ÉCOLE POLYTECHNIQUE
FÉDÉRALE DE LAUSANNE

C-α circles

Christian Schlatter

Soutenance projet de simulation de systèmes physiques

24 septembre 2002

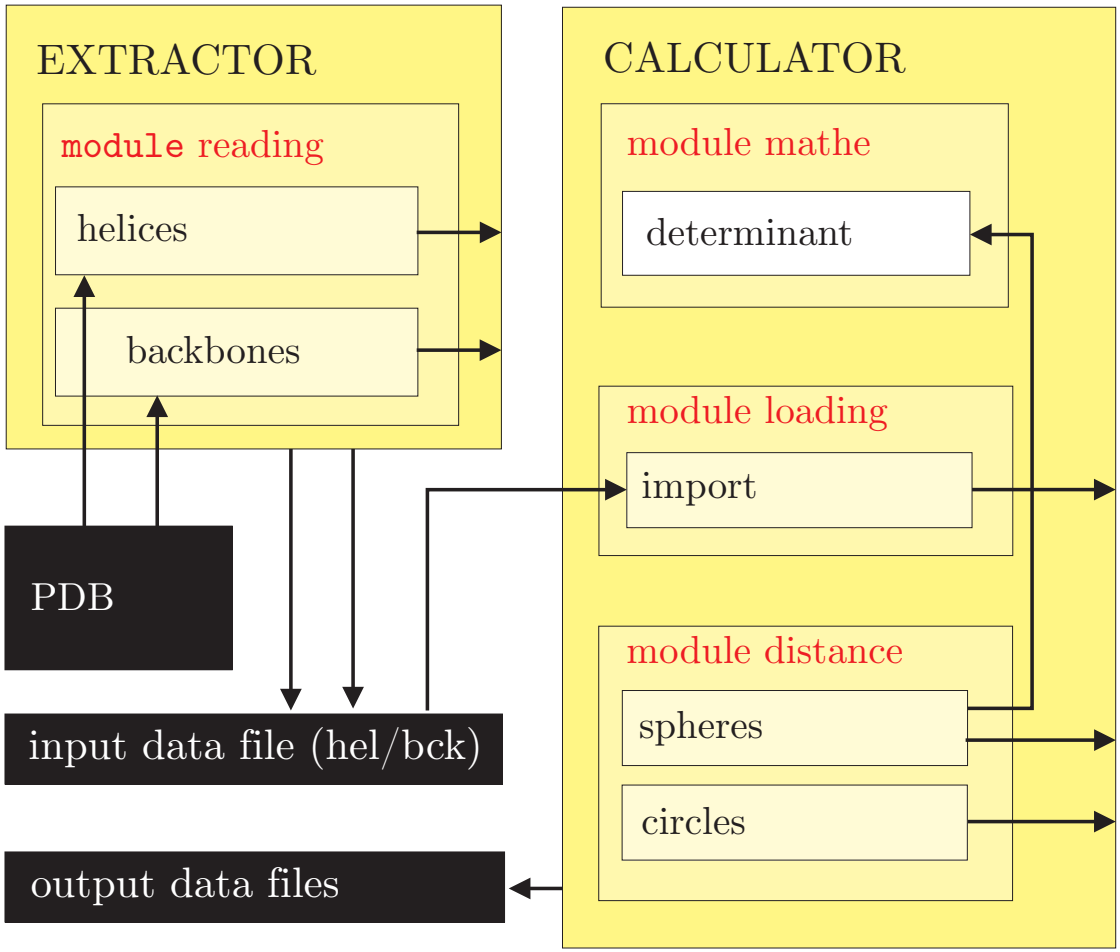
C-α circles : Présentation du projet

- ⋆ Introduction et intérêt, chaire d'Analyse LCVM^2
- ⋆ Structure générale et conception de l'algorithme
- ⋆ Concepts pour la caractérisation d'une protéine
- ⋆ Illustrations et résultats
- ⋆ Conclusion et suite

Introduction, recherche récente

- ⋆ Proteins ont une structure dense étonnamment uniforme. Comment les caractériser ?
- ⋆ L'empilement de structures 3-D est-il relié au rayon de courbure global ?
- ⋆ Par ce projet : Développement d'un outil d'étude de protéines basé sur le concept de rayon de courbure global.

