61	7,76E-04	Yes
0,08	0,46	1,00E+00	-
0,13	0,44	1,00E+00	-
0,05	0,5	1,00E+00	-
0,08	0,46	1,00E+00	-
0,08	0,55	2,17E-01	-
0,03	0,49	1,00E+00	-
0,02	0,49	1,00E+00	-
0,07	0,62	2,86E-02	Yes
0,07	0,46	1,00E+00	-
0,16	0,42	1,00E+00	-
0,05	0,47	1,00E+00	-
0,1	0,45	1,00E+00	-
0,11	0,45	1,00E+00	-
0,07	0,72	6,99E-05	Yes
0,09	0,45	1,00E+00	-
0,1	0,45	1,00E+00	-
0,02	0,55	8,39E-02	-
0,03	0,53	3,03E-01	-
0,01	0,57	1,36E-02	Yes
0,04	0,48	1,00E+00	-

0,01	0,49	1,00E+00	-
0,09	0,46	1,00E+00	-
0,09	0,46	1,00E+00	-
0,09	0,45	1,00E+00	-
0,09	0,45	1,00E+00	-
0,14	0,43	1,00E+00	-
0,12	0,44	1,00E+00	-
0,12	0,44	1,00E+00	-
0,04	0,48	1,00E+00	-
0,13	0,43	1,00E+00	-
0,05	0,48	1,00E+00	-
0,11	0,92	2,31E-15	Yes
0,16	0,42	1,00E+00	-
0,01	0,61	2,23E-03	Yes
0,03	0,59	7,59E-02	-
0,04	0,48	1,00E+00	-
0,03	0,48	1,00E+00	-

Ellipro score 0.8, default radius 6. Epitope definition #2. Discontinuous Epitopes: Best by significance

antigen	epitope	antigen size	epitope size	number of	rank best	ebest	patch	TP	FN
1AFV:A	1afv_A_HL	151	14	3	0	6	0	14	
1FSK:A	1fsk_A_CB	159	17	5	0	4	0	17	
1H0D:C	1h0d_C_B/	123	17	3	2	7	6	11	
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	4	1	4	3	15	
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	16	5	3	9	6	10	
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	15	2	1	10	9	6	
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	18	3	0	3	0	18	
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	18	3	0	4	0	18	
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	17	1	0	7	2	15	
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	3	1	14	7	7	
1PKQ:E	1pkq_E_B/	139	17	2	0	4	0	17	
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	1	0	4	0	13	
1SY6:A	1sy6_A_HL	204	11	3	1	7	4	7	
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	4	3	0	6	2	2	
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	11	1	0	3	0	11	
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	3	0	3	0	14	
1ZA3:R	1za3_R_HL	134	15	2	0	4	2	13	
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	2	0	5	0	16	
1A14:N	1a14_N_HL	388	17	6	0	3	0	17	
1A14:N	1nca_N_HL	388	21	6	0	3	0	21	
1RJC:B	1bvk_C_B/	129	17	2	0	4	4	13	
1RJC:B	1jhl_A_HL	129	11	2	0	4	4	7	
1RJC:B	1ndg_C_B/	129	21	2	0	4	0	21	
1RJC:B	1p2c_C_B/	129	18	2	0	4	0	18	
1JPS:T	1jps_T_HL	219	0 no epitope predicted						
1AR1:B	1ar1_B_CL	298	16	2	0	30	0	16	
1EO8:A	1eo8_A_HL	328	15	4	0	33	0	15	
1EO8:A	1ken_A_HL	328	16	4	3	12	4	12	
1EO8:A	1qfu_A_HL	328	19	4	0	33	0	19	
1EO8:A	2vit_C_BA	328	18	4	0	33	0	18	
1EZV:E	1ezv_E_X/	185	17	3	2	6	3	14	
1G9M:G	1g9m_G_H/	321	12	6	4	23	4	8	
1G9M:G	2b4c_G_HL	321	12	6	0	3	0	12	
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	1	0	8	0	13	
1NFD:D	1nfd_D_HC	239	13	4	2	7	6	7	
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	18	3	1	5	5	13	
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	7	1	31	11	8	
1V7M:V	1v7m_V_H/	163	17	3	0	5	0	17	
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	17	2	0	7	0	17	
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	10	1	0	4	0	10	
1Z3G:B	1z3g_B_IM	186	17	3	1	17	9	8	
2AEP:A	2aep_A_HL	395	21	4	0	29	1	20	

discontinuous epitope		Average on all predict						
FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	TI1-spec (FP/AUC)	sens Fisher	Significant	TP_av	
6	131	0	0	0,04	0,48 1,00E+00	-		0
4	138	0	0	0,03	0,49 1,00E+00	-		0
1	105	0,35	0,86	0,01	0,67 1,87E-05	Yes		2
1	127	0,17	0,75	0,01	0,58 5,92E-03	Yes		1
3	137	0,38	0,67	0,02	0,68 3,10E-05	Yes		2
1	92	0,6	0,9	0,01	0,79 1,21E-08	Yes		4
3	139	0	0	0,02	0,49 1,00E+00	-		0
4	127	0	0	0,03	0,48 1,00E+00	-		0
5	101	0,12	0,29	0,05	0,54 2,49E-01	-		2
7	202	0,5	0,5	0,03	0,73 1,94E-06	Yes		2
4	118	0	0	0,03	0,48 1,00E+00	-		0
4	78	0	0	0,05	0,48 1,00E+00	-		0
3	190	0,36	0,57	0,02	0,67 1,51E-04	Yes		1
4	94	0,5	0,33	0,04	0,73 1,66E-02	Yes		1
3	91	0	0	0,03	0,48 1,00E+00	-		0
3	123	0	0	0,02	0,49 1,00E+00	-		0
2	117	0,13	0,5	0,02	0,56 6,17E-02	-		1
5	87	0	0	0,05	0,47 1,00E+00	-		0
3	368	0	0	0,01	0,5 1,00E+00	-		0
3	364	0	0	0,01	0,5 1,00E+00	-		0
0	112	0,24	1	0	0,62 2,16E-04	Yes		2
0	118	0,36	1	0	0,68 3,00E-05	Yes		2
4	104	0	0	0,04	0,48 1,00E+00	-		0
4	107	0	0	0,04	0,48 1,00E+00	-		0
30	252	0	0	0,11	0,45 1,00E+00	-		0
33	280	0	0	0,11	0,45 1,00E+00	-		0
8	304	0,25	0,33	0,03	0,61 1,49E-03	Yes		1
33	276	0	0	0,11	0,45 1,00E+00	-		0
33	277	0	0	0,11	0,45 1,00E+00	-		0
3	165	0,18	0,5	0,02	0,58 1,10E-02	Yes		1
19	290	0,33	0,17	0,06	0,64 6,81E-03	Yes		0
3	306	0	0	0,01	0,5 1,00E+00	-		0
8	103	0	0	0,07	0,46 1,00E+00	-		0
1	225	0,46	0,86	0	0,73 4,82E-08	Yes		1
0	84	0,28	1	0	0,64 1,03E-04	Yes		1
20	413	0,58	0,35	0,05	0,77 1,28E-09	Yes		1
5	141	0	0	0,03	0,48 1,00E+00	-		0
7	81	0	0	0,08	0,46 1,00E+00	-		0
4	65	0	0	0,06	0,47 1,00E+00	-		0
8	161	0,53	0,53	0,05	0,74 6,99E-07	Yes		3
28	346	0,05	0,03	0,07	0,49 1,00E+00	-		0

ed epitopes.

FN_av	FP_av	TN_av	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	1- spec (1-TN)	AUC (FAUC)	sens Fisher	Significant?
13	8	128	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
17	4	137	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
15	3	102	0,12	0,4	0,03	0,54	1,42E-01	-
16	5	122	0,06	0,17	0,04	0,51	5,36E-01	-
14	3	136	0,12	0,4	0,02	0,55	8,33E-02	-
10	5	87	0,29	0,44	0,05	0,62	1,68E-02	Yes
17	5	136	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-
17	4	126	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
15	5	101	0,12	0,29	0,05	0,54	2,49E-01	-
11	8	200	0,15	0,2	0,04	0,56	1,10E-01	-
17	3	118	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
13	4	78	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-
9	5	187	0,1	0,17	0,03	0,54	2,66E-01	-
3	3	94	0,25	0,25	0,03	0,61	1,51E-01	-
11	3	91	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
13	3	122	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-
14	4	115	0,07	0,2	0,03	0,52	4,53E-01	-
16	5	87	0	0	0,05	0,47	1,00E+00	-
17	10	360	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
21	10	356	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
14	1	111	0,12	0,67	0,01	0,56	4,10E-02	Yes
9	1	116	0,18	0,67	0,01	0,59	1,93E-02	Yes
21	3	104	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
18	3	107	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-
16	18	263	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
15	15	297	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-
15	14	297	0,06	0,07	0,05	0,51	5,37E-01	-
18	15	293	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-
18	15	294	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-
16	9	159	0,06	0,1	0,05	0,5	1,00E+00	-
11	10	299	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
11	10	298	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-
13	8	103	0	0	0,07	0,46	1,00E+00	-
11	11	214	0,08	0,08	0,05	0,52	4,72E-01	-
16	3	81	0,06	0,25	0,04	0,51	5,28E-01	-
17	8	424	0,06	0,11	0,02	0,52	3,10E-01	-
17	6	140	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-
17	5	83	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
10	4	65	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-
14	9	159	0,18	0,25	0,05	0,56	8,44E-02	-
20	16	357	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-

Fist best score								
first patch ϵ TP	FN	FP	TN		sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+FN))	1-spec (FP/(FP+TN))	AUC (sens+ppv)/2
6	0	14	6	131	0	0	0,04	0,48
4	0	17	4	138	0	0	0,03	0,49
7	0	17	7	99	0	0	0,07	0,47
15	2	16	13	115	0,11	0,13	0,1	0,5
3	0	16	3	137	0	0	0,02	0,49
10	0	15	10	83	0	0	0,11	0,45
3	0	18	3	139	0	0	0,02	0,49
4	0	18	4	127	0	0	0,03	0,48
7	2	15	5	101	0,12	0,29	0,05	0,54
14	0	14	14	195	0	0	0,07	0,47
4	0	17	4	118	0	0	0,03	0,48
4	0	13	4	78	0	0	0,05	0,48
10	0	11	10	183	0	0	0,05	0,47
6	2	2	4	94	0,5	0,33	0,04	0,73
3	0	11	3	91	0	0	0,03	0,48
3	0	14	3	123	0	0	0,02	0,49
4	2	13	2	117	0,13	0,5	0,02	0,56
5	0	16	5	87	0	0	0,05	0,47
3	0	17	3	368	0	0	0,01	0,5
3	0	21	3	364	0	0	0,01	0,5
4	4	13	0	112	0,24	1	0	0,62
4	4	7	0	118	0,36	1	0	0,68
4	0	21	4	104	0	0	0,04	0,48
4	0	18	4	107	0	0	0,04	0,48
30	0	16	30	252	0	0	0,11	0,45
33	0	15	33	280	0	0	0,11	0,45
33	0	16	33	279	0	0	0,11	0,45
33	0	19	33	276	0	0	0,11	0,45
33	0	18	33	277	0	0	0,11	0,45
5	0	17	5	163	0	0	0,03	0,49
3	0	12	3	306	0	0	0,01	0,5
3	0	12	3	306	0	0	0,01	0,5
8	0	13	8	103	0	0	0,07	0,46
24	0	13	24	202	0	0	0,11	0,45
3	0	18	3	81	0	0	0,04	0,48
10	0	19	10	423	0	0	0,02	0,49
5	0	17	5	141	0	0	0,03	0,48
7	0	17	7	81	0	0	0,08	0,46
4	0	10	4	65	0	0	0,06	0,47
6	0	17	6	163	0	0	0,04	0,48
29	1	20	28	346	0,05	0,03	0,07	0,49

