

# Tutoriel réaliser le FOLDING d'une séquence d'acides aminés :

Présentation de divers outils (Via sites WEB ) pour simuler et prédire le repliement d'une chaîne polypeptidique

Les captures d'écrans et les liens sont testés et validés au 26/01/2021

Si ces liens devaient ne plus fonctionner à l'avenir, merci de contacter [jean-pascal.dufour@ac-creteil.fr](mailto:jean-pascal.dufour@ac-creteil.fr)

# Présentation des outils

- Le choix des armes sur le net :
  - RPBS : Ressources Parisiennes en Bio-informatique Structurale : pas exactement un site, mais un portail, ouvrant sur une multitudes d'outils. Nous nous concentrerons uniquement sur l'outil PEP-FOLD :  
<http://mobylerpbs.univ-paris-diderot.fr/cgi-bin/portal.py#forms::PEP-FOLD3>
  - ZhangLab : Site de l'université du Michigan : portail donnant accès à une multitude d'outils, nous nous concentrerons uniquement sur I-TASSER  
<https://zhanglab.ccmb.med.umich.edu/I-TASSER/>
  - OPM : Site de l'université du Michigan (encore) : Orientations of Proteins in Membranes, le titre est suffisamment évocateur normalement 😊  
<http://opm.phar.umich.edu/server.php>

# PEP FOLD3 : pour des peptides de 5 à 50 AA

Zone où vous devez coller la séquence peptidique (format à une lettre)

The screenshot shows the RPBS Web portal interface for PEP-FOLD3.5. The page has a blue header with the RPBS logo and the text 'RPBS Web portal'. Below the header, there is a search bar and a navigation menu with tabs for 'Welcome', 'Forms', 'Data Bookmarks', 'Jobs', and 'Tutorials'. The main content area is titled 'PEP-FOLD 3.5' and includes a 'Run' button, a 'Reset' button, and a 'Help pages' button. Below these buttons is an 'Input Data' section with a 'Peptide amino acid sequence' label and a 'paste' button. A large blue box highlights the input field for the peptide sequence. A blue arrow points from the text on the left to this input field. Another blue arrow points from the text on the right to the 'Run' button.