Structure de l'algorithme



Des tas de rayons...

⋆ **Rayon d'un cercle** passant par $\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j, \mathbf{q}_k \in \mathbb{R}^3$ avec $D_{ij} = |\mathbf{q}_i - \mathbf{q}_j|$

$$r^2(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j, \mathbf{q}_k) = \frac{-D_{ij}^2 D_{ik}^2 D_{jk}^2}{D_{ij}^4 + D_{ik}^4 + D_{jk}^4 - 2(D_{ij}^2 D_{ik}^2 + D_{ik}^2 D_{jk}^2 + D_{ij}^2 D_{jk}^2)}$$

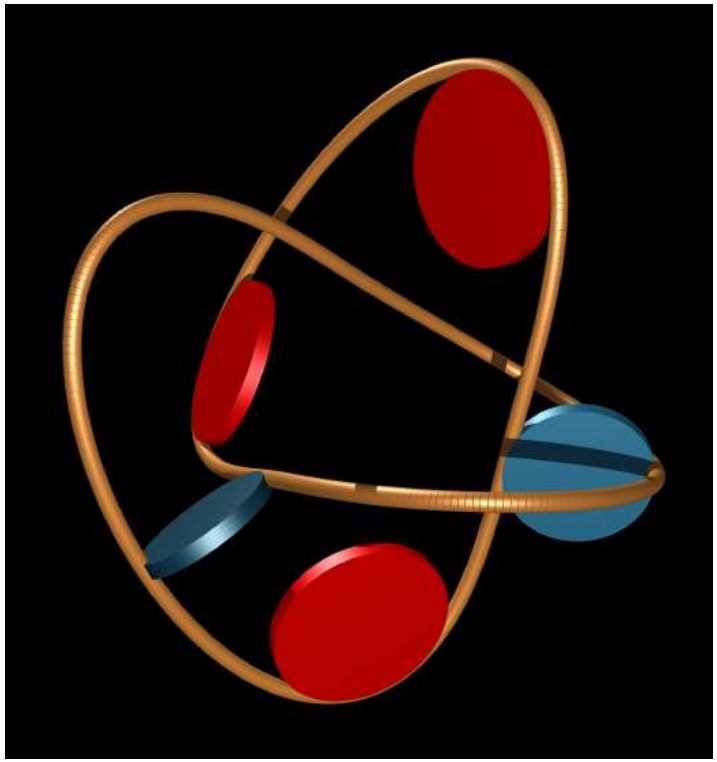
⋆ **Rayon de courbure local** d'une courbe discrète

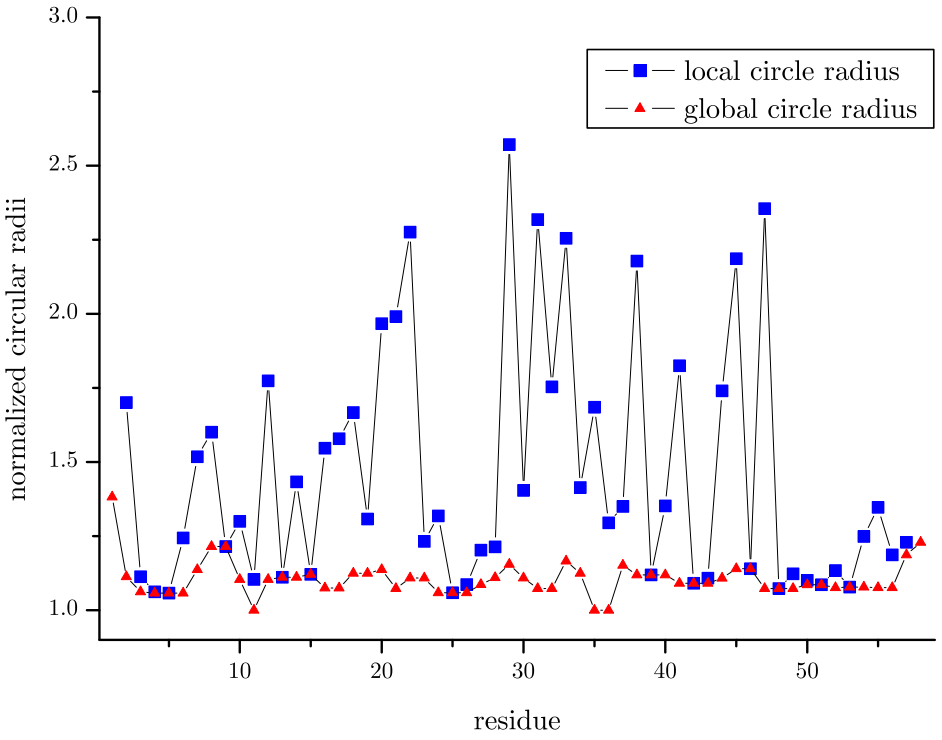
$$\rho(\mathbf{q}_i) = r(\mathbf{q}_{i-1}, \mathbf{q}_i, \mathbf{q}_{i+1}), \quad 1 < i < n$$

