

# Implémentation de la méthode DSSP pour l'assignation de structures secondaires

Thomas Forest

September 19, 2019

## Introduction

Le présent projet vise à implémenter en langage Python (version 3.x) la méthode DSSP (Define Secondary Structure of Proteins) décrite dans la publication *Dictionary of protein secondary structure: pattern recognition of hydrogen-bonded and geometrical features*. Kabsch W, Sander C, *Biopolymers*, 1983.

Le programme *dssp.py* permet de réaliser une déduction approximée de propriété physico-chimiques et l'assignations de structures secondaires d'une protéine donnée en entrée au format PDB. À partir des liaisons hydrogènes qui s'effectuent entre les atomes N et O du squelette peptidique (ou *backbone* en anglais), sont assignées des structures telles les brins beta (ladders), les feuillettes (sheets), les coudes (turns), les angles de torsion (kappa, alpha), etc.

## Matériel & Méthode

Les assignations effectuées par DSSP reposent sur l'existence de liaisons Hydrogènes entre résidus, entre les atomes N et O du squelette peptidique. Selon cette approche, il existe une liaison, ou plutôt devrait-on dire une interaction hydrogène, entre deux résidus, si l'énergie d'interaction entre les deux est inférieure à un seuil de -0.5 kcal/mol, selon cette expression :

$$E = q_1 \cdot q_2 \left\{ \frac{1}{r_{ON}} + \frac{1}{r_{CH}} - \frac{1}{r_{OH}} - \frac{1}{r_{CN}} \right\} \cdot f < -0.5 \text{kcal/mol} \quad (1)$$

Avec  $f = 332$  kcal/mol,  $q_1 = 0.42$  et  $q_2 = 0.20$  les charges partielles appliquées sur les partenaires impliqués dans l'interaction hydrogène.  $r_{ON}$ ,  $r_{CH}$ ,  $r_{OH}$ ,  $r_{CN}$  étant les distances O-N, C-H... entre les deux résidus considérés. Cela sous-entend que la position des résidus entre eux dans l'espace nous permet d'assigner des structures secondaires sur des régions localisées de la protéine. En revanche, il faut bien souligner que DSSP ne permet pas de **déduire** des structures secondaires à partir de la séquence seule. Voilà pourquoi cette méthode repose sur un fichier qui possède les coordonnées des atomes dans l'espace, ici consignées au format PDB.

Une fois qu'il est possible de déterminer les interactions hydrogènes entre résidus, on peut assigner les structures suivantes :

- n-Turns : liaison entre le résidu  $i$  et  $i+n$ , avec  $n = 3, 4$  ou  $5$
- Bridges : il existe un pont entre résidu  $i$  et  $j$  de type :
  - parallèle s'il existe un couple de liaisons  $H(i-1, j)$  et  $H(j, i+1)$  ou bien  $H(j-1, i)$  et  $H(i, j+1)$

– antiparallèle s'il existe un couple de liaisons  $H(i,j)$  et  $H(j,i)$  ou bien  $H(i-1,j+1)$  et  $H(j-1,i+1)$

- Helix : une hélice est constituée de deux Turns consécutifs ou plus. Au delà de 5-turns, on trouve des hélices de type  $\alpha$ ,  $3_{10}$ ,  $\pi$ ...
- Ladder : un brin  $\beta$  est constitué de *bridges* consécutifs du même type
- Sheets : un feuillet  $\beta$  est constitué de *ladders* qui sont connectées entre-elles par liaisons entre résidus communs

Le principe du programme implémenté est de parcourir la liste de résidus pour évaluer les liaisons entre résidus et dénoter la position de ces structures particulières, dans un ordre d'évaluation, en commençant par les bridges et les turns, puis les hélices, les brins et les feuillets. Dans les faits, les bridges et les ladders sont calculés en premier, séparément, puis une boucle générale itère sur tous les résidus et détermine localement les angles de torsion, la chiralité, les turns puis les hélice, position après position, et affiche en temps réel dans l'output, ligne par ligne, le résumé des informations recueillies pour chaque résidu.

