

# Protein structure prediction

AlphaFold

# O czym będzie prezentacja?

1. Białko we wszechświecie

2. Dlaczego prowadzone są badania nad białkiem

3. Powstanie AlphaFold

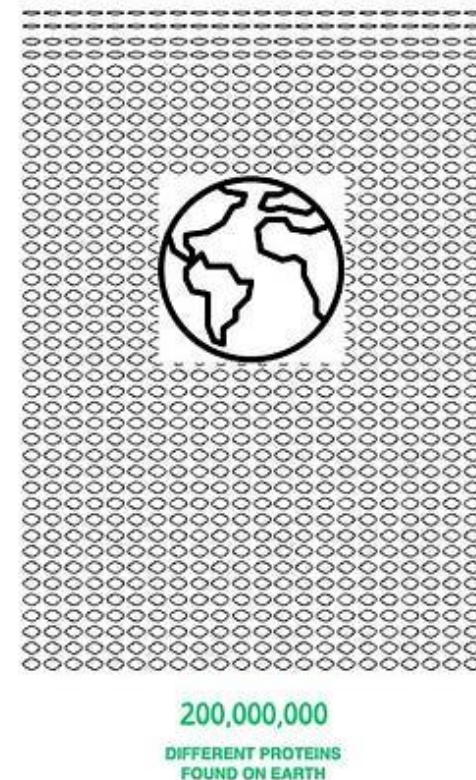
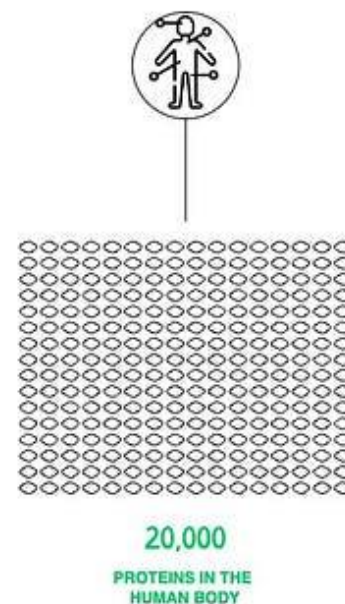
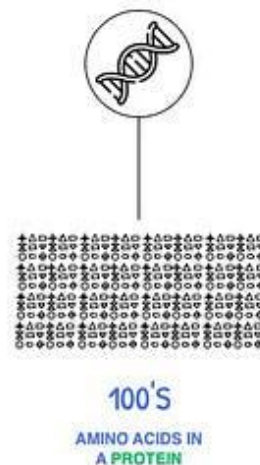
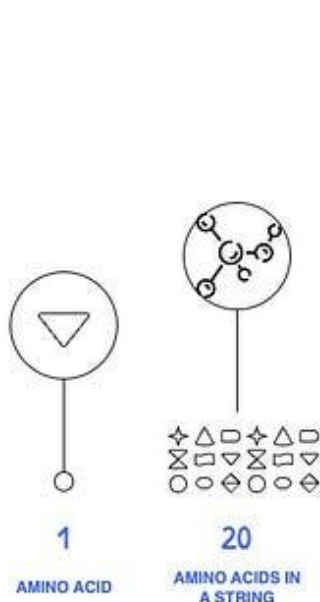
4. Podstawy budowy białka

5. Proces działania AlphaFold

6. Wykorzystane w algorytmach mechanizmy

7. Dostęp do AlphaFold

Co nieco o  
tym, czemu  
białka są  
ważne...







