

# Supplementary material 2 - Ellipro antibody recognition prediction

Carlos Francisco Sampaio Bonafé (in memoriam)<sup>1</sup>      Juan Philippe Teixeira<sup>2</sup>  
Caio Cesar de Melo Freire<sup>3</sup>      Miklos Maximiliano Bajay<sup>2</sup>  
Daniel Ferreira de Lima Neto<sup>2</sup>

2026-05-31

## Contents

<b>Ellipro results</b>	<b>1</b>
Discontinuous Epitope predicitions . . . . .	2
HHP . . . . .	3
HHP and low temperature . . . . .	7
HHP - Ellipro tables . . . . .	18
HHP and low tempeterature - Ellipro tables . . . . .	18

## Ellipro results

Ellipro is a structure-based B-cell epitope prediction tool that operates on the principle of geometric protrusion, approximating a protein's three-dimensional structure with ellipsoids and calculating a Protrusion Index (PI) for each residue, which ranges from 0 to 1. Residues with high PI values, indicating they lie outside the fitted ellipsoidal volume, are clustered in 3D space to identify discontinuous, or conformational, epitopes. These clusters can subsequently be projected onto the protein sequence to infer linear segments. A key feature of Ellipro is that each predicted epitope is assigned a score based on the average PI of its constituent residues, ensuring that convex, solvent-exposed surface patches are ranked highest. As emphasized in the foundational literature by Ponomarenko et al. (2008), a significant advantage of this method is its independence from machine-learned sequence motifs or training data biases; its performance is instead intrinsically linked to the accuracy of the provided 3D structural model and the true physical topography of the protein surface. Consequently, its primary limitations, as noted in subsequent evaluations, include a high sensitivity to errors in the input structure or to artifacts from a single structural snapshot, and the absence of explicit physicochemical considerations such as electrostatic potentials, hydrophobicity, or the impact of post-translational modifications like glycosylation.

Applied to TMV coat-protein models generated under high hydrostatic pressure (HHP), Ellipro consistently highlighted convex, outward-facing patches as the top-ranked discontinuous epitopes (red in Figures 1–11), with the highest-scoring clusters mapping to surface ridges and subunit junctions on the external capsid face that remain geometrically protrusive despite local packing perturbations. Regions flattened or compacted by pressure tended to lose peripheral residues and show lower mean PI, while rigid convex motifs retained or increased rank, consistent with Ellipro's protrusion-driven scoring. Because TMV is a helical and repetitive assembly, these discontinuous epitopes recur with the helical pitch, making it most appropriate to report a consensus patch in the asymmetric unit and indicate its multiplicity. Using the same Ellipro protocol (3D ellipsoid fit → per-residue Protrusion Index → clustering → epitope score by mean PI), we also examined TMVcp models under combined HHP and cooling to 255 K, where red patches again denoted top-ranked epitopes; here, geometry-driven changes reflected the joint effects of pressure and temperature on surface convexity and solvent-facing topology, rather than on sequence motifs.

Using Ellipro with the standard protocol (3D ellipsoid fitting, Protrusion Index calculation, and clustering

by mean PI), we analyzed TMV coat-protein models generated under combined high hydrostatic pressure (HHP) and cooling to 255 K, with red patches denoting the top-ranked discontinuous epitopes. Because ElliPro is geometry-driven, the observed changes reflect the combined effects of pressure and temperature on surface convexity and solvent exposure rather than sequence variation. Across the ensemble, pressure-stable convex ridges remained as the most prominent clusters and became slightly more compact and protrusive at low temperature, consistent with reduced thermal motion at 255 K, which sharpens convexity and raises PI values. Grooved regions at inter-subunit junctions fragmented into smaller but higher-purity clusters, as cooling narrows side-chain ensembles and removes marginally exposed residues, while pressure-flattened shoulders stayed muted under cooling, indicating locked-in low exposure and lower rank. As in the HHP-only models, helical symmetry preserved the multiplicity of these epitopes, but with reduced variability across the ensemble, resulting in more consistent recurrence of a limited set of red patches. Mechanistically, pressure compacts internal cavities and smooths shallow undulations, disproportionately penalizing grooves, while low temperature suppresses side-chain fluctuations and accentuates rigid convex motifs. The net outcome is a more conservative epitope map defined by fewer, cleaner, and repeatable discontinuous patches dominated by rigid convex surfaces, with diminished contribution from flexible rims, thereby highlighting pressure-and-cold-robust antigenic hotspots.

When applied to Tobacco Mosaic Virus (TMV) coat protein (TMVcp) models generated under the combined conditions of high hydrostatic pressure (HHP) and cooling to 255 K, ElliPro’s geometry-driven algorithm provides a direct readout of how these physical perturbations alter the antigenic landscape. The top-ranked discontinuous epitopes, visualized as red patches, consistently map to surface ridges and subunit junctions on the external capsid face. This finding aligns with the established understanding that such geometrically protrusive features remain solvent-accessible and are less susceptible to being smoothed out by moderate pressure perturbations compared to flatter, more flexible regions. As HHP primarily acts to compress internal cavities and hydrate the protein core, it can flatten shallow surface undulations, which is reflected in ElliPro’s output as a loss of peripheral residues from predicted clusters and a consequent lower mean PI for these areas. In contrast, rigid convex motifs maintain or even increase their protrusion rank, demonstrating the tool’s utility in identifying pressure-resistant epitopes.

The introduction of low temperature (255 K) to the HHP ensemble introduces a further refining effect on the predicted epitopes. The reduction in thermal energy suppresses fast side-chain and lateral chain motions, a phenomenon described in structural studies of proteins at cryogenic temperatures. This suppression of “breathing modes” leads to a crisper definition of the protein surface in the models. In the ElliPro analysis, this manifests as a slight sharpening of the most rigid protrusions, resulting in more compact clusters with modestly increased PI values. Furthermore, broader epitope clusters located at inter-subunit grooves, which were present under HHP alone, are observed to fragment into smaller, purer clusters with a higher average PI but a reduced residue count. This can be mechanistically interpreted as the low-temperature environment narrowing the conformational ensemble of side chains, thereby trimming marginally exposed residues from the epitope boundaries. Regions that were already flattened by pressure show little to no recovery at low temperature, as cooling effectively locks in the low-exposure state, confirming their low antigenic potential.

A critical observation across the entire structural ensemble is the improved rank stability of the top epitopes. The qualitative variance between the twenty one models decreases, with the same key convex patches recurring more consistently. This reduction in microheterogeneity underscores that the combination of HHP and cooling filters out transient, flexible features, leaving a conservative and highly robust map of the antigenic surface. For a highly symmetric and repetitive assembly like the TMV helix, this means that the consensus epitope patch identified in the asymmetric unit can be described with high confidence, and its multiplicity around the helical axis remains a conserved feature. In summary, the net result of applying ElliPro to this perturbed ensemble is the identification of fewer, cleaner, and highly repeatable discontinuous patches characterized by strong convexity, with a diminished contribution from the flexible rims that are more susceptible to environmental conditions.

