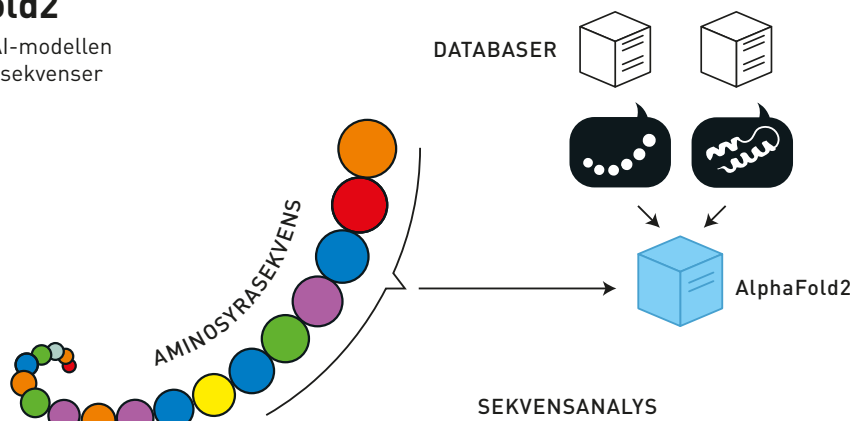


Så fungerar AlphaFold2

I utvecklingen av AlphaFold2 har AI-modellen fått träna på alla kända aminosyrasekvenser och kartlagda proteinstrukturer.

1. INMATNING OCH DATABASSÖKNING

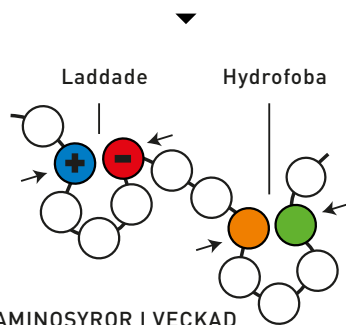
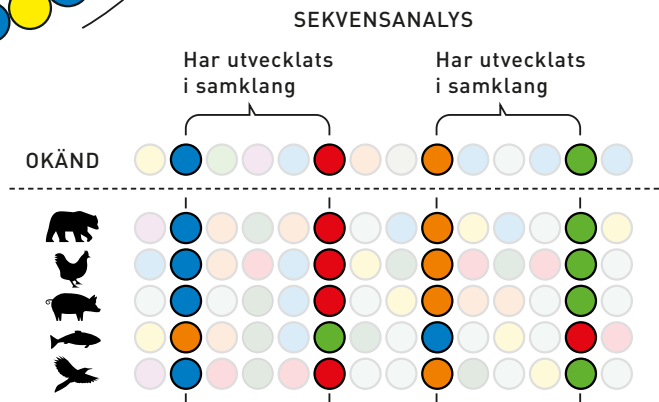
En aminosyrasekvens med okänd struktur matas in i AlphaFold2, som söker efter liknande aminosyrasekvenser och proteinstrukturer i olika databaser.



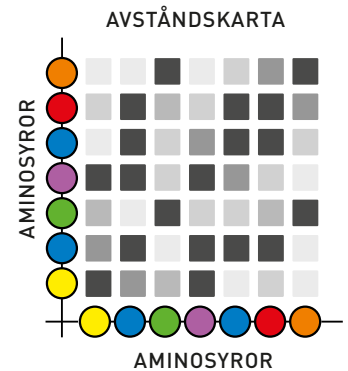
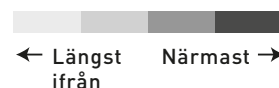
2. SEKVENSANALYS

AI-modellen linjerar upp alla liknande aminosyrasekvenser – som ofta är från olika arter – och undersöker vilka delar som har bevarats under evolutionen.

I nästa steg utforskar AlphaFold2 vilka aminosyror som skulle kunna ha kontakt i den tredimensionella proteinstrukturen. Aminosyror som interagerar förändras i samklang med varandra under evolutionen. Är den ena laddad har den andra motsatt laddning, så att de dras till varandra. Byts en ut till en vattenavvisande (hydrofob) aminosyra, blir den andra också hydrofob.



Utifrån analysen skapar AlphaFold2 en avståndskarta som uppskattar hur nära olika aminosyror ligger varandra i strukturen.



3. AI-ANALYS

I en sökande process förfinar AlphaFold2 sekvensanalysen och avståndskartan. AI-modellen utnyttjar neuronät kallade transformers. De identifierar vad i all data som är viktigt att fokusera på. Information från andra proteinstrukturer – om sådan hittats i steg 1 – utnyttjas också.

4. HYPOTETISK STRUKTUR

AlphaFold2 lägger ett pussel med alla aminosyrasekvenser och testas sig fram till en hypotetisk struktur. Denna körs in i steg 3 igen. Efter tre cykler har AlphaFold2 letat sig fram till en bestämd struktur. AI-modellen uppskattar hur stor sannolikheten är att olika delar av strukturen stämmer med verkligheten.