...serio są ważne

# Badania nad białkiem

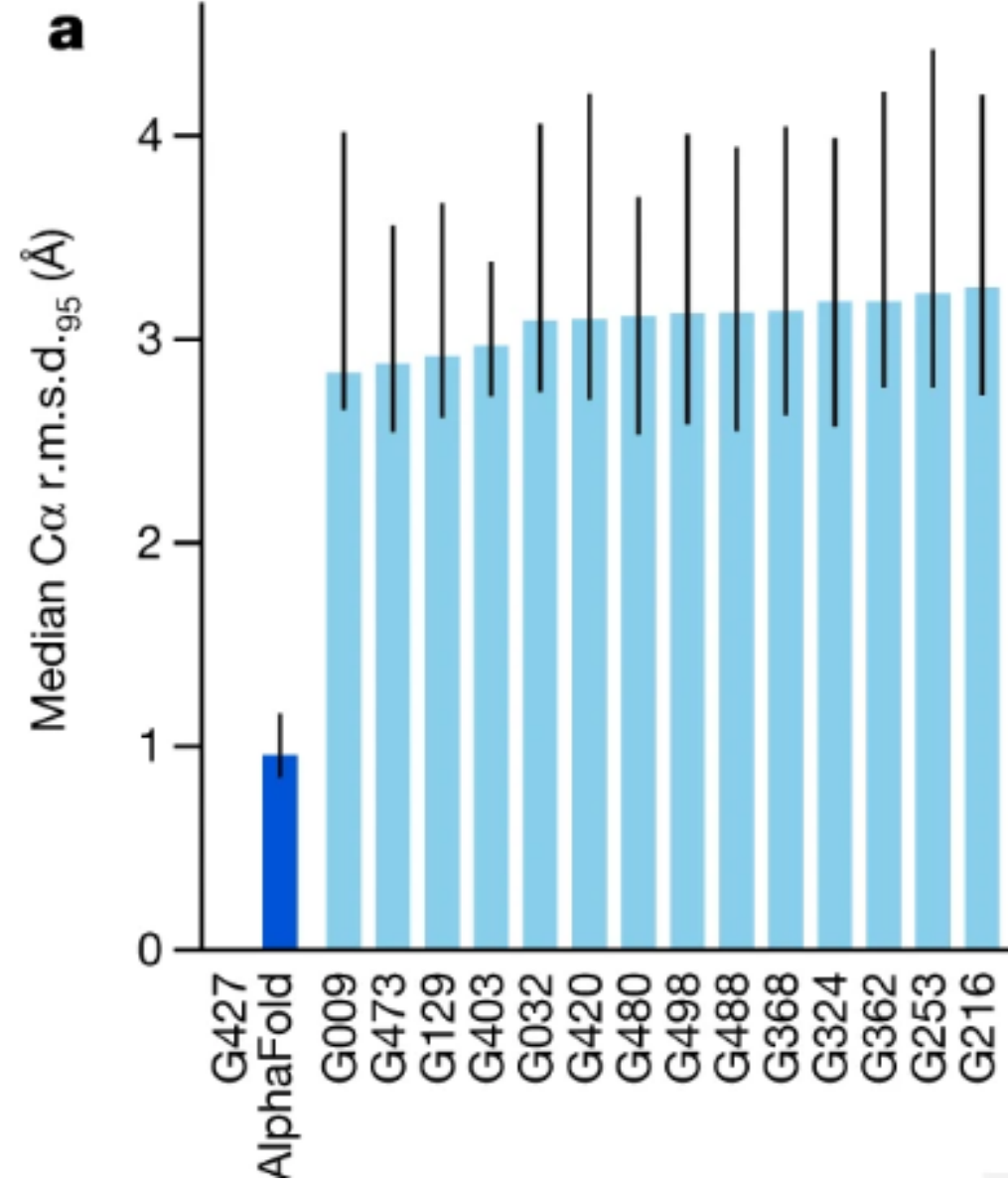


PODEJŚCIE FIZYCZNE



PODEJŚCIE EWOLUCYJNE

# Zaprezentowanie AlphaFold



# Rewolucja w badaniach nad białkiem

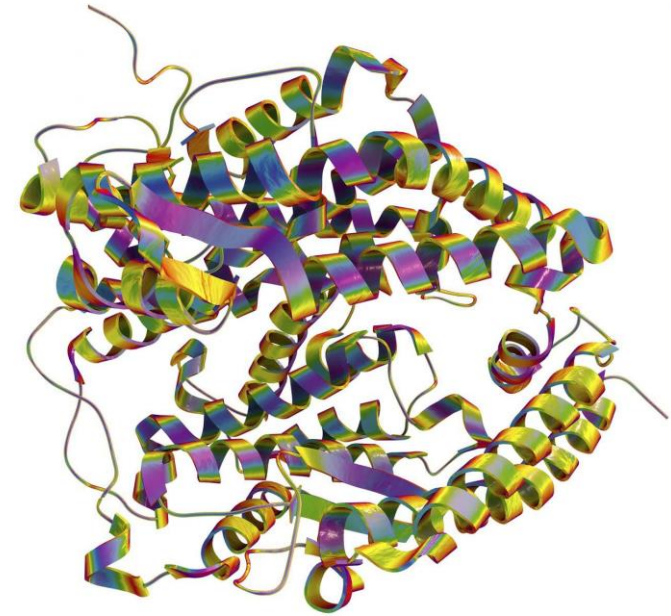
„To zmieni medycynę. Zmieni badania naukowe. Zmieni bioinżynierię.  
Zmieni wszystko”.