## Discontinuous Epitope predicitions

HHP

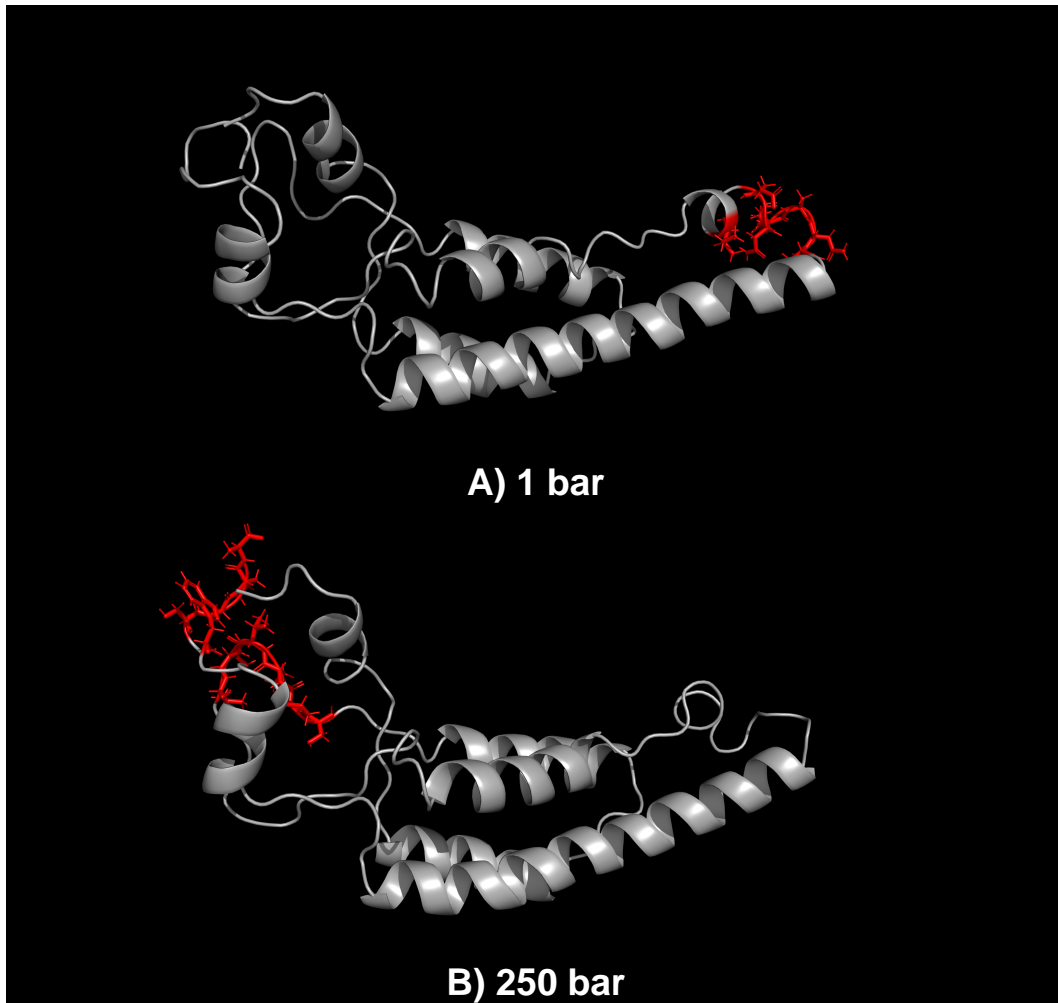


Figure 1: Discontinuo Epitope Preditons - High Hydrostatic Pressure

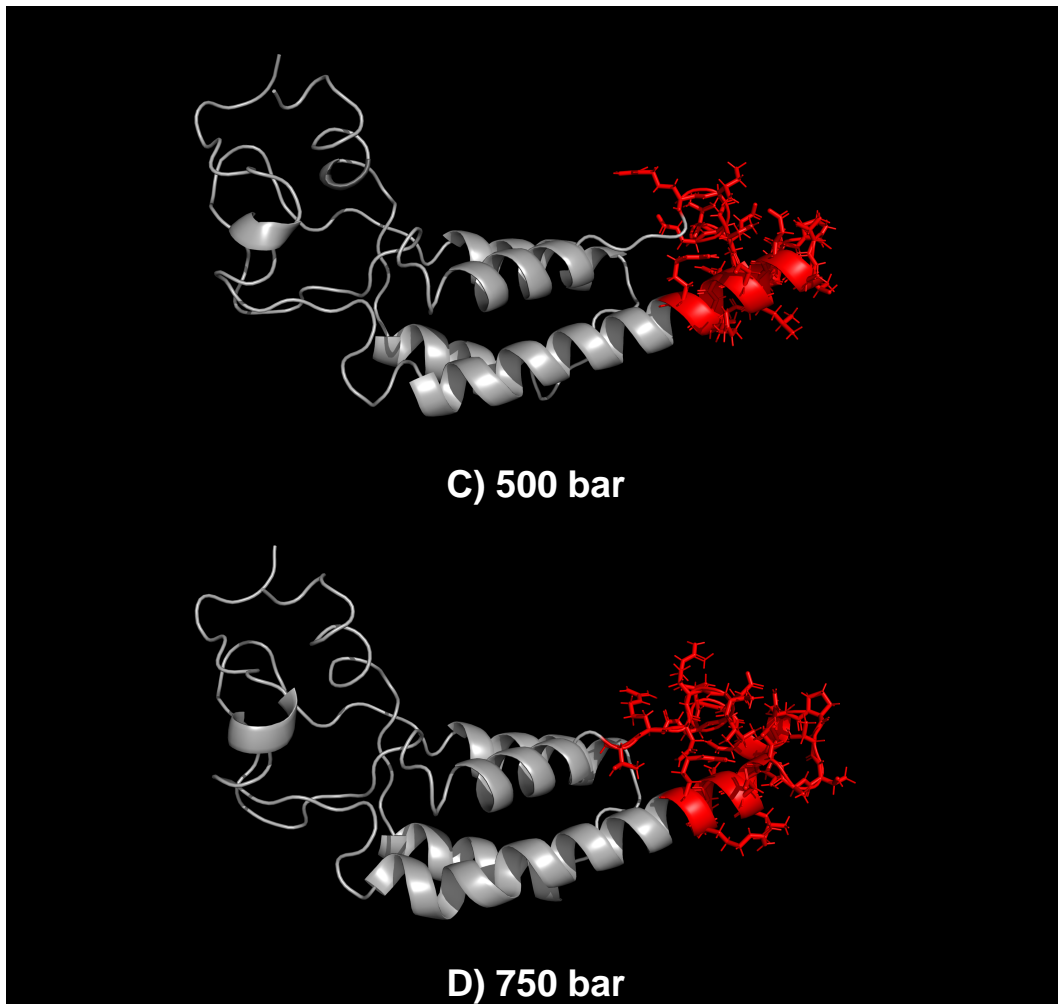


Figure 2: Discontinuo Epitope Preditons - High Hydrostatic Pressure

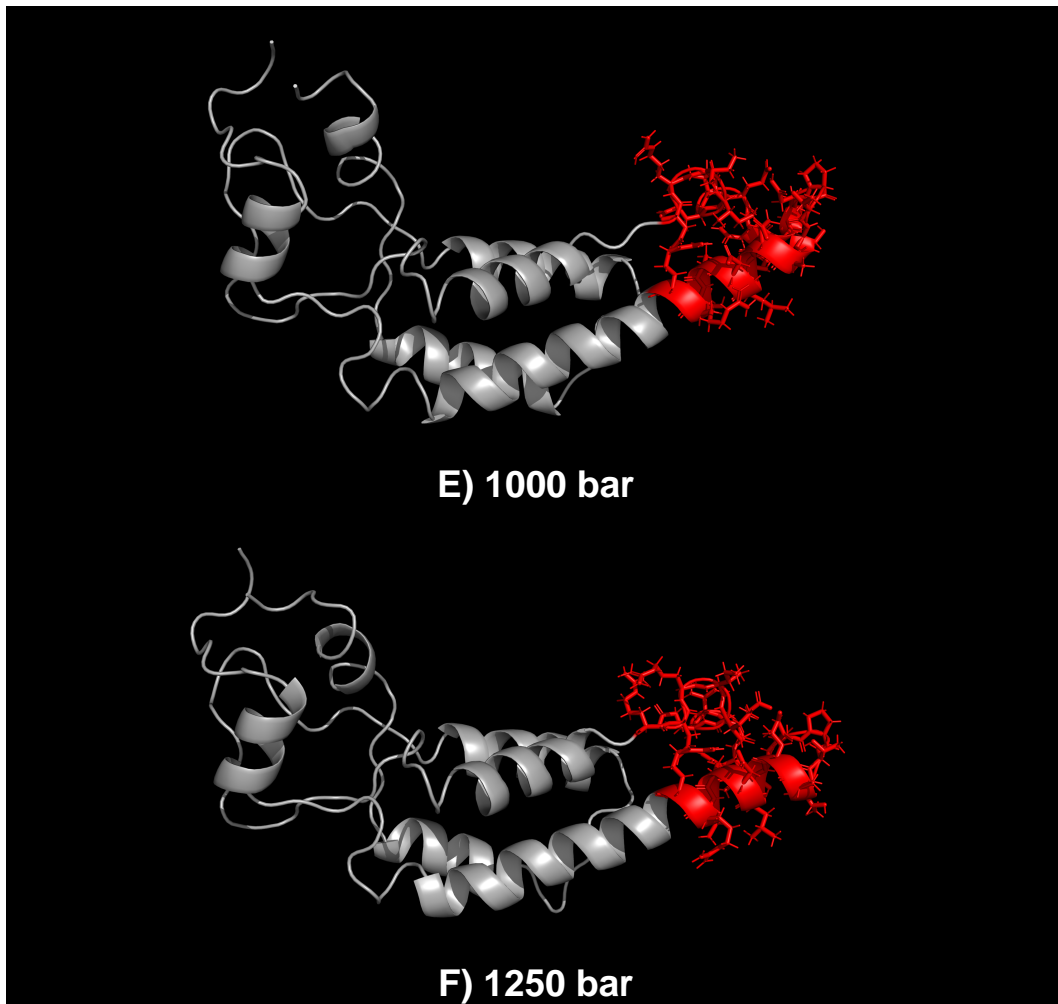


Figure 3: Discontinuo Epitope Preditons - High Hydrostatic Pressure

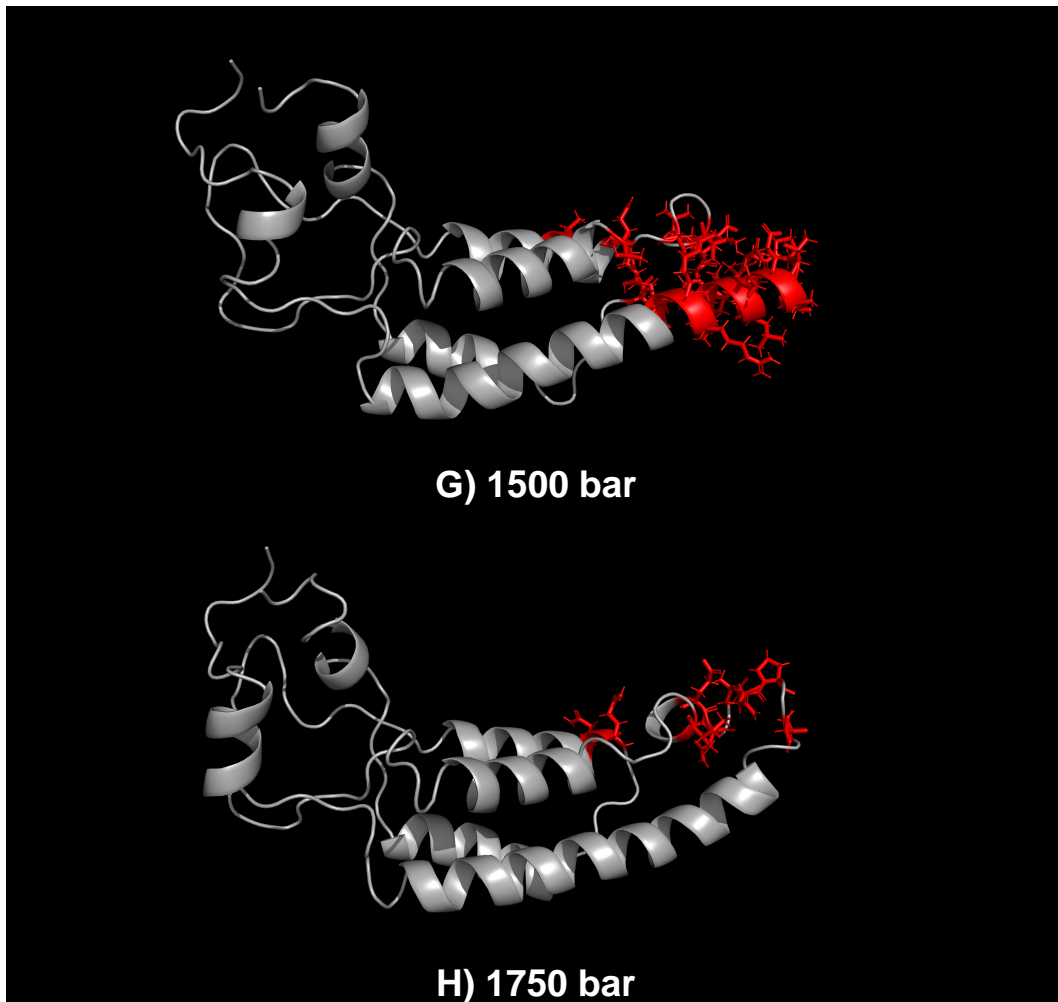