⋆ **Rayon de courbure global** d'une courbe discrète

$$\rho_G(\mathbf{q}_j) = \min_{\substack{1 \leqslant i,k \leqslant n \\ i \neq j \neq k \neq i}} r(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j, \mathbf{q}_k), \quad 1 < j < n$$

Rayon de courbure global II



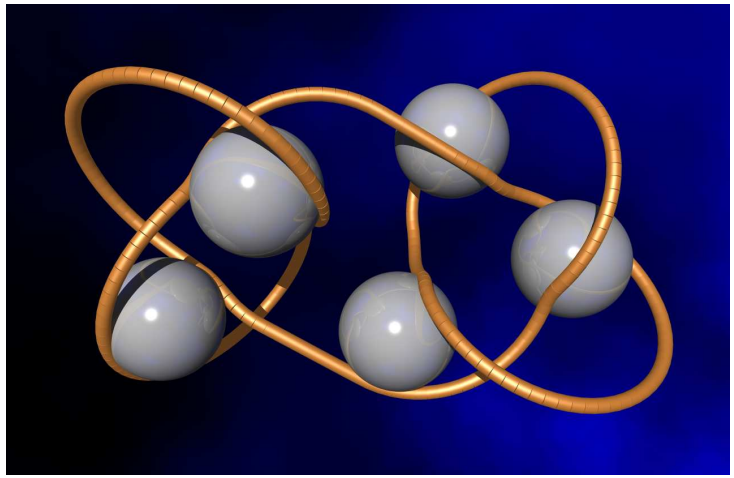


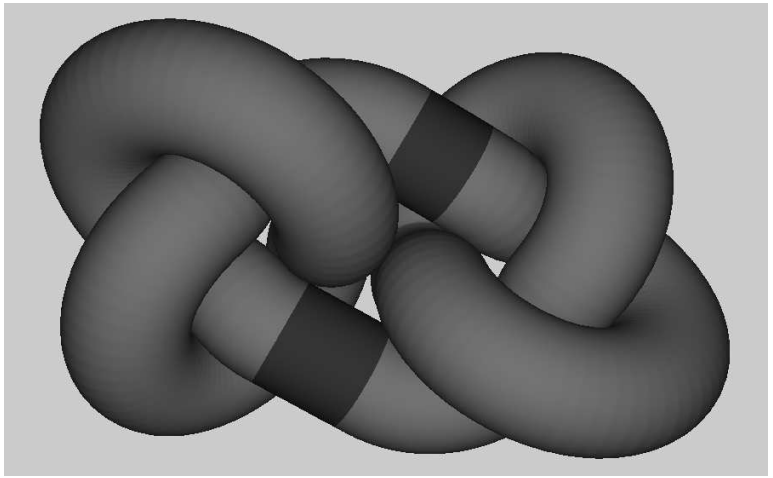
Épaisseur

⋆ **Épaisseur d'une protéine**

$$\Delta[\mathcal{C}_n] = \min_{1 \leqslant i \leqslant n} \rho_G(\mathbf{q}_i)$$