Cliquez pour lancer les calculs

Je vous invite à essayer avec la séquence : PRQTEINEDETSTDELA FQRMATIQNCRETEIL

# PEP FOLD3 : pour des peptides de 5 à 50 AA

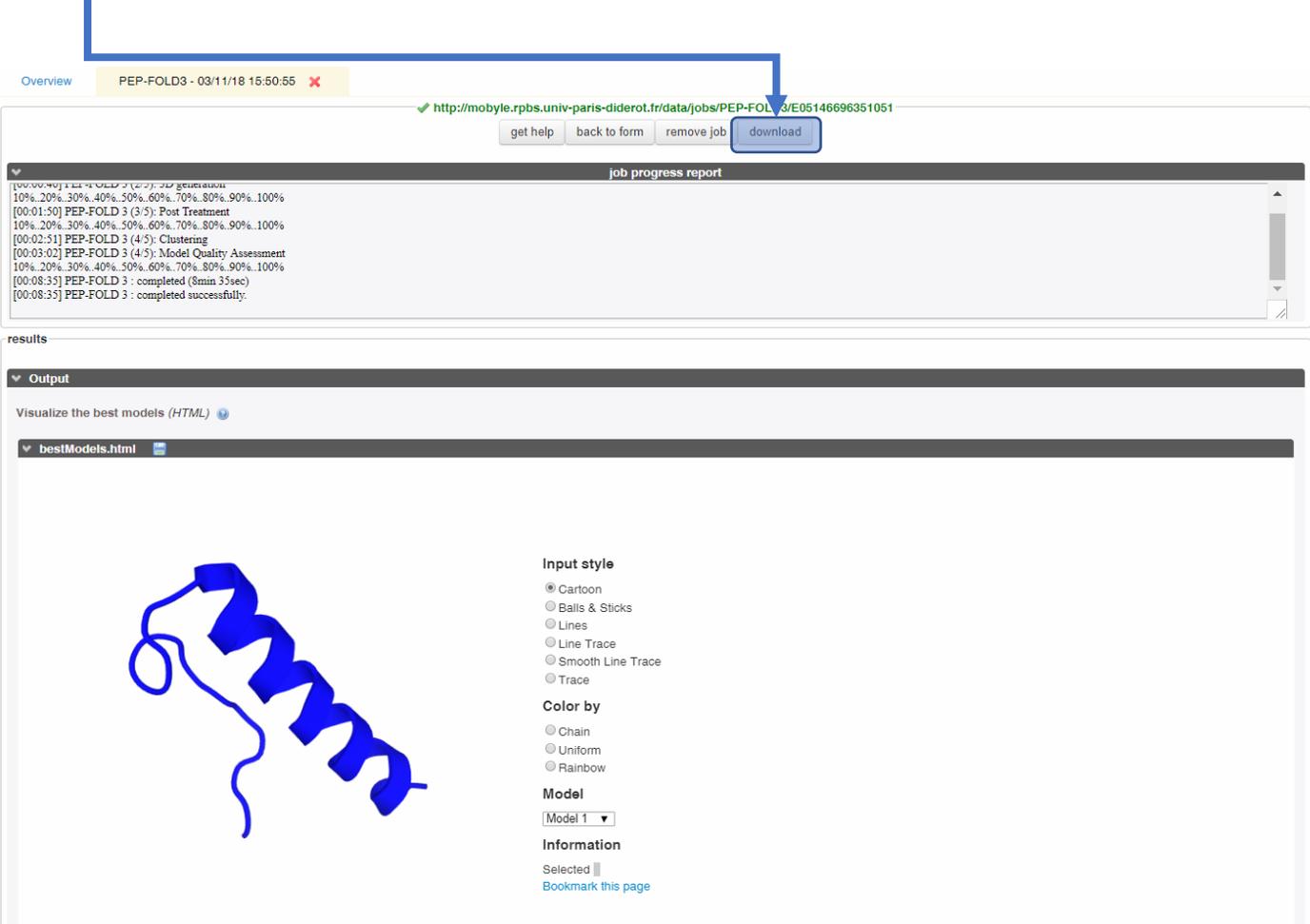
Cliquer ici pour télécharger les modèles calculés ainsi que toutes les informations de la simulation. C'est un dossier ZIP (compressé !) dedans se trouvent tous les autres fichiers intéressants.

En moins de 10 minutes les serveurs RPBS fournissent 10 prévisions.

L'avantage principal du travail sur un peptide et via ce site est que la durée de calculs est compatible avec la durée d'une AT.

Plus bas sur la même page vous aurez la possibilité de voir chacune des 10 propositions.