Second best score							
Fisher	Significant	second pat TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+TN))
1,00E+00 -		12	1	13	11	126	0,07
1,00E+00 -		5	0	17	5	137	0
1,00E+00 -		3	0	17	2	104	0
8,75E-01 -		4	3	15	1	127	0,17
1,00E+00 -		4	4	12	0	140	0,25
1,00E+00 -		10	9	6	1	92	0,6
1,00E+00 -		8	1	17	7	135	0,06
1,00E+00 -		3	0	18	3	128	0
2,49E-01 -							
1,00E+00 -		14	7	7	7	202	0,5
1,00E+00 -		3	0	17	3	119	0
1,00E+00 -							
1,00E+00 -		7	4	7	3	190	0,36
1,66E-02 Yes		3	0	4	3	95	0
1,00E+00 -							
1,00E+00 -		3	0	14	3	123	0
6,17E-02 -		6	0	15	6	113	0
1,00E+00 -		5	0	16	5	87	0
1,00E+00 -		6	0	17	6	365	0
1,00E+00 -		6	0	21	6	361	0
2,16E-04 Yes		3	1	16	2	110	0,06
3,00E-05 Yes		3	0	11	3	115	0
1,00E+00 -		3	0	21	3	105	0
1,00E+00 -		3	0	18	3	108	0
1,00E+00 -		7	0	16	7	275	0
1,00E+00 -		3	0	15	3	310	0
1,00E+00 -		3	0	16	3	309	0
1,00E+00 -		3	1	18	2	307	0,05
1,00E+00 -		3	0	18	3	307	0
1,00E+00 -		19	0	17	19	149	0
1,00E+00 -		11	0	12	11	298	0
1,00E+00 -		11	0	12	11	298	0
1,00E+00 -							
1,00E+00 -		4	0	13	4	222	0
1,00E+00 -		5	5	13	0	84	0,28
1,00E+00 -		31	11	8	20	413	0,58
1,00E+00 -		8	0	17	8	138	0
1,00E+00 -		3	0	17	3	85	0
1,00E+00 -							
1,00E+00 -		17	9	8	8	161	0,53
1,00E+00 -		10	0	21	10	364	0

1-spec	FP.AUC	(sens	Fisher	Significant?
0,08	0,5	1,00E+00	-	
0,04	0,48	1,00E+00	-	
0,02	0,49	1,00E+00	-	
0,01	0,58	5,92E-03	Yes	
0	0,62	7,67E-05	Yes	
0,01	0,79	1,21E-08	Yes	
0,05	0,5	1,00E+00	-	
0,02	0,49	1,00E+00	-	
0,03	0,73	1,94E-06	Yes	
0,02	0,49	1,00E+00	-	
0,02	0,67	1,51E-04	Yes	
0,03	0,48	1,00E+00	-	
0,02	0,49	1,00E+00	-	
0,05	0,47	1,00E+00	-	
0,05	0,47	1,00E+00	-	
0,02	0,49	1,00E+00	-	
0,02	0,49	1,00E+00	-	
0,02	0,52	3,48E-01	-	
0,03	0,49	1,00E+00	-	
0,03	0,49	1,00E+00	-	
0,03	0,49	1,00E+00	-	
0,02	0,49	1,00E+00	-	
0,01	0,5	1,00E+00	-	
0,01	0,5	1,00E+00	-	
0,01	0,52	1,64E-01	-	
0,01	0,5	1,00E+00	-	
0,11	0,44	1,00E+00	-	
0,04	0,48	1,00E+00	-	
0,04	0,48	1,00E+00	-	
0,02	0,49	1,00E+00	-	
0	0,64	1,03E-04	Yes	
0,05	0,77	1,28E-09	Yes	
0,05	0,47	1,00E+00	-	
0,03	0,48	1,00E+00	-	
0,05	0,74	6,99E-07	Yes	
0,03	0,49	1,00E+00	-	

Ellipro score 0.9, default radius 6. Epitope definition #2. Discontinuous Epitopes: Best by significance

discontinuous epitope		Average on all predict						
FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	TI1-spec (FP/AUC)	(sens Fisher)	Significant?	TP_av	
5	132	0	0	0,04	0,48 1,00E+00	-	0	
4	138	0	0	0,03	0,49 1,00E+00	-	0	
7	99	0	0	0,07	0,47 1,00E+00	-	0	
3	137	0	0	0,02	0,49 1,00E+00	-	0	
3	90	0	0	0,03	0,48 1,00E+00	-	0	
3	139	0	0	0,02	0,49 1,00E+00	-	0	
3	128	0	0	0,02	0,49 1,00E+00	-	0	
4	102	0,12	0,33	0,04	0,54 1,93E-01	-	2	
1	208	0,36	0,83	0	0,68 2,64E-06	Yes	2	
4	118	0	0	0,03	0,48 1,00E+00	-	0	
4	78	0	0	0,05	0,48 1,00E+00	-	0	
2	191	0,09	0,33	0,01	0,54 1,54E-01	-	0	
3	95	0,25	0,25	0,03	0,61 1,50E-01	-	1	
3	123	0	0	0,02	0,49 1,00E+00	-	0	
4	367	0	0	0,01	0,49 1,00E+00	-	0	
4	363	0	0	0,01	0,49 1,00E+00	-	0	
19	263	0	0	0,07	0,47 1,00E+00	-	0	
11	302	0	0	0,04	0,48 1,00E+00	-	0	
11	301	0	0	0,04	0,48 1,00E+00	-	0	
11	298	0	0	0,04	0,48 1,00E+00	-	0	
11	299	0	0	0,04	0,48 1,00E+00	-	0	
5	163	0	0	0,03	0,49 1,00E+00	-	0	
5	304	0	0	0,02	0,49 1,00E+00	-	0	
5	304	0	0	0,02	0,49 1,00E+00	-	0	
5	106	0	0	0,05	0,48 1,00E+00	-	0	
3	81	0	0	0,04	0,48 1,00E+00	-	0	
18	415	0,37	0,28	0,04	0,66 2,15E-05	Yes	2	
6	140	0	0	0,04	0,48 1,00E+00	-	0	
5	83	0	0	0,06	0,47 1,00E+00	-	0	
3	66	0	0	0,04	0,48 1,00E+00	-	0	
1	168	0,47	0,89	0,01	0,73 6,85E-09	Yes	8	

ed epitopes.

FN_av	FP_av	TN_av	sens (TP/(TP+FN))		ppv (TP/(TP+FP))	1- spec (1-TN)	FAUC (sens + spec)/2	Fisher	Significant?
13	7	130	0	0	0,05	0,47	1,00E+00	-	
17	4	138	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-	
17	4	101	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-	
16	3	137	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-	
15	3	90	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-	
18	4	137	0	0	0,03	0,49	1,00E+00	-	
18	3	127	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-	
15	4	102	0,12	0,33	0,04	0,54	1,93E-01	-	
11	5	203	0,15	0,29	0,02	0,56	5,68E-02	-	
17	4	118	0	0	0,03	0,48	1,00E+00	-	
13	4	78	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-	
10	3	190	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-	
3	3	95	0,25	0,25	0,03	0,61	1,50E-01	-	
14	3	123	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-	
17	4	367	0	0	0,01	0,49	1,00E+00	-	
21	4	363	0	0	0,01	0,49	1,00E+00	-	
16	19	263	0	0	0,07	0,47	1,00E+00	-	
15	7	305	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-	
16	7	304	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-	
19	7	301	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-	
18	7	302	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-	
17	9	159	0	0	0,05	0,47	1,00E+00	-	
12	6	303	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-	
12	6	303	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	-	
13	5	106	0	0	0,05	0,48	1,00E+00	-	
18	3	81	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-	
16	9	423	0,11	0,18	0,02	0,55	6,71E-02	-	
17	6	140	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-	
17	5	83	0	0	0,06	0,47	1,00E+00	-	
10	3	66	0	0	0,04	0,48	1,00E+00	-	
9	1	168	0,47	0,89	0,01	0,73	6,85E-09	Yes	

Fist best score first patch ϵ TP	FN	FP	TN		sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+TN))	1-spec (FP/(FP+TN))	FPAUC (sens+spec)/2	(sens+spec)/2
5	0	14	5	132	0	0	0,04	0,48	
4	0	17	4	138	0	0	0,03	0,49	
7	0	17	7	99	0	0	0,07	0,47	
3	0	16	3	137	0	0	0,02	0,49	
3	0	15	3	90	0	0	0,03	0,48	
3	0	18	3	139	0	0	0,02	0,49	
3	0	18	3	128	0	0	0,02	0,49	
6	2	15	4	102	0,12	0,33	0,04	0,54	
10	0	14	10	199	0	0	0,05	0,48	
4	0	17	4	118	0	0	0,03	0,48	
4	0	13	4	78	0	0	0,05	0,48	
3	1	10	2	191	0,09	0,33	0,01	0,54	
4	1	3	3	95	0,25	0,25	0,03	0,61	
3	0	14	3	123	0	0	0,02	0,49	
4	0	17	4	367	0	0	0,01	0,49	
4	0	21	4	363	0	0	0,01	0,49	
19	0	16	19	263	0	0	0,07	0,47	
11	0	15	11	302	0	0	0,04	0,48	
11	0	16	11	301	0	0	0,04	0,48	
11	0	19	11	298	0	0	0,04	0,48	
11	0	18	11	299	0	0	0,04	0,48	
5	0	17	5	163	0	0	0,03	0,49	
5	0	12	5	304	0	0	0,02	0,49	
5	0	12	5	304	0	0	0,02	0,49	
5	0	13	5	106	0	0	0,05	0,48	
3	0	18	3	81	0	0	0,04	0,48	
7	0	19	7	426	0	0	0,02	0,49	
6	0	17	6	140	0	0	0,04	0,48	
5	0	17	5	83	0	0	0,06	0,47	
3	0	10	3	66	0	0	0,04	0,48	
9	8	9	1	168	0,47	0,89	0,01	0,73	

Fisher	Second best score	Significant	second pat TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+TN))	
1,00E+00 -			10	1	13	9	128	0,07	0,1
1,00E+00 -									
1,00E+00 -			3	0	17	2	104	0	0
1,00E+00 -									
1,00E+00 -									
1,00E+00 -			6	0	18	6	136	0	0
1,00E+00 -			4	0	18	4	127	0	0
1,93E-01 -									
1,00E+00 -			6	5	9	1	208	0,36	0,83
1,00E+00 -									
1,00E+00 -									
1,54E-01 -			4	0	11	4	189	0	0
1,50E-01 -									
1,00E+00 -			3	0	14	3	123	0	0
1,00E+00 -									
1,00E+00 -									
1,00E+00 -									
1,00E+00 -									
1,00E+00 -									
1,00E+00 -			5	0	15	5	308	0	0
1,00E+00 -			5	0	16	5	307	0	0
1,00E+00 -			5	0	19	5	304	0	0
1,00E+00 -			5	0	18	5	305	0	0
1,00E+00 -			13	0	17	13	155	0	0
1,00E+00 -			5	0	12	5	304	0	0
1,00E+00 -			5	0	12	5	304	0	0
1,00E+00 -									
1,00E+00 -									
1,00E+00 -			3	0	19	3	430	0	0
1,00E+00 -									
1,00E+00 -									
1,00E+00 -									
6,85E-09 Yes									

1-spec	FP.AUC	(sens	Fisher	Significant?
--------	--------	-------	--------	--------------

0,07	0,5	1,00E+00	-
------	-----	----------	---

0,02	0,49	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0,04	0,48	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0,03	0,48	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0	0,68	2,64E-06	Yes
---	------	----------	-----

0,02	0,49	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0,02	0,49	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0,02	0,49	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0,02	0,49	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0,02	0,49	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0,02	0,49	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0,08	0,46	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0,02	0,49	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0,02	0,49	1,00E+00	-
------	------	----------	---

