

MASTER BIBS

PROGRAMMATION PYTHON

février 2024

APPLICATIONS :

- fonctions, dictionnaires, gestion arguments, modules (import, création)

Dans cet exercice on se propose de créer un programme qui pour un fichier PDB renseigné par l'utilisateur, renverra la carte de contact résidu-résidu associée. Le but est de pouvoir identifier les zones de la protéine qui sont en contact. Ceci permet ensuite d'éventuellement identifier des domaines protéiques, des zones d'interaction, comprendre des corrélations entre résidus...

La carte de contact (ou carte de distance) reflétera la distance séparant toutes les paires de résidus possibles de la protéine (Fig. 1). Ainsi, sur la figure 1, chaque case i,j est colorée en fonction de la distance séparant les résidus i et j . Les zones rouges reflètent des distances faibles entre résidus tandis que les bleues reflètent des paires de résidus très éloignés dans la structure 3D.

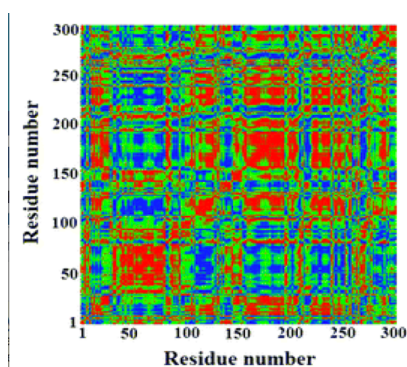


Figure 1 : carte reflétant la distance entre chaque paire de résidu i,j . Ne pas se préoccuper du code couleur qui n'est pas forcément celui que vous aurez par défaut.

Votre programme devra donc produire ce type de carte (dans un fichier – nom à fournir par l'utilisateur) et fournir la liste des résidus en contact (idem). On considère que deux résidus sont en contact s'ils sont à une distance inférieure à un seuil donné (paramétrable). Par ailleurs, votre programme devra offrir à l'utilisateur, plusieurs modes de calcul de distance (distance la plus courte, entre les centres de masse...).

Les aspects paramétrables par l'utilisateur devront être gérés directement via le passage des arguments.

Les fonctions qui vous semblent génériques et ré-utilisables dans d'autres problèmes doivent être stockées dans des modules appropriés, celles spécifiques à cet exercice resteront dans le programme principal.

Pour l'affichage de la matrice, le module pylab et la fonction pcolor peuvent être utilisés mais plein d'autres solutions sont possibles !