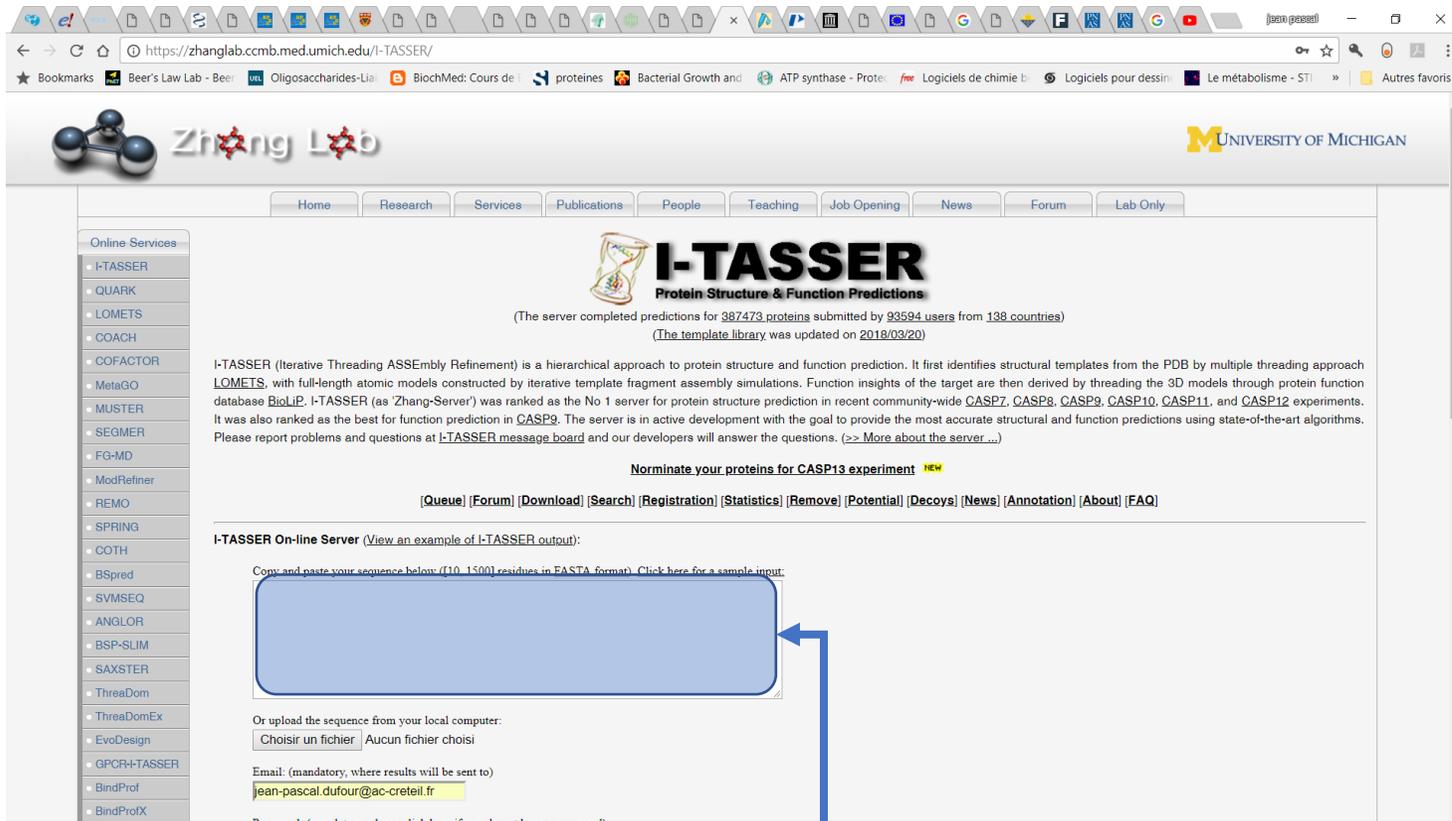
Toutes les informations disposent d'explications (en anglais).



The screenshot displays the PEP FOLD3 web interface. At the top, there is a navigation bar with 'Overview' and a job identifier 'PEP-FOLD3 - 03/11/18 15:50:55'. A URL is shown: 'http://mobyline.rpbs.univ-paris-diderot.fr/data/jobs/PEP-FOLD3/E05146696351051'. Below this are buttons for 'get help', 'back to form', 'remove job', and 'download'. A 'job progress report' section shows a log of simulation steps: '[00:00:40] PEP-FOLD3 (2-5): Job generation', '[00:01:50] PEP-FOLD3 (3-5): Post Treatment', '[00:02:51] PEP-FOLD3 (4-5): Clustering', '[00:03:02] PEP-FOLD3 (4-5): Model Quality Assessment', '[00:08:35] PEP-FOLD3 : completed (8min 35sec)', and '[00:08:35] PEP-FOLD3 : completed successfully.'. The 'results' section is titled 'Output' and includes a link to 'Visualize the best models (HTML)'. Below this, a 3D model of a peptide structure is shown in blue. To the right of the model are controls for 'Input style' (Cartoon, Balls & Sticks, Lines, Line Trace, Smooth Line Trace, Trace), 'Color by' (Chain, Uniform, Rainbow), 'Model' (Model 1), and 'Information' (Selected, Bookmark this page).