*Andrei Lupas, Instytut Biologii Rozwojowej Maxa Plancka w Tybindze*



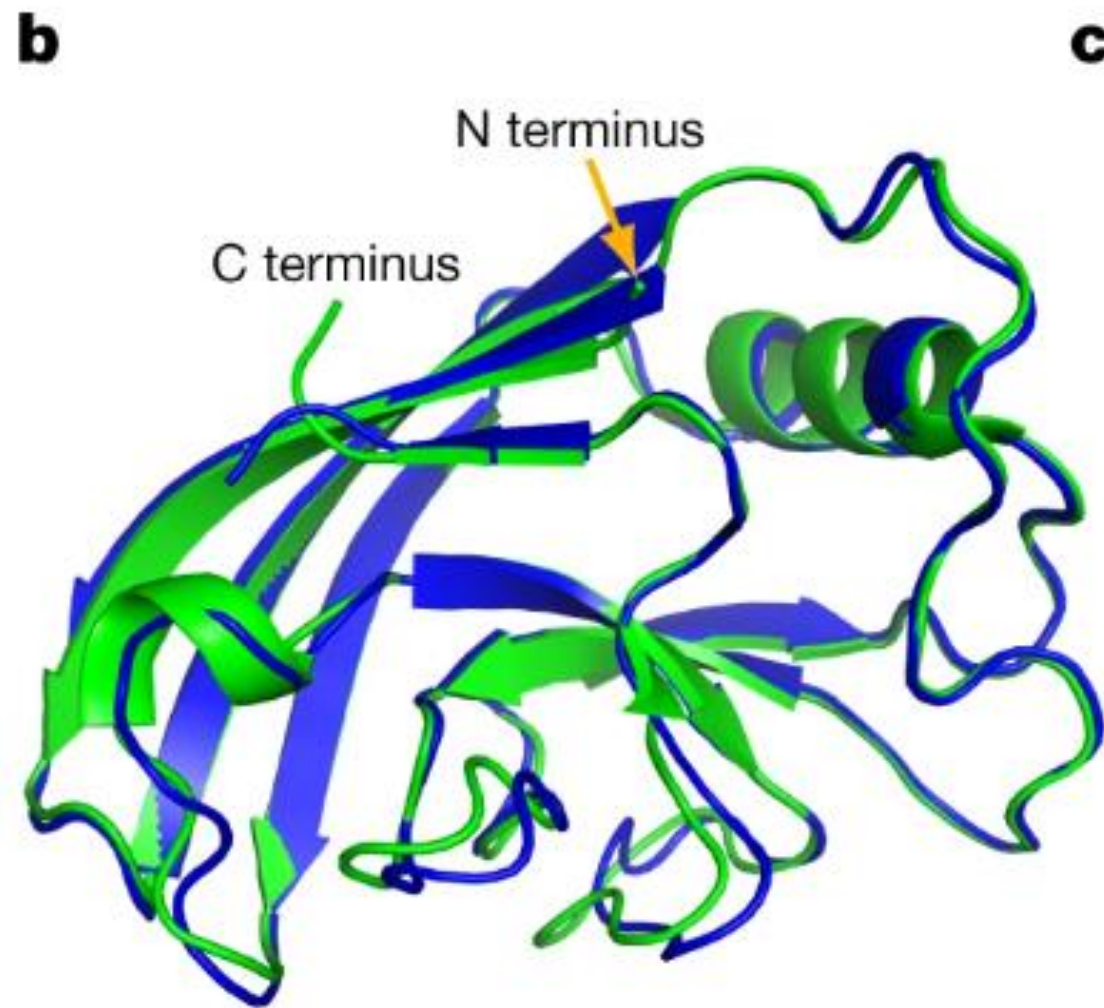
# Jak wygląda białko

- Główny budulec to szeregi aminokwasów





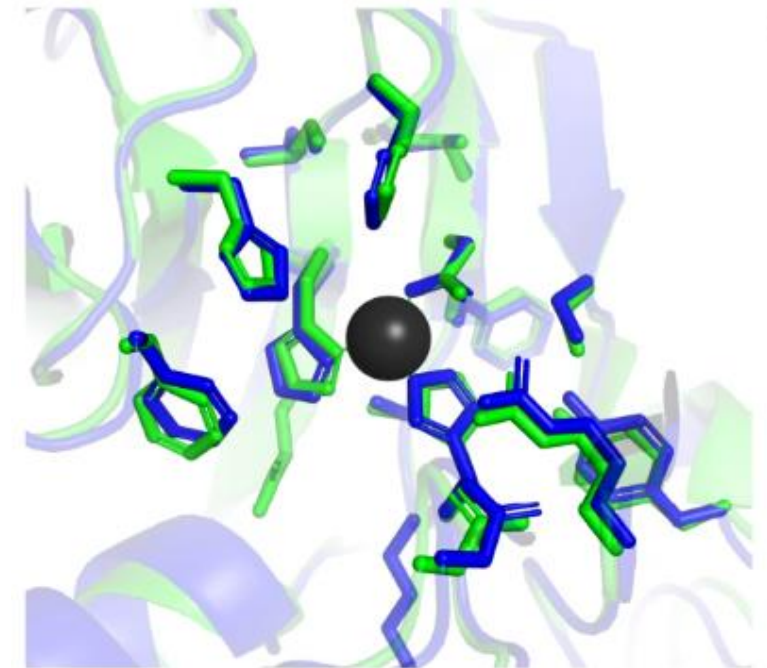
# Szkielet białka



AlphaFold Experiment  
r.m.s.d.<sub>95</sub> = 0.8 Å; TM-score = 0.93

# łańcuchy boczne białka

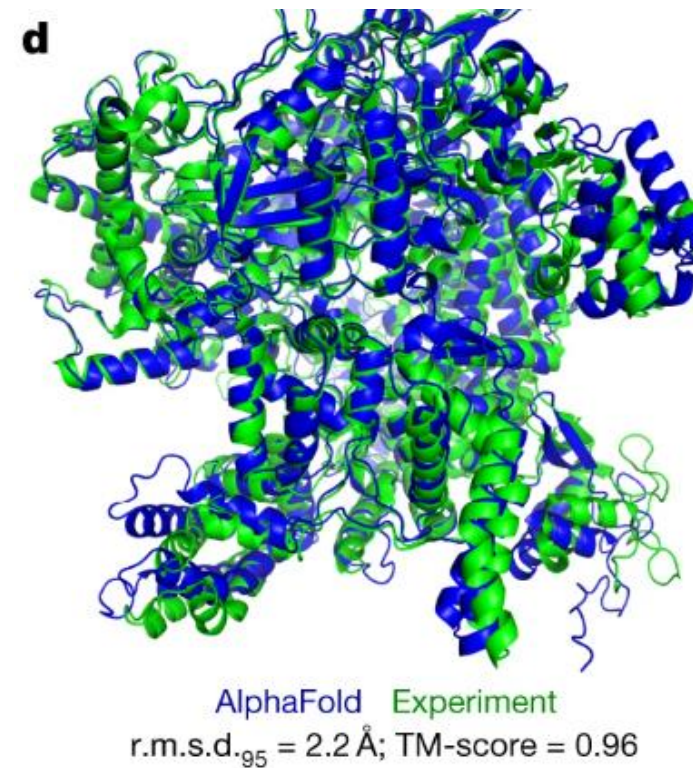
- Część białka wychodząca ze szkieletu
- Dobre przybliżenie, głównie jeśli szkielet jest poprawnie przybliżony