0,01	0,5	1,00E+00	-
------	-----	----------	---

antigen	epitope	antigen size	epitope size	DiscoTope (score)	PIER	ConSurf	ConSurf (confidence)
				AUC	AUC	AUC	AUC
2ADF:A	2adf_A_HL	196	15	0,53	0,99	0,62	0,62
2ADF:A	1fe8_B_IM	196	20	0,81	0,84	0,67	0,67
1AFV:A	1afv_A_HL	151	14	0,53	0,22	0,48	0,41
1BGX:T	1bgx_T_HL	832	52	0,74	0,61	0,48	0,50
1E6J:P	1e6j_P_HL	210	12	0,23	0,49	0,43	0,39
1EGJ:A	1egj_A_HL	101	11	0,88	0,91	no data	no data
1FSK:A	1fsk_A_CB	159	17	0,82	0,15	0,31	0,33
1H0D:C	1h0d_C_BA	123	17	0,50	0,75	0,51	0,51
1I9R:A	1i9r_A_HL	146	18	0,71	0,53	0,72	0,74
1IQD:C	1iqd_C_BA	156	16	0,78	0,90	0,80	0,81
1JRH:I	1jrh_I_HL	108	15	0,62	0,43	0,62	no scores for ep
1LK3:A	1lk3_A_HL	160	18	0,81	0,29	0,72	0,76
1MHP:B	1mhp_B_XY	192	19	0,81	0,85	0,44	0,42
1NL0:G	1nl0_G_HL	51	7	0,61	0,77	no data	no data
1NSN:S	1nsn_S_HL	149	18	0,58	0,24	0,75	0,78
1OAZ:A	1oaz_A_HL	123	17	0,61	0,83	0,33	0,25
1ORQ:C	1orq_C_BA	223	14	0,48	0,35	0,60	0,61
1ORS:C	1ors_C_BA	132	10	0,50	0,41	no data	no data
1PKQ:E	1pkq_E_BA	139	17	0,71	0,52	0,69	0,70
1RJL:C	1rjl_C_BA	95	13	0,73	0,36	0,51	0,48
1SY6:A	1sy6_A_HL	204	11	0,82	0,17	0,45	no scores for ep
1TZI:V	1tzi_V_BA	102	4	0,52	0,80	0,49	0,55
1WEJ:F	1wej_F_HL	105	11	0,47	0,33	0,82	0,83
1YJD:C	1yjd_C_HL	140	14	0,58	0,56	0,53	0,54
1YNT:F	1ynt_F_BA	254	19	0,49	0,69	no data	no data
1YY9:A	1yy9_A_DC	624	20	0,68	0,54	0,74	0,75
1ZA3:R	1za3_R_HL	134	15	0,69	0,71	0,72	0,77
1ZTX:E	1ztx_E_HL	108	16	0,47	0,27	0,63	0,63
2JEL:P	2jel_P_HL	85	15	0,66	0,42	0,70	0,70
1A14:N	1a14_N_HL	388	17	0,87	0,31	0,75	0,76
1A14:N	1nca_N_HL	388	21	0,84	0,44	0,67	0,69
1RJC:B	1bvk_C_BA	129	17	0,66	0,39	0,62	0,61
1RJC:B	1jhl_A_HL	129	11	0,79	0,55	0,73	0,73
1RJC:B	1ndg_C_BA	129	21	0,74	0,54	0,66	0,65
1RJC:B	1p2c_C_BA	129	18	0,74	0,30	0,55	0,57
1JPS:T	1jps_T_HL	219	21	0,62	0,51	0,63	0,72
1AR1:B	1ar1_B_CD	298	16	0,57	0,13	0,62	0,64
1EO8:A	1eo8_A_HL	328	15	0,27	0,57	0,64	0,65
1EO8:A	1ken_A_HL	328	16	0,76	0,68	0,61	0,62
1EO8:A	1qfu_A_HL	328	19	0,38	0,46	0,64	0,64
1EO8:A	2vit_C_BA	328	18	0,58	0,49	0,56	0,63
1EZV:E	1ezv_E_XY	185	17	0,85	0,16	0,62	0,64
1OSP:O	1osp_O_HL	257	19	0,76	0,10	0,41	0,38
1OSP:O	1fj1_F_BA	257	17	0,68	0,83	0,50	0,50
1FNS:A	1fns_A_HL	196	12	0,92	0,50	0,57	0,57
1G9M:G	1g9m_G_HL	321	12	0,44	0,83	0,49	0,48
1G9M:G	2b4c_G_HL	321	17	0,43	0,87	0,46	0,44
1R3J:C	1r3j_C_BA	124	13	0,72	0,16	0,81	0,81
1N8Z:C	1n8z_C_BA	607	17	0,59	0,70	0,46	0,46
1N8Z:C	1s78_B_FE	607	23	0,55	0,84	0,56	0,57

1NFD:D	1nfd_D_HG	239	13	0,88	0,10	0,73	0,71
1TQB:A	1tqb_A_BC	102	18	0,59	0,56	0,42	0,44
1TXV:A	1txv_A_HL	452	19	0,87	0,36	0,88	0,89
1V7M:V	1v7m_V_HL	163	17	0,47	0,33	0,59	no scores for ep
1XIW:A	1xiw_A_DC	105	18	0,87	0,16	0,76	0,90
1XIW:F	1xiw_F_DC	79	10	0,59	0,31	0,65	0,74
1Z3G:A	1z3g_A_HL	186	19	0,66	0,52	0,65	0,59
2AEP:A	2aep_A_HL	395	21	0,70	0,32	0,50	0,51
1R0A:B	1r0a_B_HL	429	11	0,94	0,88	0,51	0,54

- Epitopes for which the average ConSurf score was ≥ 0.0 , while for the rest of the protein (non-epitope) < 0.0 , and
& - Epitopes used in the DiscoTope training set are indicated by an asterisk; those not used in the training set are indicated by a hash.

1

2

3

4

ConSurf	ProMate (s	ProMate (patch)									
#	AUC	patch size	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(	ppv (TP/(T	(1-spec)	I	AUC=(Se
*	0,88	no patch predicted									
*	0,65	no patch predicted									
*	0,60	3	0	14	3	134	0	0	0,02	0,49	
	0,56	no patch predicted									
	0,41	no patch predicted									
NA	0,84	11	3	8	8	82	0,27	0,27	0,09	0,59	
	0,54	16	0	17	16	126	0	0	0,11	0,44	
*	0,97	13	11	6	2	104	0,65	0,85	0,02	0,82	
*	0,43	13	0	18	13	115	0	0	0,10	0,45	
*	0,74	13	3	13	10	130	0,19	0,23	0,07	0,56	
*	0,49	10	1	14	9	84	0,07	0,1	0,10	0,49	
*	0,38	14	0	18	14	128	0	0	0,10	0,45	
	0,88	no patch predicted									
NA	0,16	4	0	7	4	40	0	0	0,09	0,45	
*	0,26	14	0	18	14	117	0	0	0,11	0,45	
	0,85	12	6	11	6	100	0,35	0,5	0,06	0,65	
*	0,55	23	0	14	23	186	0	0	0,11	0,44	
NA	0,96	13	6	4	7	115	0,6	0,46	0,06	0,77	
*	0,76	12	6	11	6	116	0,35	0,5	0,05	0,65	
	0,33	3	0	13	3	79	0	0	0,04	0,48	
itope resid	0,54	4	0	11	4	189	0	0	0,02	0,49	
	0,56	10	0	4	10	88	0	0	0,10	0,45	
*	0,33	11	0	11	11	83	0	0	0,12	0,44	
*	0,80	12	2	12	10	116	0,14	0,17	0,08	0,53	
NA	0,69	no patch predicted									
*	0,20	60	0	20	60	544	0	0	0,10	0,45	
*	0,61	10	2	13	8	111	0,13	0,2	0,07	0,53	
*	0,37	11	1	15	10	82	0,06	0,09	0,11	0,48	
*	0,59	no patch predicted									
*	0,38	39	0	17	38	333	0	0	0,10	0,45	
*	0,30	39	0	21	38	329	0	0	0,10	0,45	
*	0,66	13	0	17	13	99	0	0	0,12	0,44	
*	0,51	13	0	11	13	105	0	0	0,11	0,44	
*	0,66	13	6	15	7	101	0,29	0,46	0,06	0,61	
*	0,48	13	2	16	11	100	0,11	0,15	0,10	0,51	
*	0,77	10	1	20	9	189	0,05	0,1	0,05	0,50	
*	0,15	24	0	16	24	258	0	0	0,09	0,46	
*	0,67	4	0	15	4	309	0	0	0,01	0,49	
*	0,59	4	0	16	4	308	0	0	0,01	0,49	
*	0,60	4	0	19	4	305	0	0	0,01	0,49	
*	0,48	4	0	18	4	306	0	0	0,01	0,49	
*	0,23	19	0	17	19	149	0	0	0,11	0,44	
	0,82	no patch predicted									
	0,62	no patch predicted									
*	0,40	no patch predicted									
	0,68	31	0	12	31	278	0	0	0,10	0,45	
	0,68	31	0	12	31	278	0	0	0,10	0,45	
*	0,53	10	0	13	10	101	0	0	0,09	0,45	
	0,82	58	4	13	54	536	0,24	0,07	0,09	0,57	
*	0,60	58	0	23	58	526	0	0	0,10	0,45	

*	0,34	16	0	13	16	210	0	0	0,07	0,46
	0,33	11	0	18	11	73	0	0	0,13	0,43
*	0,59	46	0	19	46	387	0	0	0,11	0,45
*	0,37	5	0	17	5	141	0	0	0,03	0,48
*	0,31	10	0	17	10	78	0	0	0,11	0,44
*	0,60	7	1	9	6	63	0,1	0,14	0,09	0,51
*	0,34	18	2	15	16	153	0,12	0,11	0,09	0,51
*	0,43	39	0	21	39	335	0	0	0,10	0,45
	0,02	no patch predicted								

av	0,08	0,09	0,08	0,50
SD	0,15	0,18	0,03	0,08

SUM	57	692	772	8919
sens	0,08			
PPV	0,07			
1=spec	0,08			

re indicated by asterisk.
indicated by a hyphen.