## Résultats & Exemple d'utilisation

Deux fichiers .pdb sont dans le répertoire /data afin de tester le programme. Il s'agit des fichiers 1bta.pdb et 1est.pdb, qui sont les structures de la Chaîne A de la BARSTAR ainsi que la Chaîne A de la "PORCINE PANCREATIC ELASTASE".

Des captures d'écran des outputs obtenus sur le fichier 1est sont disponibles ci-dessous, y compris en annexe.

L'output de *dssp.py* est allégé. Il a en effet fallu être synthétique, afin de démontrer que la méthode a été comprise tout en gagnant du temps. On y voit que les angles calculés résidu par résidu, les *bridge partner* (BP1), la chiralité, les positions des *bends*, correspondent parfaitement. Les structures comme les turns ressortent également.

```
##### DSSP OUTPUT #####
### Exported on 18/09/2019
#####
HEADER      HYDROLASE              17-MAY-76   1EST
COMPND     2 MOLECULE: PORCINE PANCREATIC ELASTASE;
SOURCE     2 ORGANISM SCIENTIFIC: SUS SCROFA;
AUTHOR     L.SAWYER,D.M.SHOTTON,H.C.WATSON

# RESIDUE AA STRUCTURE BP1 TCO KAPPA ALPHA PHI PSI X-CA Y-CA Z-CA
1 16 A V > 0 0.0 360.0 360.0 360.0 108.5 -11.1 33.8 35.9
2 17 A V 3 + 0 -0.776 360.0 8.1 -84.5 125.5 -14.7 34.4 34.8
3 18 A G 3 S+ 182 0.798 100.7 136.9 80.5 24.5 -16.0 37.9 35.4
4 19 A G < - 0 -0.371 45.8 -132.5 -100.0 170.1 -12.7 39.3 36.5
5 20 A T - 0 -0.899 35.7 -86.0 -114.8 165.7 -10.6 42.4 35.9
6 21 A E - 147 -0.432 44.9 -137.8 -79.6 125.3 -6.9 42.9 35.0
7 22 A A - 146 -0.325 18.7 -104.2 -76.0 161.6 -4.6 43.0 38.0
8 23 A Q > - 0 -0.782 31.7 -116.3 -93.7 129.2 -1.7 45.3 38.6
9 24 A R 4 S+ 0 0.849 114.3 36.3 -25.9 -47.2 1.8 43.9 38.0
10 25 A N 4 S+ 11 0.291 95.3 90.4 -95.2 -8.1 2.8 44.3 41.6
11 26 A S 4 S+ 0 0.961 98.4 20.4 -54.7 -58.2 -0.5 43.5 43.2
12 27 A W > < + 11 -0.621 69.2 166.5 -120.7 81.0 -0.2 39.7 43.6
13 28 A P 3 > + 0 0.352 68.6 62.2 -95.3 15.7 3.5 38.8 43.6
14 29 A S 3 S+ 0 0.326 76.6 113.3 -108.5 -13.4 3.3 35.3 44.9
15 30 A Q < - 0 -0.58 48.5 -171.3 -63.8 119.9 1.2 34.1 42.0
16 31 A I - 33 -0.912 22.1 -128.7 -115.2 158.2 3.1 31.7 39.7
17 32 A S - 32 -0.944 15.4 -154.0 -107.5 111.1 2.4 30.1 36.3
18 33 A L - 56 -0.891 24.0 -178.6 -87.1 102.6 2.7 26.3 36.2
19 34 A Q - 55 -0.916 17.2 -152.0 -107.9 142.4 3.6 25.5 32.6
20 35 A Y - 28 -0.873 31.0 -106.6 -113.2 142.2 4.2 22.1 30.9
21 36 A R - 27 -0.731 31.4 -167.7 -73.6 92.0 6.5 21.6 27.9
22 36 A S - 0 -0.855 54.9 -82.7 -81.6 69.3 4.0 21.1 25.1
23 36 A G 3 S+ 0 -0.301 119.0 14.6 77.3 -82.9 6.5 19.8 22.6
24 36 A S 3 S+ 0 0.665 132.2 17.5 -91.7 -40.1 8.1 22.9 21.1
25 37 A S < - 0 -0.696 82.8 -90.0 -126.0 -175.0 7.0 25.4 23.6
26 38 A W - 0 -0.868 32.7 -158.1 -108.7 135.8 5.6 25.9 27.1
```

