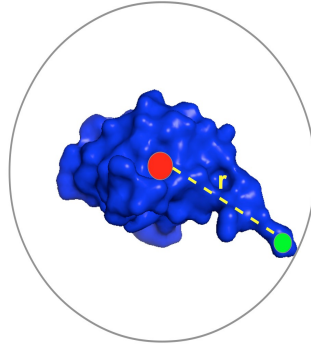


## NOTIONS

**Rayon de giration ( $\bar{A}$ ) :** Le rayon de giration, rend compte du rayon de la protéine et correspond à la distance entre le centre de masse de la protéine et le résidu le plus éloigné du centre de masse de la protéine.



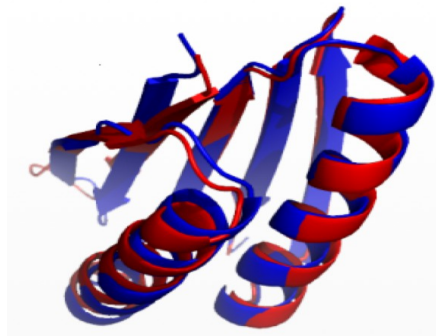
**Figure 1 :** le rayon est représenté en jaune, le centre de masse de la protéine en rouge et le résidu/atome (à vous de voir si vous voulez le calculer en fonction des résidus ou des atomes) le plus éloigné du centre de masse en vert.

**RMSD (Root Mean Square Deviation) ( $\bar{A}$ ) :** le RMSD rend ainsi compte de la déviation structurale entre deux structures protéiques alignées. Dans votre cas, les structures ont toutes été déjà alignées sur la structure de départ. Plus le RMSD est petit, plus les structures des protéines alignées se ressemblent.

$$\text{RMSD} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta_i^2}$$

où N correspond au nombre total de PAIRES d'atomes (une paire comprenant un atome de la structure 1 et son atome correspondant dans la structure 2) utilisés pour le calcul (généralement sur les carbones  $\alpha$  (CA), mais le RMSD peut aussi être calculé sur les atomes du squelette peptidique N, CA, C,O par exemple ou n'importe quel jeu d'atomes) et  $\delta_i$  correspond à la distance spatiale séparant les deux atomes numéro i de la structure 1 et de la structure 2 (paires d'atomes équivalents entre les deux structures).

Le principe consiste donc à superposer les deux structures d'intérêt puis à calculer la distance spatiale séparant chaque paire d'atomes superposés. Le RMSD correspond à la racine de la moyenne des distances élevées au carré.



**Figure 2 :** calcul du RMSD sur les **CA** des deux structures rouge et bleue. Les deux structures sont alignées, puis la distance spatiale entre chaque paire d'atome **CA<sub>rouge</sub>-CA<sub>bleu</sub>** est calculée. Pour une protéine de 110 résidus par exemple, le RMSD calculé sur les CA, sera calculé à partir des 110 distances séparant les couples de **CA<sub>bleu</sub>-CA<sub>rouge</sub>**.