1

	PPI-PRED (1st patch)										PPI-F
Fisher	1st patc	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(	ppv (TP/(T (1-spec)	IAUC=(SeFisher		2nd p	
1,00E+00	18	12	3	6	175	0,8	0,67	0,03	0,88	1,62E-12	22
	18	6	14	12	164	0,3	0,33	0,07	0,62	4,45E-03	22
	52	8	6	44	93	0,57	0,15	0,32	0,62	5,96E-02	23
	139	1	51	138	642	0,02	0,01	0,18	0,42	1,00E+00	81
	34	1	11	33	165	0,08	0,03	0,17	0,46	1,00E+00	29
9,80E-02	16	7	4	9	81	0,64	0,44	0,10	0,77	1,54E-04	16
1,00E+00	60	10	7	50	92	0,59	0,17	0,35	0,62	5,30E-02	26
5,66E-10	22	1	16	21	85	0,06	0,05	0,20	0,43	1,00E+00	10
1,00E+00	13	0	18	13	115	0	0	0,10	0,45	1,00E+00	16
1,33E-01	18	0	16	18	122	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	20
1,00E+00	18	10	5	8	85	0,67	0,56	0,09	0,79	2,29E-06	15
1,00E+00	29	0	18	29	113	0	0	0,20	0,40	1,00E+00	21
	26	0	19	26	147	0	0	0,15	0,42	1,00E+00	24
1,00E+00	7	0	7	7	37	0	0	0,16	0,42	1,00E+00	5
1,00E+00	25	0	18	25	106	0	0	0,19	0,40	1,00E+00	21
1,61E-03	31	10	7	21	85	0,59	0,32	0,20	0,70	1,53E-03	27
1,00E+00	73	0	14	73	136	0	0	0,35	0,33	1,00E+00	51
4,52E-05	28	0	10	28	94	0	0	0,23	0,39	1,00E+00	23
8,15E-04	16	5	12	11	111	0,29	0,31	0,09	0,60	2,82E-02	10
1,00E+00	22	0	13	22	60	0	0	0,27	0,37	1,00E+00	23
1,00E+00	26	0	11	26	167	0	0	0,13	0,43	1,00E+00	30
1,00E+00	26	0	4	26	72	0	0	0,27	0,37	1,00E+00	10
1,00E+00	10	0	11	10	84	0	0	0,11	0,45	1,00E+00	12
3,43E-01	11	7	7	4	122	0,5	0,64	0,03	0,73	5,21E-06	16
	29	0	19	29	206	0	0	0,12	0,44	1,00E+00	26
1,00E+00	49	0	20	49	555	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	89
3,10E-01	17	7	8	10	109	0,47	0,41	0,08	0,69	5,32E-04	18
1,00E+00	13	0	16	13	79	0	0	0,14	0,43	1,00E+00	19
	12	0	15	12	58	0	0	0,17	0,41	1,00E+00	24
1,00E+00	29	0	17	29	342	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	38
1,00E+00	29	0	21	29	338	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	38
1,00E+00	23	2	15	21	91	0,12	0,09	0,19	0,47	1,00E+00	13
1,00E+00	23	3	8	20	98	0,27	0,13	0,17	0,55	3,08E-01	13
7,47E-03	23	8	13	15	93	0,38	0,35	0,14	0,62	1,35E-02	13
8,72E-01	23	3	15	20	91	0,17	0,13	0,18	0,49	1,00E+00	13
1,00E+00	34	3	18	31	167	0,14	0,09	0,16	0,49	1,00E+00	24
1,00E+00	31	1	15	30	252	0,06	0,03	0,11	0,48	1,00E+00	24
1,00E+00	47	0	15	47	266	0	0	0,15	0,42	1,00E+00	39
1,00E+00	47	11	5	36	276	0,69	0,23	0,12	0,79	4,38E-07	39
1,00E+00	47	0	19	47	262	0	0	0,15	0,42	1,00E+00	39
1,00E+00	47	6	12	41	269	0,33	0,13	0,13	0,60	3,02E-02	39
1,00E+00	28	0	17	28	140	0	0	0,17	0,42	1,00E+00	19
	61	1	18	60	178	0,05	0,02	0,25	0,40	1,00E+00	51
	61	0	17	61	179	0	0	0,25	0,37	1,00E+00	51
	20	0	12	20	164	0	0	0,11	0,45	1,00E+00	16
1,00E+00	67	8	4	59	250	0,67	0,12	0,19	0,74	6,05E-04	39
1,00E+00	67	9	3	58	251	0,75	0,13	0,19	0,78	6,10E-05	39
1,00E+00	17	0	13	17	94	0	0	0,15	0,42	1,00E+00	21
6,95E-02	13	5	12	8	582	0,29	0,38	0,01	0,64	1,03E-05	73
1,00E+00	13	0	23	13	571	0	0	0,02	0,49	1,00E+00	73

1,00E+00	33	0	13	33	193	0	0	0,15	0,43	1,00E+00	37
1,00E+00	17	5	13	12	72	0,28	0,29	0,14	0,57	1,48E-01	14
1,00E+00	57	0	19	57	376	0	0	0,13	0,43	1,00E+00	37
1,00E+00	15	0	17	15	131	0	0	0,10	0,45	1,00E+00	21
1,00E+00	16	0	17	16	72	0	0	0,18	0,41	1,00E+00	14
1,00E+00	12	0	10	12	57	0	0	0,17	0,41	1,00E+00	6
5,09E-01	35	6	11	29	140	0,35	0,17	0,17	0,59	7,33E-02	59
1,00E+00	31	0	21	31	343	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	33
	96	8	3	88	330	0,73	0,08	0,21	0,76	4,43E-04	83
						av	0,18	0,11	0,15	0,52	
						SD	0,26	0,17	0,07	0,14	

SUM 164 796 1756 10828
 sens 0,17
 PPV 0,09
 1=spec 0,14

|

|

PRED (2nd patch)									PPI-PRED (3rd patch)											
TP	FN	FP	TN	sens (Tppv (TF(1-spec))		IAUC=(SeFisher			3d p:	TP	FN	FP	TN	sens ('ppv (TP						
0	15	22	159	0	0	0,12	0,44	1,00E+00	16	1	14	15	166	0,07	0,06					
0	20	22	154	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	16	10	10	6	170	0,5	0,62					
0	14	23	114	0	0	0,17	0,42	1,00E+00	39	2	12	37	100	0,14	0,05					
0	52	81	699	0	0	0,10	0,45	1,00E+00	149	17	35	132	648	0,33	0,11					
12	0	17	181	1	0,41	0,09	0,96	4,65E-12	43	0	12	43	155	0	0					
0	11	16	74	0	0	0,18	0,41	1,00E+00	18	0	11	18	72	0	0					
0	17	26	116	0	0	0,18	0,41	1,00E+00	no patch predicted											
10	7	0	106	0,59	1	0,00	0,80	1,30E-10	no patch predicted											
1	17	15	113	0,06	0,06	0,12	0,47	1,00E+00	19	0	18	19	109	0	0					
0	16	20	120	0	0	0,14	0,43	1,00E+00	22	0	16	22	118	0	0					
0	15	15	78	0	0	0,16	0,42	1,00E+00	15	2	13	13	80	0,13	0,13					
0	18	21	121	0	0	0,15	0,43	1,00E+00	no patch predicted											
4	15	20	153	0,21	0,17	0,12	0,55	1,98E-01	27	9	10	18	155	0,47	0,33					
0	7	5	39	0	0	0,11	0,44	1,00E+00	10	0	7	10	34	0	0					
7	11	14	117	0,39	0,33	0,11	0,64	4,77E-03	24	4	14	20	111	0,22	0,17					
0	17	27	79	0	0	0,25	0,37	1,00E+00	27	6	11	21	85	0,35	0,22					
7	7	44	165	0,5	0,14	0,21	0,64	2,03E-02	33	0	14	33	176	0	0					
7	3	16	106	0,7	0,3	0,13	0,78	1,74E-04	24	0	10	24	98	0	0					
0	17	10	112	0	0	0,08	0,46	1,00E+00	13	0	17	13	109	0	0					
0	13	23	59	0	0	0,28	0,36	1,00E+00	14	0	13	14	68	0	0					
0	11	30	163	0	0	0,16	0,42	1,00E+00	20	0	11	20	173	0	0					
3	1	7	91	0,75	0,3	0,07	0,84	2,65E-03	18	0	4	18	80	0	0					
0	11	12	82	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	no patch predicted											
0	14	16	110	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	14	0	14	14	112	0	0					
15	4	11	224	0,79	0,58	0,05	0,87	4,23E-14	43	0	19	43	192	0	0					
0	20	89	515	0	0	0,15	0,43	1,00E+00	38	0	20	38	566	0	0					
0	15	18	101	0	0	0,15	0,42	1,00E+00	11	4	11	7	112	0,27	0,36					
3	13	16	76	0,19	0,16	0,17	0,51	8,24E-01	16	0	16	16	76	0	0					
0	15	24	46	0	0	0,34	0,33	1,00E+00	no patch predicted											
0	17	38	333	0	0	0,10	0,45	1,00E+00	33	6	11	27	344	0,35	0,18					
0	21	38	329	0	0	0,10	0,45	1,00E+00	33	11	10	22	345	0,52	0,33					
0	17	13	99	0	0	0,12	0,44	1,00E+00	17	8	9	9	103	0,47	0,47					
0	11	13	105	0	0	0,11	0,44	1,00E+00	17	1	10	16	102	0,09	0,06					
0	21	13	95	0	0	0,12	0,44	1,00E+00	17	4	17	13	95	0,19	0,24					
0	18	13	98	0	0	0,12	0,44	1,00E+00	17	0	18	17	94	0	0					
0	21	24	174	0	0	0,12	0,44	1,00E+00	20	4	17	16	182	0,19	0,2					
0	16	24	258	0	0	0,09	0,46	1,00E+00	31	0	16	31	251	0	0					
0	15	39	274	0	0	0,12	0,44	1,00E+00	56	13	2	43	270	0,87	0,23					
0	16	39	273	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	56	0	16	56	256	0	0					
0	19	39	270	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	56	16	3	40	269	0,84	0,29					
0	18	39	271	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	56	0	18	56	254	0	0					
0	17	19	149	0	0	0,11	0,44	1,00E+00	15	0	17	15	153	0	0					
0	19	51	187	0	0	0,21	0,39	1,00E+00	no patch predicted											
12	5	39	201	0,71	0,24	0,16	0,77	3,31E-06	no patch predicted											
0	12	16	168	0	0	0,09	0,46	1,00E+00	20	0	12	20	164	0	0					
0	12	39	270	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	24	0	12	24	285	0	0					
0	12	39	270	0	0	0,13	0,44	1,00E+00	24	0	12	24	285	0	0					
0	13	21	90	0	0	0,19	0,41	1,00E+00	18	0	13	18	93	0	0					
0	17	73	517	0	0	0,12	0,44	1,00E+00	56	9	8	47	543	0,53	0,16					
2	21	71	513	0,09	0,03	0,12	0,48	1,00E+00	56	0	23	56	528	0	0					

12	1	25	201	0,92	0,32	0,11	0,90	3,95E-10	24	0	13	24	202	0	0
0	18	14	70	0	0	0,17	0,42	1,00E+00	21	12	6	9	75	0,67	0,57
0	19	37	396	0	0	0,09	0,46	1,00E+00	37	0	19	37	396	0	0
3	14	18	128	0,18	0,14	0,12	0,53	3,79E-01	19	6	11	13	133	0,35	0,32
2	15	12	76	0,12	0,14	0,14	0,49	1,00E+00	7	0	17	7	81	0	0
0	10	6	63	0	0	0,09	0,46	1,00E+00	13	1	9	12	57	0,1	0,08
0	17	59	110	0	0	0,35	0,33	1,00E+00	15	0	17	15	154	0	0
10	11	23	351	0,48	0,3	0,06	0,71	7,73E-07	33	4	17	29	345	0,19	0,12
0	11	83	335	0	0	0,20	0,40	1,00E+00	58	0	11	58	360	0	0
						0,14	0,50								
						0,06	0,15								