Figure 4: Discontinuo Epitope Preditons - High Hydrostatic Pressure

**HHP and low temperature**

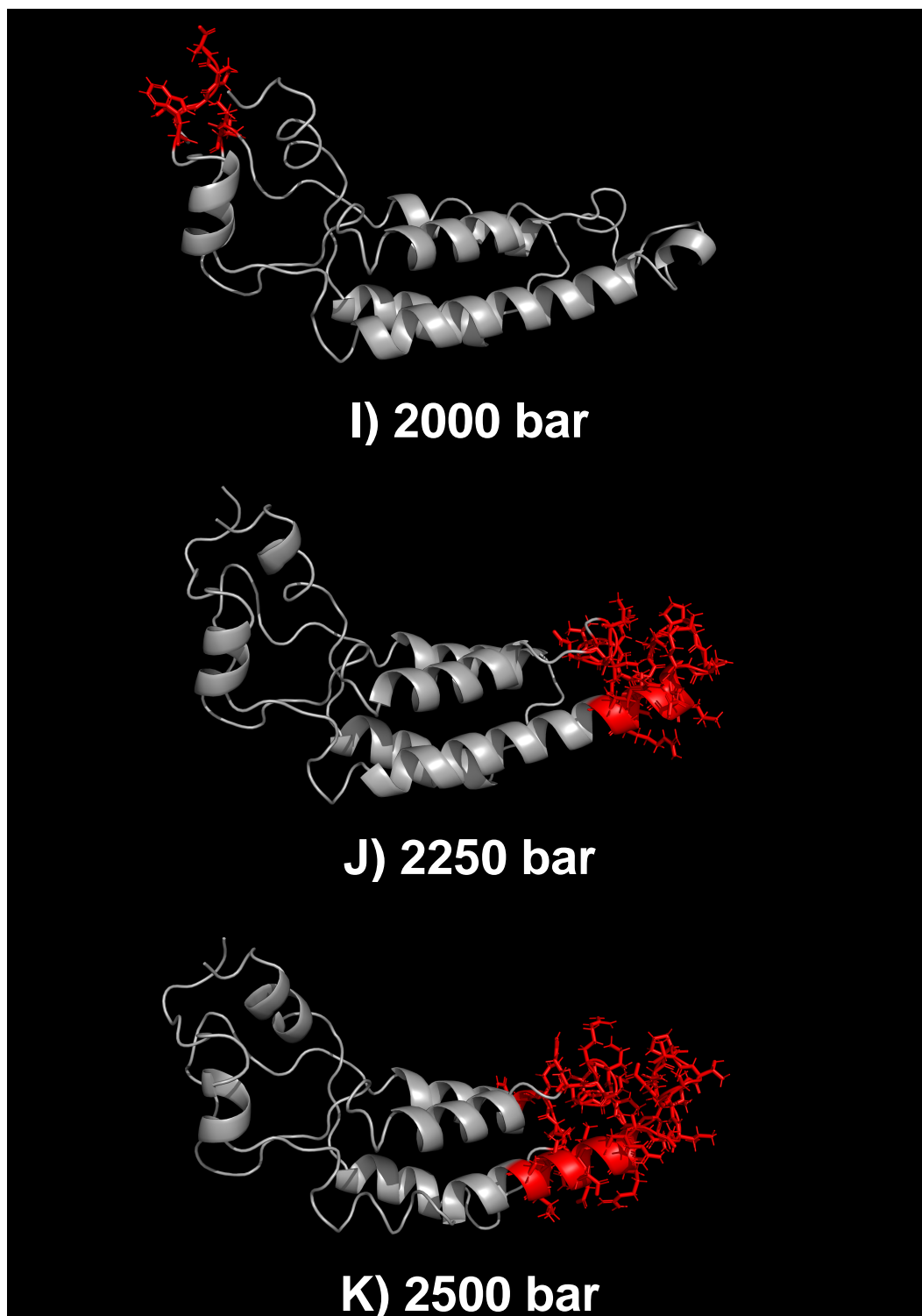


Figure 5: Discontinuo Epitope Preditons - High Hydrostatic Pressure

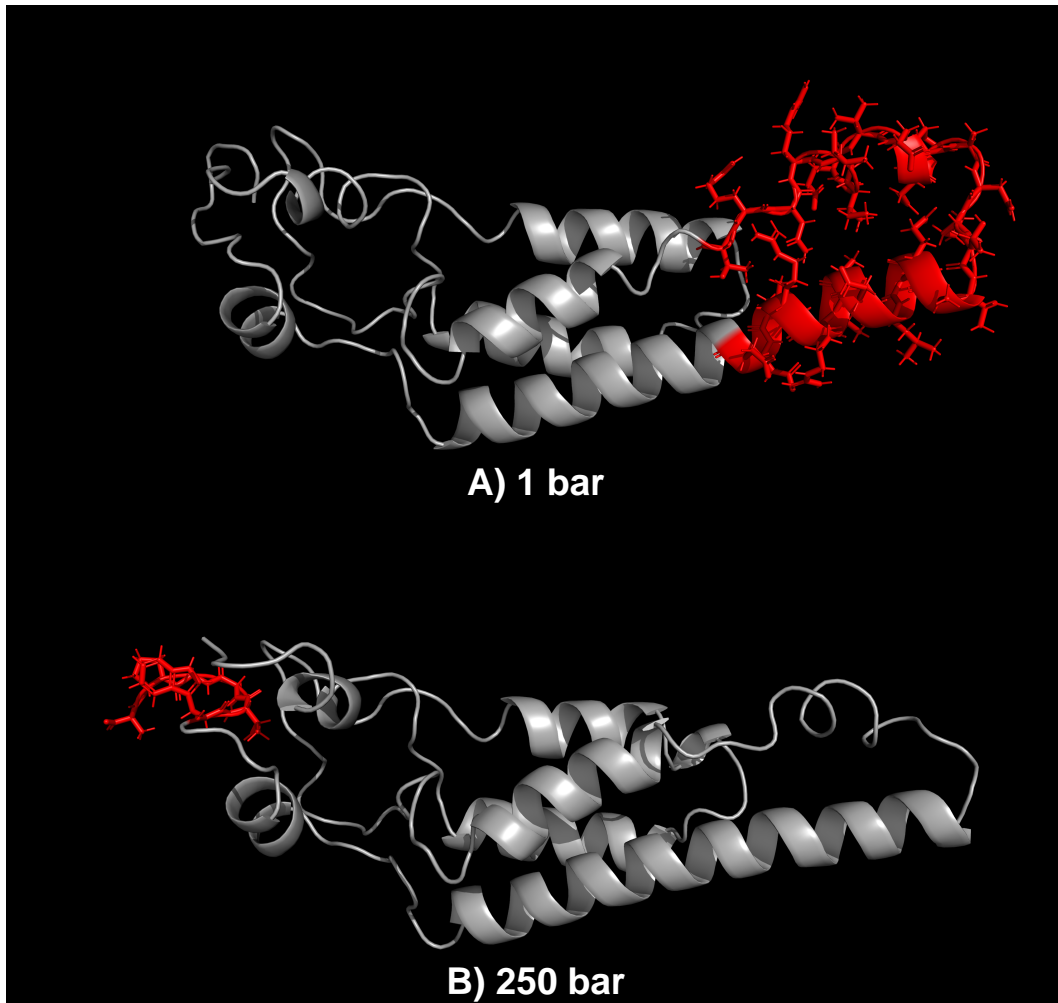


Figure 6: Discontinuo Epitope Preditions - High Hydrostatic Pressure and Low Temperature

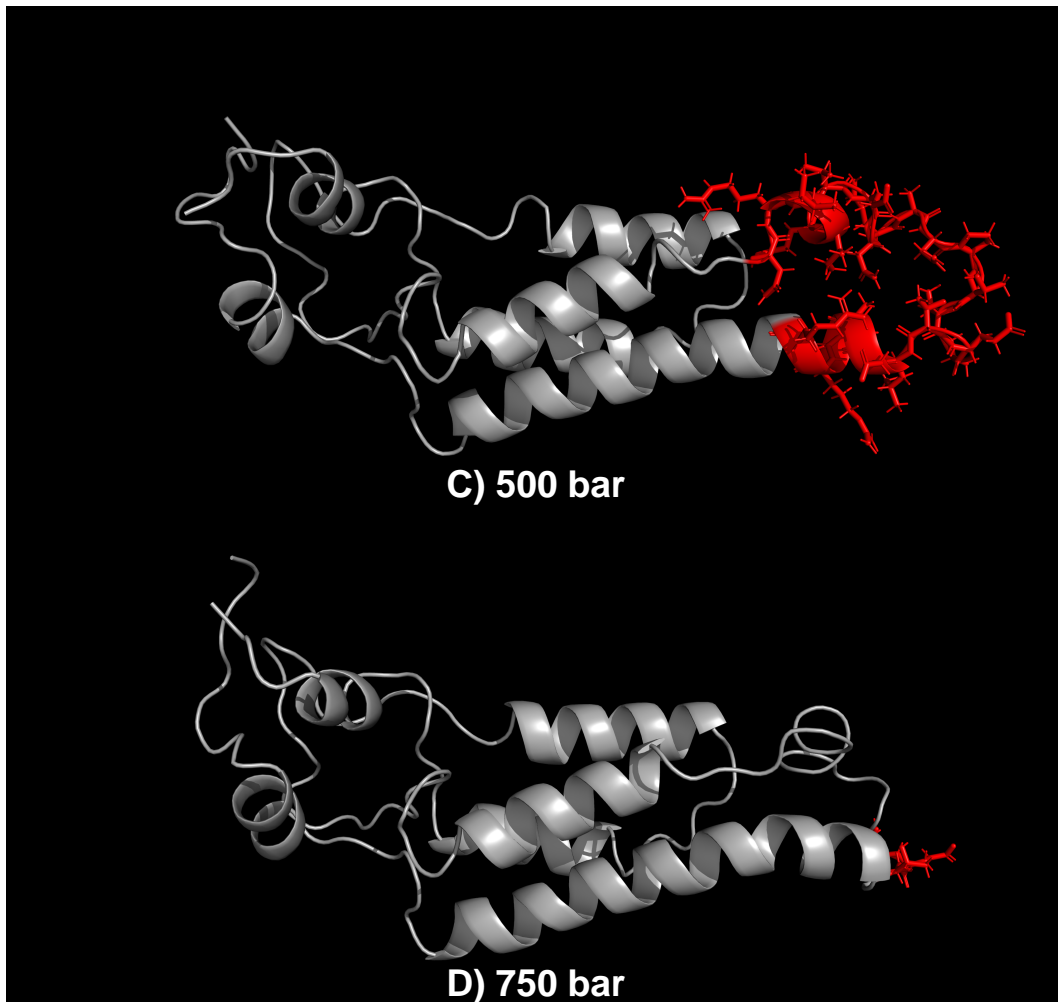


Figure 7: Discontinuo Epitope Preditions - High Hydrostatic Pressure and Low Temperature