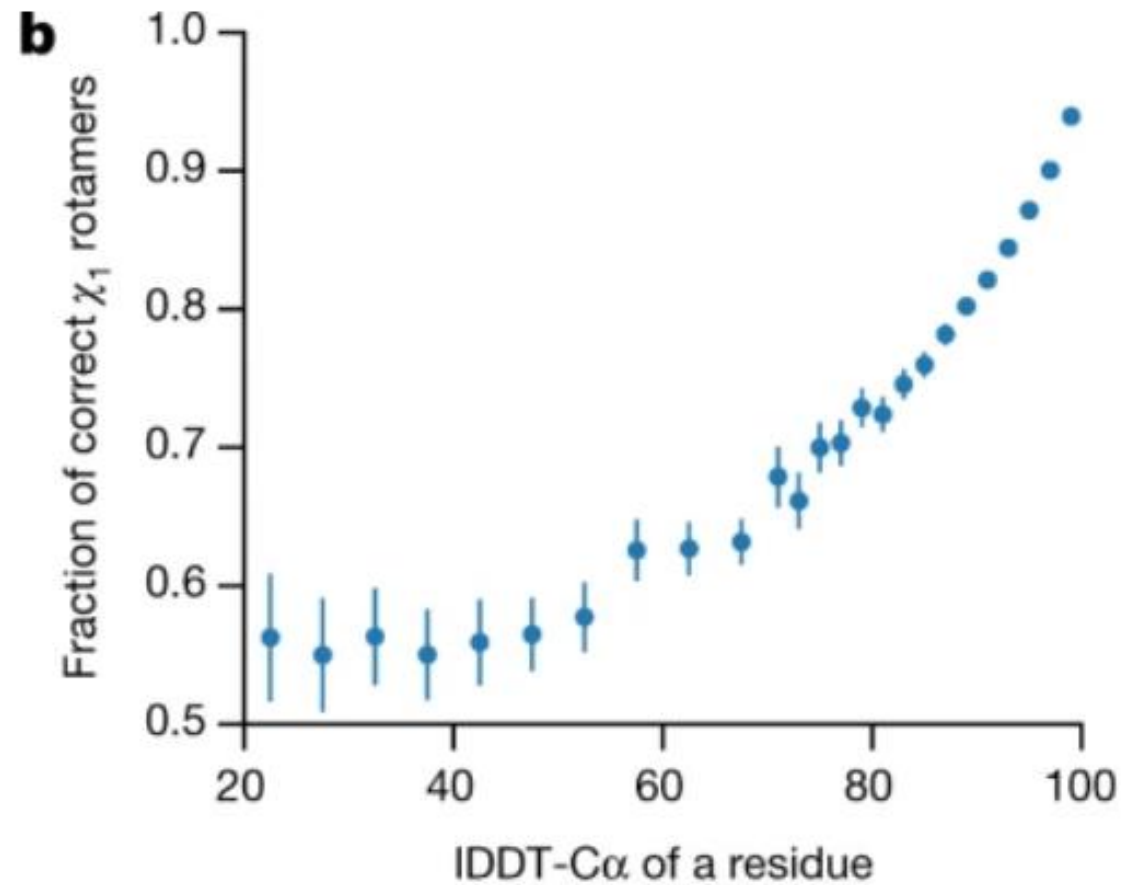
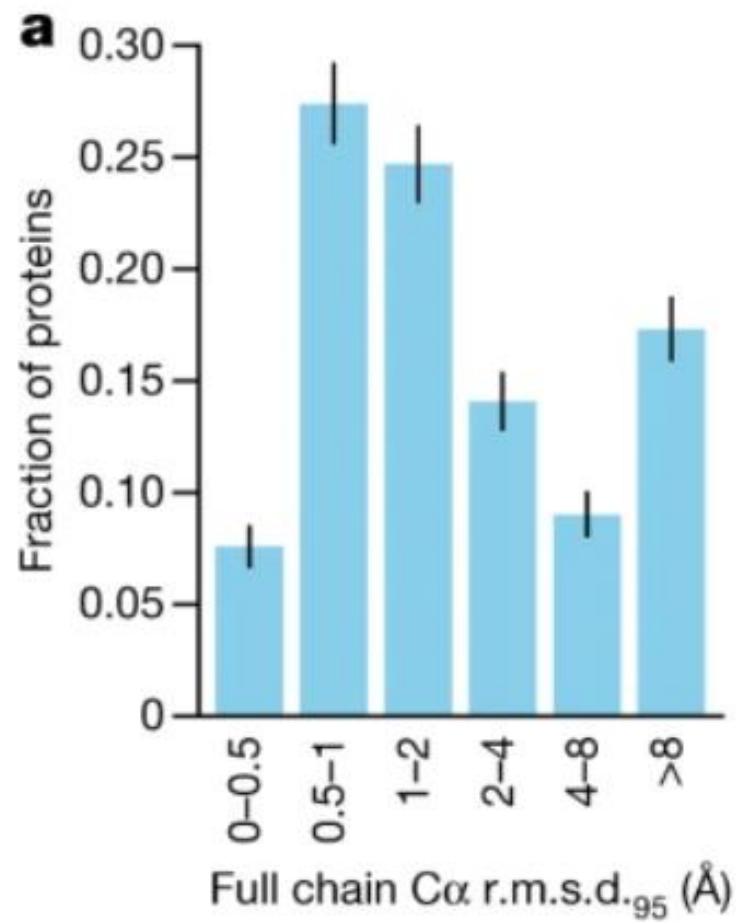


AlphaFold Experiment  
r.m.s.d. = 0.59 Å within 8 Å of Zn

# A tak wygląda całe białko

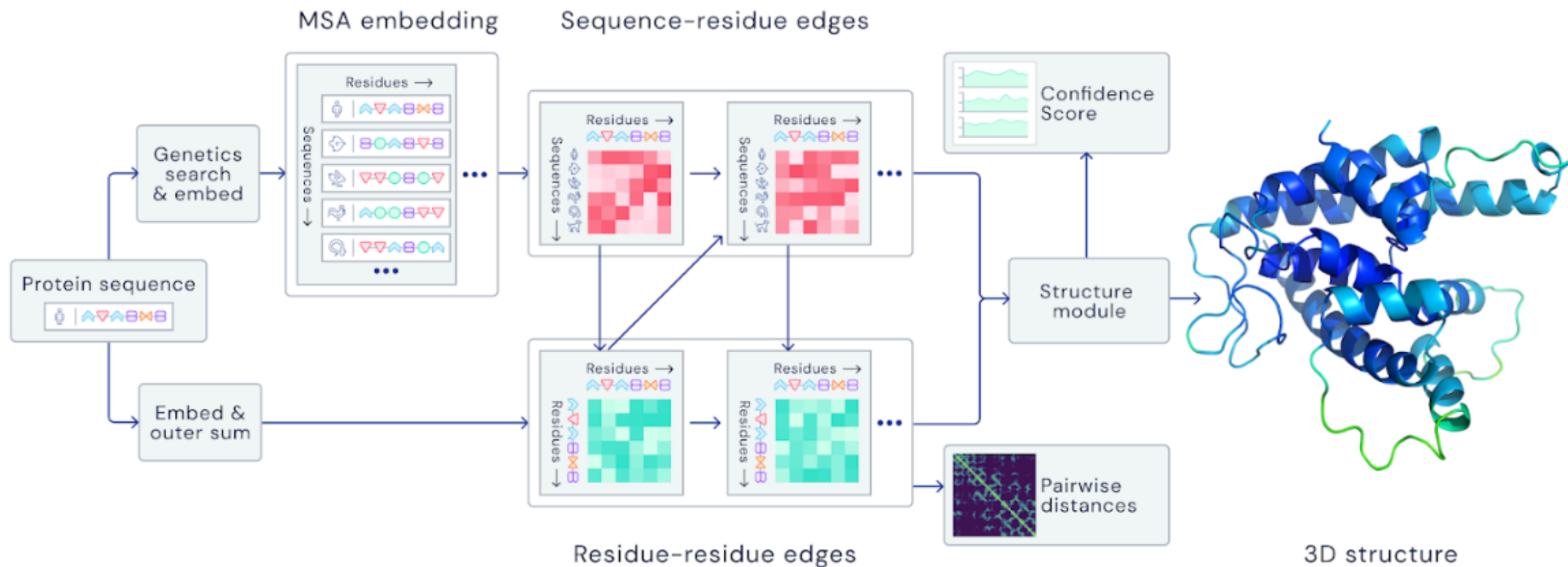
- Szkielety wraz ze swoimi łańcuchami bocznymi skręcają się i tworzą całą strukturę