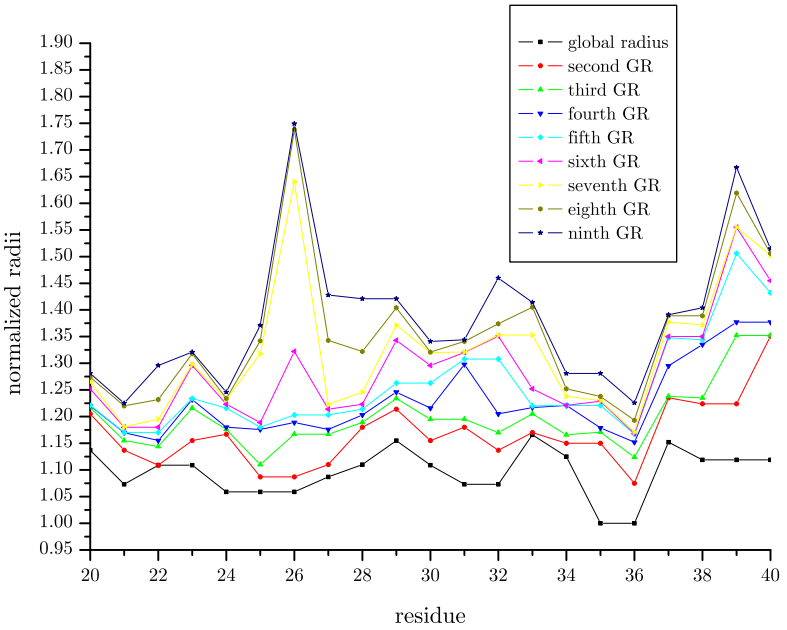
⋆ Interprétation boules de billard et tube

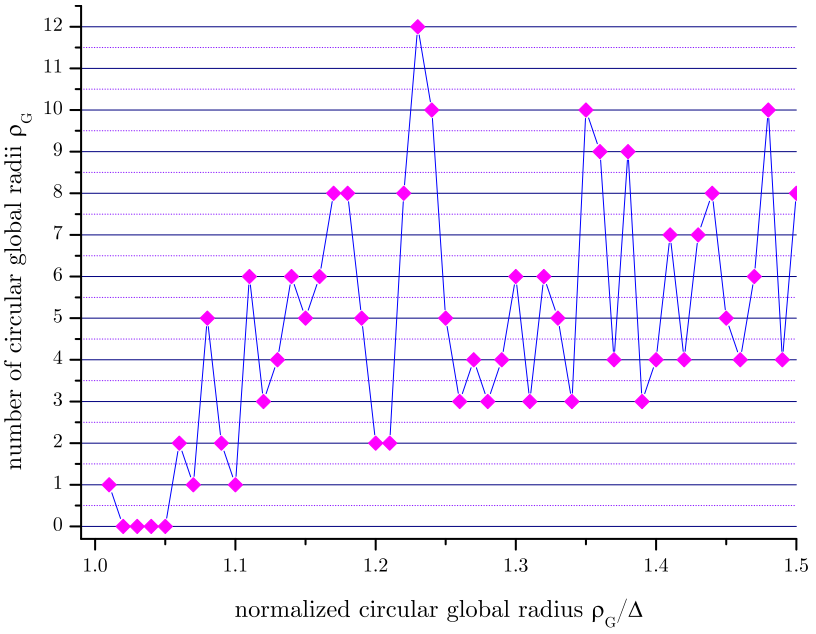




⋆ de l'ordre de 2 à 3 Å

Comportement du rayon global





Non-localité du rayon global et le rapport f

⋆ Soient $\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j, \mathbf{q}_k \in \mathbb{R}^3$ les coordonnées du rayon global du point $\mathbf{q}_j$, i < j < k. La mesure de sa dislocation est