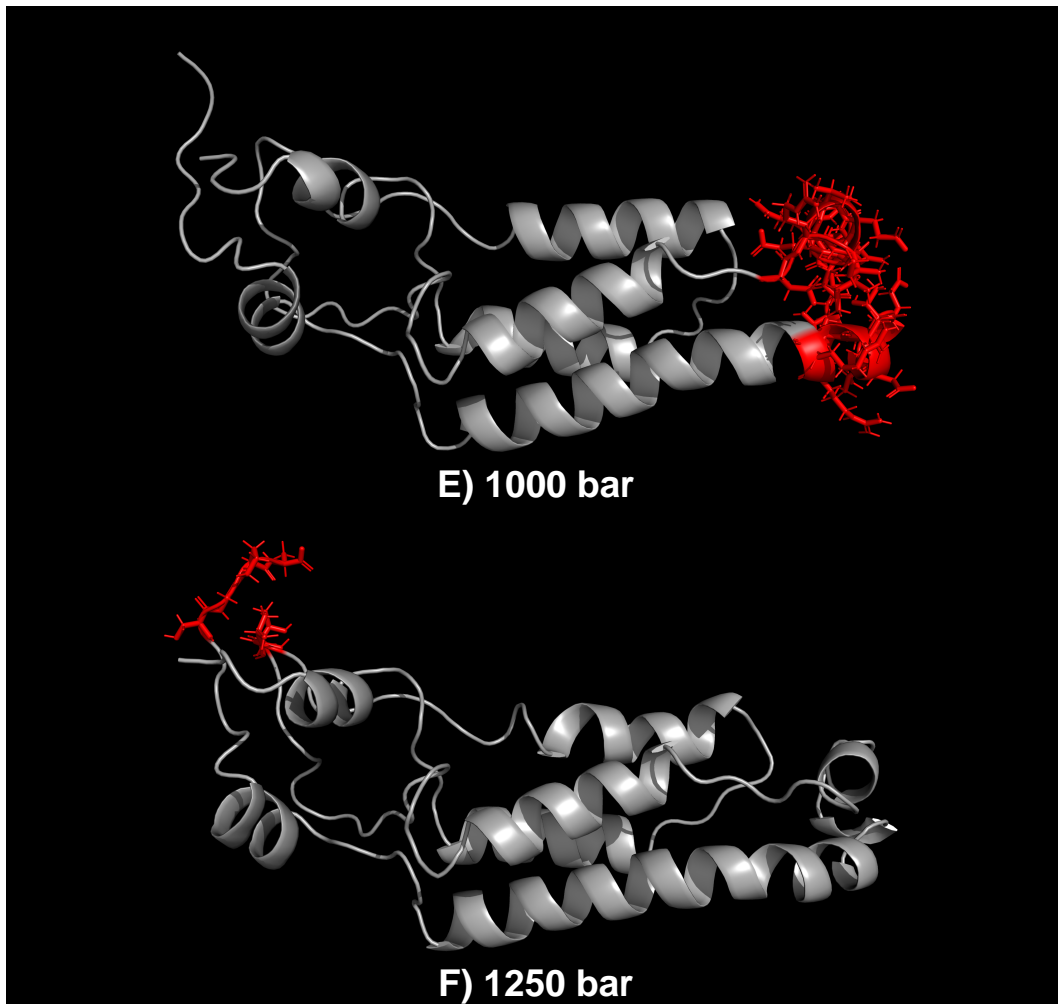


Figure 8: Discontinuo Epitope Preditions - High Hydrostatic Pressure and Low Temperature

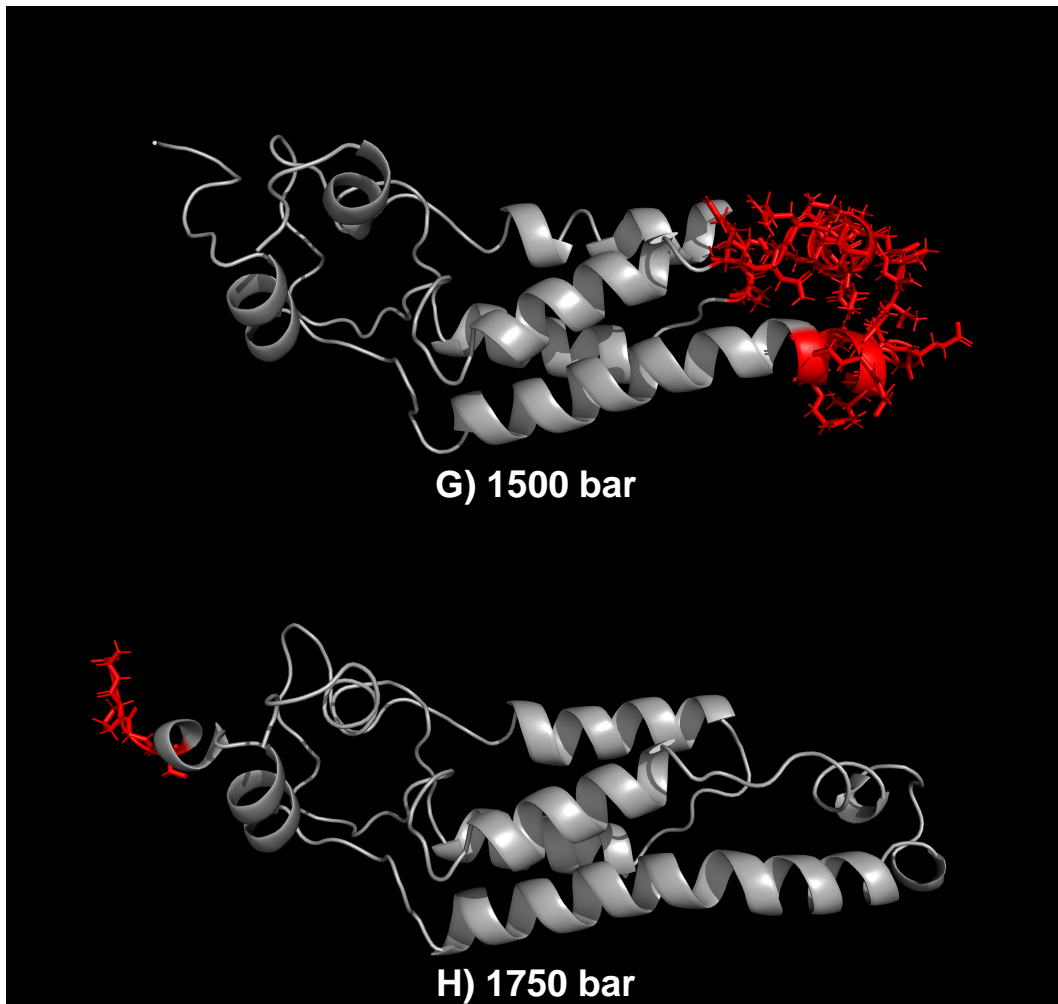


Figure 9: Discontinuo Epitope Preditions - High Hydrostatic Pressure and Low Temperature

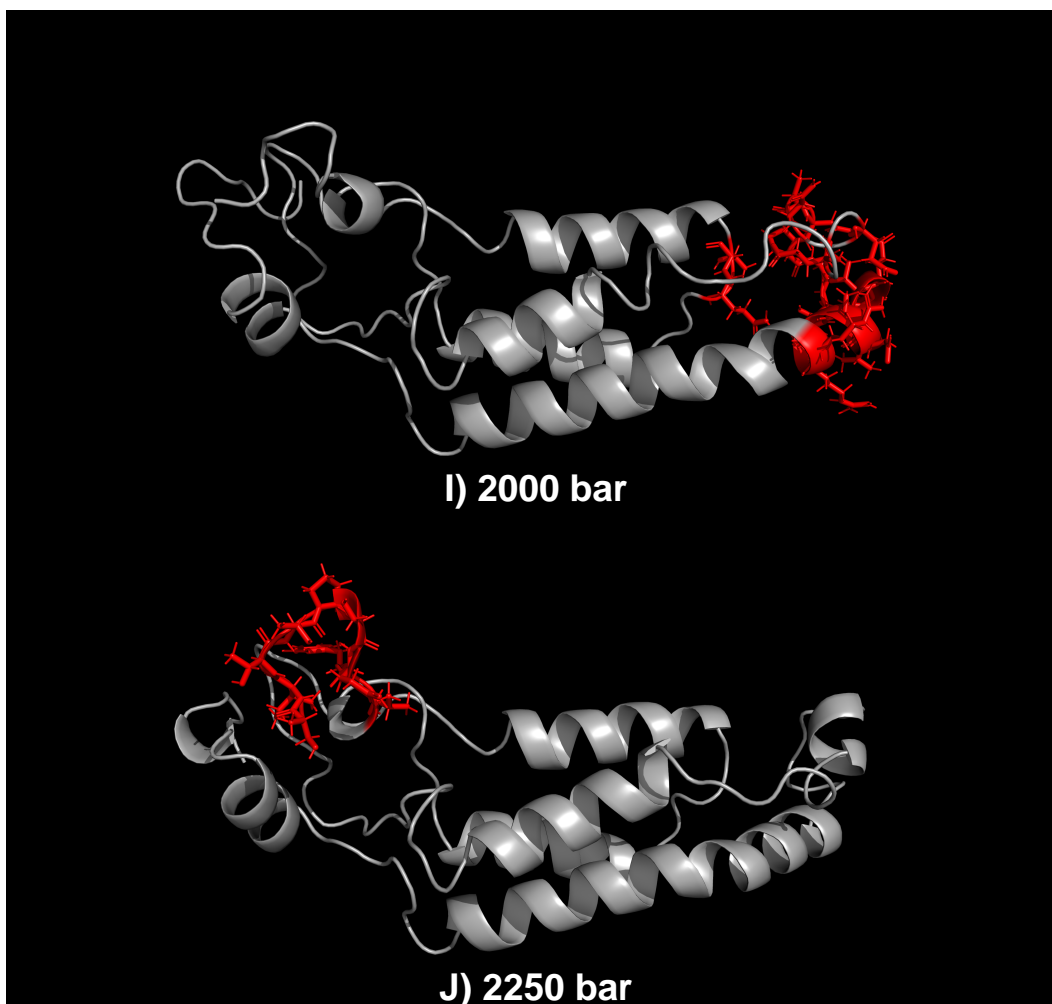


Figure 10: Discontinuo Epitope Preditons - High Hydrostatic Pressure and Low Temperature