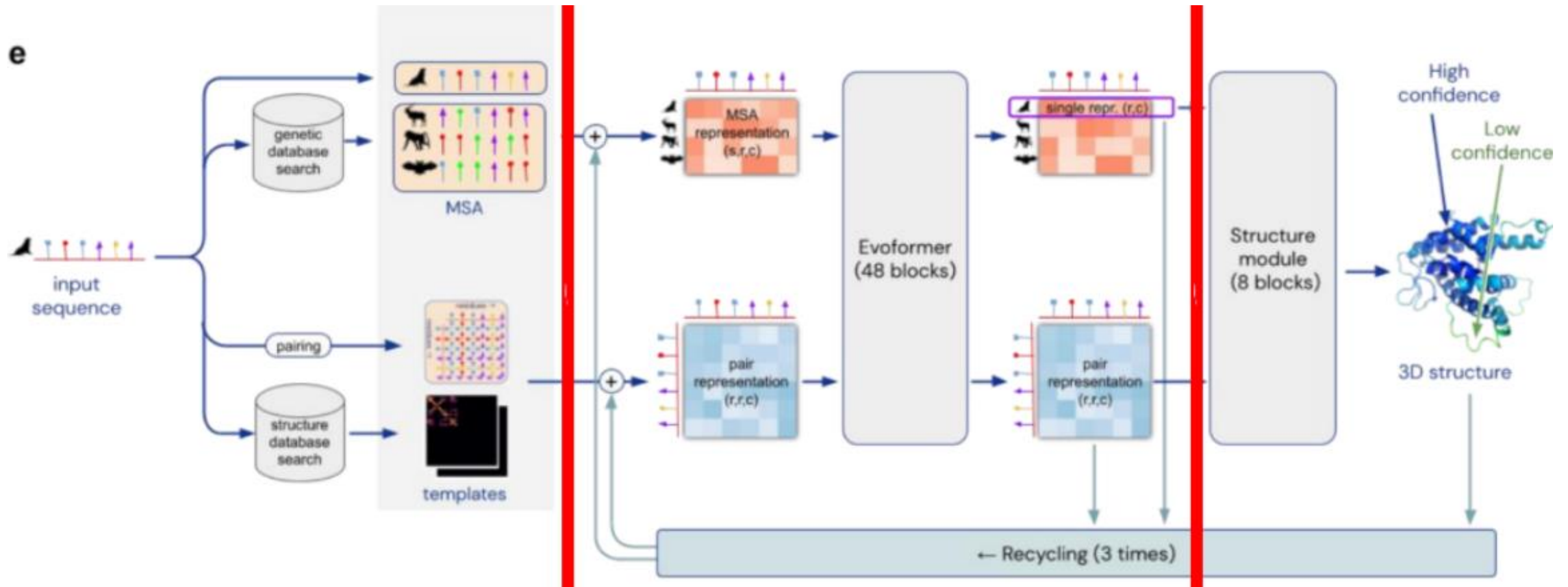


Przybliżanie struktur białka – trochę wykresów





Pierwsze spojrzenie na AlphaFold



Schemat działania

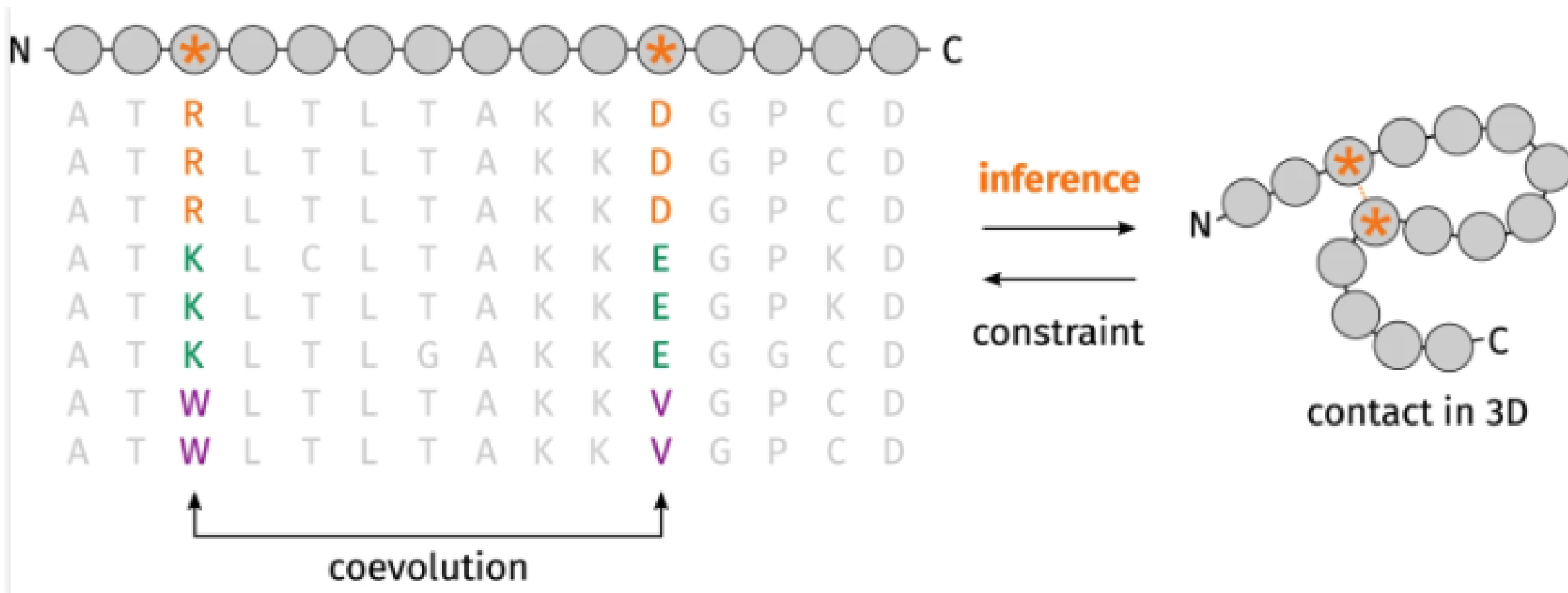
# Preprocessing danych

1. Potok przetwarzania wstępnego

2. Przeszukanie dostępnych baz danych

3. Utworzenie MSA

4. Utworzenie reprezentacji par reszt

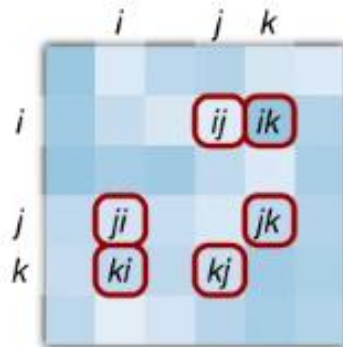


