

Projet DSSP

26/06/25

Garis CLUZEAU

Introduction

Article : Kabsch, W., & Sander, C. (1983)

$$E_{elec} = q1 * q2 * f \left(\frac{1}{d_{ON}} + \frac{1}{d_{CH}} - \frac{1}{d_{OH}} - \frac{1}{d_{CN}} \right)$$

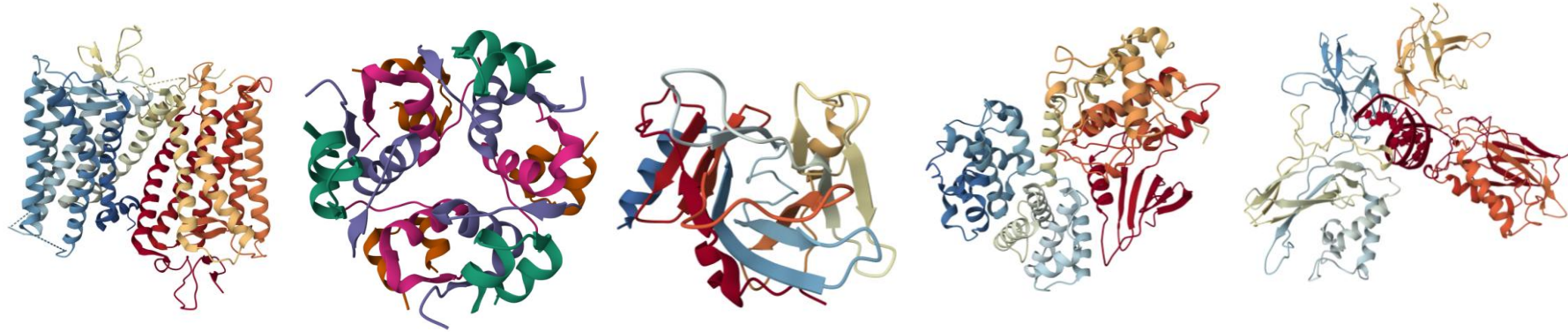
Détection de 8 structure secondaire:

- Hélice:
 - hélice 3_{10}
 - hélice α
 - hélice π
- Brin:
 - Parallèle
 - Anti parallèle
- Coude:
 - Turn
 - Bend
- Coil:

Matériel et Méthode

- Parse_pdb_residues : Parser un fichier PDB
- Combine_secondary_structure Combiner hélice + feuillet + boucle
 - Assign Identifier les hélices (α , π , 3-10)
 - Is_hydrogen_bond Déterminer si une liaison H existe
 - get_hydrogen_atom_position Estimer la position de l'atome H
 - distance_atom Calculer la distance euclidienne
 - Find_beta_bridges Trouver les ponts H caractéristiques des feuillets β
 - Is_hydrogen_bond
 - get_hydrogen_atom_position
 - distance_atom
 - annotate_beta_strands_on_sequence Annoter les résidus formant des brins β
- get_prediction_dict Transformer les prédictions custom en dictionnaire
- get_dssp_secondary_structure Utiliser DSSP via MDAnalysis
- compare_structures Comparer prédiction vs DSSP

Matériel et Méthode



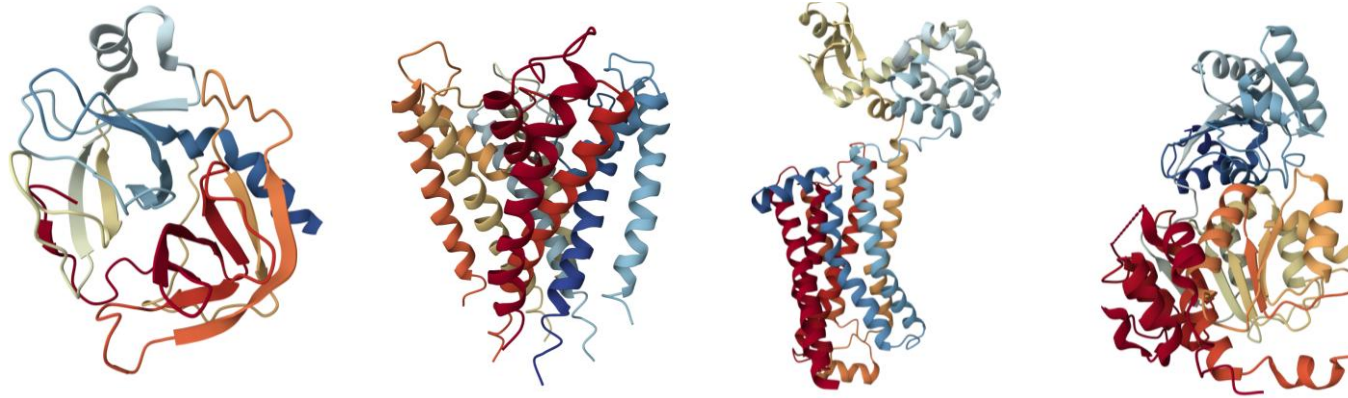
1F88

4EY1

2OCJ

1FIN

1NFK



2PTN

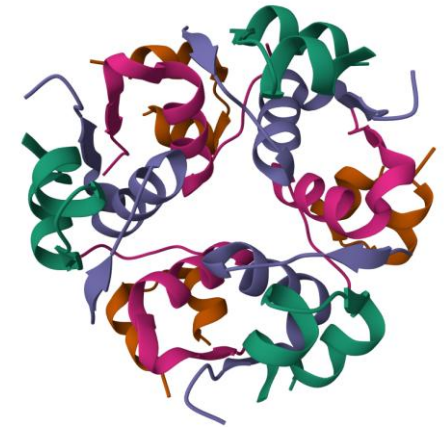
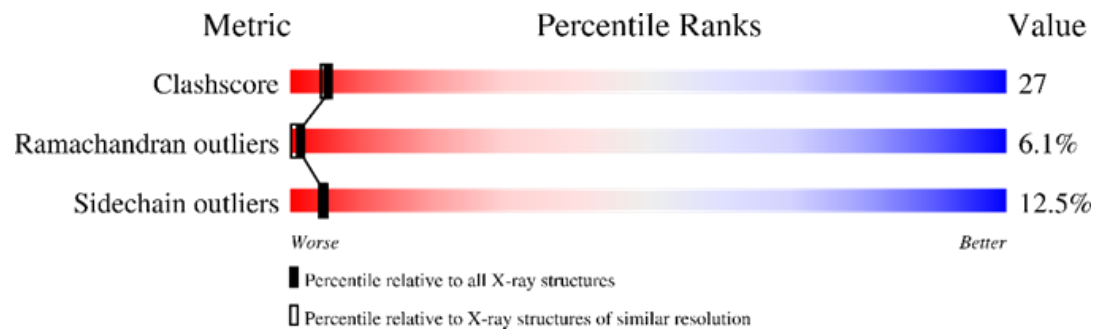
1BL8

2RH1

5E7I

Résultat

	1BL8	1FIN	1NFK	2OCJ	2PTN	2RH1	4EY1	5E7I	1F88
Résidus comparés	388	116	624	776	220	442	102	1272	643
Correspondances exactes MDa	388	1055	265	718	192	429	66	1076	629
Précision de la prédiction (%)	100	94.53	42.47	92.53	87.27	97.06	64.71	84.59	97.82



Conclusion

- Bonne prédiction globale sur un code à 3 lettres
- Prévoir affichage et la comparaison avec un code à 8 lettres