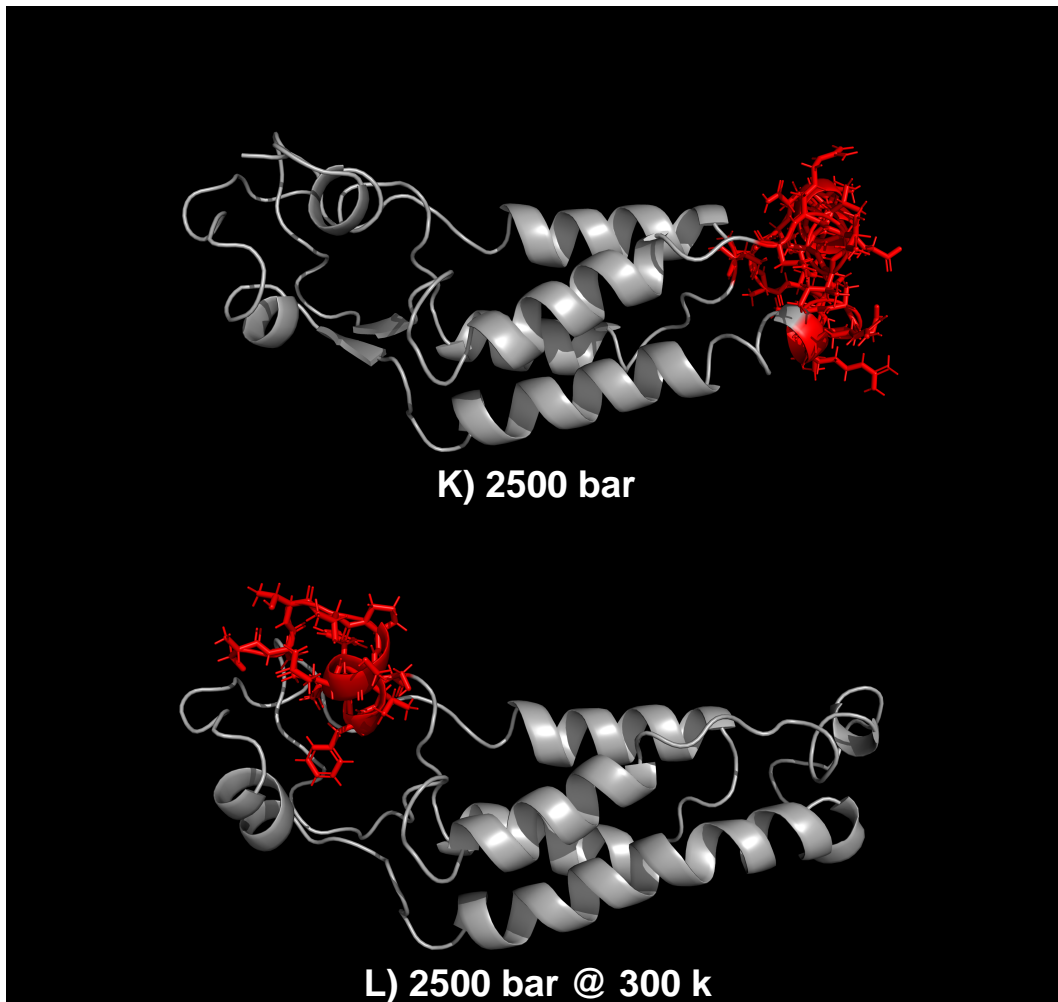


Figure 11: Discontinuo Epitope Preditons - High Hydrostatic Pressure and Low Temperature

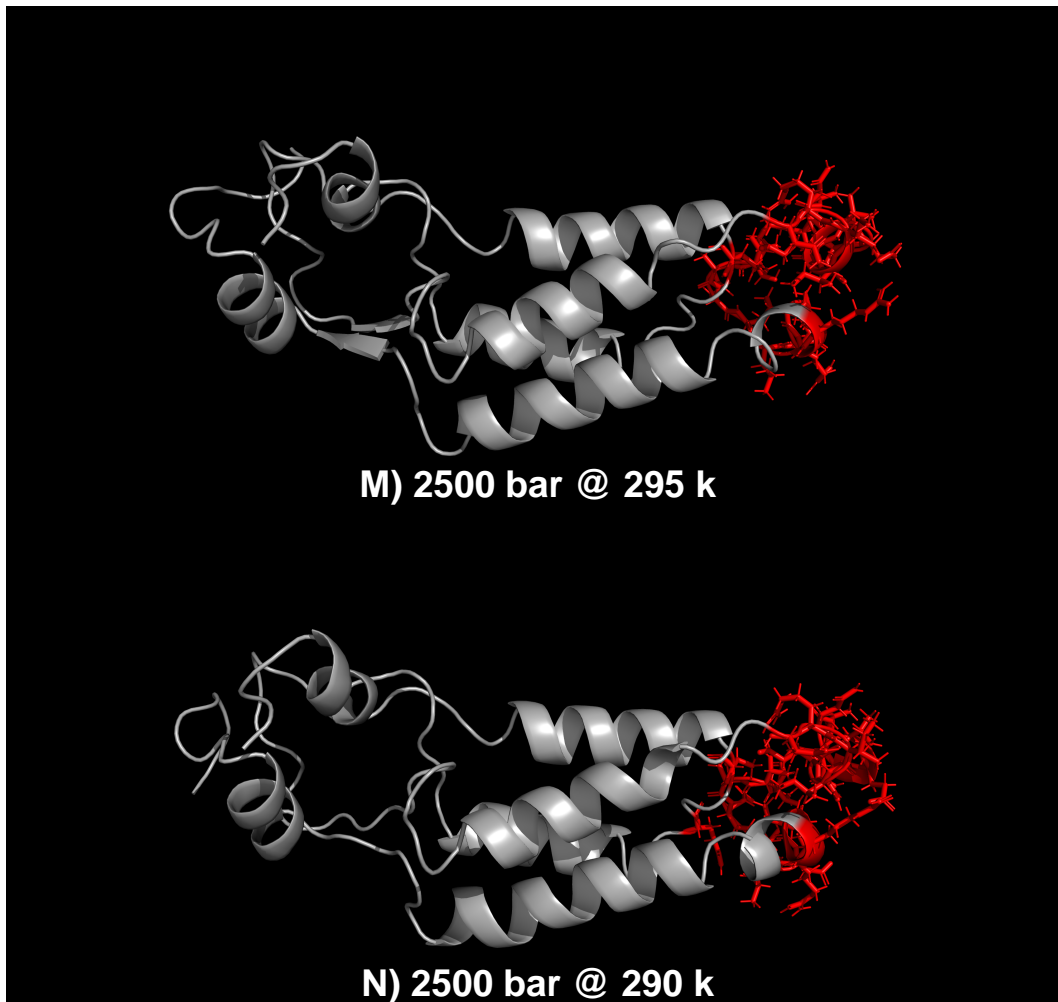


Figure 12: Discontinuo Epitope Preditons - High Hydrostatic Pressure and Low Temperature

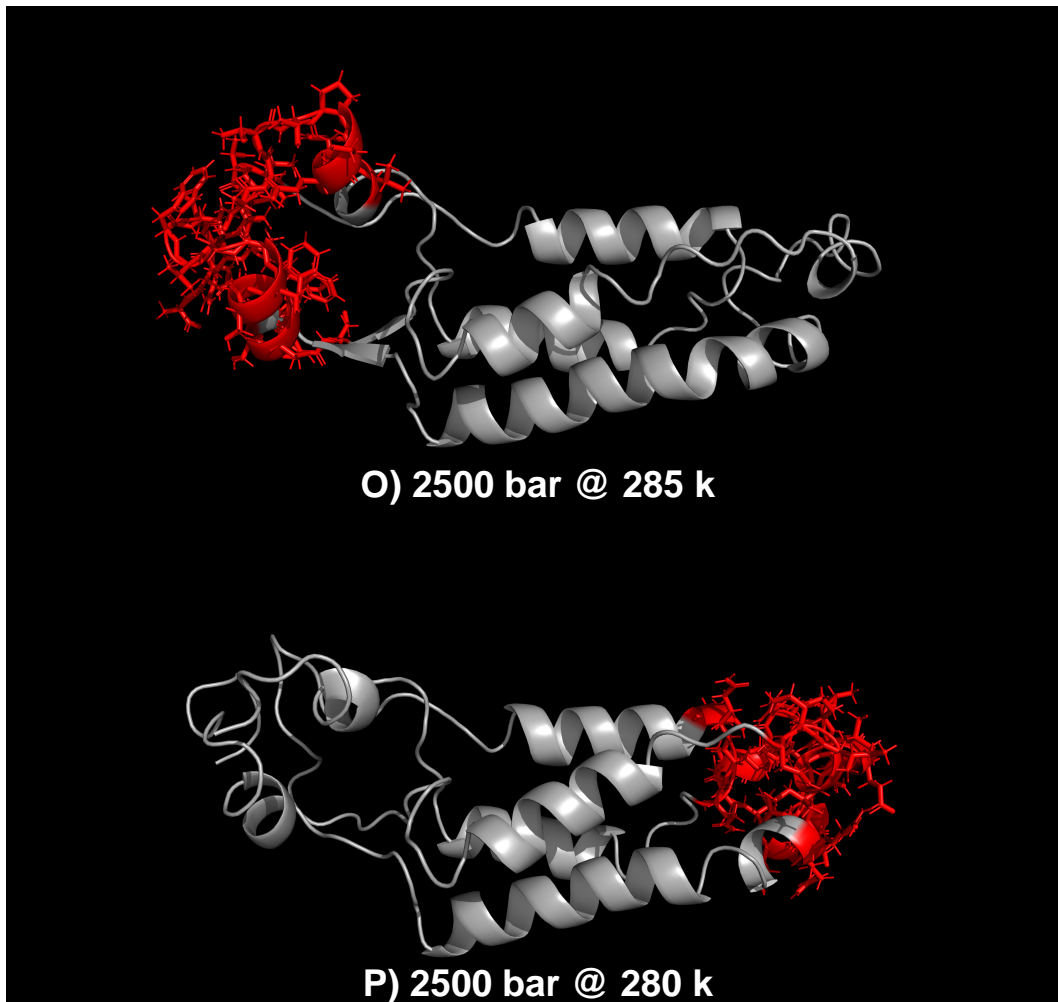


Figure 13: Discontinuo Epitope Preditons - High Hydrostatic Pressure and Low Temperature

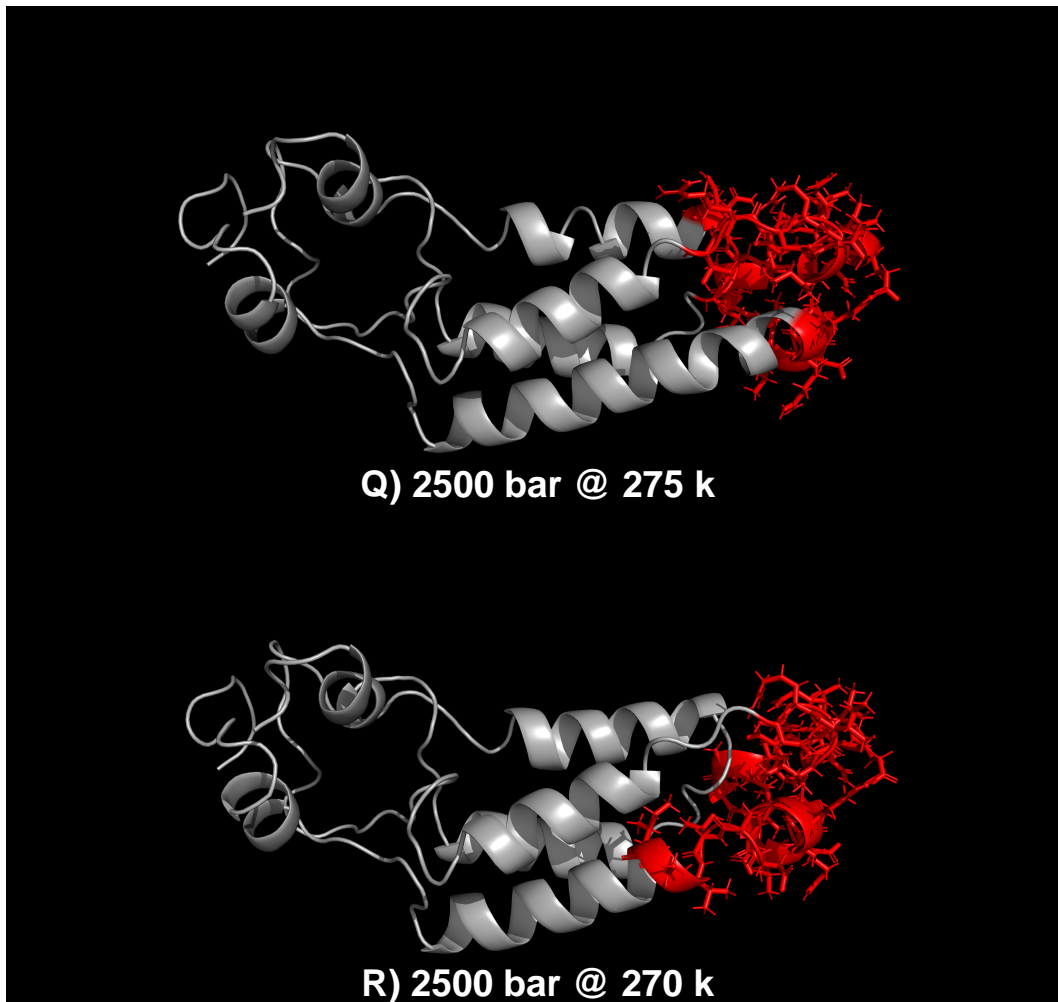


Figure 14: Discontinuo Epitope Preditons - High Hydrostatic Pressure and Low Temperature