MSA – wielokrotne wyrównywanie sekwencji

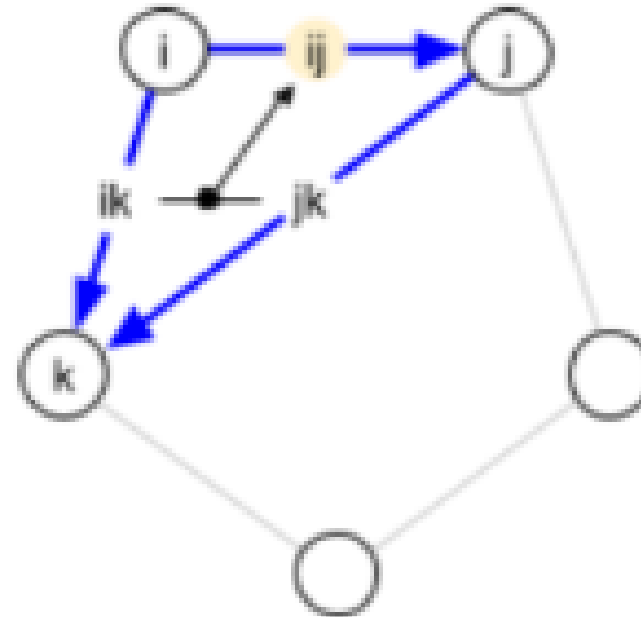
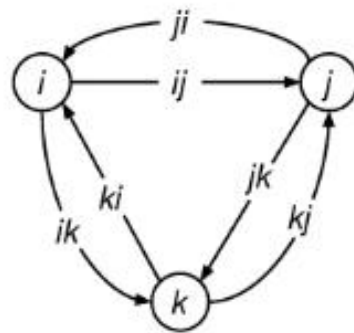


# Reprezentacija par

**b** Pair representation  
( $r, r, c$ )



Corresponding edges  
in a graph





A woman is throwing a frisbee in a park.



A dog is standing on a hardwood floor.



A stop sign is on a road with a mountain in the background.



A little girl sitting on a bed with a teddy bear.

