

AlphaFold

Apresentação AlphaFold

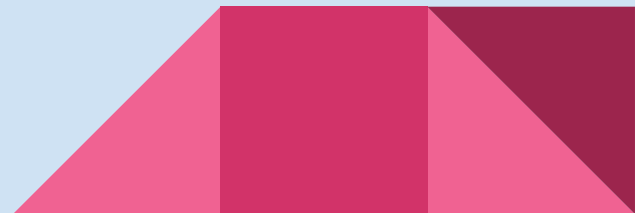
Professor

Robson de Souza Resende

Discentes

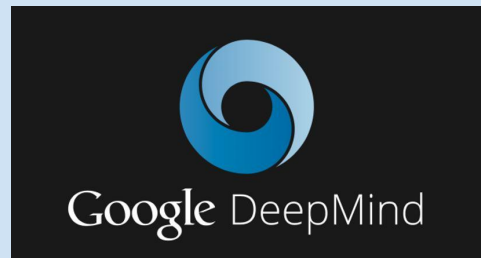
Adriano Douglas Reis Rosa

Claudimar José da Cruz



Introdução

- IA que prevê a estrutura 3D de uma proteína.
- Análise da sequência de aminoácidos.
- Criada pela DeepMind.
- Possui um sistema de aprendizagem profunda.
- Auxilia em pesquisa biológicas.
- Fornece acesso aberto gratuito a suas previsões a toda comunidade científica.



Motivação

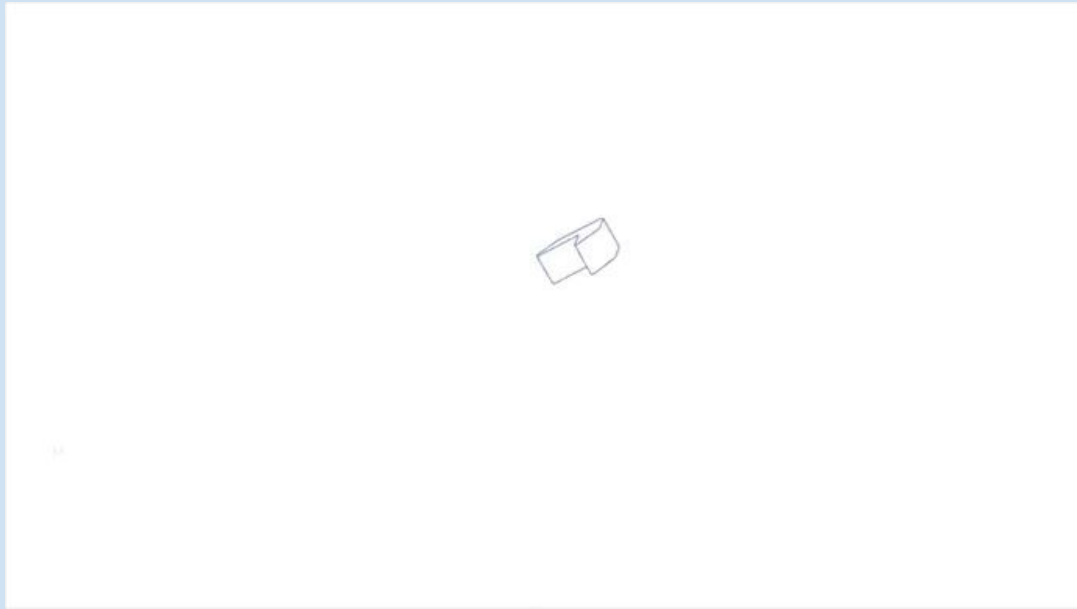
- Proteínas, blocos de construção de vida.
- Estão presentes em cada célula do corpo.
- Responsáveis pelo processo biológico de qualquer ser vivo.
- Interação de aminoácidos
- Possui um formato 3d complexo.
- Problema de dobramento de proteínas.
- Determinar a forma da proteína.