HHP - Ellipro tables

HHP and low temperature - Ellipro tables

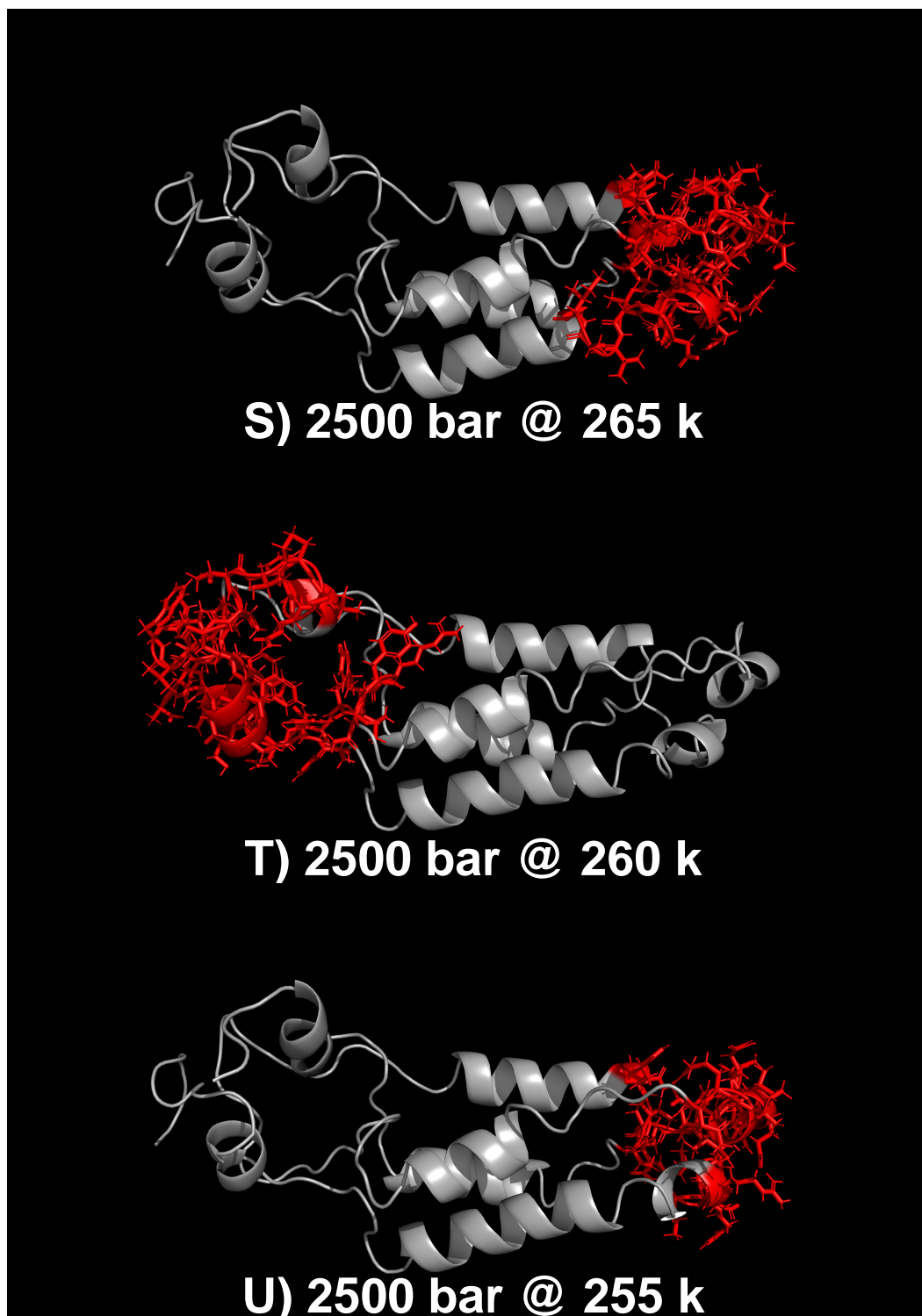


Figure 15: Discontinuo Epitope Preditions - High Hydrostatic Pressure and Low Temperature

### Ellipro HHP - md\_0\_1

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:I93, A:E97, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:P102	7	0.945	NA
2	A:R90, A:N91, A:I94, A:T103, A:T104, A:A105, A:E106, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:D115, A:D116	16	0.694	NA
3	A:I4, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:S55, A:V58, A:T59, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:N140, A:R141, A:S142, A:S146, A:S147, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:V152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	33	0.679	NA
4	A:N126, A:I129, A:V130	3	0.639	NA
5	A:P56, A:Q57, A:V60	3	0.583	NA
6	A:L31, A:G32, A:N33, A:Q34, A:F35, A:Q36, A:T37	7	0.518	NA
7	A:D19, A:P20, A:I21	3	0.512	NA

Figure 16: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-1

### Ellipro HHP - md\_0\_2

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:P56, A:Q57, A:V58, A:T59, A:V60, A:W152, A:S154, A:P156, A:A157	11	0.757	NA
2	A:R90, A:N91, A:I93, A:I94, A:E95, A:V96, A:E97, A:N98, A:P102, A:T103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:R113	23	0.75	NA
3	A:I24, A:T28, A:N126, A:N127, A:I129, A:V130, A:I133	7	0.666	NA
4	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:L13, A:R61, A:N139, A:N140, A:R141, A:S142, A:S143, A:E145, A:S146, A:S147, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:T153	24	0.664	NA
5	A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67	5	0.609	NA
6	A:N29, A:L31, A:G32, A:N33, A:Q34, A:F35, A:Q36	7	0.5	NA

Figure 17: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-2

**Ellipro HHP - md\_0\_3**

No.	Residues	mber of residu	Score	3D structure
1	A:N91, A:I93, A:I94, A:E95, A:V96, A:E97, A:N98, A:Q99, A:P101, A:P102, A:T103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L109, A:A110, A:T111, A:R112	22	0.8	NA
2	A:I4, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:P56, A:Q57, A:V58, A:T59, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:Y139, A:N140, A:R141, A:F144, A:E145, A:S146, A:S147, A:S148, A:G149, A:L151, A:W152, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	34	0.683	NA
3	A:T28, A:N126, A:N127, A:I129, A:V130	5	0.661	NA
4	A:Q39, A:T42, A:V43	3	0.611	NA

Figure 18: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-3

**Ellipro HHP - md\_0\_4**

No.	Residues	mber of residu	Score	3D structure
1	A:R90, A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:V96, A:E97, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:A105, A:E106, A:T107, A:D109, A:R112, A:R113	22	0.773	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:L13, A:P56, A:T59, A:V60, A:R61, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:R141, A:S142, A:S143, A:F144, A:E145, A:S146, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:C156, A:A157	39	0.687	NA
3	A:T28, A:N126, A:N127, A:I129, A:V130	5	0.666	NA
4	A:N25, A:N29, A:G32, A:N33, A:Q34, A:F35, A:Q36	7	0.551	NA

Figure 19: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-4

### Ellipro HHP - md\_0\_5

No.	Residues	mber of residu	Score	3D structure
1	A:N91, A:I93, A:I94, A:E95, A:V96, A:E97, A:N98, A:Q99, A:P101, A:P102, A:T103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:R112	20	0.827	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11, A:L13, A:V57, A:V58, A:T59, A:V60, A:R61, A:F62, A:Y139, A:N140, A:I141, A:S142, A:S143, A:E145, A:S146, A:S147, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	35	0.681	NA
3	A:L31, A:G32, A:N33, A:Q34	4	0.619	NA
4	A:N73, A:A74, A:V75, A:N126, A:I129, A:V130, A:E131, A:I133, A:R134, A:G135, A:T136, A:G137, A:S138	15	0.509	NA
5	A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:K68	6	0.501	NA

Figure 20: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-5

### Ellipro HHP - md\_0\_6

No.	Residues	mber of residu	Score	3D structure
1	A:N91, A:I94, A:E95, A:V96, A:E97, A:N98, A:Q99, A:A100, A:P102, A:T103, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112	20	0.787	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:L13, A:P56, A:T59, A:V60, A:R61, A:F62, A:Y139, A:N140, A:R141, A:I143, A:E145, A:S146, A:S147, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	34	0.69	NA
3	A:I24, A:T28, A:N126, A:N127, A:I129, A:V130	6	0.653	NA
4	A:N25, A:N29, A:A30, A:L31, A:G32, A:N33, A:Q34	7	0.606	NA
5	A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67	5	0.572	NA

Figure 21: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-6

**Ellipro HHP - md\_0\_7**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:T37, A:Q38, A:T42, A:T89, A:R90, A:N91, A:I94, A:E95, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:T104, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:R112, A:R113	25	0.725	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:P56, A:Q57, A:V58, A:D60, A:R61, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:N140, A:F142, A:S143, A:F144, A:E145, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	33	0.722	NA
3	A:N126, A:V130, A:E131, A:R134, A:T136	5	0.679	NA
4	A:I24, A:N25, A:T28	3	0.654	NA