# Zhanglab : l'outil I-Tasser 10 à 1500 AA

Outil GRATUIT MAIS : vous devez au préalable procéder à inscription avec une adresse académique.



Zone où vous devez coller la séquence peptidique (format à une lettre)

Outil extrêmement puissant, qui va procéder par comparaison avec les bases de données de la PDB.

Il proposera plusieurs modèles possibles mais aussi :

Les 10 meilleures concordances avec les protéines déjà présentes dans la PDB, une prédiction des possibles ligands (les modèles protéine / ligand) seront téléchargeables.

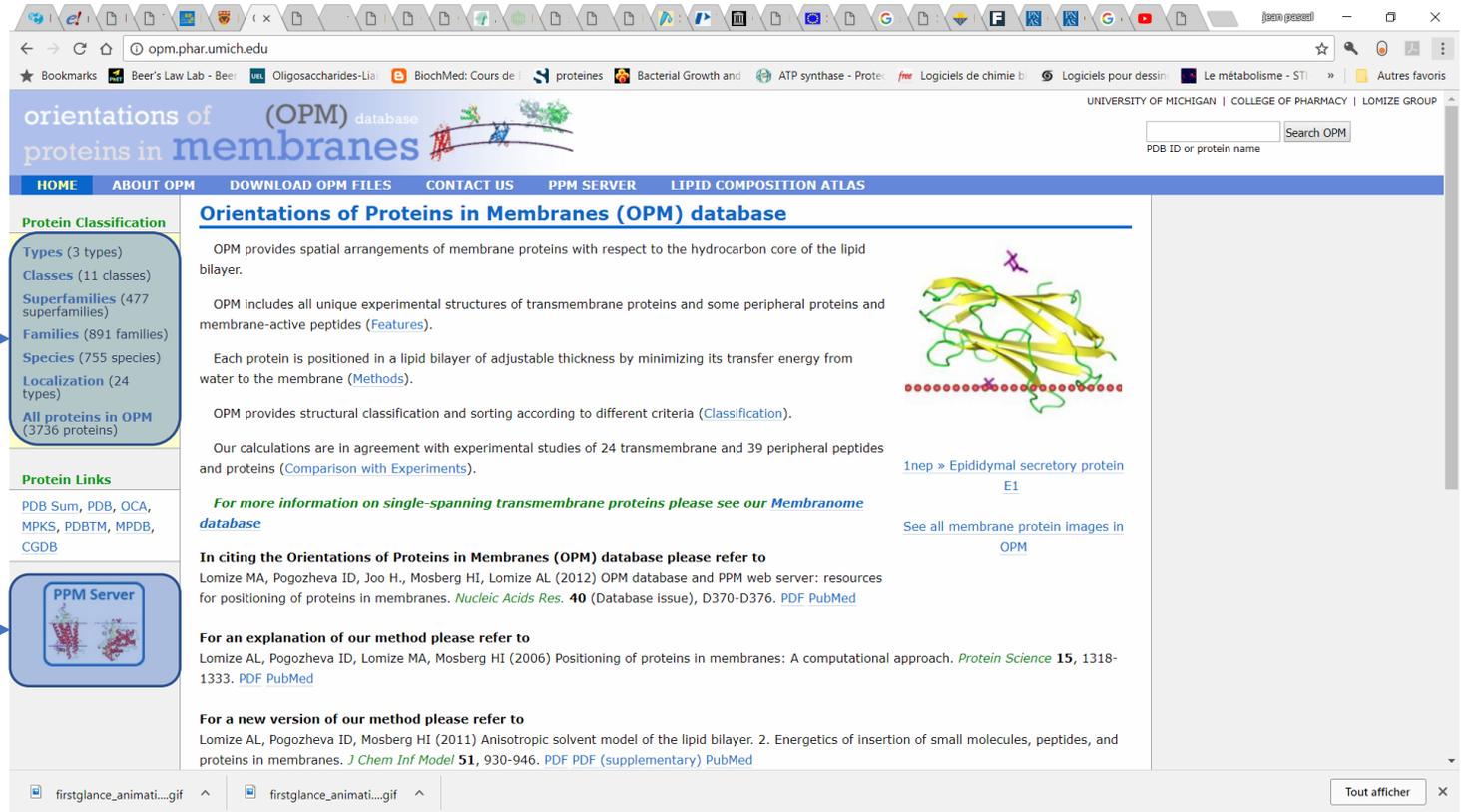
Et en concordance avec les données de la PDB un prédiction de la ou des activités catalytiques possibles.

