

Un nouvel algorithme de segmentation facilitant la modélisation des molécules

Publié le jeudi 8 décembre 2005

Voir en ligne : <https://www.france-science.org/Un-nouvel-algorithme-de.html>

Des informaticiens et biologistes du laboratoire Lawrence Berkeley du Department of Energy ont développé un logiciel permettant de sélectionner des images de haute qualité de molécules à partir de micrographes électroniques. Les images en 2 dimensions d'une molécule sous différents angles sélectionnées par cet algorithme, "particle picking by segmentation", sont utilisées pour modéliser la structure de la molécule en 3 dimensions. Théoriquement, il faut au moins 2 fois plus d'images que le nombre d'atomes d'une molécule pour pouvoir la modéliser, on retrouve là la loi de Shannon. Chacune de ces images doit contenir au moins un atome intégralement et bien isolé, avec une bonne qualité ; la technique utilisée pour produire les images de départ ne permet qu'un faible rapport signal/bruit. Les méthodes développées jusqu'à présent pour sélectionner les images menaient à plus de 30% d'images sélectionnées inexploitable, et il fallait donc laisser à un oeil humain un tri final. Le nouvel algorithme permettrait de réduire ce taux. Il requiert la donnée par l'utilisateur de la taille de la molécule et l'intervalle de niveaux de gris correspondant à la molécule sur un micrographe. L'algorithme sélectionne alors les images et les zones intéressantes (segmentation) pour permettre ultérieurement une modélisation de la molécule. Une première étape vise à faire disparaître le bruit d'arrière plan. Ensuite ont lieu une étape itérative de binarisation, puis une étape nommée "pinch-off", qui sépare les motifs qui ne sont pas connectés et détecte les motifs correspondant à 2 molécules et qui sont connectés pour qu'ils ne soient pas pris en compte. Les zones rectangulaires correspondant à l'image d'une molécule sont sélectionnées et l'image améliorée par la technique du shrink-wrapping (affinage progressif d'une structure 3D polygonale). Si une telle zone contient une partie d'une autre molécule, celle-ci est remplacée par un motif similaire à l'arrière plan. Au final, le système permet de produire rapidement des images à haute résolution de structures biologiques, en somme c'est une forme de microscope artificiel. Ces recherches font l'objet d'un article à paraître dans le "Journal of Structural Biology" intitulé "Particle picking by segmentation : A comparative study with SPIDER-based manual particle picking".

Source :

<http://www.lbl.gov/Science-Articles/Archive/PBD-picking-particles.html>

Rédacteur :

Sébastien Morbieu, tic.vi@ambafrance-us.org