

MIZINIAK
Hippolyte
M2BI

Projet court

Sujet : Calcul de la surface accessible au solvant d'une protéine

Lien github :

I) Objectif

L'objectif de ce projet est de créer un programme afin de calculer la surface absolue et relative accessible au solvant à partir des coordonnées d'une protéine issue d'un fichier pdb.

II) Matériels et méthode

Pour lancer le programme il faut mettre le fichier pdb désiré en argument.

Fonctionnement :

Le programme a été fait en plusieurs étapes :

- 1) Parsing + Extraction des données du fichier pdb (coordonnées de chaque atome, nom, résidus)
- 2) Effectuer une recherche des atomes voisins avec une matrice de distance
- 3) Créer un nuage de point uniformément sur la surface d'une sphère centrée sur chaque atome de la protéine. La création des sphères a été fait grâce à un code trouver sur internet à partir de l'algorithme de Saff et Kuijlaars
- 4) Effectuer une boucle qui parcourt tous les points d'une sphère afin de déterminer si il existe un point appartenant à une autre sphère à une distance inférieure au rayon de l'atome ciblé + le diamètre d'une molécule d'eau
- 5) Ensuite il a été fait un calcul de la surface total de la protéine en effectuant un calcul de surface de chaque type d'atome en Å².

- 6) Par la suite, un calcul de la surface accessible au solvant a été effectué à partir des points n'ayant pas d'atome voisin.
- 7) Pour finir une comparaison a été effectuée avec un logiciel ayant le même objectif avec une protéine : 1b0q.pdb

Afin de réaliser ce programme l'utilisation de nombreux module ont été nécessaire :

- sys : pour vérifier qu'il n'y ait pas d'erreur d'argument
- pandas : pour le dataframe
- math : pour tous les calculs liés à la sphère
- scipy : pour la matrice de distance

III) Résultats

Voici les résultats obtenus en ayant testé avec le fichier « 1b0q.pdb ».

```
(projet) PS C:\Users\Hippo\Desktop\Master2\Projet> python global-copy.py 1b0q.pdb
Il y a 79 atomes dans la protéine
la surface totale de la protéines est : 1635.136144340416 Å²
la surface accessible au solvant de la protéines est : 1486.173130440741 Å²
la surface relative accessible au solvant est 90.8898708884107 %
(projet) PS C:\Users\Hippo\Desktop\Master2\Projet>
```

Ce résultat a été comparé avec celui de FreeSASA



PDB code

1b0q

Calculate

Output

```
PARAMETERS
algorithm   : Lee & Richards
probe-radius : 1.400
slices      : 20

INPUT
source      : 1b0q
chains      : A
model       : 1
atoms       : 79

RESULTS (Å²)
Total       : 1438.48
Apolar      : 854.11
Polar       : 584.37
CHAIN A     : 1438.48
```

On observe que le résultat obtenu entre les 2 programmes est assez proche, mais il y a quand même une différence notable. Cela est peut-être dû aux paramétrages qui sont différents, comme la valeur seuil entre lesquels 2 atomes sont considérés comme voisins ou non.