Calculs LONGS :

24 à 36 Heures !!!!!

# Orientations of Proteins in Membranes : OMP

Accéder à la base de données des protéines de la PDB qui sont déjà incluses dans une membrane.



The screenshot shows the OPM database website. The main navigation bar includes: HOME, ABOUT OPM, DOWNLOAD OPM FILES, CONTACT US, PPM SERVER, and LIPID COMPOSITION ATLAS. The left sidebar contains a 'Protein Classification' section with the following statistics: Types (3 types), Classes (11 classes), Superfamilies (477 superfamilies), Families (891 families), Species (755 species), Localization (24 types), and All proteins in OPM (3736 proteins). Below this is a 'Protein Links' section with links to PDB Sum, PDB, OCA, MPKS, PDBTM, MPDB, and CGDB. A 'PPM Server' button is also visible. The main content area is titled 'Orientations of Proteins in Membranes (OPM) database' and contains introductory text about the database's purpose and methods. A search bar is located at the top right of the page.

Accéder à la fenêtre pour déposer la propre séquence peptidique.  
NON TESTEE A DATE

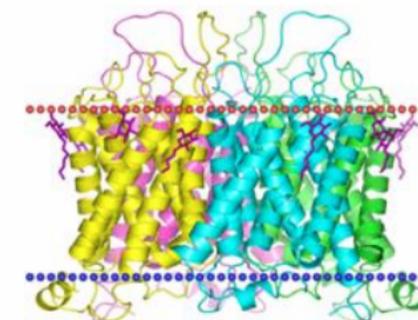
# Orientations of Proteins in Membranes : OMP

Exemple : En cherchant parmi les protéines déjà incluses, dans une membrane Eucaryote, vous trouverez une aquaporine1

## 1j4n » Aquaporin-1

- **Type:** [1. Transmembrane](#) (3 classes)
- **Class:** [1.1. Alpha-helical polytopic](#) (115 superfamilies)
- **Superfamily:** [1.1.014. Major Intrinsic Protein \(MIP\)/FNT superfamily](#) (2 families)
- **Family:** [1.1.14.01. Major intrinsic protein \(MIP\) family](#) (25 proteins) [1.A.8 \(TCDB\)](#)
- **Species:** [Bos taurus](#) (88 proteins)
- **Localization:** [Eukaryotic plasma membrane](#) (889 proteins)

1j4n » Aquaporin-1	
<b>Hydrophobic Thickness</b>	31.8 ± 1.0 Å
<b>Tilt Angle</b>	0 ± 0°
<b>ΔG<sub>transfer</sub></b>	-129.2 kcal/mol
<b>Links to 1j4n</b>	<a href="#">PDB Sum</a> , <a href="#">PDB</a> , <a href="#">SCOP</a> , <a href="#">MSD</a> , <a href="#">OCA</a> , <a href="#">MMDB</a>
<b>Topology</b>	subunit A (N-terminus cytoplasmic)
<b>Resolution</b>	2.20 Å
<b>Other PDB entries representing this structure</b>	none
<b>Number of TM Secondary Structures</b>	32