Figure 22: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-7

**Ellipro HHP - md\_0\_8**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:Q39, A:I93, A:V96, A:E97, A:A100, A:N101, A:P102, A:I103, A:T104, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:R112, A:R113	9	0.842	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:P56, A:Q57, A:V58, A:D60, A:R61, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:N140, A:F142, A:S143, A:F144, A:E145, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	29	0.741	NA
3	A:I94, A:N98, A:Q99, A:T103, A:A105, A:E106, A:T107, A:I108, A:A110, A:T111, A:R112, A:R113, A:D115, A:D116, A:V117, A:V118, A:V119, A:V120, A:V121, A:V122, A:V123, A:V124, A:V125, A:V126, A:V127, A:V128, A:V129, A:V130, A:V131, A:V132, A:V133, A:V134, A:V135, A:V136, A:V137, A:V138, A:V139, A:V140, A:V141, A:V142, A:V143, A:V144, A:V145, A:V146, A:V147, A:V148, A:V149, A:V150, A:V151, A:V152, A:V153, A:V154, A:V155, A:V156, A:V157, A:V158, A:V159, A:V160, A:V161, A:V162, A:V163, A:V164, A:V165, A:V166, A:V167, A:V168, A:V169, A:V170, A:V171, A:V172, A:V173, A:V174, A:V175, A:V176, A:V177, A:V178, A:V179, A:V180, A:V181, A:V182, A:V183, A:V184, A:V185, A:V186, A:V187, A:V188, A:V189, A:V190, A:V191, A:V192, A:V193, A:V194, A:V195, A:V196, A:V197, A:V198, A:V199, A:V200	17	0.741	NA
4	A:S123, A:N126, A:N127, A:V130	4	0.623	NA
5	A:L31, A:G32, A:N33, A:Q34	4	0.584	NA
6	A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:K68	6	0.531	NA

Figure 23: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-8

**Ellipro HHP - md\_0\_9**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:V58, A:T59, A:W152, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	7	0.938	NA
2	A:V36, A:T37, A:N91, A:I93, A:I94, A:E97, A:N98, A:Q99, A:A101, A:P102, A:T103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L109, A:A110, A:T111, A:R112, A:R113	22	0.762	NA
3	A:N25, A:T28, A:N29	3	0.671	NA
4	A:N126, A:N127, A:V130	3	0.654	NA
5	A:I14, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11, A:R61, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:K68, A:Y139, A:N140, A:L142, A:S143, A:E145, A:S146, A:S147, A:S148, A:G149, A:L151, A:T153	30	0.64	NA
6	A:Q38, A:R90, A:R92, A:E95, A:V96	5	0.622	NA
7	A:A74, A:V75, A:E131, A:R134, A:G135, A:T136, A:G137,	9	0.506	NA
8	A:L13, A:P56, A:Q57, A:V60	4	0.5	NA

Figure 24: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-9

**Ellipro HHP - md\_0\_10**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:I91, A:I93, A:I94, A:E95, A:V96, A:E97, A:N98, A:Q99, A:A101, A:P102, A:T103, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:C110, A:T111, A:R112, A:R113	21	0.786	NA
2	A:I14, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11, A:F12, A:Q57, A:V58, A:T59, A:V60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:F67, A:Y139, A:N140, A:R141, A:S142, A:S143, A:E145, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	41	0.672	NA
3	A:D19, A:I21, A:I24, A:T28, A:L132	5	0.557	NA
4	A:G32, A:N33, A:Q34	3	0.516	NA
5	A:I73, A:A74, A:V75, A:R134, A:G135, A:T136, A:G137, A:S138	8	0.504	NA

Figure 25: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-10

**Ellipro HHP - Sheet11**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:T37, A:Q38, A:Q39, A:R90, A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E97, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:A105, A:E106, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:R113, A:D116, A:A114, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:P56, A:Q57, A:V58, A:F60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:Y69, A:R141, A:S142, A:S143, A:E145, A:S146, A:S147, A:S149, A:L150, A:V151, A:W152, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	27	0.711	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:P56, A:Q57, A:V58, A:F60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:Y69, A:R141, A:S142, A:S143, A:E145, A:S146, A:S147, A:S149, A:L150, A:V151, A:W152, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	36	0.69	NA
3	A:I4, A:T28, A:N126, A:N127, A:I129, A:V130, A:L132, A:I133, A:T136	8	0.601	NA
4	A:N73, A:A74, A:V75, A:E131, A:R134, A:G135, A:T136	7	0.533	NA

Figure 26: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-11

**Ellipro HHP-LT - md\_0\_1\_HT**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:N91, A:I93, A:I94, A:E95, A:E97, A:N98, A:Q99, A:A101, A:P102, A:T103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:D115	22	0.796	NA
2	A:N25, A:T28, A:N29	3	0.729	NA
3	A:I4, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11, A:V58, A:T59, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:N140, A:R141, A:S145, A:S146, A:S147, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	33	0.683	NA
4	A:G32, A:N33, A:Q34	3	0.613	NA
5	A:P56, A:Q57, A:V60	3	0.57	NA

Figure 27: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-1

**Ellipro HHP-LT - md\_0\_2\_HT**

No.	Residues	number of residue	Score	3D structure
1	A:V151, A:W152, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	6	0.83	NA
2	A:N91, A:I94, A:E95, A:E97, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N102, A:T103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D110, A:T111, A:R112, A:R113, A:D116, A:V119, A:R122	24	0.736	NA
3	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11, A:R61, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:N73, A:A74, A:V75, A:E34, A:G135, A:T136, A:G137, A:S138, A:Y139, A:N140, A:F42, A:S143, A:S146, A:S147, A:S148, A:G149, A:L150, A:T151	36	0.623	NA
4	A:S55, A:P56, A:Q57, A:V60	4	0.55	NA
5	A:N29, A:G32, A:N33, A:Q34	4	0.542	NA

Figure 28: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-2

**Ellipro HHP-LT - md\_0\_3\_HT**

No.	Residues	number of residue	Score	3D structure
1	A:I93, A:I94, A:E97, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:F103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:R113	20	0.817	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	17	0.805	NA
3	A:P56, A:Q57, A:V58, A:T59, A:V60	5	0.701	NA
4	A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:K68, A:N73, A:A74, A:R134, A:G135, A:T136, A:G137, A:S138, A:N140, A:F141, A:S142, A:E145, A:T153	21	0.572	NA
5	A:G32, A:N33, A:Q34, A:F35	4	0.561	NA

Figure 29: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-3

**Ellipro HHP-LT - md\_0\_4\_HT**

...2	...3	...4	...5	
No.	Residues	number of residue	Score	3D structure
1	A:A105, A:E106, A:T107	3	0.935	NA
2	A:L13, A:P56, A:Q57, A:V58, A:T59, A:G149, A:L150, A:V151	21	0.756	NA
3	A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:T104, A:F103	22	0.745	NA
4	A:S65, A:D66, A:F67, A:Y139, A:N140, A:R141, A:S142, A:F141	15	0.628	NA
5	A:D19, A:I21, A:E22, A:N25	4	0.561	NA

Figure 30: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-4

**Ellipro HHP-LT - MD\_0\_5\_HT**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:V96, A:N98, A:A100, A:N102, A:T103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D110, A:R112, A:R113	20	0.833	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:L13, A:P56, A:T59, A:V60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:I11, A:S142, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:G155, A:P156, A:A157	32	0.715	NA
3	A:A74, A:V75, A:V130, A:E131, A:R134, A:G135, A:T136, A:S138	10	0.529	NA

Figure 31: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-5

**Ellipro HHP-LT - MD\_0\_6\_HT**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:V58, A:T59, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	6	0.94	NA
2	A:I36, A:T37, A:N91, A:I93, A:I94, A:E95, A:N98, A:Q99, A:A101, A:P102, A:T103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:R112, A:R113	21	0.778	NA
3	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11, A:R61, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:K68, A:Y139, A:N140, A:I142, A:S143, A:E145, A:S146, A:S147, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153	31	0.645	NA
4	A:Q39, A:T42, A:V43	3	0.611	NA
5	A:A74, A:V75, A:V130, A:E131, A:R134, A:G135, A:T136	8	0.573	NA
6	A:P56, A:Q57, A:V60	3	0.561	NA

Figure 32: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-6

**Ellipro HHP-LT - MD\_0\_7\_HT**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:T37, A:R90, A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:V96, A:Q99, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:A105, A:E106, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:R113	25	0.77	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:L13, A:P56, A:T59, A:V60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:R141, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:P156, A:A157	32	0.715	NA

Figure 33: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-7

**Ellipro HHP-LT - MD\_0\_8\_HT**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	4	0.911	NA
2	A:E97, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112	18	0.812	NA
3	A:S3, A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11	9	0.801	NA
4	A:P56, A:Q57, A:V60	3	0.637	NA
5	A:Q38, A:Q39, A:T42, A:R90, A:N91, A:R92, A:E95	7	0.615	NA
6	A:I1, A:F62, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:K68, A:S:A:R141, A:S142, A:S146, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152	18	0.58	NA
7	A:N73, A:A74, A:V75, A:R134, A:G135, A:T136, A:G137	7	0.501	NA

Figure 34: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-8

**Ellipro HHP-LT - MD\_0\_9\_HT**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:I3, A:T37, A:E95, A:E97, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:A:R103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A:A:T111, A:R112, A:R113	20	0.76	NA
2	A:R90, A:N91, A:R92, A:I93, A:I94	5	0.735	NA
3	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:P56, A:Q57, A:V58, A:A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:Y:A:R141, A:S142, A:S143, A:E145, A:S146, A:S147, A:S:A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156	37	0.695	NA
4	A:N126, A:N127, A:V130	3	0.602	NA
5	A:A74, A:V75, A:E131, A:R134, A:G135, A:T136, A:G137,	9	0.513	NA

Figure 35: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-9

**Ellipro HHP-LT - MD\_0\_10\_HT**

No.	Residues	mber of residu	Score	3D structure
1	A:S3, A:I4, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10	6	0.825	NA
2	A:V96, A:E97, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:P102, A:O5, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:R112, A:F	17	0.822	NA
3	A:R90, A:N91, A:R92, A:I93, A:I94	5	0.726	NA
4	A:Q57, A:V58, A:T59, A:V60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:F67, A:N140, A:R141, A:S142, A:E145, A:S146, A:S147, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156	28	0.685	NA
5	A:G32, A:N33, A:Q34	3	0.533	NA
6	A:A74, A:V75, A:L76, A:N127, A:V130, A:E131, A:R134, A:T136, A:G137, A:S138	12	0.521	NA

Figure 36: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-10

**Ellipro HHP-LT - MD\_0\_11\_HT**

No.	Residues	mber of residu	Score	3D structure
1	A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:V96, A:E97, A:N98, A:O5, A:N101, A:P102, A:T103, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:R112, A:R113	22	0.811	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11, A:L13, A:V58, A:T59, A:V60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:S65, A:G68, A:S142, A:E145, A:S147, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	35	0.716	NA
3	A:I73, A:A74, A:V75, A:E131, A:R134, A:G135, A:T136, A:G137	8	0.562	NA
4	A:D115, A:D116, A:A117, A:V119	4	0.544	NA

Figure 37: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-11

**Ellipro HHP-LT - md\_0\_12\_HT**

No.	Residues	mber of residu	Score	3D structure
1	A:S3, A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:L13	9	0.814	NA
2	A:E97, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:O5, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:F	17	0.784	NA
3	A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:R113	6	0.748	NA
4	A:Q57, A:V58, A:T59, A:V60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:F67, A:N140, A:R141, A:S142, A:E145, A:S146, A:S147, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156	28	0.689	NA
5	A:A74, A:V75, A:E131, A:R134, A:G135, A:T136, A:G137	9	0.52	NA