		overall	PPI-PRED (best patch)								
(1-spec)	[Fisher	patch	patch TP	FN	FP	TN	sens (TP/(	ppv (TP/(T	(1-spec)	[AUC=(Se	
0,08	1,00E+00	1	18	12	3	6	175	0,8	0,67	0,03	0,88
0,03	5,98E-08	1	18	6	14	12	164	0,3	0,33	0,07	0,62
0,27	1,00E+00	1	52	8	6	44	93	0,57	0,15	0,32	0,62
0,17	5,75E-03	3	149	17	35	132	648	0,33	0,11	0,17	0,58
0,22	1,00E+00	2	29	12	0	17	181	1	0,41	0,09	0,96
0,20	1,00E+00	1	16	7	4	9	81	0,64	0,44	0,10	0,77
		1	60	10	7	50	92	0,59	0,17	0,35	0,62
		2	10	10	7	0	106	0,59	1	0,00	0,80
0,15	1,00E+00	1	13	0	18	13	115	0	0	0,10	0,45
0,16	1,00E+00	1	18	0	16	18	122	0	0	0,13	0,44
0,14	1,00E+00	1	18	10	5	8	85	0,67	0,56	0,09	0,79
		1	29	0	18	29	113	0	0	0,20	0,40
0,10	2,08E-04	3	27	9	10	18	155	0,47	0,33	0,10	0,68
0,23	1,00E+00	1	7	0	7	7	37	0	0	0,16	0,42
0,15	3,23E-01	2	21	7	11	14	117	0,39	0,33	0,11	0,64
0,20	1,33E-01	1	31	10	7	21	85	0,59	0,32	0,20	0,70
0,16	1,00E+00	2	51	7	7	44	165	0,5	0,14	0,21	0,64
0,20	1,00E+00	2	23	7	3	16	106	0,7	0,3	0,13	0,78
0,11	1,00E+00	1	16	5	12	11	111	0,29	0,31	0,09	0,60
0,17	1,00E+00	1	22	0	13	22	60	0	0	0,27	0,37
0,10	1,00E+00	1	26	0	11	26	167	0	0	0,13	0,43
0,18	1,00E+00	2	10	3	1	7	91	0,75	0,3	0,07	0,84
		1	10	0	11	10	84	0	0	0,11	0,45
0,11	1,00E+00	1	11	7	7	4	122	0,5	0,64	0,03	0,73
0,18	1,00E+00	2	26	15	4	11	224	0,79	0,58	0,05	0,87
0,06	1,00E+00	1	49	0	20	49	555	0	0	0,08	0,46
0,06	2,14E-02	1	17	7	8	10	109	0,47	0,41	0,08	0,69
0,17	1,00E+00	1	13	0	16	13	79	0	0	0,14	0,43
		1	12	0	15	12	58	0	0	0,17	0,41
0,07	1,51E-03	3	33	6	11	27	344	0,35	0,18	0,07	0,64
0,06	6,02E-08	3	33	11	10	22	345	0,52	0,33	0,06	0,73
0,08	2,06E-04	3	17	8	9	9	103	0,47	0,47	0,08	0,69
0,14	1,00E+00	1	23	3	8	20	98	0,27	0,13	0,17	0,55
0,12	2,88E-01	1	23	8	13	15	93	0,38	0,35	0,14	0,62
0,15	1,00E+00	1	23	3	15	20	91	0,17	0,13	0,18	0,49
0,08	1,09E-01	1	34	3	18	31	167	0,14	0,09	0,16	0,49
0,11	1,00E+00	1	31	1	15	30	252	0,06	0,03	0,11	0,48
0,14	2,36E-09	3	56	13	2	43	270	0,87	0,23	0,14	0,87
0,18	1,00E+00	1	47	11	5	36	276	0,69	0,23	0,12	0,79
0,13	4,63E-11	3	56	16	3	40	269	0,84	0,29	0,13	0,86
0,18	1,00E+00	1	47	6	12	41	269	0,33	0,13	0,13	0,60
0,09	1,00E+00	1	28	0	17	28	140	0	0	0,17	0,42
		1	61	1	18	60	178	0,05	0,02	0,25	0,40
		2	51	12	5	39	201	0,71	0,24	0,16	0,77
0,11	1,00E+00	1	20	0	12	20	164	0	0	0,11	0,45
0,08	1,00E+00	1	67	8	4	59	250	0,67	0,12	0,19	0,74
0,08	1,00E+00	1	67	9	3	58	251	0,75	0,13	0,19	0,78
0,16	1,00E+00	1	17	0	13	17	94	0	0	0,15	0,42
0,08	3,52E-06	1	13	5	12	8	582	0,29	0,38	0,01	0,64
0,10	1,00E+00	1	13	0	23	13	571	0	0	0,02	0,49

0,11	1,00E+00	2	37	12	1	25	201	0,92	0,32	0,11	0,90
0,11	2,23E-06	3	21	12	6	9	75	0,67	0,57	0,11	0,78
0,09	1,00E+00	1	57	0	19	57	376	0	0	0,13	0,43
0,09	6,19E-03	3	19	6	11	13	133	0,35	0,32	0,09	0,63
0,08	1,00E+00	1	16	0	17	16	72	0	0	0,18	0,41
0,17	1,00E+00	1	12	0	10	12	57	0	0	0,17	0,41
0,09	1,00E+00	1	35	6	11	29	140	0,35	0,17	0,17	0,59
0,08	8,73E-02	2	33	10	11	23	351	0,48	0,3	0,06	0,71
0,14	1,00E+00	1	96	8	3	88	330	0,73	0,08	0,21	0,76
0,13							av	0,37	0,22	0,13	0,62
0,05							SD	0,31	0,22	0,07	0,16

Vertical line 1

Vertical line 2

	PatchDock 1st model								
Fisher	1st patch sTP	FN	FP	TN	sens (TP/(1ppv (TP/(TIspec (1-FPACC=(				
1,62E-12	20	0	15	20	161	0	0	0,89	0,82
4,45E-03	19	0	20	19	157	0	0	0,89	0,80
5,96E-02	24	6	8	18	119	0,43	0,25	0,87	0,83
5,75E-03	53	41	11	12	768	0,79	0,77	0,98	0,97
4,65E-12	30	0	12	30	168	0	0	0,85	0,80
1,54E-04	28	3	8	25	65	0,27	0,11	0,72	0,67
5,30E-02	32	10	7	22	120	0,59	0,31	0,85	0,82
1,30E-10	27	0	17	27	79	0	0	0,75	0,64
1,00E+00	22	3	15	19	109	0,17	0,14	0,85	0,77
1,00E+00	35	5	11	30	110	0,31	0,14	0,79	0,74
2,29E-06	26	8	7	18	75	0,53	0,31	0,81	0,77
1,00E+00	21	2	16	19	123	0,11	0,1	0,87	0,78
2,08E-04	23	14	5	9	164	0,74	0,61	0,95	0,93
1,00E+00	8	2	5	6	38	0,29	0,25	0,86	0,78
4,77E-03	20	9	9	11	120	0,5	0,45	0,92	0,87
1,53E-03	24	11	6	13	93	0,65	0,46	0,88	0,85
2,03E-02	35	0	14	35	174	0	0	0,83	0,78
1,74E-04	25	2	8	23	99	0,2	0,08	0,81	0,77
2,82E-02	28	6	11	22	100	0,35	0,21	0,82	0,76
1,00E+00	21	4	9	17	65	0,31	0,19	0,79	0,73
1,00E+00	29	0	11	29	164	0	0	0,85	0,80
2,65E-03	28	0	4	28	70	0	0	0,71	0,69
1,00E+00	19	2	9	17	77	0,18	0,11	0,82	0,75
5,21E-06	22	8	6	14	112	0,57	0,36	0,89	0,86
4,23E-14	30	0	19	30	205	0	0	0,87	0,81
1,00E+00	43	0	20	43	561	0	0	0,93	0,90
5,32E-04	28	11	4	17	102	0,73	0,39	0,86	0,84
1,00E+00	25	6	10	19	73	0,38	0,24	0,79	0,73
1,00E+00	20	0	15	20	50	0	0	0,71	0,59
1,51E-03	26	3	14	23	348	0,18	0,12	0,94	0,90
6,02E-08	30	0	21	30	338	0	0	0,92	0,87
2,06E-04	22	1	16	21	91	0,06	0,05	0,81	0,71
3,08E-01	20	0	11	20	98	0	0	0,83	0,76
1,35E-02	22	12	9	10	98	0,57	0,55	0,91	0,85
1,00E+00	20	5	13	15	96	0,28	0,25	0,86	0,78
1,00E+00	27	1	20	26	172	0,05	0,04	0,87	0,79
1,00E+00	27	1	15	26	256	0,06	0,04	0,91	0,86
2,36E-09	33	0	15	33	280	0	0	0,89	0,85
4,38E-07	37	0	16	37	275	0	0	0,88	0,84
4,63E-11	32	0	19	32	277	0	0	0,9	0,84
3,02E-02	172	4	14	168	96	0,22	0,02	0,36	0,35
1,00E+00	33	3	14	30	138	0,18	0,09	0,82	0,76
1,00E+00	22	0	19	22	216	0	0	0,91	0,84
3,31E-06	27	0	17	27	213	0	0	0,89	0,83
1,00E+00	27	2	10	25	159	0,17	0,07	0,86	0,82
6,05E-04	44	1	11	43	266	0,08	0,02	0,86	0,83
6,10E-05	56	12	5	44	283	0,71	0,21	0,87	0,86
1,00E+00	26	4	9	22	89	0,31	0,15	0,8	0,75
1,03E-05	44	4	13	40	550	0,24	0,09	0,93	0,91
1,00E+00	35	0	23	35	566	0	0	0,94	0,91

3,95E-10	32	2	11	30	196	0,15	0,06	0,87	0,83
2,23E-06	19	10	8	9	75	0,56	0,53	0,89	0,83
1,00E+00	31	0	19	31	402	0	0	0,93	0,89
6,19E-03	18	7	10	11	135	0,41	0,39	0,92	0,87
1,00E+00	21	18	0	3	84	1	0,86	0,97	0,97
1,00E+00	19	1	9	18	51	0,1	0,05	0,74	0,66
7,33E-02	33	10	9	23	144	0,53	0,3	0,86	0,83
7,73E-07	31	0	21	31	343	0	0	0,92	0,87
4,43E-04	27	4	7	23	395	0,36	0,15	0,94	0,93

1

2

AUC=Fisher		PatchDock best model of top 10							
		first signific	patch size	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FP))	ppv (TP/(TP+TN))
0,45	1,00E+00	4	21	6	9	15	166	0,4	0,29
0,45	1,00E+00	2	21	8	12	13	163	0,4	0,38
0,65	1,09E-02	1	24	6	8	18	119	0,43	0,25
0,89	0,00E+00	1	53	41	11	12	768	0,79	0,77
0,43	1,00E+00	9	21	5	7	16	182	0,42	0,24
0,50	1,00E+00	1	28	3	8	25	65	0,27	0,11
0,72	2,11E-04	1	32	10	7	22	120	0,59	0,31
0,38	1,00E+00	10	18	9	8	9	97	0,53	0,5
0,51	5,34E-01	3	23	14	4	9	119	0,78	0,61
0,55	2,72E-01	5	18	15	1	3	137	0,94	0,83
0,67	8,22E-03	1	26	8	7	18	75	0,53	0,31
0,49	1,00E+00	2	21	12	6	9	133	0,67	0,57
0,85	1,14E-11	1	23	14	5	9	164	0,74	0,61
0,58	3,00E-01	1	8	2	5	6	38	0,29	0,25
0,71	5,33E-05	1	20	9	9	11	120	0,5	0,45
0,77	1,01E-05	1	24	11	6	13	93	0,65	0,46
0,42	1,00E+00	7	27	7	7	20	189	0,5	0,26
0,51	8,87E-01	4	25	6	4	19	103	0,6	0,24
0,59	9,44E-02	3	20	11	6	9	113	0,65	0,55
0,55	3,13E-01	6	23	9	4	14	68	0,69	0,39
0,43	1,00E+00	1	29	0	11	29	164	0	0
0,36	1,00E+00	1	28	0	4	28	70	0	0
0,50	9,03E-01	4	18	8	3	10	84	0,73	0,44
0,73	1,76E-04	1	22	8	6	14	112	0,57	0,36
0,44	1,00E+00	1	30	0	19	30	205	0	0
0,47	1,00E+00	1	43	0	20	43	561	0	0
0,80	4,12E-06	1	28	11	4	17	102	0,73	0,39
0,59	1,26E-01	3	19	7	9	12	80	0,44	0,37
0,36	1,00E+00	3	16	6	9	10	60	0,4	0,38
0,56	9,69E-02	6	24	8	9	16	355	0,47	0,33
0,46	1,00E+00	4	26	21	0	5	363	1	0,81
0,44	1,00E+00	1	22	1	16	21	91	0,06	0,05
0,42	1,00E+00	2	25	9	2	16	102	0,82	0,36
0,74	3,38E-06	1	22	12	9	10	98	0,57	0,55
0,57	1,18E-01	9	18	6	12	12	99	0,33	0,33
0,46	1,00E+00	2	38	12	9	26	172	0,57	0,32
0,49	1,00E+00	1	27	1	15	26	256	0,06	0,04
0,45	1,00E+00	1	33	0	15	33	280	0	0
0,44	1,00E+00	1	37	0	16	37	275	0	0
0,45	1,00E+00	7	23	4	15	19	290	0,21	0,17
0,29	1,00E+00	2	186	18	0	168	96	1	0,1
0,50	1,00E+00	7	17	9	8	8	160	0,53	0,53
0,46	1,00E+00	4	39	12	7	27	211	0,63	0,31
0,45	1,00E+00	5	33	10	7	23	217	0,59	0,3
0,52	5,13E-01	6	24	5	7	19	165	0,42	0,21
0,47	1,00E+00	2	39	4	8	35	274	0,33	0,1
0,79	3,80E-07	1	56	12	5	44	283	0,71	0,21
0,56	2,76E-01	5	13	11	2	2	109	0,85	0,85
0,59	2,85E-02	1	44	4	13	40	550	0,24	0,09
0,47	1,00E+00	1	35	0	23	35	566	0	0