Cliquer sur Jmol  
Pour accéder à la  
vue 3D

3D view in [Jmol](#) or [Webmol](#)

[Download Coordinates](#)

*Topology in Eukaryotic plasma membrane*

extracellular side

cytoplasmic side

4 transmembrane subunits	
<b>A</b> - Tilt: 8° - Segments: 1(10-32), 2(51-70), 3(79-88), 4(93-115), 5(141-159), 6(170-186), 7(195-204), 8(211-232)	
<b>B</b> - Tilt: 8° - Segments: 1(10-32), 2(51-70), 3(79-88), 4(93-115), 5(141-159), 6(170-186), 7(195-204), 8(211-232)	

# Orientations of Proteins in Membranes : OMP

L'interface offre de multiples possibilités de visualisation (je vous laisse découvrir)

1j4n Views Tools Resources Preferences

Spin Background Quality Zoom

This model was generated by the server *Orientations of Proteins in Membranes* (available under the *Resources* tab). The server added **red** and **blue** pseudo-atoms to mark the hydrophobic boundaries of the lipid bilayer. They can be toggled on/of (and made smaller) with the *Ligands+* button (under the *Views* and *Tools* tabs).

This [PDB data file](#) lacks important standard information. This typically occurs when the model was generated by a server such as MakeMultimer (for Biological Units), Orientations of Proteins in Membranes, Swiss-Model, or comes from a source different from the [Protein Data Bank](#).

Introduction [What's NEW ?](#)

**FirstGlance in Jmol** is a simple, free tool for macromolecular visualization. The initial display is [Cartoon](#) plus [Ligands+](#).

[NEW Save presentation-ready animations or images of any view.](#)

- **Rotate** the molecule by dragging near it with the mouse.
- **Identify** any atom by clicking on it. Its identity will be displayed to the lower left of the molecule. If you don't recognize the abbreviation, look for it under *Ligands+* and *Non-Standard Residues* in the 1j4n tab. [More.](#)
- **Center** a region of interest using *Center Atom* (at the bottom of any of the first 4 tabs). You can then inspect details by **zooming** in. Regions distant from the centered moiety can be **hidden** by toggling on *Slab* (in the *Views* or *Tools* tabs). When finished, *Center Atom* offers the option to re-center the entire molecule.
- Save [Powerpoint-ready images or animations.](#)
- For a **quick tour** of what *FirstGlance* can do, visit the [Snapshot Gallery](#) and see [What Is FirstGlance?](#).
- [All About FirstGlance in Jmol](#) has instructions on setting up links to display molecules. [troubleshooting](#). [copyright/license](#). [acknowledgements](#). [version](#)

1J4N

extracellular  
cytoplasmic

JSmol

[NEW Save Image or Animation for Powerpoint](#) [NEW](#)