#	RESIDUE	AA	STRUCTURE	BP1	BP2	ACC	N-H-->O	O-->H-N	N-H-->O	O-->H-N	TCO	KAPPA	ALPHA	PHI	PSI	X-CA	Y-CA	Z-CA			
1	16	A	V	>	0	0	0, 0, 0	3, -0,6	0, 0, 0	2, -0,4	0,000	360,0	360,0	360,0	108,5	-11,1	33,8	35,9			
2	17	A	V	B	3	+A	182	0A	7	180,-2,5	180,-1,9	1,-0,2	134,-0,1	-0,776	360,0	8,1	-84,5	125,5	-14,7	34,4	34,8
3	18	A	G	T	3	S+	0	0	43	132,-0,7	-1,-0,2	-2,-0,4	2,-0,1	0,798	100,7	136,9	80,5	24,5	-16,0	37,9	35,4
4	19	A	G	-	0	0	25	-3,-0,6	2,-0,3	144,-0,1	144,-0,2	-0,371	45,-8	-132,5	-100,0	170,1	-12,7	39,3	36,5		
5	20	A	T	E	-	B	147	0B	84	142,-2,6	142,-2,6	-2,-0,1	2,-0,1	-0,899	35,7	-86,0	-114,8	165,7	-10,6	42,4	35,9
6	21	A	E	E	-	B	146	0B	116	-2,-0,3	140,-0,2	140,-0,2	2,-0,1	-0,432	44,9	-137,8	-79,6	125,3	-6,9	42,9	35,0
7	22	A	A	>>	0	0	5	138,-2,6	2,-0,4	-2,-0,1	-1,-0,1	-0,325	18,7	-104,2	-76,0	161,6	-4,6	43,0	38,0		
8	23	A	Q	>	0	0	133	-2,-0,1	3,-1,8	1,-0,1	4,-0,7	-0,782	31,7	-116,3	-93,7	129,2	-1,7	45,3	38,6		
9	24	A	R	T	34	S+	0	0	109	-2,-0,4	3,-0,2	1,-0,3	-1,-0,1	0,849	114,3	36,3	-25,9	-47,2	1,8	43,9	38,0
10	25	A	N	T	34	S+	0	0	94	1,-0,2	-1,-0,3	2,-0,1	99,-0,0	0,291	95,3	90,4	-95,2	-8,1	2,8	44,3	41,6
11	26	A	S	T	44	S+	0	0	37	-3,-1,8	-1,-0,2	1,-0,2	-2,-0,2	0,961	98,4	20,4	-54,7	-58,2	-0,5	43,5	43,2
12	27	A	W	>	0	0	25	-4,-0,7	3,-1,5	-3,-0,2	-1,-0,2	-0,621	69,2	166,5	-120,7	81,0	-0,2	39,7	43,6		
13	28	A	P	T	3	+	0	0	33	0, 0, 0	97,-2,2	0, 0, 0	45,-0,2	0,352	68,6	62,2	-95,3	15,7	3,5	38,8	43,6
14	29	A	S	T	3	S+	0	0	8	95,-0,2	20,-2,3	97,-0,1	2,-0,3	0,326	76,6	113,3	-108,5	-13,4	3,3	35,3	44,9
15	30	A	Q	E	>	-I	33	0C	7	-3,-1,5	43,-0,5	18,-0,2	44,-0,4	-0,580	48,5	-171,3	-63,8	119,9	1,2	34,1	42,0
16	31	A	T	E	-	IJ	32	57C	0	16,-1,8	16,-0,9	-2,-0,3	2,-0,6	-0,912	22,1	-128,7	-115,2	158,2	2,1	31,7	39,7
17	32	A	S	E	-	IJ	31	56C	0	39,-2,0	39,-1,6	-2,-0,3	2,-0,7	-0,944	15,4	-154,0	-107,5	111,1	2,4	30,1	36,3
18	33	A	L	E	-	IJ	30	55C	0	12,-3,3	11,-2,8	-2,-0,6	12,-1,8	-0,891	24,0	-178,6	-87,1	102,6	2,7	26,3	36,2
19	34	A	Q	E	-	IJ	28	54C	9	35,-2,7	35,-2,4	-2,-0,7	2,-0,3	-0,916	17,2	-152,0	-107,9	142,4	3,6	25,5	32,6
20	35	A	Y	E	-	IJ	27	53C	71	7,-2,4	7,-2,9	-2,-0,4	2,-1,0	-0,873	31,0	-166,6	-113,2	142,2	4,2	22,1	30,9
21	36	A	R	E	-	I	26	0C	135	31,-1,9	2,-1,3	-2,-0,3	31,-0,3	-0,731	31,4	-167,7	-73,6	92,0	6,5	21,6	27,9
22	36AA	S	E	>	-I	25	0C	61	3,-1,9	3,-1,8	-2,-1,0	2,-0,8	-0,855	54,9	-82,7	-81,6	69,3	4,0	21,1	25,1	
23	36BA	S	T	3	S+	0	0	62	-2,-1,3	-1,-0,0	1,-0,3	-2,-0,0	-0,301	119,0	14,6	77,3	-82,9	6,5	19,8	22,6	
24	36CA	S	T	3	S+	0	0	125	-2,-0,8	-1,-0,3	-3,-0,1	2,-0,2	0,665	132,2	17,5	-91,7	-40,1	8,1	22,9	21,1	
25	37	A	S	E	>	S-I	22	0C	71	-3,-1,8	-3,-1,9	-5,-0,1	2,-0,4	-0,696	82,8	-90,0	-126,0	-175,0	7,0	25,4	23,6
26	38	A	W	E	-	I	21	0C	62	-5,-0,3	2,-0,4	-2,-0,2	-5,-0,2	-0,868	32,7	-158,1	-108,7	135,8	5,6	25,9	27,1
27	39	A	A	E	-	I	20	0C	27	-7,-2,9	-7,-2,4	-2,-0,4	2,-0,1	-0,981	20,2	-119,7	-120,1	134,7	1,9	25,9	28,0
28	40	A	H	E	-	I	19	0C	20	-2,-0,4	-9,-0,2	-9,-0,2	3,-0,1	-0,359	40,9	157,2	-70,1	115,2	0,1	27,3	31,0
29	41	A	T	E	-	0	0	43	-11,-2,8	2,-0,3	1,-0,4	159,-0,3	0,628	58,1	-2,9	-106,4	-36,8	-1,8	24,6	32,8	
30	42	A	a	e	-	I	18	0C	5	-12,-1,8	-12,-3,3	157,-0,1	-1,-0,4	-0,967	58,7	-112,8	-148,2	173,7	-2,2	25,9	36,4
31	43	A	G	E	-	I	17	0C	1	157,-2,2	12,-0,4	-2,-0,3	2,-0,3	-0,344	32,4	176,1	-99,5	-179,3	-1,6	28,6	39,0

