



UNIVERSITÉ DE
BORDEAUX

Master bioinformatique

Génie Logiciel

Semaine 2 - Travaux Pratiques

TP2

Modélisation de réactions métaboliques

Les réactions métaboliques sont habituellement modélisées par des graphes, en 2D. Cependant, il est difficile de préciser la localisation des réactions dans les différents compartiments cellulaires, sans surcharger la visualisation. Nous allons donc effectuer un rendu 3D de l'interaction de molécules impliquées dans une réaction, ainsi que leur localisation cellulaire.

Nous nous intéressons à la réaction qui précède le cycle de Calvin dans les cellules végétales, c'est-à-dire la fixation du CO_2 sur la **phosphoénolpyruvate carboxylase** (PEPC) pour donner du **Malate**. La réaction du CO_2 avec la PEPC se produit dans le cytosol. Le malate est ensuite transporté dans la vacuole, où il est utilisé dans le cycle de Calvin. L'objectif est d'obtenir un rendu proche de celui obtenu sur la Figure 1.

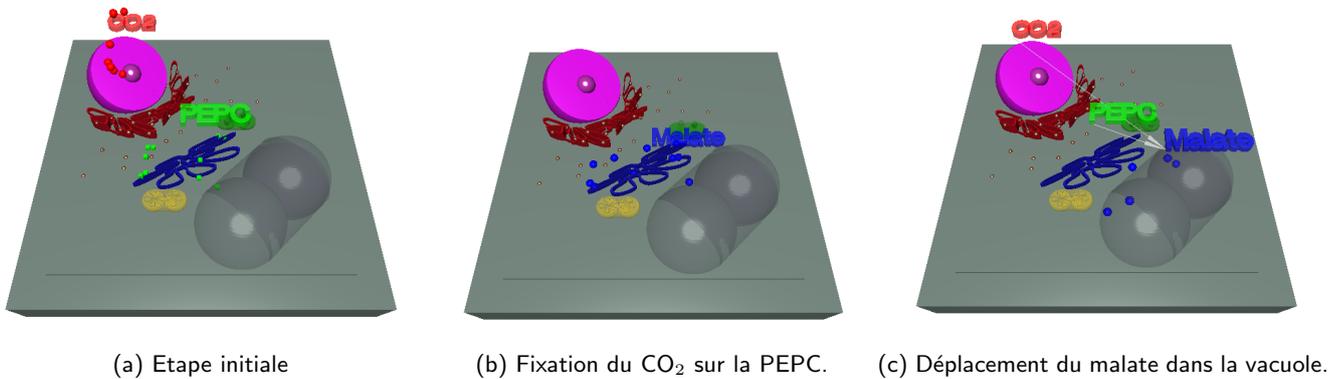


FIGURE 1 – Différentes étapes de la réaction CO_2 /PEPC dans une cellule végétale.

1 Informations importantes

Au chargement de la page, un modèle 3D est chargé (fichier `.obj` situé dans le répertoire `models`). Ce modèle représente les différents compartiments d'une cellule végétale : noyau (en rose), reticulum (en rouge), vacuole (en gris), mitochondrie (en jaune) et chloroplaste (en vert). Chaque compartiment est stocké dans un `THREE.Group`.

Avant de commencer le TD, commencez par lire attentivement le code disponible. Les parties à compléter sont marquées d'un commentaire `TODO`.

2 Création et animation des molécules

L'objectif de cette partie est de modéliser les réactions impliquant les différentes molécules.

2.1 Création des molécules

1. Créer les modèles représentant les molécules de CO_2 , de PEPC, et de Malate, à l'aide de `THREE.BoxGeometry` ou `THREE.SphereGeometry`. Créer 10 molécules de chaque.
2. Positionner les molécules de CO_2 dans le cytosol, à proximité du noyau. Pour cela, vous pouvez vous aider de la classe `THREE.Box3`, qui permet de construire la boîte englobante d'un objet, c'est-à-dire le cube minimal qui englobe l'objet. Le code est le suivant :

```
var box = new THREE.Box3();
box.setFromObject(noyau);
```

On peut ensuite placer les molécules aléatoirement dans la boîte en utilisant les points inférieur et supérieur de la boîte : `box.min` et `box.max`.

3. Positionner les molécules de PEPC aléatoirement dans la boîte englobante de l'appareil de Golgi.
4. Les molécules de Malate ont la même position que les molécules de PEPC initialement, mais ne sont pas affichées au début de l'animation.
5. Créer des groupes (`THREE.Group`) pour les molécules de même type, de façon à pouvoir les manipuler plus facilement par la suite.

2.2 Trajectoires des molécules

Le but de cette partie est de modéliser la trajectoire des molécules de CO_2 vers les molécules de PEPC, et des molécules de Malate vers la vacuole. Les trajectoires sont modélisées par des courbes. On utilisera pour cela la classe `THREE.CatmullRomCurve3`. Dans la fonction `createPaths()` :

1. Créer une courbe reliant chaque molécule de CO_2 à une molécule aléatoire de PEPC.
2. Faire de même pour chaque molécule de Malate et un point aléatoire dans la boîte englobante de la vacuole.
3. Ajouter chaque courbe à un tableau afin de les utiliser lors de l'animation.

2.3 Animation

Le but de cette partie est de réaliser le déplacement des molécules et leur interaction. Compléter la fonction `animate()`.

1. Déplacer les molécules de CO_2 vers les molécules de PEPC en suivant les courbes définies par la fonction `createPaths()`, en utilisant la méthode `getPoints(n)` de `CatmullRomCurve3`. Cette méthode renvoie un tableau avec n points répartis entre le point de départ et le point d'arrivée de la courbe.
2. Lorsque l'animation précédente est terminée, supprimer les molécules de CO_2 et de PEPC de la scène, et afficher les molécules de Malate.
3. Déplacer les molécules de Malate à l'intérieur de la vacuole selon le même principe que la question 1.

3 Création du graphe

3.1 Création du texte

Dans la fonction `initFont()` :

1. Créer les modèles représentant le nom des molécules, à l'aide de `THREE.TextGeometry` (compléter la fonction `initFont()`).
2. Positionner le texte au niveau des molécules en utilisant les boîtes englobantes des molécules.

3.2 Modification de l'animation

Modifier l'animation précédente pour intégrer les informations textuelles :

1. Afficher uniquement le texte " CO_2 " et "PEPC" au début de l'animation.
2. Lorsque les molécules de Malate apparaissent, faire apparaître le texte "Malate", et disparaître " CO_2 " et "PEPC".
3. Lorsque l'animation est terminée, c'est-à-dire lorsque les molécules de Malate sont dans la vacuole, faire apparaître tous les noms des molécules et dessiner la réaction à l'aide de flèches en utilisant la classe `ArrowHelper` (cf. Fig 1c).