0,51	5,41E-01	1	32	2	11	30	196	0,15	0,06
0,73	8,79E-05	1	19	10	8	9	75	0,56	0,53
0,47	1,00E+00	1	31	0	19	31	402	0	0
0,67	6,07E-04	1	18	7	10	11	135	0,41	0,39
0,99	1,66E-17	1	21	18	0	3	84	1	0,86
0,42	1,00E+00	8	19	6	4	13	56	0,6	0,32
0,70	2,52E-04	1	33	10	9	23	144	0,53	0,3
0,46	1,00E+00	1	31	0	21	31	343	0	0
0,65	3,05E-03	1	27	4	7	23	395	0,36	0,15

1

spec (1-FPACC= $\frac{AUC}{1+2 \cdot FP}$)				ClusPro(DOT) 1st model							
				1st patch sTP	FN	FP	TN	sens (TP/(TP+FN))	ppv (TP/(TP+FP))	(1-spec)/f1	
0,92	0,88	0,66	1,97E-03	20	10	5	10	171	0,67	0,5	0,06
0,93	0,87	0,67	2,52E-04	21	12	7	9	168	0,63	0,57	0,05
0,87	0,83	0,65	1,09E-02	18	0	14	18	119	0	0	0,13
0,98	0,97	0,89	0,00E+00	no DOT results available							
0,92	0,89	0,67	3,09E-03	13	0	12	13	185	0	0	0,07
0,72	0,67	0,50	1,00E+00	10	8	3	2	88	0,73	0,8	0,02
0,85	0,82	0,72	2,11E-04	17	0	17	17	125	0	0	0,12
0,92	0,86	0,73	4,90E-05	18	10	7	8	98	0,59	0,56	0,08
0,93	0,91	0,86	1,59E-10	14	2	16	12	116	0,11	0,14	0,09
0,98	0,97	0,96	4,25E-17	19	6	10	13	127	0,38	0,32	0,09
0,81	0,77	0,67	8,22E-03	9	7	8	2	91	0,47	0,78	0,02
0,94	0,91	0,81	9,97E-09	15	4	14	11	131	0,22	0,27	0,08
0,95	0,93	0,85	1,14E-11	17	13	6	4	169	0,68	0,76	0,02
0,86	0,78	0,58	3,00E-01	14	1	4	13	33	0,2	0,07	0,28
0,92	0,87	0,71	5,33E-05	15	0	18	15	116	0	0	0,11
0,88	0,85	0,77	1,01E-05	17	14	3	3	103	0,82	0,82	0,03
0,9	0,88	0,70	3,39E-04	12	4	10	8	201	0,29	0,33	0,04
0,84	0,83	0,72	3,25E-03	17	4	6	13	109	0,4	0,24	0,11
0,93	0,89	0,79	2,22E-07	17	1	16	16	106	0,06	0,06	0,13
0,83	0,81	0,76	2,61E-04	18	0	13	18	64	0	0	0,22
0,85	0,80	0,43	1,00E+00	19	0	11	19	174	0	0	0,10
0,71	0,69	0,36	1,00E+00	23	2	2	21	77	0,5	0,09	0,21
0,89	0,88	0,81	1,94E-05	14	5	6	9	85	0,45	0,36	0,10
0,89	0,86	0,73	1,76E-04	14	0	14	14	112	0	0	0,11
0,87	0,81	0,44	1,00E+00	16	14	5	2	233	0,74	0,88	0,01
0,93	0,90	0,47	1,00E+00	no DOT results available							
0,86	0,84	0,80	4,12E-06	11	0	15	11	108	0	0	0,09
0,87	0,81	0,66	7,48E-03	20	0	16	20	72	0	0	0,22
0,86	0,78	0,63	3,14E-02	14	0	15	14	56	0	0	0,20
0,96	0,94	0,72	1,07E-06	19	0	17	19	352	0	0	0,05
0,99	0,99	1,00	2,38E-30	22	0	21	22	346	0	0	0,06
0,81	0,71	0,44	1,00E+00	13	0	17	13	99	0	0	0,12
0,86	0,86	0,84	4,24E-06	14	0	11	14	104	0	0	0,12
0,91	0,85	0,74	3,38E-06	21	0	21	21	87	0	0	0,19
0,89	0,81	0,61	2,06E-02	14	3	15	11	100	0,17	0,21	0,10
0,87	0,84	0,72	1,38E-05	20	18	3	2	196	0,86	0,9	0,01
0,91	0,86	0,49	1,00E+00	18	0	16	18	264	0	0	0,06
0,89	0,85	0,45	1,00E+00	15	0	15	15	298	0	0	0,05
0,88	0,84	0,44	1,00E+00	9	0	16	9	303	0	0	0,03
0,94	0,90	0,58	3,52E-02	15	0	19	15	294	0	0	0,05
0,36	0,40	0,68	4,15E-04	13	0	18	13	251	0	0	0,05
0,95	0,91	0,74	7,33E-07	6	0	17	6	162	0	0	0,04
0,89	0,87	0,76	6,91E-07	10	0	19	10	228	0	0	0,04
0,9	0,88	0,75	3,32E-06	9	5	12	4	236	0,29	0,56	0,02
0,9	0,87	0,66	8,00E-03	18	0	12	18	166	0	0	0,10
0,89	0,87	0,61	4,50E-02	21	6	6	15	294	0,5	0,29	0,05
0,87	0,86	0,79	3,80E-07	24	5	12	19	308	0,29	0,21	0,06
0,98	0,97	0,92	3,48E-12	12	11	2	1	110	0,85	0,92	0,01
0,93	0,91	0,59	2,85E-02	no DOT results available							
0,94	0,91	0,47	1,00E+00	no DOT results available							

0,87	0,83	0,51	5,41E-01	19	0	13	19	207	0	0	0,08
0,89	0,83	0,73	8,79E-05	15	3	15	12	72	0,17	0,2	0,14
0,93	0,89	0,47	1,00E+00	26	0	19	26	407	0	0	0,06
0,92	0,87	0,67	6,07E-04	16	6	11	10	136	0,35	0,38	0,07
0,97	0,97	0,99	1,66E-17	19	15	3	4	83	0,83	0,79	0,05
0,81	0,78	0,71	1,05E-02	15	1	9	14	55	0,1	0,07	0,20
0,86	0,83	0,70	2,52E-04	23	0	19	23	144	0	0	0,14
0,92	0,87	0,46	1,00E+00	19	1	20	18	356	0,05	0,05	0,05
0,94	0,93	0,65	3,05E-03	21	0	11	21	397	0	0	0,05
									av	0,23	0,22
									SD	0,29	0,3
											0,09
											0,06

Vertical line segment

Horizontal line segment

		ClusPro(DOT) best model of 10 first								
AUC=(SeFisher		first signific	patch size	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(	ppv (TP/(TI(1-spec)	I
0,81	2,36E-08	1	20	10	5	10	171	0,67	0,5	0,06
0,79	2,24E-09	1	21	12	7	9	168	0,63	0,57	0,05
0,43	1,00E+00	1	18	0	14	18	119	0	0	0,13
0,47	1,00E+00	7	19	5	7	14	184	0,42	0,26	0,07
0,85	3,47E-08	1	10	8	3	2	88	0,73	0,8	0,02
0,44	1,00E+00	8	17	8	9	9	133	0,47	0,47	0,06
0,76	3,52E-06	1	18	10	7	8	98	0,59	0,56	0,08
0,51	5,40E-01	5	24	8	10	16	112	0,44	0,33	0,13
0,64	5,45E-03	1	19	6	10	13	127	0,38	0,32	0,09
0,72	7,20E-06	1	9	7	8	2	91	0,47	0,78	0,02
0,57	6,95E-02	5	16	10	8	6	136	0,56	0,62	0,04
0,83	1,11E-12	1	17	13	6	4	169	0,68	0,76	0,02
0,46	1,00E+00	2	10	5	0	5	41	1	0,5	0,11
0,44	1,00E+00	4	18	5	13	13	118	0,28	0,28	0,10
0,90	4,43E-13	1	17	14	3	3	103	0,82	0,82	0,03
0,63	3,66E-03	1	12	4	10	8	201	0,29	0,33	0,04
0,65	2,48E-02	1	17	4	6	13	109	0,4	0,24	0,11
0,46	1,00E+00	8	17	5	12	12	110	0,29	0,29	0,10
0,39	1,00E+00	1	18	0	13	18	64	0	0	0,22
0,45	1,00E+00	3	21	5	6	16	177	0,45	0,24	0,08
0,64	2,19E-01	6	21	3	1	18	80	0,75	0,14	0,18
0,68	5,96E-03	1	14	5	6	9	85	0,45	0,36	0,10
0,44	1,00E+00	4	28	9	5	19	107	0,64	0,32	0,15
0,87	3,62E-17	1	16	14	5	2	233	0,74	0,88	0,01
0,45	1,00E+00	2	17	15	0	2	117	1	0,88	0,02
0,39	1,00E+00	3	20	9	7	11	81	0,56	0,45	0,12
0,40	1,00E+00	5	19	7	8	12	58	0,47	0,37	0,17
0,47	1,00E+00	1	19	0	17	19	352	0	0	0,05
0,47	1,00E+00	5	21	18	3	3	365	0,86	0,86	0,01
0,44	1,00E+00	3	20	13	4	7	105	0,76	0,65	0,06
0,44	1,00E+00	5	15	5	6	10	108	0,45	0,33	0,08
0,40	1,00E+00	2	21	7	14	14	94	0,33	0,33	0,13
0,54	3,06E-01	2	20	12	6	8	103	0,67	0,6	0,07
0,92	2,40E-21	1	20	18	3	2	196	0,86	0,9	0,01
0,47	1,00E+00	1	18	0	16	18	264	0	0	0,06
0,48	1,00E+00	1	15	0	15	15	298	0	0	0,05
0,49	1,00E+00	1	9	0	16	9	303	0	0	0,03
0,48	1,00E+00	3	15	4	15	11	298	0,21	0,27	0,04
0,48	1,00E+00	10	12	4	14	8	256	0,22	0,33	0,03
0,48	1,00E+00	1	6	0	17	6	162	0	0	0,04
0,48	1,00E+00	1	10	0	19	10	228	0	0	0,04
0,64	7,38E-05	1	9	5	12	4	236	0,29	0,56	0,02
0,45	1,00E+00	8	18	4	8	14	170	0,33	0,22	0,08
0,73	2,69E-05	1	21	6	6	15	294	0,5	0,29	0,05
0,62	3,79E-03	1	24	5	12	19	308	0,29	0,21	0,06
0,92	5,44E-13	1	12	11	2	1	110	0,85	0,92	0,01

0,46	1,00E+00	5	22	4	9	18	208	0,31	0,18	0,08
0,51	5,20E-01	3	17	9	9	8	76	0,5	0,53	0,10
0,47	1,00E+00	7	19	10	9	9	424	0,53	0,53	0,02
0,64	2,22E-03	1	16	6	11	10	136	0,35	0,38	0,07
0,89	5,00E-12	1	19	15	3	4	83	0,83	0,79	0,05
0,45	1,00E+00	1	15	1	9	14	55	0,1	0,07	0,20
0,43	1,00E+00	8	20	5	14	15	152	0,26	0,25	0,09
0,50	1,00E+00	1	19	1	20	18	356	0,05	0,05	0,05
0,47	1,00E+00	1	21	0	11	21	397	0	0	0,05
0,57						av		0,43	0,39	0,07
0,16						SD		0,29	0,28	0,05