$$✠(\mathbf{q}_j) = (k - j) + (j - i)$$

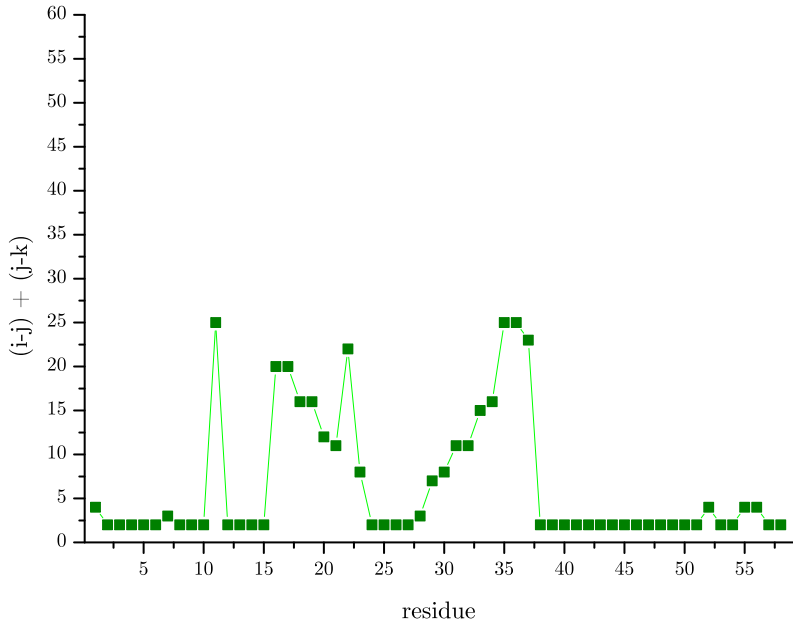
⋆ Soit

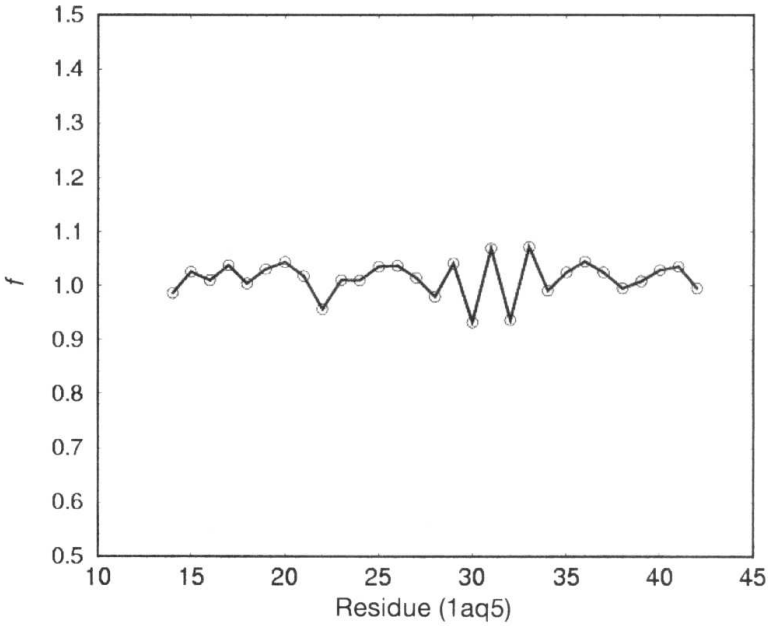
$$\rho_N(\mathbf{q}_j) = \min_{\substack{1 \leqslant i,k \leqslant n \\ (k-j)+(j-i)>2 \\ i \neq j \neq k \neq i}} r(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j, \mathbf{q}_k), \quad 1 < j < n$$

le rayon de courbure global non-local du point $\mathbf{q}_j$. Alors le rapport f local est

$$f(\mathbf{q}_i) = \frac{\rho_N}{\rho}$$

Non-localité du rayon global et le rapport f II





Conclusion

- ⋆ Les définitions pour les cercles ont été généralisé pour les sphères.
- ⋆ L'algorithme a été testé sur un grand nombre de protéines.
- ⋆ Le résultats sont accessibles pour l'interprétation.
- ⋆ L'utilisation de l'algorithme pour des grandes molécules exige une modification de la "spherification".