Comparaison de l'output sur 1est.pdb avec dssp.py (en haut), et l'output du programme d'origine(en bas).

En annexe, on constate aussi un exemple ou les hélices visibles aux positions 155 à 158 (donc aux résidus correspondants 165-168) correspondent et sont de type H, c'est-à-dire 4-Helix, ou encore l'hélice G (3-Helix) à la position 165 à 167 (donc résidus 173-175).

L'output des sheets n'est pas visible sur la version synthétique, et c'est pour cette raison que la colonne qui est censée résumer la structure à une position donnée n'est pas affichée. Les algorithmes pour déterminer les sheets ont été implémentés mais ne fournissent pas de résultats qui semblent attendus, ou alors les output ont été mal compris. Néanmoins, l'output des ladders (Figure 3 en annexe) permet de déceler la présence des feuillettes et des brins à des positions qui coïncident. Cette sortie peut être obtenue en exécutant dssp.py avec le paramètre `-v` ou `--verbose`.

## Discussion & Conclusion

À défaut d'avoir pu implémenter une sortie satisfaisante pour les positions précises des hélices et des brins, le travail ici présenté est agrémenté de docstrings et quelques commentaires afin de rendre compte de la compréhension de la méthode DSSP pour assigner les structures secondaires. En guise de perspective, on pourrait envisager de mettre en place tout un système de tests unitaires, implémenter la méthode de calcul de surface accessible au solvant, réaliser des "benchmarks" automatisés sur une multitude de fichiers PDB, et autres tests de calibration et détermination de l'efficacité de l'outil développé, une fois que l'on se sera assuré que les résultats évidents attendus sont obtenus.

