

# Com fem anar AlphaFold

1. Entreu a <https://colab.research.google.com/github/sokrypton/ColabFold/blob/main/AlphaFold2.ipynb>
2. Heu d'entrar amb un compte de google (si els alumnes no en tenen es poden fer uns quants per tal de fer l'activitat) i cal comprovar que esteu connectats al lloc de la posició 2.2 de la imatge i si no, prémer connectar. Vigilar que es pot desconnectar entre prediccions, però només cal tornar a connectar.
3. Al primer apartat, "Input protein sequence(s)" heu de copiar la seqüència que hàgiu decidit analitzar on posa "query\_sequence", posició 3. de la imatge.
4. A "jobname" (posició 4) podeu posar el nom del test que esteu realitzant.

AlphaFold2.ipynb

Archivo Editar Ver Insertar Entorno de ejecución Herramientas Ayuda *No se pueden guardar cambios*

+ Código + Texto Copiar en Drive

2.1 Compartir

2.2 RAM Disco Editar

### ColabFold: AlphaFold2 using MMseqs2

Easy to use protein structure and complex prediction using [AlphaFold2](#) and [Alphafold2-multimer](#). Sequence alignments/templates are generated through [MMseqs2](#) and [HHsearch](#). For more details, see [bottom](#) of the notebook, checkout the [ColabFold GitHub](#) and read our manuscript. Old versions: [v1.0](#), [v1.1](#), [v1.2](#), [v1.3](#)

[Mirdita M. Schütze K. Moriwaki Y. Heo L. Ovchinnikov S. Steinegger M. ColabFold: Making protein folding accessible to all. \*Nature Methods\*, 2022](#)

Input protein sequence(s), then hit Runtime -> Run all

3 query\_sequence: "GENFTETDIKMMERVVEQMCITQYQRESQAYYQGA"

- Use : to specify inter-protein chainbreaks for **modeling complexes** (supports homo- and hetro-oligomers). For example **PI...SK:PI...SK** for a homodimer

4 jobname: "test"

use\_amber:

5. Per iniciar la prova, heu d'anar a Runtime → Run all (en anglès) o Entorno de ejecución → Ejecutar todas (en castellà) o les tecles Ctrl + F9.

AlphaFold2.ipynb

Archivo Editar Ver Insertar Entorno de ejecución Herramientas Ayuda No se pueden guardar cambios

+ Código + Texto + Cor

5 → Ejecutar todas Ctrl+F9

Ejecutar anteriores Ctrl+F8

Ejecutar celda seleccionada Ctrl+Enter

Ejecutar selección Ctrl+Shift+Enter

Ejecutar siguientes Ctrl+F10

Interrumpir ejecución Ctrl+M

Reiniciar entorno de ejecución Ctrl+M

Reiniciar y ejecutar todo

Desconectarse y eliminar entorno de ejecución

Cambiar tipo de entorno de ejecución

Gestionar sesiones

Ver registros del entorno de ejecución

ColabFold: AlphaFold

Easy to use protein structure alignments/templates are generated in this notebook, checkout the [ColabFold](#) [Mirdita M, Schütze K, Moriwa](#) [accessible to all. Nature Methods](#)

Input protein sequence

query\_sequence: "

- Use : to specify inter-protein chainbreaks for **modeling complexes** (supports homo- and hetro-

6. En funció de la llargada de la seqüència trigarà més o menys temps en acabar (seqüències de 10-20 aminoàcids triga un 1 minut aproximadament, seqüències de 35-50 aminoàcids triga uns 2-3 minuts). Tot i això, segons la connexió i ordinadors pot trigar més temps.

7. Quan hagi acabat, a l'apartat "Run prediction" veureu diversos plegaments (5 en mode predefinit) que ha anat testejant l'eina.

8. Podeu visualitzar els resultats a l'apartat Display 3D structure. Si feu anar el ratolí i arrossegueu el dibuix de sota (8.2) Veureu que el podeu moure en l'espai 3D.

## OPCIONES PER ALS MÉS ATREVITS

9. Podeu seleccionar quina de les solucions (5 en predefinit) voleu veure (posicions 9.1 i 9.2). Per defecte mostra l'opció amb millor puntuació de la predicció.

10. Podeu triar els colors de l'estructura resultant (posicions 10.1 i 10.2) (segons IDDT, és un valor que mesura la probabilitat de la predicció, blau és molt probable, vermell és molt poc probable, *chain* pinta tota l'estructura d'un color, *rainbow* pinta l'estructura de blau a vermell des del principi a la fi.)

11. Podeu fer tick a `show_sidechains` per veure les cadenes laterals dels aminoàcids de la seqüència que heu introduït (posició 11)

12. Podeu fer tick a `show_mainchains` per veure la representació de tots els àtoms dels residus que formen la seqüència (posició 12)

The image shows a software interface for displaying a 3D protein structure. It features two control panels at the top and two 3D models below. The left panel is titled 'Display 3D structure' and has several settings: 'rank\_num: 1', 'color: IDDT', 'show\_sidechains: ', and 'show\_mainchains: '. The right panel is titled 'color: rainbow' and has 'show\_sidechains: ' and 'show\_mainchains: '. Red arrows point from the numbers 8, 9.1, 9.2, 10.1, 10.2, 11, and 12 in the text above to their corresponding UI elements. Below the panels are two 3D models: a blue ribbon model on the left and a stick model on the right. A red arrow labeled '8.2' points to a specific part of the ribbon model.

13. Podeu descarregar-vos el resultat. Se us descarregarà automàticament una carpeta comprimida amb diversos arxius comprimida amb ZIP. De la llista d'arxius el que acaba en `.pdb` és un arxiu amb les coordenades i es pot llegir amb programes específics com Jmol, Chimera o Pymol, que tenen versions lliures.

Els arxius `pdb` es poden transformar en arxiu `STL` per poder imprimir-lo en impressora 3D a través d'aquest programa: <https://pdb101.rcsb.org/learn/3d-printing/pdb-structures-and-3d-printing>.

Podeu visitar la secció [Impressió 3D](#)