

# Assignation et détection des parties transmembranaires d'une protéine

**PETIT Ferdinand**    *Université de Paris - Étudiant Master 2 BI-IPFB*

**KERMARREC Maxime**    *Université de Paris - Étudiant Master 2 BI-IPFB*

---

Ce projet de bioinformatique a été réalisé dans le cadre de l'UE Programmation et Gestion de Projets de la deuxième année du Master BI-IPFB de l'université de Paris.

---

## Introduction

Les protéines transmembranaires jouent un rôle important dans la vie cellulaire. Elles peuvent avoir un rôle dans: la transduction de signal, la structure de la membrane ou encore en temps que canal ionique. Cependant, une caractéristique lie les protéines transmembranaires, en effet la partie en contact avec la membrane est composée en majorité d'acides aminés hydrophobes et exposés.

Lorsqu'une protéine est identifiée comme étant transmembranaire, l'emplacement de la bicouche lipidique n'est pas indiqué dans la *protein data bank* (PDB) car ces protéines sont cristallisées sans leur bicouche lipidique naturelle, et actuellement il existe des méthodes permettant de détecter le plan membranaire en utilisant les coordonnées atomiques des protéines membranaires. Dans ce projet, nous nous sommes proposés de remplir l'objectif d'établir un outil permettant de déterminer les zones transmembranaires d'une protéine.





### Output :

Un fichier text nomproteine.txt contenant : -un rappel des différents arguments utilisés  
-les coordonnées du centre de masse de la proteine (x,y,z), -le score ainsi que les facteur (a,b,c,d1,d2) des coordonnées cartésiennes du plan tilt pour résoudre l'équation cartésiennes  $ax+by+cz+d=0$  -La séquence des acides aminés présent dans la membrane Un fichier pdb nomproteine\_ca.pdb contenant tous les carbonnes alpha de la proteine. Toutes les fichiers de sortis se trouvent dans le répertoire results

### Résultats

Nous avons soumis la protéine de transport EAAT1 (code PDB : 5llu) à notre programme.

PDB file : ../data/5llu.pdb

Gravity center : [7.447830808080808, 47.44442929292934, 0.12914646464646493]

Best tilt : score=145 a=-0.778899864655898, b=0.5384615384615401, c=0.32151854135750446, d1=-25.47777751902465, d2=-10.477777519024649

Sequences: 0(35),1(39),2(42-43),3(45-46),4(49-50),5(52-53),6(56-57),7(60),8(64),9(68),10(71-72),11(76),12(80-81),13(83-84),14(87-88),15(91-92),16(95-96),17(98-100),18(102-103),19(175),20(178-179),21(182),22(185-186),23(188-189),24(192-193),25(195-202),26(207-208),27(210-211),28(214-215),29(245-246),30(248-267),31(272-273),32(275-285),33(288-304),34(315),35(318-319),36(322),37(327),38(358),41(360-362),42(364-383),43(386-387),44(390)

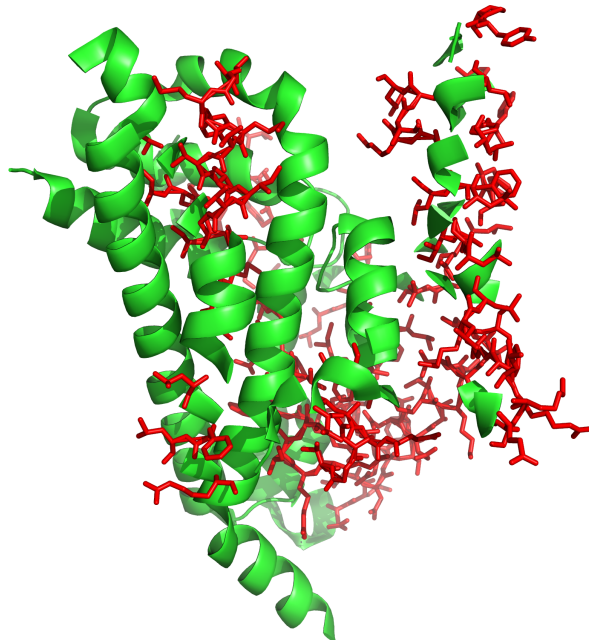


Figure 2: La protéine EAAT1. Les résidus dont le carbone alpha est compris dans l'espace définis par les plans cartésien sont en rouge, le reste est en vert.

