

## Atelier de Bio & Chimie Informatique Structurale :

http://abcis.cbs.cnrs.fr

### Le Serveur

Le serveur A.B.C.I.S. rassemble un certain nombre de ressources en Biologie Structurale. La plupart de ces ressources sont assurées par le serveur installé au CBS, cependant certaines ressources sont des "meta-services" exploitant indirectement d'autres serveurs.



Atelier de Bio & Chimie Informatique Structurale :

## A.B.C.I.S.

Protein modelling tools

Principal Sponsors : Additional Sponsors :

	<b>@TOME</b> : Bioinformatics Tools Server (or <i>BioServ</i> ) : A freely-accessible system for scientists dealing with Proteins and their Ligands. <i>Douguet D. and Labesse G (2001). Bioinformatics, 17(8), 752-3.</i>	LR-Genopole ACI-IMPBio
	<b>PAT</b> : a Protein Analysis Toolkit for integrated biocomputing on the web. <i>Jerome Gracy and Laurent Chiche (2005). Nucleic Acids Research, Web Server Issue In Press</i>	ACI-IMPBio
	<b>Eval23D</b> : This server allows evaluation of 3D protein structures with different methods in a single run (Verify3D, Eval23D, Prosa II, EvTree) <i>Jean-Christophe Gelly</i>	LR-Genopole ACI-IMPBio
	<b>EvDTree</b> : EvDTree creates structure-dependent substitution profiles based on decision tree classification of 3D environments. <i>Gelly, J.-C., Chiche, L. and Gracy, J. (2005). BMC Bioinformatics 6:4</i>	Action Bioinformatique Inter-EPST
	<b>VITO</b> : an interactive tool for homology modelling and protein family study coupling a full featured alignment editor with a complete 3D viewer. <b>VITO</b> has its own macro language. <i>Catherine V. and Labesse, G.(2004) Bioinformatics 20,3694-3696</i>	Inserm (AIGE)
	<b>Propsearch</b> : Sequence homology using amino acid composition. (by Uwe Hobohm and Chris Sander) - <i>This Web site is maintained by the CBS.</i>	

#### NMR Tools

	<b>NMR data-sets bank</b> : A repository for raw NMR data-sets <i>Pons JL, Mallavin TE, Tramset D, Delsuc M-A. (2004) Bioinformatics 20 (1) 3707-3709</i>	IMPG ACI-IMPBio
	<b>RESCUE ( &amp; Rescuen)</b> : NMR residu typing assignment aid software based on Neural Networks <i>Pons JL, Delsuc M-A (1999). J. Bio. NMR 15 (0) 15-26 . Auguin D, Catherine V, Mallavin TE, Pons JL, Delsuc MA (2003) . Spectroscopy 17 (0) 559-568 .</i>	IMPG
	<b>RESCUE2</b> - program for amino acid type assignment based on a probabilistic model of NMR chemical shifts distributions. <i>Marin, A., Mallavin, T.E., Nicolas P., Delsuc, MA. (2003). J.Bio.NMR. 30 (1) 47-60</i>	ACI-IMPBio
	<b>CRAACK</b> - Consensus Rules for Amino-Acid Characterisation using a Kernel method (SVM). The spin system typing consensus is based on the following softwares: Rescuc, Rescuen, Rescuc2, Platon, and one other using SVM algorithm. <i>Benod C., Delsuc MA., Pons JL</i>	ACI-IMPBio
	<b>CCSP</b> : Consensus for Chemical Shift Prediction. (based on the following softwares : Shifty v1.4, Orb v1.2, Shifts v4.1.1, Proshfts and Shifts). <i>Pons JL &amp; Delsuc MA</i>	ACI-IMPBio
	<b>DEX</b> : Distance Extraction from PDB file. <i>Martin L, Pons JL, Delsuc MA</i>	IMPG
	<b>RMN softwares</b> (Gifa, Cindy, Crowd,...)	