1

		CEP best patch								
AUC=(SeFisher		number of best patch	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(	ppv (TP/(T (1-spec)[f		
0,81	2,36E-08	7	37	10	5	27	154	0,67	0,27	0,15
0,79	2,24E-09	7	37	16	4	21	155	0,8	0,43	0,12
0,43	1,00E+00	6	35	13	1	22	115	0,93	0,37	0,16
		17	84	25	27	59	721	0,48	0,3	0,08
0,67	1,88E-03	5	55	10	2	45	153	0,83	0,18	0,23
0,85	3,47E-08	1	82	11	0	71	19	1	0,13	0,79
0,70	4,23E-05	6	24	13	4	11	131	0,76	0,54	0,08
0,76	3,52E-06	5	30	9	8	21	85	0,53	0,3	0,20
0,66	2,51E-03	7	14	4	14	10	118	0,22	0,29	0,08
0,64	5,45E-03	5	18	7	9	11	129	0,44	0,39	0,08
0,72	7,20E-06	1	74	11	4	63	30	0,73	0,15	0,68
0,76	1,14E-07	5	16	8	10	8	134	0,44	0,5	0,06
0,83	1,11E-12	2	12	0	19	12	161	0	0	0,07
0,95	1,07E-04	1	12	5	2	7	37	0,71	0,42	0,16
0,59	4,55E-02	3	34	1	17	33	98	0,06	0,03	0,25
0,90	4,43E-13	5	26	11	6	15	91	0,65	0,42	0,14
0,63	3,66E-03	6	102	14	0	88	121	1	0,14	0,42
0,65	2,48E-02	4	45	10	0	35	87	1	0,22	0,29
0,60	3,68E-02	8	44	11	6	27	95	0,65	0,29	0,22
0,39	1,00E+00	5	37	10	3	27	55	0,77	0,27	0,33
0,68	2,21E-03	8	40	11	0	29	164	1	0,28	0,15
0,78	2,68E-02	3	90	4	0	86	12	1	0,04	0,88
0,68	5,96E-03	5	32	0	11	32	62	0	0	0,34
0,74	1,56E-04	6	29	6	8	23	103	0,43	0,21	0,18
0,87	3,62E-17	16	28	10	9	18	217	0,53	0,36	0,08
		22	29	0	20	29	575	0	0	0,05
0,99	4,97E-18	5	44	14	1	30	89	0,93	0,32	0,25
0,72	2,31E-04	1	73	12	4	61	31	0,75	0,16	0,66
0,65	1,99E-02	5	58	9	6	49	21	0,6	0,16	0,70
0,47	1,00E+00	11	22	0	17	22	349	0	0	0,06
0,93	3,97E-25	11	24	5	16	19	348	0,24	0,21	0,05
0,85	6,20E-10	3	16	7	10	9	103	0,41	0,44	0,08
0,68	3,30E-03	3	45	0	11	45	73	0	0	0,38
0,60	2,91E-02	3	16	9	12	7	101	0,43	0,56	0,06
0,80	6,00E-08	3	45	15	3	30	81	0,83	0,33	0,27
0,92	2,40E-21	7	62	16	5	46	152	0,76	0,26	0,23
0,47	1,00E+00	12	35	7	9	28	254	0,44	0,2	0,10
0,48	1,00E+00	14	18	4	11	14	299	0,27	0,22	0,04
0,49	1,00E+00	14	52	9	7	43	269	0,56	0,17	0,14
0,59	7,36E-03	14	37	9	10	28	281	0,47	0,24	0,09
0,59	4,22E-03	14	43	13	5	30	280	0,72	0,3	0,10
0,48	1,00E+00	7	29	13	4	16	152	0,76	0,45	0,10
0,48	1,00E+00	14	36	9	10	27	211	0,47	0,25	0,11
0,64	7,38E-05	14	56	15	2	41	199	0,88	0,27	0,17
0,63	1,57E-02	7	33	0	12	33	151	0	0	0,18
0,73	2,69E-05	14	47	5	7	42	267	0,42	0,11	0,14
0,62	3,79E-03	14	27	0	12	27	282	0	0	0,09
0,92	5,44E-13	4	33	11	2	22	89	0,85	0,33	0,20
		18	40	16	1	24	566	0,94	0,4	0,04
		18	28	8	15	20	564	0,35	0,29	0,03

0,62	2,23E-02	13	59	13	0	46	180	1	0,22	0,20
0,70	2,43E-04	2	23	2	16	21	63	0,11	0,09	0,25
0,75	8,12E-11	18	47	14	5	33	400	0,74	0,3	0,08
0,64	2,22E-03	6	43	10	7	33	113	0,59	0,23	0,23
0,89	5,00E-12	26	33	0	17	33	55	0	0	0,38
0,45	1,00E+00	26	33	0	10	0	69	0	0	0,00
0,59	3,71E-02	10	41	17	0	24	145	1	0,41	0,14
0,50	1,00E+00	18	30	8	13	22	352	0,38	0,27	0,06
0,47	1,00E+00	10	40	0	0	40	389	0	0	0,09
0,68						av		0,53	0,23	0,20
0,15						SD		0,34	0,15	0,19

1

AUC=(SeFisher	CEP average								AUC=(SeFisher
	TP	FN	FP	TN	sens (TP/(	ppv (TP/(Tl(1-spec)			
0,76 2,81E-05	4	11	24	156	0,27	0,14	0,13	0,57	1,50E-01
0,84 3,23E-10	6	13	21	154	0,32	0,22	0,12	0,60	3,11E-02
0,88 8,79E-09	6	7	28	109	0,46	0,18	0,20	0,63	4,48E-02
0,70 2,21E-13	4	47	36	743	0,08	0,1	0,05	0,52	2,26E-01
0,80 3,30E-05	4	8	45	152	0,33	0,08	0,23	0,55	3,00E-01
0,61 8,82E-02	11	0	71	19	1	0,13	0,79	0,61	8,82E-02
0,84 1,10E-09	2	14	17	125	0,12	0,11	0,12	0,50	8,85E-01
0,67 6,00E-03	7	9	37	69	0,44	0,16	0,35	0,55	3,36E-01
0,57 7,36E-02	2	16	18	109	0,11	0,1	0,14	0,48	1,00E+00
0,68 5,07E-04	1	14	23	117	0,07	0,04	0,16	0,45	1,00E+00
0,53 4,59E-01	11	4	63	30	0,73	0,15	0,68	0,53	4,59E-01
0,69 3,86E-05	3	15	19	122	0,17	0,14	0,13	0,52	4,69E-01
0,47 1,00E+00	2	17	13	159	0,11	0,13	0,08	0,52	4,54E-01
0,78 5,39E-03	5	2	7	37	0,71	0,42	0,16	0,78	5,39E-03
0,40 1,00E+00	1	16	30	100	0,06	0,03	0,23	0,41	1,00E+00
0,75 2,78E-05	10	7	33	72	0,59	0,23	0,31	0,64	2,95E-02
0,79 1,04E-05	7	6	71	137	0,54	0,09	0,34	0,60	1,27E-01
0,86 1,02E-05	7	2	57	65	0,78	0,11	0,47	0,66	7,18E-02
0,71 6,43E-04	7	9	39	82	0,44	0,15	0,32	0,56	2,58E-01
0,72 3,52E-03	7	5	42	39	0,58	0,14	0,52	0,53	4,58E-01
0,92 4,77E-09	3	7	26	166	0,3	0,1	0,14	0,58	1,59E-01
0,56 9,34E-01	4	0	77	20	1	0,05	0,79	0,60	4,08E-01
0,33 1,00E+00	1	9	29	64	0,1	0,03	0,31	0,39	1,00E+00
0,62 4,21E-02	5	9	40	85	0,36	0,11	0,32	0,52	4,96E-01
0,73 2,50E-06	2	16	19	215	0,11	0,1	0,08	0,51	4,55E-01
0,48 1,00E+00	0	20	30	573	0	0	0,05	0,48	1,00E+00
0,84 3,87E-07	8	6	33	85	0,57	0,2	0,28	0,65	3,05E-02
0,54 3,55E-01	12	4	61	31	0,75	0,16	0,66	0,54	3,55E-01
0,45 1,00E+00	6	8	38	31	0,43	0,14	0,55	0,44	1,00E+00
0,47 1,00E+00	0	16	24	346	0	0	0,06	0,47	1,00E+00
0,59 6,13E-03	0	20	24	342	0	0	0,07	0,47	1,00E+00
0,66 1,12E-03	4	13	35	76	0,24	0,1	0,32	0,46	1,00E+00
0,31 1,00E+00	1	9	37	80	0,1	0,03	0,32	0,39	1,00E+00
0,68 8,36E-05	9	12	30	77	0,43	0,23	0,28	0,57	1,38E-01
0,78 7,99E-06	10	8	29	81	0,56	0,26	0,26	0,65	1,56E-02
0,76 2,17E-06	5	15	33	165	0,25	0,13	0,17	0,54	2,55E-01
0,67 8,99E-04	2	13	41	240	0,13	0,05	0,15	0,49	1,00E+00
0,61 5,98E-03	1	13	36	276	0,07	0,03	0,12	0,48	1,00E+00
0,71 1,56E-04	2	13	34	277	0,13	0,06	0,11	0,51	5,10E-01
0,69 4,62E-05	2	16	35	274	0,11	0,05	0,11	0,50	1,00E+00
0,81 3,07E-09	3	14	33	276	0,18	0,08	0,11	0,54	2,86E-01
0,83 3,62E-09	5	11	62	105	0,31	0,07	0,37	0,47	1,00E+00
0,68 2,62E-04	3	15	43	195	0,17	0,07	0,18	0,49	1,00E+00
0,85 2,20E-09	4	12	42	197	0,25	0,09	0,18	0,54	3,21E-01
0,41 1,00E+00	0	12	23	160	0	0	0,13	0,44	1,00E+00
0,64 1,95E-02	2	9	36	272	0,18	0,05	0,12	0,53	3,85E-01
0,46 1,00E+00	1	10	37	271	0,09	0,03	0,12	0,48	1,00E+00
0,83 6,02E-06	5	7	42	68	0,42	0,11	0,38	0,52	7,54E-01
0,95 7,73E-20	3	14	27	562	0,18	0,1	0,05	0,57	4,65E-02
0,66 2,21E-06	1	21	29	554	0,05	0,03	0,05	0,50	1,00E+00

0,90	4,23E-09	3	9	33	192	0,25	0,08	0,15	0,55	2,68E-01
0,43	1,00E+00	2	16	24	59	0,11	0,08	0,29	0,41	1,00E+00
0,83	1,98E-11	2	16	32	400	0,11	0,06	0,07	0,52	4,01E-01
0,68	2,88E-03	5	11	29	116	0,31	0,15	0,20	0,56	2,27E-01
0,31	1,00E+00	0	16	9	78	0	0	0,10	0,45	1,00E+00
0,50	1,00E+00	0	9	3	65	0	0	0,04	0,48	1,00E+00
0,93	3,00E-13	4	12	33	135	0,25	0,11	0,20	0,53	4,06E-01
0,66	4,40E-05	2	19	25	348	0,1	0,07	0,07	0,52	4,30E-01
0,45	1,00E+00	0	0	40	389	0	0	0,09	0,45	1,00E+00
0,67					av	0,28	0,1	0,23	0,52	
0,17					SD	0,25	0,08	0,18	0,07	

