
Modélisation mésoscopique des biopolymères : Approche BCE, Projet ” rubAN ”, Classifications et recherche des formes idéales de l’Elastica 3D

Jean Cognet^{*1,2}, Olivier Ameline^{*}, Xingxi Huang^{*}, Sinan Haliyo^{*}, and Stéphane Régnier^{*}

¹Institut des Systèmes Intelligents et de Robotique (ISIR) – UMR 7222 UPMC CNRS – Pyramide
T55-65, BC 173, 4 Place Jussieu, F-75252 Paris Cedex 05, France

²Laboratoire Jean Perrin (LJP) – UMR 8237 UPMC et CNRS – T32-33-4e, BC 114, 4 Place Jussieu,
F-75252 Paris Cedex 05, France

Résumé

**Olivier Ameline^{1,2}, Xingxi Huang^{1,2}, Sinan Haliyo², Stéphane Régnier²,
Jean A. H. Cognet¹**

Sorbonne Universités UPMC Univ Paris 06, (1) UMR 8237 Laboratoire Jean Perrin (LJP),
BC 114, et (2) UMR 7222, Institut des Systèmes Intelligents et de Robotique (ISIR), BC
173, 4 Place Jussieu, F-75252 Paris Cedex 05, France

Contexte : Nous avons montré progressivement avec plusieurs travaux antérieurs théoriques et expérimentaux que la chaîne sucre-phosphate des acides nucléiques (AN) se comporte aux échelles mésoscopiques comme une poutre élastique [1]. C’est ainsi que nous avons développé une approche de modélisation moléculaire nommée Biopolymer Chain Elasticity (BCE) fondée sur ces observations [1-3]. Elle s’est avérée particulièrement efficace pour modéliser des structures essentielles d’ADN ou d’ARN en boucles, dites ” en épingle à cheveux ” [2-3]. Cette modélisation consiste en quatre étapes qui correspondent aux différentes échelles mésoscopiques (boucle, résidus, bases, atomes).

Projet ” rubAN ” : ” Calcul robuste de vrais rubans d’ADN ou d’ARN pour la modélisation moléculaire interactive à différentes échelles ” est un projet sélectionné et financé par Convergence UPMC 2014, et par le contrat doctoral Interface Pour le Vivant IPV 2014-2017 d’O. Ameline. Notre objectif est de développer un modèle novateur général pour les biopolymères, AN et protéines, où la chaîne macromoléculaire est représentée par une poutre élastique en grande déformation. Ce modèle s’inspire des rubans qui sont couramment utilisés en biologie pour identifier la structure géométrique d’une macromolécule. En superposant une poutre élastique à ces rubans, nous souhaitons les utiliser non seulement pour visualiser la molécule, mais pour en décrire aussi les propriétés géométriques, physiques et mécaniques. L’approche proposée consiste à décrire la conformation comme une tige flexible, figurée par un ruban, au moyen de la théorie d’élasticité non-linéaire des poutres. Dans un premier temps, l’idée est donc de disposer d’une méthode pour calculer la géométrie de ces poutres à partir de la conformation connue de biopolymères. Dans un deuxième temps, cette méthode peut ensuite servir à déformer ces conformations de façon réaliste, ou aussi à déterminer les

*Intervenant

conformations inconnues ou partiellement connues de biopolymères. Enfin, nous souhaitons également utiliser ce modèle pour mettre en œuvre une simulation interactive et haptique des déformations et interactions entre molécules.

Résultats : Pour être applicable à tous les biopolymères, l'approche BCE nécessite une méthode de calcul des trajectoires de poutres élastiques pour tous types de conditions d'encastrement. Nous nous sommes d'abord focalisés sur le problème direct qui consiste à exprimer analytiquement, à étudier, caractériser, et classer toutes les trajectoires infinies obtenues à partir des équations de forces et de couples agissant sur une poutre élastique en trois dimensions (c'est une généralisation en 3D du problème de l'Elastica d'Euler).

Nous avons réussi à résoudre ce problème difficile en utilisant l'approche physique de Landau, et le formalisme de mécanique des directeurs de Darboux ou de Cosserat [4]. Nous avons montré que trois dimensions suffisent pour localiser toutes les trajectoires, et que la structure géométrique des trajectoires présente trois propriétés de chiralités, liées au sens des enroulements (1) autour d'un axe hélicoïdal, (2) de la poutre autour de cet hélice et (3) des sections autour de la tangente à la trajectoire. L'espace est ainsi subdivisé en dix zones qui ont été déterminées.

Thèses C. Pakleza (2002) et de G. Santini (2005), Pakleza, C., & Cognet, J.A.H. (2003) **Nucleic Acids Res.**, **31**, 1075-1085 ; Santini, G.P.H., Pakleza, C., & Cognet, J.A.H. (2003) **Nucleic Acids Res.**, **31**, 1086-1096 ; Lamoureux, M., Santini, G.P.H., Cognet, J.A.H., et al. (2006) **Spectrochim. Acta part A**, 84-94, sur Biopolymer Chain Elasticity.

Santini, G.P.H., Cognet, J.A.H., et al. (2009) **J. Phys. Chem. B**, **113**, 6881-6887.

Baouendi, M., Cognet, J.A.H., et al. (2012) **FEBS J.**, **279**, 479-490.

Ameline, O., Haliyo, S., Huang, X., & Cognet, J.A.H. (2017) **J. Math. Phys.**, **58**, 062902