Figure 38: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-12

### Ellipro HHP-LT - md\_0\_13\_HT

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:V96, A:E97, A:N98, A:Y99, A:N101, A:P102, A:T103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:R113	24	0.776	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:P56, A:Q57, A:V60, A:A61, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:R141, A:S142, A:E145, A:A146, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:A154, A:G155, A:P156, A:A157	31	0.728	NA
3	A:N126, A:N127, A:V130	3	0.643	NA
4	A:D116, A:A117, A:V119	3	0.617	NA
5	A:D88, A:T89, A:R90	3	0.576	NA
6	A:I73, A:A74, A:V75, A:E131, A:R134, A:G135, A:T136, A:G137	8	0.528	NA

Figure 39: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-13

### Ellipro HHP-LT - md\_0\_14\_HT

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:T37, A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:V96, A:E97, A:N98, A:Y99, A:N101, A:P102, A:T103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:R112, A:R113	24	0.782	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11, A:P56, A:A57, A:T59, A:V60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:A67, A:S142, A:E145, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:A153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	33	0.749	NA
3	A:A74, A:V75, A:N126, A:V130, A:E131, A:I133, A:R134, A:A135	9	0.609	NA

Figure 40: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-14

**ElliPro HHP-LT - md\_0\_15\_HT**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11, A:P56, A:R58, A:V60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:R12, A:E145, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	32	0.739	NA
2	A:Q36, A:T37, A:T89, A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:T104, A:R106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:F113, A:V114, A:V115, A:V116, A:V117, A:V118, A:V119, A:V120, A:V121, A:V122, A:V123, A:V124, A:V125, A:V126, A:V127, A:V128, A:V129, A:V130, A:V131, A:V132, A:V133, A:V134, A:V135, A:V136, A:V137, A:V138, A:V139, A:V140, A:V141, A:V142, A:V143, A:V144, A:V145, A:V146, A:V147, A:V148, A:V149, A:V150, A:V151, A:V152, A:V153, A:V154, A:V155, A:V156, A:V157, A:V158, A:V159, A:V160, A:V161, A:V162, A:V163, A:V164, A:V165, A:V166, A:V167, A:V168, A:V169, A:V170, A:V171, A:V172, A:V173, A:V174, A:V175, A:V176, A:V177, A:V178, A:V179, A:V180, A:V181, A:V182, A:V183, A:V184, A:V185, A:V186, A:V187, A:V188, A:V189, A:V190, A:V191, A:V192, A:V193, A:V194, A:V195, A:V196, A:V197, A:V198, A:V199, A:V200	27	0.73	NA
3	A:A74, A:V75, A:L76, A:N126, A:N127, A:V130, A:E131, A:R132, A:V133, A:V134, A:V135, A:V136, A:V137, A:V138, A:V139, A:V140, A:V141, A:V142, A:V143, A:V144, A:V145, A:V146, A:V147, A:V148, A:V149, A:V150, A:V151, A:V152, A:V153, A:V154, A:V155, A:V156, A:V157, A:V158, A:V159, A:V160, A:V161, A:V162, A:V163, A:V164, A:V165, A:V166, A:V167, A:V168, A:V169, A:V170, A:V171, A:V172, A:V173, A:V174, A:V175, A:V176, A:V177, A:V178, A:V179, A:V180, A:V181, A:V182, A:V183, A:V184, A:V185, A:V186, A:V187, A:V188, A:V189, A:V190, A:V191, A:V192, A:V193, A:V194, A:V195, A:V196, A:V197, A:V198, A:V199, A:V200	11	0.535	NA

Figure 41: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-15

**ElliPro HHP-LT - md\_0\_16\_HT**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:Q36, A:T37, A:Q39, A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:T104, A:R106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:F113, A:V114, A:V115, A:V116, A:V117, A:V118, A:V119, A:V120, A:V121, A:V122, A:V123, A:V124, A:V125, A:V126, A:V127, A:V128, A:V129, A:V130, A:V131, A:V132, A:V133, A:V134, A:V135, A:V136, A:V137, A:V138, A:V139, A:V140, A:V141, A:V142, A:V143, A:V144, A:V145, A:V146, A:V147, A:V148, A:V149, A:V150, A:V151, A:V152, A:V153, A:V154, A:V155, A:V156, A:V157, A:V158, A:V159, A:V160, A:V161, A:V162, A:V163, A:V164, A:V165, A:V166, A:V167, A:V168, A:V169, A:V170, A:V171, A:V172, A:V173, A:V174, A:V175, A:V176, A:V177, A:V178, A:V179, A:V180, A:V181, A:V182, A:V183, A:V184, A:V185, A:V186, A:V187, A:V188, A:V189, A:V190, A:V191, A:V192, A:V193, A:V194, A:V195, A:V196, A:V197, A:V198, A:V199, A:V200	27	0.737	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:V11, A:S14, A:P56, A:R58, A:V60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:R12, A:E145, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	37	0.709	NA
3	A:N126, A:N127, A:V130	3	0.589	NA

Figure 42: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-16

**ElliPro HHP-LT - md\_0\_17\_HT**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:Q36, A:T37, A:T89, A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:T104, A:R106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:F113, A:V114, A:V115, A:V116, A:V117, A:V118, A:V119, A:V120, A:V121, A:V122, A:V123, A:V124, A:V125, A:V126, A:V127, A:V128, A:V129, A:V130, A:V131, A:V132, A:V133, A:V134, A:V135, A:V136, A:V137, A:V138, A:V139, A:V140, A:V141, A:V142, A:V143, A:V144, A:V145, A:V146, A:V147, A:V148, A:V149, A:V150, A:V151, A:V152, A:V153, A:V154, A:V155, A:V156, A:V157, A:V158, A:V159, A:V160, A:V161, A:V162, A:V163, A:V164, A:V165, A:V166, A:V167, A:V168, A:V169, A:V170, A:V171, A:V172, A:V173, A:V174, A:V175, A:V176, A:V177, A:V178, A:V179, A:V180, A:V181, A:V182, A:V183, A:V184, A:V185, A:V186, A:V187, A:V188, A:V189, A:V190, A:V191, A:V192, A:V193, A:V194, A:V195, A:V196, A:V197, A:V198, A:V199, A:V200	27	0.738	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:R61, A:F62, A:P63, A:D66, A:F67, A:N140, A:R141, A:S142, A:E145, A:S146, A:C147, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	29	0.736	NA
3	A:S55, A:P56, A:Q57, A:V58, A:T59, A:V60	6	0.602	NA
4	A:A74, A:V75, A:N126, A:N127, A:V130, A:E131, A:R134, A:V135, A:V136, A:V137, A:V138, A:V139, A:V140, A:V141, A:V142, A:V143, A:V144, A:V145, A:V146, A:V147, A:V148, A:V149, A:V150, A:V151, A:V152, A:V153, A:V154, A:V155, A:V156, A:V157, A:V158, A:V159, A:V160, A:V161, A:V162, A:V163, A:V164, A:V165, A:V166, A:V167, A:V168, A:V169, A:V170, A:V171, A:V172, A:V173, A:V174, A:V175, A:V176, A:V177, A:V178, A:V179, A:V180, A:V181, A:V182, A:V183, A:V184, A:V185, A:V186, A:V187, A:V188, A:V189, A:V190, A:V191, A:V192, A:V193, A:V194, A:V195, A:V196, A:V197, A:V198, A:V199, A:V200	10	0.601	NA

Figure 43: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-17

**ElliPro HHP-LT - md\_0\_18\_HT**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:T89, A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:V96, A:E97, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:T104, A:T107, A:L108, A:A110, A:T111, A:R112, A:R113, A:D116, A:A117, A:V119	26	0.742	NA
2	A:P56, A:Q57, A:V58, A:T59, A:V60	5	0.738	NA
3	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:R61, A:F62, A:A565, A:D66, A:F67, A:N140, A:R141, A:S142, A:E145, A:I17, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:A50, A:G155, A:P156, A:A157	31	0.726	NA
4	A:A74, A:V75, A:N126, A:N127, A:V130, A:E131, A:R134, A:T136	10	0.576	NA

Figure 44: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-18

**ElliPro HHP-LT - md\_0\_19\_HT**

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:Q36, A:T37, A:T89, A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:T104, A:D66, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:F113, A:D116, A:A117, A:V119	30	0.717	NA
2	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11, A:S14, A:A565, A:T59, A:V60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:S65, A:Y72, A:N140, A:R141, A:S142, A:E145, A:S146, A:S148, A:I150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	38	0.704	NA
3	A:N73, A:A74, A:V75, A:E131, A:I133, A:R134, A:T136	7	0.617	NA
4	A:N126, A:N127, A:V130	3	0.6	NA
5	A:G85, A:D88, A:R90	3	0.576	NA

Figure 45: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-19

### Ellipro HHP-LT - md\_0\_20\_HT

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:I4, A:T5, A:T6, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11, A:V60, A:P2, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:Y72, A:S138, A:N41, A:S142, A:E145, A:S146, A:S148, A:G149, A:L150, A:V151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	34	0.71	NA
2	A:P56, A:Q57, A:V58, A:T59	4	0.705	NA
3	A:N33, A:Q34, A:Q36, A:T37, A:Q39, A:T89, A:N91, A:R92, A:E95, A:V96, A:E97, A:N98, A:Q99, A:A100, A:N101, A:F103, A:T104, A:A105, A:E106, A:T107, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:R113, A:D116, A:A117, A:V119	33	0.694	NA
4	A:G85, A:D88, A:R90	3	0.57	NA
5	A:A74, A:V75, A:S123, A:N126, A:V130, A:E131, A:R134, A:T136	10	0.546	NA

Figure 46: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-20

### Ellipro HHP-LT - md\_0\_21\_HT

No.	Residues	number of residues	Score	3D structure
1	A:T37, A:N91, A:R92, A:I93, A:I94, A:E95, A:V96, A:E97, A:A100, A:N101, A:P102, A:T103, A:T104, A:A105, A:E106, A:L108, A:D109, A:A110, A:T111, A:R112, A:R113	25	0.754	NA
2	A:I4, A:T5, A:P7, A:S8, A:Q9, A:F10, A:V11, A:P56, A:Q57, A:V60, A:R61, A:F62, A:P63, A:D64, A:S65, A:D66, A:F67, A:S142, A:E145, A:S146, A:S147, A:S148, A:G149, A:L150, A:W151, A:W152, A:T153, A:S154, A:G155, A:P156, A:A157	36	0.721	NA
3	A:D116, A:A117, A:V119	3	0.628	NA
4	A:N73, A:A74, A:V75, A:E131, A:R134, A:G135, A:T136	7	0.523	NA

Figure 47: Residues in discontinuous epitopes from Ellipro — md-0-21