# Annexe

## Outputs

```

150 160 A L - 0 -0.811 13.4 -165.0 -112.8 81.8 -14.9 36.1 45.5
151 161 A P - 0 -0.471 30.2 -91.3 -60.3 155.1 -16.2 36.4 49.1
152 162 A T - 0 -0.051 23.2 -158.9 -82.8 147.3 -16.6 33.3 51.2
153 163 A V - 175 -0.993 29.6 -130.5 -118.0 109.0 -19.4 30.8 51.7
154 164 A D - 174 -0.424 23.3 -101.6 -58.5 171.3 -19.0 28.9 54.9
155 165 A Y H 4 V S+ 0 0.841 118.0 60.8 -60.4 -39.1 -19.3 25.1 55.3
156 166 A A H 4 S+ 157 0.836 116.2 31.1 -58.5 -41.6 -22.8 25.3 56.7
157 167 A I H 4 S+ 158 0.92 116.2 56.5 -89.0 -32.7 -24.1 26.9 53.6
158 168 A C H 4 S+ 157 0.835 103.2 56.1 -78.5 -16.5 -21.8 25.3 51.1
159 169 A S H 4 S+ 158 0.303 82.5 119.2 -98.0 11.5 -22.8 21.9 52.2
160 170 A S V 4 S- 0 -0.418 74.9 -125.5 -78.3 138.3 -26.4 22.6 51.5
161 171 A S U 4 S+ 0 0.784 115.5 61.2 -51.7 -23.9 -28.2 20.4 49.0
162 171 A S U 4 S+ 0 0.771 119.6 25.1 -77.2 -17.5 -29.0 23.8 47.3
163 171 A Y U 4 S- 0 0.284 133.9 -37.3 -109.4 -112.8 -25.3 24.3 47.0
164 172 A W V 4 S- 0 0.553 68.8 -162.6 -96.0 -23.7 -22.6 21.6 46.8
165 173 A G G 4 S- 0 -0.312 65.4 -19.3 77.2 -133.4 -24.0 19.1 49.3
166 174 A S G 4 S+ 0 0.233 115.6 90.4 -91.6 0.1 -21.6 16.5 50.6
167 175 A T G 4 S+ 0 0.897 79.6 71.4 -64.2 -26.6 -19.2 17.0 47.7
168 176 A V 4 S- 0 -0.521 71.9 -156.6 -102.4 124.1 -17.5 19.6 49.9
169 177 A K 4 S- 0 -0.711 33.5 -108.6 -94.4 153.7 -15.5 18.6 52.9
170 178 A N 4 S+ 0 0.869 117.3 71.0 -54.4 -19.2 -14.7 20.8 55.9
171 179 A S 4 S+ 0 0.679 91.5 81.4 -81.3 7.7 -11.2 20.9 54.6
172 180 A M 4 S- 0 -0.853 66.4 -145.7 -118.6 154.5 -12.5 23.1 51.8
173 181 A V + 224 -0.947 12.2 -152.5 -116.9 131.7 -13.3 26.8 51.3
174 182 A C + 223 -0.929 16.5 175.8 -108.7 131.4 -16.1 28.0 49.1
175 183 A A - 222 -0.957 47.1 -9.2 -137.2 131.9 -16.0 31.4 47.5
176 184 A G + 221 -0.735 40.1 165.5 95.4 -137.7 -18.4 33.2 45.1
177 185 A G + 0 0.665 37.1 127.1 97.3 5.7 -21.4 31.4 43.4
178 186 A D S- 0 0.407 76.7 -122.3 -65.2 -17.0 -23.0 34.7 42.3
179 187 A G S+ 0 0.474 101.1 68.5 89.9 -8.0 -23.1 33.2 38.8
180 188 A V S+ 0 0.727 98.0 41.2 -104.1 -43.1 -21.1 36.1 37.4
181 188 A R S+ 0 -0.805 70.9 114.4 -115.8 138.2 -17.7 35.7 39.0
182 189 A S - 0 -0.977 56.0 -76.6 -169.6 -171.2 -15.7 32.5 39.5
183 190 A G - 182 -0.345 44.3 -176.9 -104.0 152.9 -12.6 30.3 38.8
184 191 A C V 4 S- 0 -0.827 41.5 -42.9 -145.6 170.9 -12.2 28.3 35.6
185 192 A Q 4 S+ 0 -0.422 125.9 28.4 -42.1 107.7 -10.0 25.9 33.8
186 193 A G 4 S+ 187 0.186 96.8 86.0 126.5 -26.7 -6.5 27.1 34.3
187 194 A D V 4 S+ 0 0.477 62.7 128.8 -72.2 -23.1 -6.9 28.8 37.6
188 195 A S V 4 S+ 187 -0.175 70.3 15.4 -38.1 139.2 -6.3 25.5 39.5
189 196 A G 3 S+ 0 0.452 101.8 123.2 81.1 -18.3 -3.7 25.4 42.2