#### Others

	<b>Knottins Web site</b> : This web is dedicated to the protein structural family of Knottins <i>Gelly JC, Gracy J, Kats Q, Le-Nguyen D, Heitz A, Chiche L. (2004) Nucleic Acids Res. Jan 1;32(1):D156-9.</i>	ACI-IMPBio
--	--	------------

Date	Pages	Hits	Unique Hosts	Visits	Pages
January, 2004	251,070	521,805	6,155	16,671	
February, 2004	102,882	280,557	5,402	11,441	
March, 2004	194,146	540,521	8,400	18,714	
April, 2004	40,699	175,808	5,942	12,460	
May, 2004	0	0	0	0	
June, 2004	64,211	151,498	3,012	7,011	
July, 2004	165,472	315,655	3,018	10,454	
August, 2004	218,934	457,427	2,797	9,322	
September, 2004	37,577	106,398	3,046	9,293	
October, 2004	75,574	158,948	2,985	10,422	
November, 2004	44,868	109,908	3,067	10,113	
December, 2004	58,251	117,421	3,449	11,621	
January, 2005	105,178	152,807	3,526	12,081	
February, 2005	71,890	125,184	3,785	12,404	
March, 2005	74,675	156,383	4,094	15,820	
April, 2005	98,187	156,689	3,816	15,205	
May, 2005	118,887	231,695	3,728	15,783	

Log globaux du serveur

activité CASP 2004

### Équipement

décembre 2003 Démarrage du projet - Développements  
décembre 2004 Achat du cluster de calcul

Cluster de calcul - total de 20 CPU



9 noeuds Bi-cpu Opteron 248 (2.2GHz) / 4 Go de Memoire par noeud

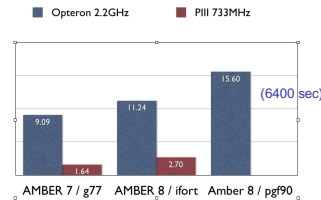
1 noeud Maitre Bi-cpu Opteron 246 (2GHz) / 4 Go de Memoire

Réseau Gigabits

Logiciels: Rocks sur RedHat 3.1 (Logiciel OpenSource)



Comparaison des vitesses (sec<sup>-1</sup>) entre un noeud du cluster et l'équipement précédent



### @TOME (@utomatic Threading Optimisation Modelling & Evaluation)

A pipeline dedicated to predictions of protein structures and protein-ligand interactions.

This pipeline offers both a fully automated server to run from the sequence to a validated protein structure model (@TOME) as well as open suite of softwares for a stepwise optimisation of sequence-structure alignment, modelling and evaluation of protein structures (TOME).

This server has been successfully evaluated during last CASP5 meeting (see *PROTEINS*, 53, supplement 6, 2003).

### PAT (Protein Analysis Toolkit for integrated biocomputing on the web)

PAT (Protein Analysis Toolkit) est un serveur internet dédié à l'analyse des séquences et structures protéiques. Il propose un accès intégré à une cinquantaine d'outils bio-informatiques au travers de formulaires interactifs. Les résultats obtenus peuvent être directement réinjectés en entrée d'autres outils afin d'enchaîner des analyses complexes. A travers des formulaires interactifs, l'utilisateur peut ainsi formuler aisément des requêtes complexes.

Comparativement aux méta-serveurs existants, PAT propose plusieurs avancées significatives visant à améliorer l'interactivité, la flexibilité et la complexité des analyses possibles : \* Des analyseurs syntaxiques spécifiques de chaque outil permettent de reconnaître un grand nombre de format de données, d'en extraire les informations utiles et de les reformater automatiquement pour les réinjecter en entrée de l'outil à exécuter. \* Des formulaires contextuels dépendant de la nature des données à analyser sont automatiquement générés de façon à faciliter l'enchaînement des outils.

\* Un langage de macros permet l'automatisation et la sauvegarde des processus d'analyse complexes. \* Un espace de travail spécifique est créé pour chaque session et permet la gestion de l'ensemble des résultats obtenus.

### NMRb (A repository for raw NMR data-sets)

The development of NMR in structural genomics requires the availability of automatic structure determination methods. An initial group gathered and decided it would be very helpful to have access to complete data-sets easily on the WEB. We believe that this availability will help the development of new NMR analysis methods by allowing complete testing procedures on raw data.

According to the will of the depositors, datasets found here can be either in free access or confidential. In case of confidential access, the datasets are distributed through a login/password procedure (which should be asked directly to the depositor). Naturally, the free access is preferable for the NMR methodologists community.

NMRb offers both downloadable raw NMR data and spectra information organized in a relational data-base.