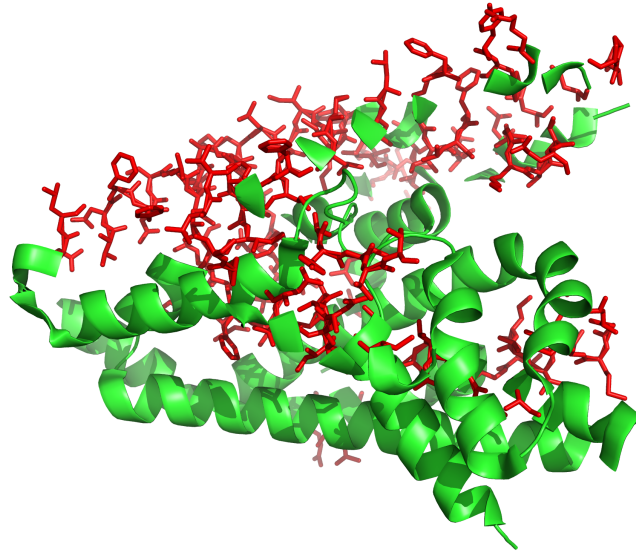


Figure 3: La protéine EAAT1 sous une vue différente. Les résidus dont le carbone alpha est compris dans l'espace définis par les plans cartésien sont en rouge, le reste est en vert.

Nous pouvons remarquer qu'une face de la protéine EAAT1 est entièrement recouverte d'acides aminés en contact avec la membrane, ainsi la partie en verte est soit cytosolique, soit extra-cellulaire. En effet, la protéine EAAT1 étant une protéine de fusion. Nous pouvons donc en déduire raisonnablement que la partie verte est à l'extérieur ou à l'intérieur de la cellule en attendant de créer un complexe avec une autre protéine avant de s'immerger entièrement dans la membrane lipidique afin d'atteindre le compartiment opposé.

## Discussion

Nous avons conçu un programme permettant d'estimer l'emplacement d'une membrane biologique vis-à-vis d'une protéine transmembranaire. Celui-ci fonctionne rapidement (2s pour 400 acides aminés) et semble cohérent. Toutefois, de petites extensions donneraient énormément de modularité dans un contexte scientifique. En effet, nous pourrions faire en sorte que le programme puisse effectuer les mêmes calculs sur des valeurs d'hydrophobicité spécifique à chaque acide aminé, ou encore que l'on puisse spécifier sur quelle caractéristique des acides aminés nous voulons travailler (aliphatic, petit, etc...). Finalement une représentation visuelle de la membrane en interaction la protéine générée est la prochaine amélioration que nous voulons intégrer à ce projet.

## Annexe

Ce projet fut court, intense et gratifiant. Nous avons été stimulé par ce dernier et aurions aimé aller plus loin . Toutefois, nous soumettons ce projet en ayant le sentiment de l'avoir mené à bien.

## Bibliographie

*Modules utilisé :*

*Librairie*

```
argparse, numpy as np, pandas as pd, csv, from Bio.PDB import PDBParser, from Bio.PDB.DSSP  
import DSSP, sys
```

*Nos propre modules*

```
import amino_acid as aa
```

*Classes et fonction*

*Fichier main.py*

```
class sphere(object):  
    def init(self, samples=20):  
    def str(self):  
    def translation(self, center):  
        class proteine(object):  
            def init(self, file, aacDF):  
            def trouve_calpha(self, file):  
            def center(self):  
            def calc_ASA(self, file):  
            def hydrophobicity(self, aacDF):  
            def str(self):
```

*Fichier calpha.py*

```
def trouve_calpha(pdbfile, out):
```

*Fichier amino\_acid.py*

```
def amino_acid_characteristics():
```

## Bibliographie

Simon. 2014. *Transmembrane Proteins in the Protein Data Bank: Identification and Classification*. Bioinformatics, Volume 20, Issue 17. doi:[10.1093/bioinformatics/bth340](https://doi.org/10.1093/bioinformatics/bth340).