```

Figure 1: Output sur 1est.pdb avec dssp.py

```

150 160 A L - 0 0 1 -23,-2.7 2,-0.2 -2,-0.5 -1,-0.1 -0.811 13.4-165.0-112.8 81.8 -14.9 36.1 45.5
151 161 A P - 0 0 23 0,0.0 25,-2.6 0,0.0 -28,-0.1 -0.471 30.2 -91.3 -60.3 155.1 -16.2 36.4 49.1
152 162 A T -E 175 06 7 27,-1.8 28,-2.2 23,-0.2 2,-0.4 -0.051 23.2-158.9-82.8 147.3 -16.6 33.3 51.2
153 163 A V -E 174 06 17 21,-2.3 21,-0.9 -38,-0.2 2,-0.1 -0.993 29.6-130.5-118.0 109.0 -19.4 30.8 51.7
154 164 A D > - 0 0 54 -2,-0.4 4,-3.0 19,-0.1 3,-0.3 -0.424 23.3-101.6 -58.5 171.3 -19.0 28.9 54.9
155 165 A Y H > S+ 0 0 99 1,-0.2 4,-3.1 2,-0.2 5,-0.2 0.841 118.0 60.8 -60.4 -39.1 -19.3 25.1 55.3
156 166 A A H 4 S+ 0 0 68 1,-0.2 -1,-0.2 2,-0.2 3,-0.1 0.836 116.2 31.1 -58.5 -41.6 -22.8 25.3 56.7
157 167 A I H > 4 S+ 0 0 59 -3,-0.3 3,-2.3 1,-0.2 6,-0.3 0.920 116.2 56.5 -89.0 -32.7 -24.1 26.9 53.6
158 168 A C H 3c S+ 0 0 0 -4,-3.0 6,-1.7 1,-0.3 7,-0.6 0.835 103.2 56.1 -78.5 -16.5 -21.8 25.3 51.1
159 169 A S T 3c S+ 0 0 40 -4,-3.1 -1,-0.3 -5,-0.2 -2,-0.2 0.303 82.5 119.2 -98.0 11.5 -22.8 21.9 52.2
160 170 A S S X S+ 0 0 46 -3,-2.3 5,-2.3 -5,-0.2 3,-0.8 -0.418 74.9-125.5 -78.3 138.3 -26.4 22.6 51.5
161 171AA S T 3 S5+ 0 0 123 1,-0.2 -1,-0.1 3,-0.2 -3,-0.8 0.784 115.5 61.2 -51.7 -23.9 -28.2 20.4 49.0
162 171BA S T 3 S5+ 0 0 69 -5,-0.1 -1,-0.2 2,-0.1 -4,-0.1 0.771 119.6 25.1 -77.2 -17.5 -29.0 23.8 47.3
163 171 A Y T < S5+ 0 0 60 -3,-0.8 -4,-0.1 -6,-0.3 -5,-0.1 0.284 133.9 -37.3-109.4-112.8 -25.3 24.3 47.0
164 172 A W T > 5 - 0 0 32 -6,-1.7 3,-1.2 1,-0.2 -5,-0.2 0.553 68.8-162.6 -96.0 -23.7 -22.6 21.6 46.8
165 173 A G G > < - 0 0 17 -5,-2.3 3,-0.8 -7,-0.6 -1,-0.2 -0.312 65.4 -19.3 77.2-133.4 -24.0 19.1 49.3
166 174 A S G 3 S+ 0 0 162 1,-0.2 -1,-0.2 -5,-0.0 -7,-0.1 0.233 115.6 90.4 -91.6 0.1 -21.6 16.5 50.6
167 175 A T G < S+ 0 0 52 -3,-1.2 -1,-0.2 2,-0.0 2,-0.2 0.897 79.6 71.4 -64.2 -26.6 -19.2 17.0 47.7
168 176 A V S < S- 0 0 1 -3,-0.8 2,-0.3 -10,-0.2 -79,-0.1 -0.521 71.9-156.6-102.4 124.1 -17.5 19.6 49.9
169 177 A K > - 0 0 67 -2,-0.2 3,-1.2 1,-0.1 -2,-0.0 -0.711 33.5-108.6 -94.4 153.7 -15.5 18.6 52.9
170 178 A N T 3 S+ 0 0 84 -2,-0.3 2,-0.2 1,-0.3 -15,-0.1 0.869 117.3 71.0 -54.4 -19.2 -14.7 20.8 55.9
171 179 A S T 3 S+ 0 0 26 57,-0.1 54,-1.0 53,-0.1 2,-0.3 0.679 91.5 81.4 -81.3 7.7 -11.2 20.9 54.6
172 180 A M E < - F 0 2248 16 -3,-1.2 2,-0.4 -2,-0.2 52,-0.2 -0.853 66.4-145.7-118.6 154.5 -12.5 23.1 51.8
173 181 A V E - F 0 2238 20 50,-2.1 50,-2.0 -2,-0.3 2,-0.4 -0.947 12.2-152.5-116.9 131.7 -13.3 26.8 51.3
174 182 A C E +EF 153 2228 2 -21,-0.9 -21,-2.3 -2,-0.4 2,-0.3 -0.929 16.5 175.8-108.7 131.4 -16.1 28.0 49.1
175 183 A A E -EF 152 2218 0 46,-1.6 46,-2.1 -2,-0.4 2,-0.4 -0.957 47.1 -9.2-137.2 131.9 -16.0 31.4 47.5
176 184 A G + 0 0 18 -25,-2.6 6,-0.1 -2,-0.3 42,-0.1 -0.735 40.1 165.5 95.4-137.7 -18.4 33.2 45.1
177 185 A G + 0 0 12 4,-0.7 41,-2.5 -2,-0.4 -1,-0.1 0.665 37.1 127.1 97.3 5.7 -21.4 31.4 43.4