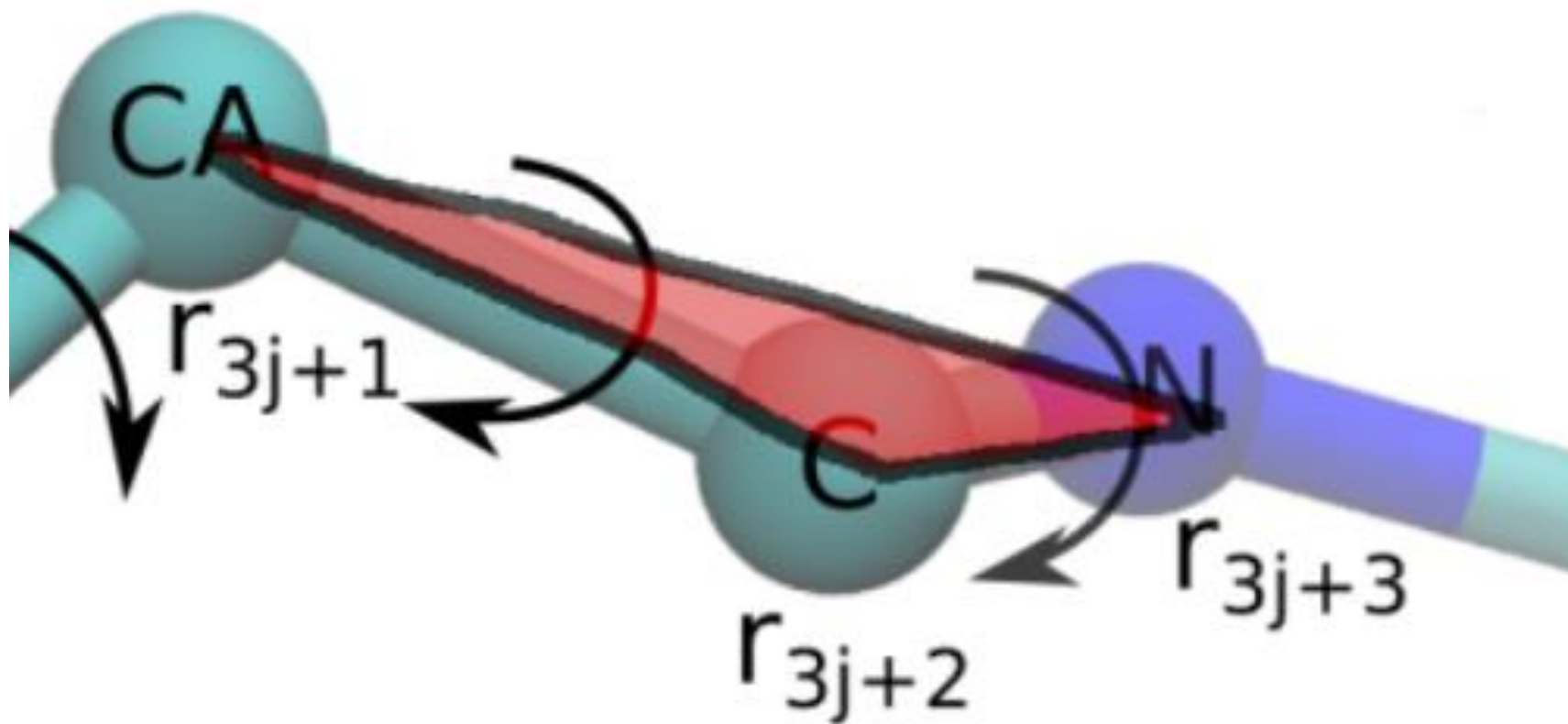


A group of people sitting on a boat in the water.



A giraffe standing in a forest with trees in the background.

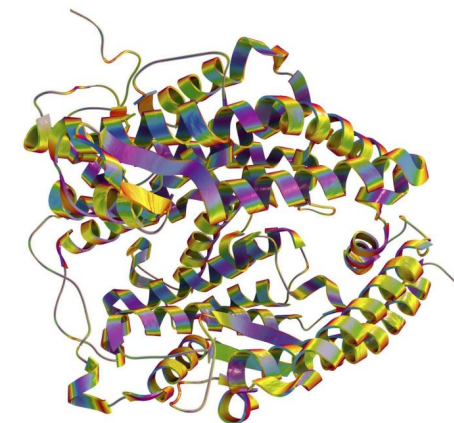
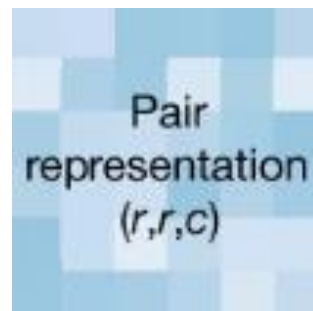
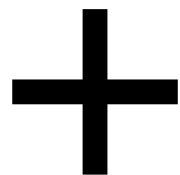
Kolejne nowatorskie podejście -  
Evoformer



Tworzenie struktury - wstęp

# Macierz Rotacji – tworzenie modelu struktury

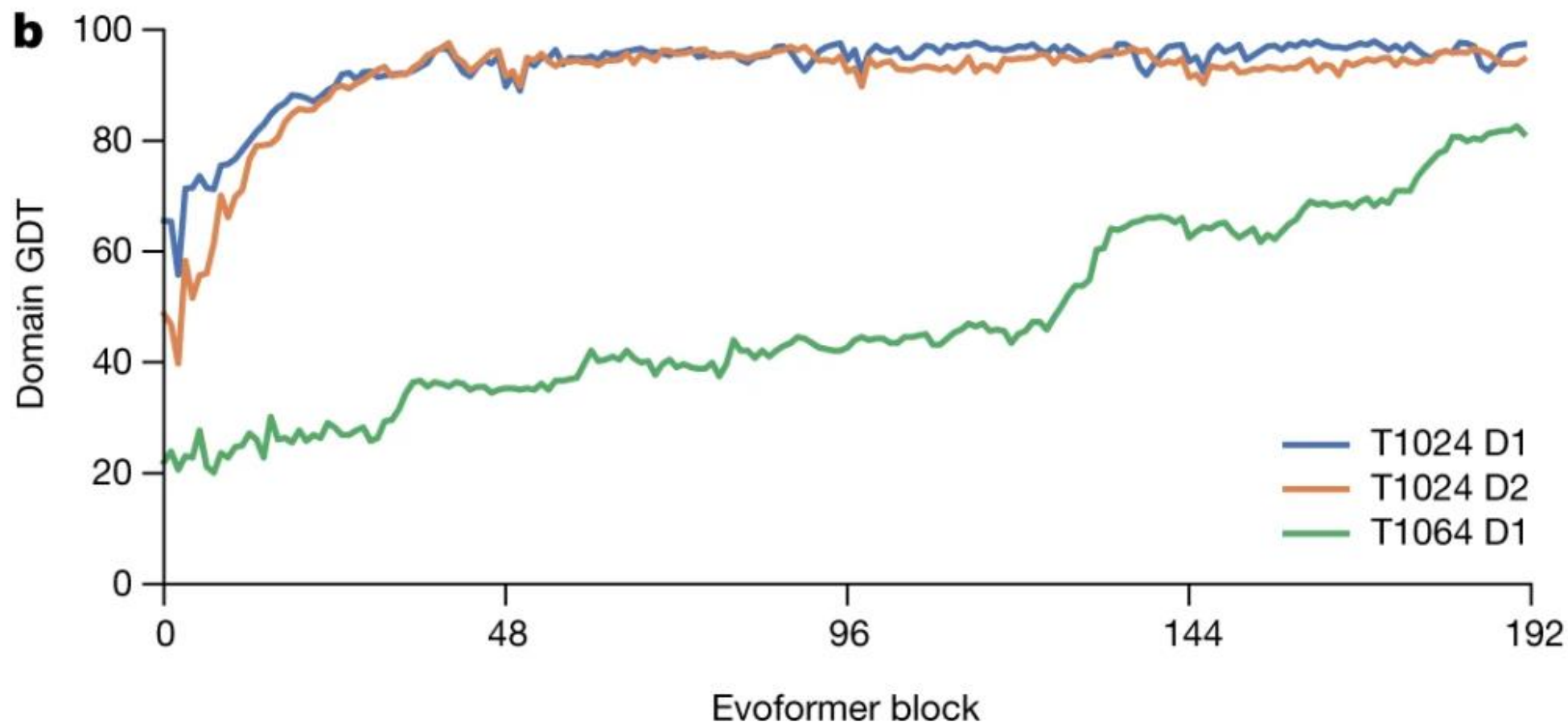
$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$