1

DiscoTope (-3.1)										DiscoTope (-7.7)		
patch size	TP	FN	FP	TN	sens (TP/ppv)	(TP/(1-spec))	IAUC=(SeFisher P-value)			patch size	TP	FN
no epitope predicted										9	1	14
no epitope predicted										9	3	17
11	0	14	11	126	0	0	0,08	0,46	1	59	6	8
8	1	51	7	773	0,02	0,12	0,01	0,51	0,4	117	19	33
14	0	12	14	184	0	0	0,07	0,46	1	79	0	12
13	8	3	5	85	0,73	0,62	0,06	0,84	9,07E-07	62	10	1
3	2	15	1	141	0,12	0,67	0,01	0,56	3,04E-02	60	13	4
16	0	17	16	90	0	0	0,15	0,42	1	45	6	11
1	0	18	1	127	0	0	0,01	0,50	1	13	3	15
2	0	16	2	138	0	0	0,01	0,49	1	30	9	7
2	0	15	2	91	0	0	0,02	0,49	1	34	9	6
6	2	16	4	138	0,11	0,33	0,03	0,54	0,14	34	11	7
3	1	18	2	171	0,05	0,33	0,01	0,52	0,27	37	10	9
4	0	7	4	40	0	0	0,09	0,45	1	12	4	3
21	1	17	20	111	0,06	0,05	0,15	0,45	1	49	7	11
9	2	15	7	99	0,12	0,22	0,07	0,53	0,36	25	5	12
no epitope predicted										26	0	14
2	0	10	2	120	0	0	0,02	0,49	1	20	0	10
6	1	16	5	117	0,06	0,17	0,04	0,51	0,55	34	8	9
2	0	13	2	80	0	0	0,02	0,49	1	31	7	6
13	3	8	10	183	0,27	0,23	0,05	0,61	2,49E-02	71	10	1
11	0	4	11	87	0	0	0,11	0,44	1	43	2	2
4	0	11	4	90	0	0	0,04	0,48	1	57	5	6
2	0	14	2	124	0	0	0,02	0,49	1	19	3	11
1	0	19	1	234	0	0	0,00	0,50	1	19	0	19
3	1	19	2	602	0,05	0,33	0,00	0,52	0,09	59	4	16
2	0	15	2	117	0	0	0,02	0,49	1	8	2	13
1	0	16	1	91	0	0	0,01	0,49	1	14	3	13
no epitope predicted										5	1	14
15	5	12	10	361	0,29	0,33	0,03	0,63	1,99E-04	66	13	4
15	8	13	7	360	0,38	0,53	0,02	0,68	8,89E-08	66	13	8
5	1	16	4	108	0,06	0,2	0,04	0,51	0,51	22	5	12
5	0	11	5	113	0	0	0,04	0,48	1	22	3	8
5	0	21	5	103	0	0	0,05	0,48	1	22	7	14
5	3	15	2	109	0,17	0,6	0,02	0,58	1,94E-02	22	9	9
no epitope predicted										36	7	14
9	0	16	9	273	0	0	0,03	0,48	1	30	0	16
3	0	15	3	310	0	0	0,01	0,50	1	70	0	15
3	0	16	3	309	0	0	0,01	0,50	1	70	9	7
3	0	19	3	306	0	0	0,01	0,50	1	70	2	17
3	0	18	3	307	0	0	0,01	0,50	1	70	3	15
18	1	16	17	151	0,06	0,06	0,10	0,48	1	58	17	0
7	1	18	6	232	0,05	0,14	0,03	0,51	0,42	58	10	9
7	1	16	6	234	0,06	0,14	0,03	0,52	0,38	58	8	9
4	2	10	2	182	0,17	0,5	0,01	0,58	1,93E-02	27	8	4
10	0	12	10	299	0	0	0,03	0,48	1	67	1	11
10	0	12	10	299	0	0	0,03	0,48	1	67	1	11
6	0	13	6	105	0	0	0,05	0,47	1	11	1	12
1	0	17	1	589	0	0	0,00	0,50	1	40	2	15
1	0	23	1	583	0	0	0,00	0,50	1	40	5	18

12	8	5	4	222	0,62	0,67	0,02	0,80	2,51E-09	62	10	3
23	3	15	20	64	0,17	0,13	0,24	0,47	1	68	14	4
no epitope predicted										60	10	9
no epitope predicted										9	1	16
10	6	11	4	84	0,35	0,6	0,05	0,65	1,08E-03	35	15	2
no epitope predicted										9	4	6
2	0	17	2	167	0	0	0,01	0,49	1	17	6	11
4	2	19	2	372	0,1	0,5	0,01	0,55	1,52E-02	60	3	18
37	9	2	28	390	0,82	0,24	0,07	0,88	4,85E-09	190	11	0
av					0,1	0,15	0,04	0,53				
SD					0,18	0,22	0,05	0,09				

1

2

							DiscoTope (-10.5)						
FP	TN	sens (↑ppv (↑(1-spec)))		IAUC=(SeFisher P-v)			patch size	TP	FN	FP	TN	sens (↑	
8	173	0,07	0,11	0,04	0,51	0,52	36	3	12	33	148	0,2	
6	170	0,15	0,33	0,03	0,56	0,05	36	11	9	25	151	0,55	
53	84	0,43	0,1	0,39	0,52	0,49	94	11	3	83	54	0,79	
98	682	0,37	0,16	0,13	0,62	2,23E-05	280	33	19	247	533	0,63	
79	119	0	0	0,40	0,30	1	132	3	9	129	69	0,25	
52	38	0,91	0,16	0,58	0,67	2,96E-02	92	11	0	81	9	1	
47	95	0,76	0,22	0,33	0,71	7,30E-04	102	17	0	85	57	1	
39	67	0,35	0,13	0,37	0,49	1	70	11	6	59	47	0,65	
10	118	0,17	0,23	0,08	0,55	0,2	33	7	11	26	102	0,39	
21	119	0,56	0,3	0,15	0,71	5,17E-04	61	14	2	47	93	0,88	
25	68	0,6	0,26	0,27	0,67	1,39E-02	57	10	5	47	46	0,67	
23	119	0,61	0,32	0,16	0,72	9,92E-05	61	16	2	45	97	0,89	
27	146	0,53	0,27	0,16	0,69	5,79E-04	76	15	4	61	112	0,79	
8	36	0,57	0,33	0,18	0,69	4,45E-02	26	6	1	20	24	0,86	
42	89	0,39	0,14	0,32	0,53	0,37	77	14	4	63	68	0,78	
20	86	0,29	0,2	0,19	0,55	0,24	49	11	6	38	68	0,65	
26	183	0	0	0,12	0,44	1	52	0	14	52	157	0	
20	102	0	0	0,16	0,42	1	35	0	10	35	87	0	
26	96	0,47	0,24	0,21	0,63	2,65E-02	63	15	2	48	74	0,88	
24	58	0,54	0,23	0,29	0,62	0,08	60	12	1	48	34	0,92	
61	132	0,91	0,14	0,32	0,80	1,32E-04	102	11	0	91	102	1	
41	57	0,5	0,05	0,42	0,54	0,89	58	3	1	55	43	0,75	
52	42	0,45	0,09	0,55	0,45	1	81	8	3	73	21	0,73	
16	110	0,21	0,16	0,13	0,54	0,29	41	7	7	34	92	0,5	
19	216	0	0	0,08	0,46	1	53	4	15	49	186	0,21	
55	549	0,2	0,07	0,09	0,55	0,11	135	8	12	127	477	0,4	
6	113	0,13	0,25	0,05	0,54	0,22	23	7	8	16	103	0,47	
11	81	0,19	0,21	0,12	0,54	0,34	28	3	13	25	67	0,19	
4	66	0,07	0,2	0,06	0,51	1	19	6	9	13	57	0,4	
53	318	0,76	0,2	0,14	0,81	4,68E-08	126	14	3	112	259	0,82	
53	314	0,62	0,2	0,14	0,74	2,27E-06	126	16	5	110	257	0,76	
17	95	0,29	0,23	0,15	0,57	0,14	39	8	9	31	81	0,47	
19	99	0,27	0,14	0,16	0,55	0,28	39	9	2	30	88	0,82	
15	93	0,33	0,32	0,14	0,60	3,81E-02	39	12	9	27	81	0,57	
13	98	0,5	0,41	0,12	0,69	4,57E-04	39	11	7	28	83	0,61	
29	169	0,33	0,19	0,15	0,59	3,67E-02	82	12	9	70	128	0,57	
30	252	0	0	0,11	0,45	1	54	2	14	52	230	0,12	
70	243	0	0	0,22	0,39	1	144	1	14	143	170	0,07	
61	251	0,56	0,13	0,20	0,68	1,83E-03	144	13	3	131	181	0,81	
68	241	0,11	0,03	0,22	0,44	1	144	4	15	140	169	0,21	
67	243	0,17	0,04	0,22	0,48	1	144	9	9	135	175	0,5	
41	127	1	0,29	0,24	0,88	4,31E-10	91	17	0	74	94	1	
48	190	0,53	0,17	0,20	0,66	2,85E-03	113	15	4	98	140	0,79	
50	190	0,47	0,14	0,21	0,63	1,87E-02	113	12	5	101	139	0,71	
19	165	0,67	0,3	0,10	0,78	1,61E-05	47	10	2	37	147	0,83	
66	243	0,08	0,01	0,21	0,43	1	119	1	11	118	191	0,08	
66	243	0,08	0,01	0,21	0,43	1	119	1	11	118	191	0,08	
10	101	0,08	0,09	0,09	0,49	1	17	2	11	15	96	0,15	
38	552	0,12	0,05	0,06	0,53	0,31	84	3	14	81	509	0,18	
35	549	0,22	0,12	0,06	0,58	1,34E-02	84	6	17	78	506	0,26	

52	174	0,77	0,16	0,23	0,77	1,11E-04	107	11	2	96	130	0,85
54	30	0,78	0,21	0,64	0,57	0,21	83	17	1	66	18	0,94
50	383	0,53	0,17	0,12	0,71	2,94E-05	114	16	3	98	335	0,84
8	138	0,06	0,11	0,05	0,50	1	32	3	14	29	117	0,18
20	68	0,88	0,43	0,23	0,83	4,97E-07	49	16	1	33	55	0,94
5	64	0,4	0,44	0,07	0,66	1,26E-02	25	6	4	19	50	0,6
11	158	0,35	0,35	0,07	0,64	1,58E-03	35	8	9	27	142	0,47
57	317	0,14	0,05	0,15	0,49	1	116	10	11	106	268	0,48
179	239	1	0,06	0,43	0,79	1,09E-04	290	11	0	279	139	1
av		0,38	0,17	0,20	0,59					av		0,58
SD		0,28	0,12	0,13	0,12					SD		0,3

1

ppv (TP/(1-spec), AUC=(SeFisher P-val) in DiscoTope training set?			
0,08	0,18	0,51	0,54-
0,31	0,14	0,70	9,74E-05*
0,12	0,61	0,59	0,15-
0,12	0,32	0,66	5,41E-06-
0,02	0,65	0,30	1-
0,12	0,90	0,55	0,34*
0,17	0,60	0,70	3,12E-04*
0,16	0,56	0,55	0,33*
0,21	0,20	0,59	0,08-
0,23	0,34	0,77	4,05E-05*
0,18	0,51	0,58	0,19-
0,26	0,32	0,79	3,80E-06*
0,2	0,35	0,72	2,96E-04-
0,23	0,45	0,70	0,06-
0,18	0,48	0,65	1,59E-02-
0,22	0,36	0,65	2,43E-02*
0	0,25	0,38	1-
0	0,29	0,36	1*
0,24	0,39	0,74	1,38E-04-
0,2	0,59	0,67	1,55E-02-
0,11	0,47	0,76	3,67E-04-
0,05	0,56	0,59	0,42-
0,1	0,78	0,48	1-
0,17	0,27	0,62	0,07-
0,08	0,21	0,50	0,8-
0,06	0,21	0,59	4,63E-02-
0,3	0,13	0,67	4,64E-03-
0,11	0,27	0,46	1-
0,32	0,19	0,61	0,08-
0,11	0,30	0,76	2,21E-05*
0,13	0,30	0,73	3,07E-05*
0,21	0,28	0,60	0,09*
0,23	0,25	0,78	3,41E-04*
0,31	0,25	0,66	4,79E-03*
0,28	0,25	0,68	3,48E-03*
0,15	0,35	0,61	4,41E-02*
0,04	0,18	0,47	1*
0,01	0,46	0,31	1*
0,09	0,42	0,70	2,13E-03-
0,03	0,45	0,38	1*
0,06	0,44	0,53	0,38-
0,19	0,44	0,78	2,50E-06*
0,13	0,41	0,69	1,45E-03*
0,11	0,42	0,64	2,09E-02*
0,21	0,20	0,81	1,26E-05*
0,01	0,38	0,35	1*
0,01	0,38	0,35	1-
0,12	0,14	0,51	0,87*
0,04	0,14	0,52	0,43*
0,07	0,13	0,56	0,08-

0,1	0,42	0,71	3,16E-03*
0,2	0,79	0,58	0,1*
0,14	0,23	0,81	5,51E-08*
0,09	0,20	0,49	1-
0,33	0,38	0,78	1,18E-05-
0,24	0,28	0,66	4,83E-02-
0,23	0,16	0,66	5,01E-03-
0,09	0,28	0,60	0,05-
0,04	0,67	0,67	1,27E-02*
0,14	0,37	0,61	
0,09	0,18	0,13	