```

Figure 2: Output sur 1est.pdb avec le programme DSSP d'origine

```

### CONNECTED LADDERS ###
ladder 5 - 6 | 5 ... 147 | ladder 146 148
ladder 5 - 6 | 6 ... 146 | ladder 146 148
ladder 15 - 20 | 20 ... 27 | ladder 27 28
ladder 15 - 20 | 15 ... 33 | ladder 32 34
ladder 15 - 20 | 16 ... 32 | ladder 32 34
ladder 15 - 20 | 17 ... 56 | ladder 54 57
ladder 15 - 20 | 18 ... 55 | ladder 54 57
ladder 27 - 28 | 20 ... 27 | ladder 27 28
ladder 32 - 34 | 16 ... 32 | ladder 32 34
ladder 32 - 34 | 33 ... 41 | ladder 39 42
ladder 32 - 34 | 34 ... 40 | ladder 39 42
ladder 39 - 42 | 39 ... 98 | ladder 95 99
ladder 39 - 42 | 40 ... 97 | ladder 95 99
ladder 39 - 42 | 41 ... 96 | ladder 95 99
ladder 39 - 42 | 42 ... 95 | ladder 95 99
ladder 54 - 57 | 54 ... 73 | ladder 70 74
ladder 54 - 57 | 55 ... 72 | ladder 70 74
ladder 54 - 57 | 56 ... 71 | ladder 70 74
ladder 54 - 57 | 57 ... 70 | ladder 70 74
ladder 70 - 74 | 57 ... 70 | ladder 70 74
ladder 70 - 74 | 56 ... 71 | ladder 70 74
ladder 70 - 74 | 55 ... 72 | ladder 70 74
ladder 70 - 74 | 54 ... 73 | ladder 70 74
ladder 76 - 79 | 76 ... 98 | ladder 95 99
ladder 76 - 79 | 77 ... 97 | ladder 95 99
ladder 76 - 79 | 78 ... 96 | ladder 95 99
ladder 76 - 79 | 79 ... 95 | ladder 95 99
ladder 95 - 99 | 79 ... 95 | ladder 95 99
ladder 95 - 99 | 78 ... 96 | ladder 95 99
ladder 95 - 99 | 77 ... 97 | ladder 95 99
ladder 95 - 99 | 76 ... 98 | ladder 95 99
ladder 127 - 131 | 130 ... 147 | ladder 146 148
ladder 127 - 131 | 131 ... 146 | ladder 146 148
ladder 127 - 131 | 127 ... 194 | ladder 191 196
ladder 127 - 131 | 128 ... 193 | ladder 191 196
ladder 146 - 148 | 131 ... 146 | ladder 146 148
ladder 146 - 148 | 130 ... 147 | ladder 146 148
ladder 152 - 153 | 152 ... 174 | ladder 172 175

