2022 - 2023

Projet court : Calcul de la surface accessible au solvant d’une protéine.

Sujet n°2 / M2-BI

Malassigne victor

# Introduction

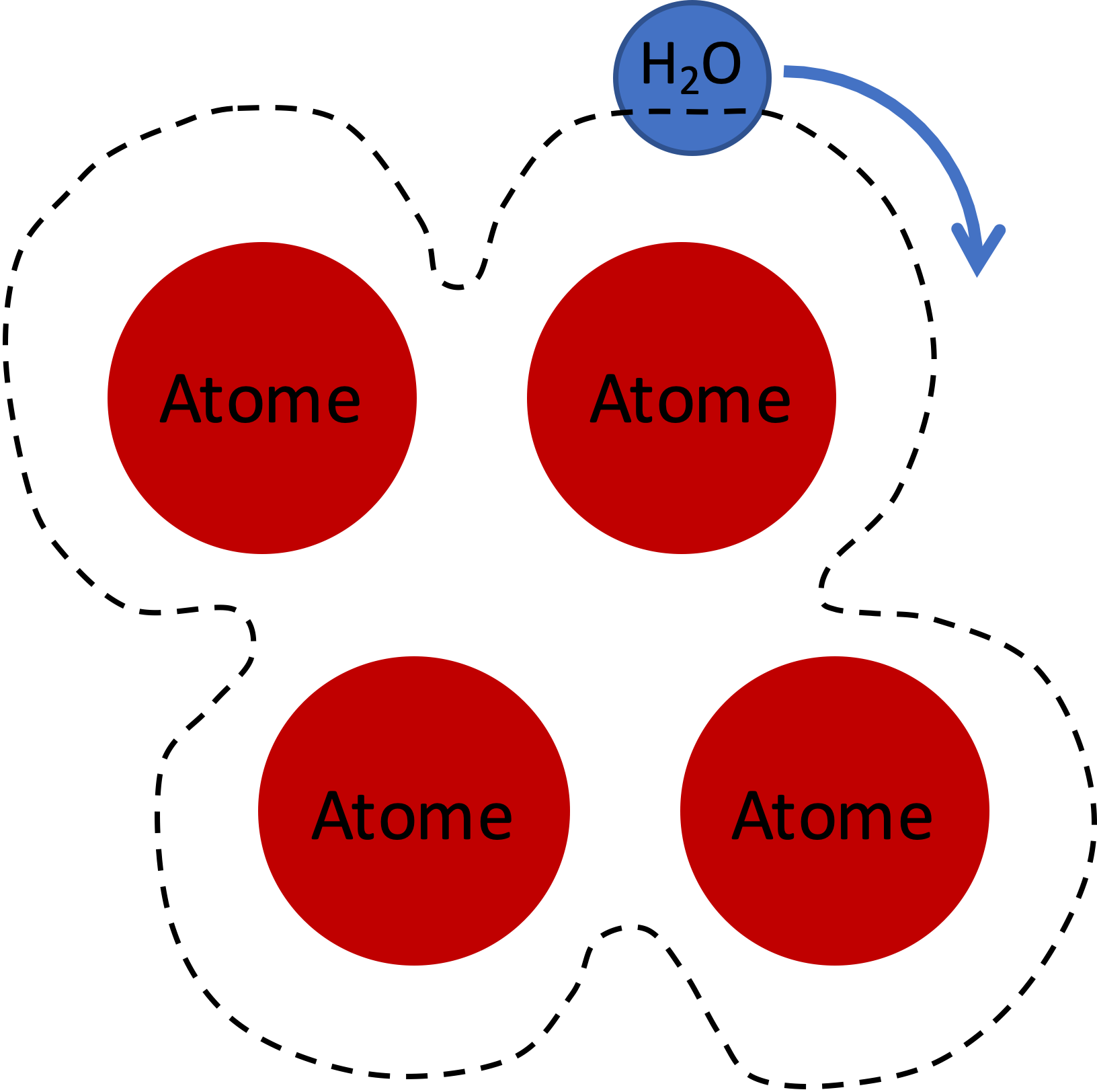
 Dans un article publié en 1973 de Shrake, A et Rupley, JA calcule la surface d’une protéine accessible aux solvant. Dans le cadre de ce projet nous voulons recoder cette modélisation en script python. Pour ce faire nous somme parti du principe de faire « rouler » une molécule d’eau à la surface des atomes. Pour cela nous modélisons sur chaque atome une sphère représentant le rayon de Van der Waals (Figure 1). Sur ces sphères nous ajoutons une molécule d’eau (représenté par son rayon de Van der Waals 1,7Å) que nous déplaçons point par point de ladite sphère. Tant que rayon de la molécule d’eau passe sans toucher deux sphères cela signifie que la surface est exposée aux solvants

Figure : Schéma surface accessible au solvant

En se basant sur ce principe il est possible de déterminer la surface accessible aux solvant d’une protéine.

# Matériel

* Python : ce programme a été codé et compilé avec une version de python 3.10.4
* Conda : nous utilisons la version 4.12.0 de conda pour créer un environnement disponible sur Github (<https://github.com/vmalass/2022_M2-BI_Projet_court.git>). Nous utilisons les modules suivants : Numpy, Bio.PDB, scipy et sys.
* Github : un répertoire sur Github a été utilisé disponible sur : <https://github.com/vmalass/2022_M2-BI_Projet_court.git>. L’utilisation de l’outil Git et sur service d’hébergement Github permet un archivage point par point des scripts, modification avec une chronologie.
* Données : les protéines utilisées ont été téléchargées sur <https://www.rcsb.org/> qui est une banque de données sur les protéines (PDB *Protein Data Bank*). Nous utilisons la protéine 3i40.pdb (*Human insulin*) dans notre exemple.
* DSSP : nous utilisons le logiciel DSSP (*Define Secondary Structure of Proteins*) qui est un algorithme permettant de calculer entre autres la surface accessible aux solvants d’une protéine.

# Méthodes

1. A partir d’un fichier .pdb on extrait les coordonnées, l’identité et le résidu de chaque atome avec un parser disponible dans le module Bio.PDB.
2. Nous calculons la distance entre chaque atome à l’aide du module scipy ce qui nous génère une matrice de distance de dimension nombre d’atome sur nombre d’atome.
3. Nous recherchons tous les voisins de l’atome étudié dans un rayon de 10Å à partir de la matrice de distance
4. Création d’une sphère autour d’un atome. La sphère se compose de 92 points répartis uniformément autour du centre de l’atome. Les points sont à situer à une distance équivalente au rayon de Van der Waals de l’atome avec l’ajout du rayon de Van der Waals du solvant qui est l’eau.
5. Calcule de la distance euclidienne entre un point de la sphère et l’atome voisin.
6. Condition de sélection, si la distance entre le point de la sphère et l’atome voisin est inférieur au rayon de Van der Waals de l’atome ajouté au rayon de l’eau alors le point n’est pas accessible aux solvants s’il est supérieur alors il est accessible.
7. On regarde tous les voisins par point de la sphère si un voisin rend le point inaccessible alors on passe au point suivant.
8. On calcule la surface accessible de l’atome avec le calcule suivant :
9. Calcule de l’aire accessible aux solvant par tous les atomes en faisant la somme de l’étape 8.

# Résultats