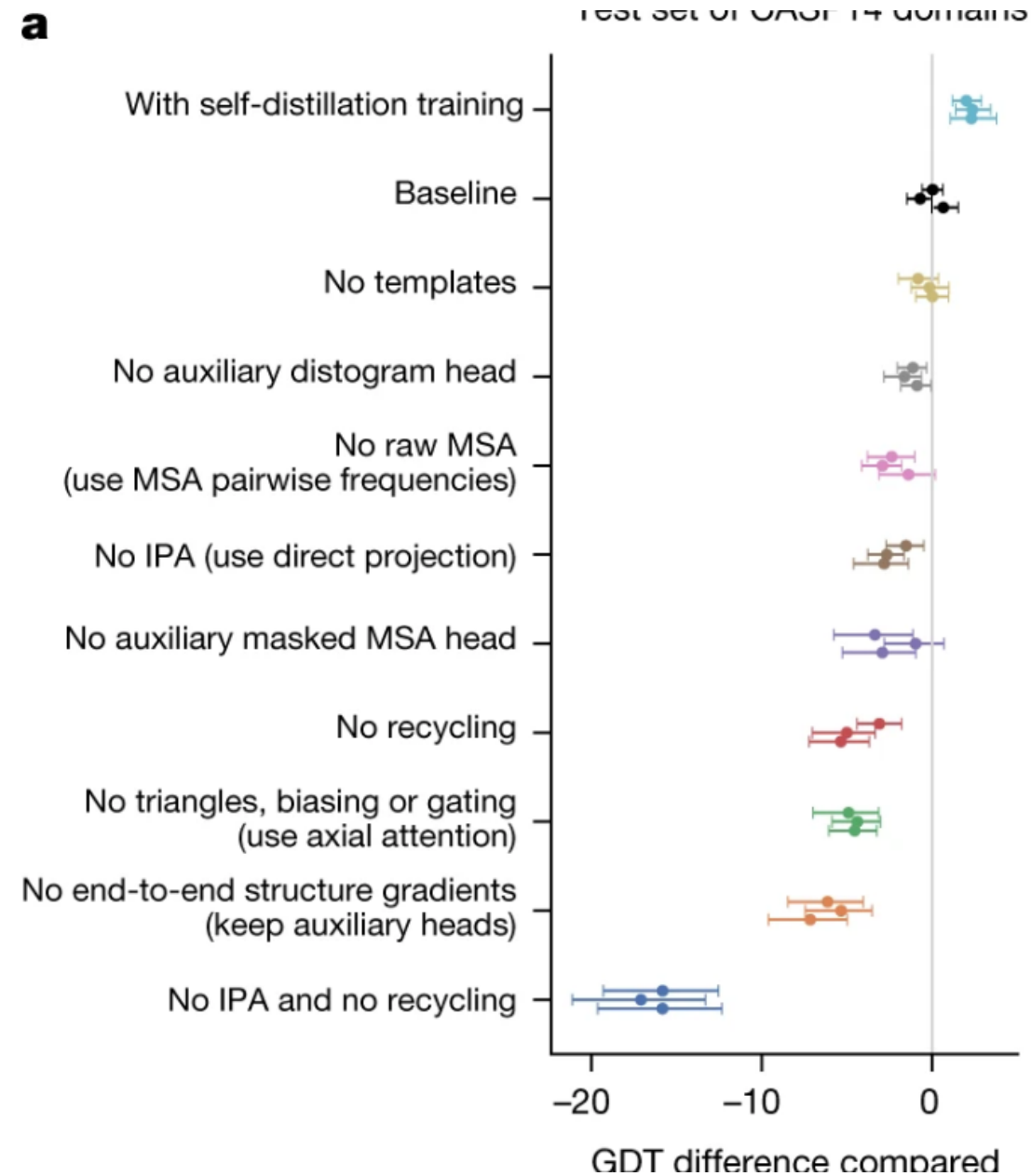
Macierz rotacji, zmienia położenie pojedynczych aminokwasów w macierzy reprezentacji par



# Iteracije



# Dodatkowe mechanizmy





# AlphaFold w twoim domu

- Wzmianka o tym jak to zrobić:
- <https://towardsdatascience.com/what-does-alphafold-do-60b6370dafa4>

# Bibliografia

- <https://www.nature.com/articles/s41586-021-03819-2>
- <https://www.blopig.com/blog/2021/07/alphafold-2-is-here-whats-behind-the-structure-prediction-miracle/>
- <https://towardsdatascience.com/what-does-alphafold-do-60b6370dafa4>
- <https://www.sztucznainteligencja.org.pl/alphafold2-przewidziec-strukture-zycia/>
- <https://www.youtube.com/watch?v=GQH-zWUyIPY>
- <https://en.wikipedia.org/wiki/AlphaFold>
- <https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/frai.2022.875587/full>



Dziękuję za uwagę

Franciszek Szczepaniak