```

Figure 3: Sortie de la fonction `raw_ladders_print()` du module `chem.py`

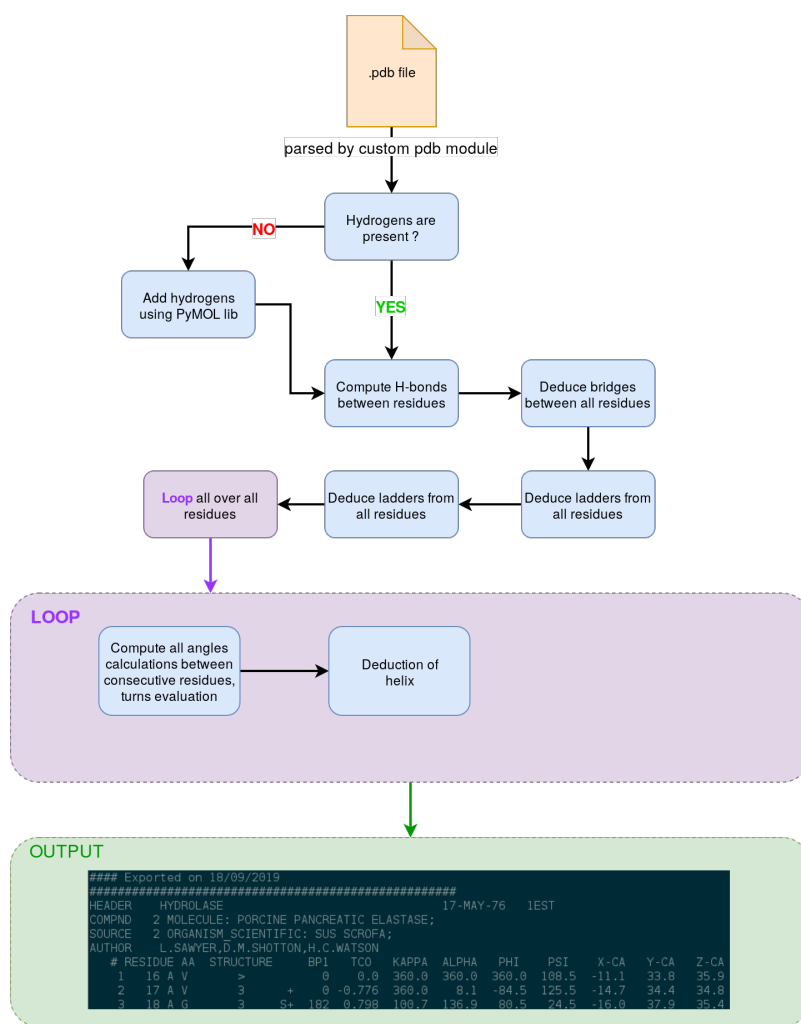


Figure 4: Organigramme du fonctionnement simplifié de la présente implémentation de DSSP