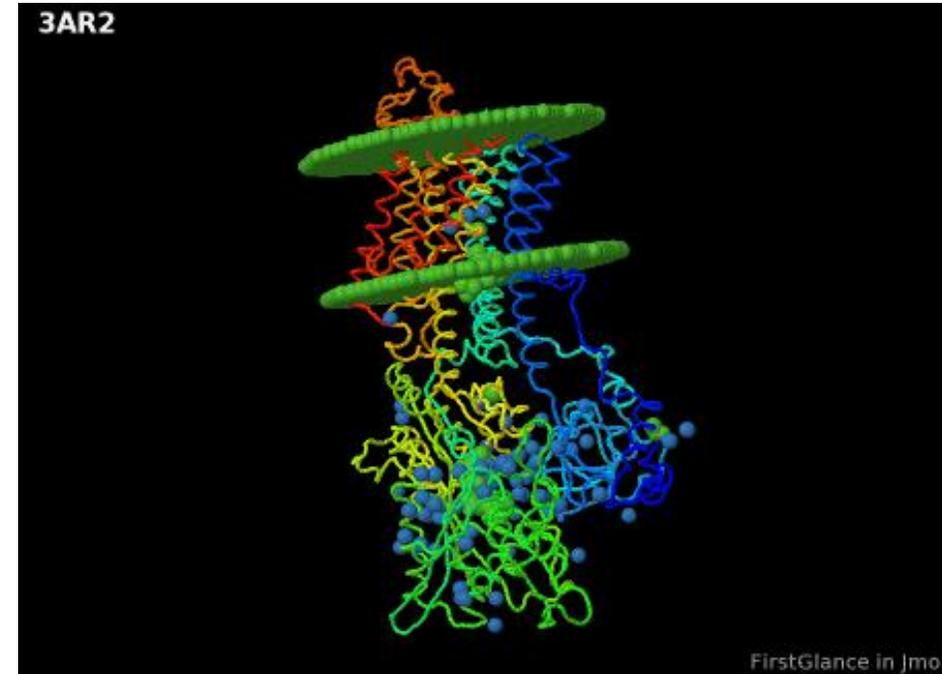
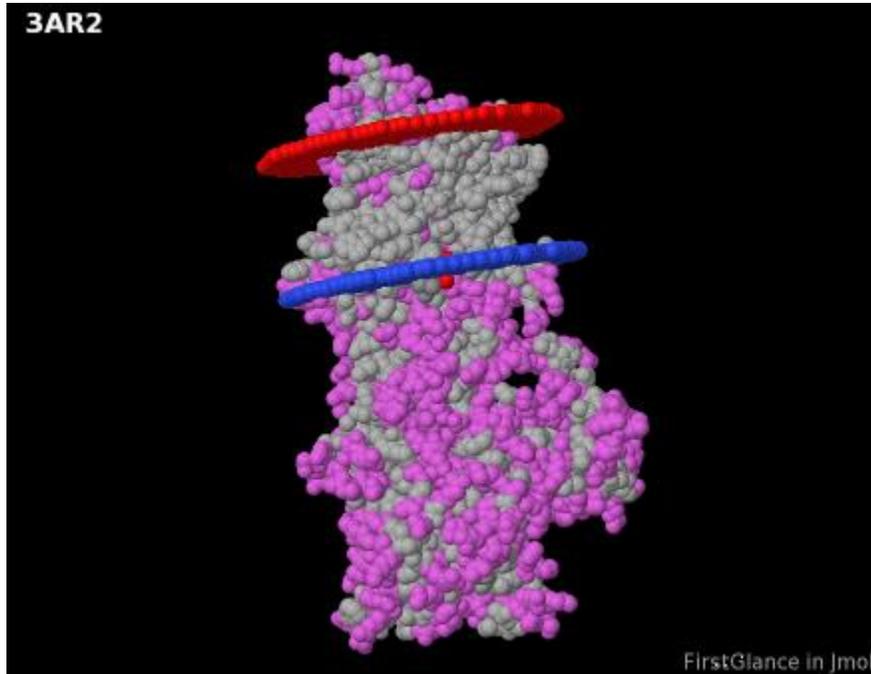
[Where? How?](#) [Troubleshooting](#) [Mouse Use](#) [FirstGlance in Jmol \(ver. 2.72\)](#)

834,093 Visitors since February 8, 2006. [Stats.](#)

Possibilité de télécharger la vue ou bien une animation (rotation en X ou en Y) de la vue.  
L'animation sera un GIF, avantage : un GIF est compatible avec PowerPoint par exemple 😊

# Orientations of Proteins in Membranes : OMP

Le résultat de 2 animations (format GIF) de ma protéine :  
Vous devez « lancer » le diaporama pour que les GIFs s'animent.



En gris : Hydrophobe  
En Violet : Hydrophile