Fonte: <https://www.deepmind.com/research/highlighted-research/alphafold>

AlphaFold

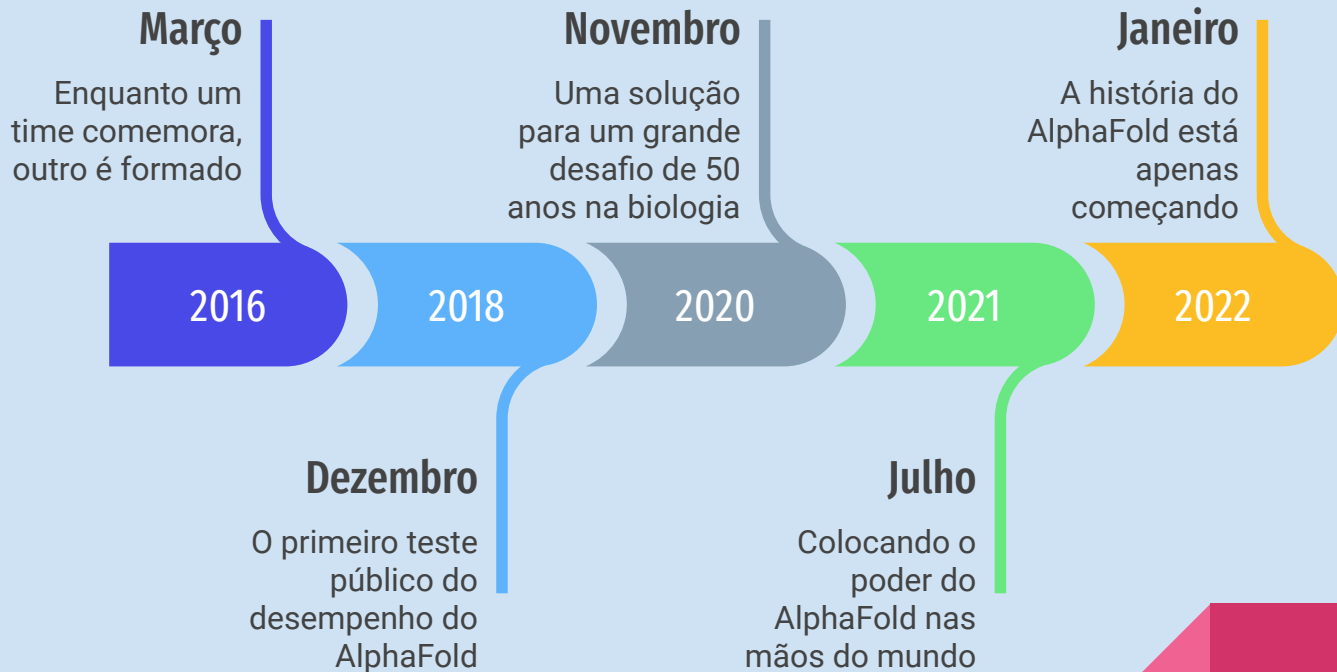
- Treinado com 100.000 proteínas.
- Rede de atenção, técnica de aprendizado profundo.
- Se baseia na análise de múltiplas sequências.
- Banco de dados com mais 350.000 estruturas.
- Possui algumas limitações.
 - Não prevê algumas estruturas.
 - Previsão de um único estado.



Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=KpedmJdrTpY&t=84s>



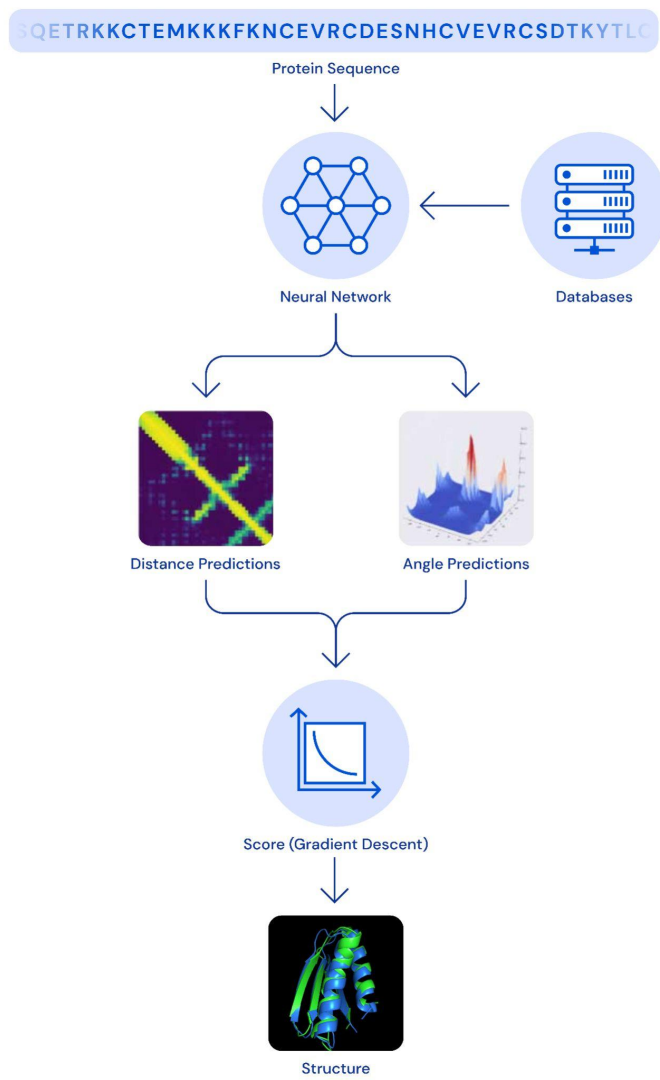
Linha do tempo



AlphaFold 1, 2018

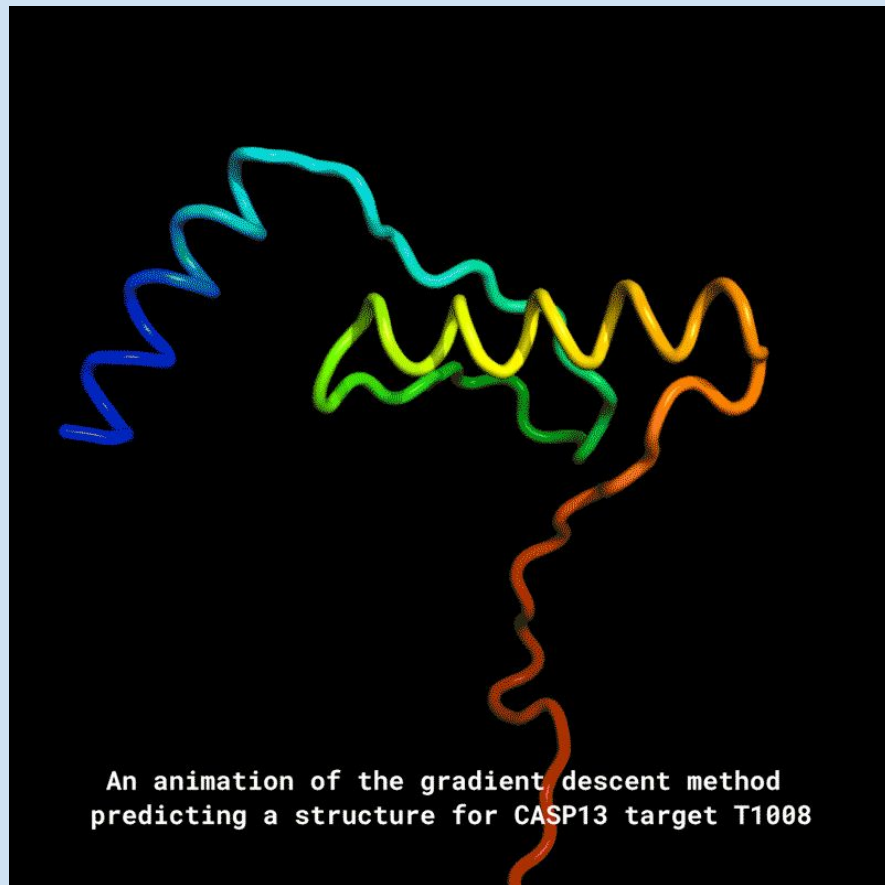
- Redes neurais profundas que são treinadas para prever as propriedades da proteína a partir de sua sequência genética.
- As propriedades que as redes preveem são:
 - As distâncias entre pares de aminoácidos
 - Os ângulos entre as ligações químicas que conectam esses aminoácidos.
- Probabilidades foram combinadas em uma pontuação.

<https://www.deepmind.com/blog/alphafold-using-ai-for-scientific-discovery-2020>



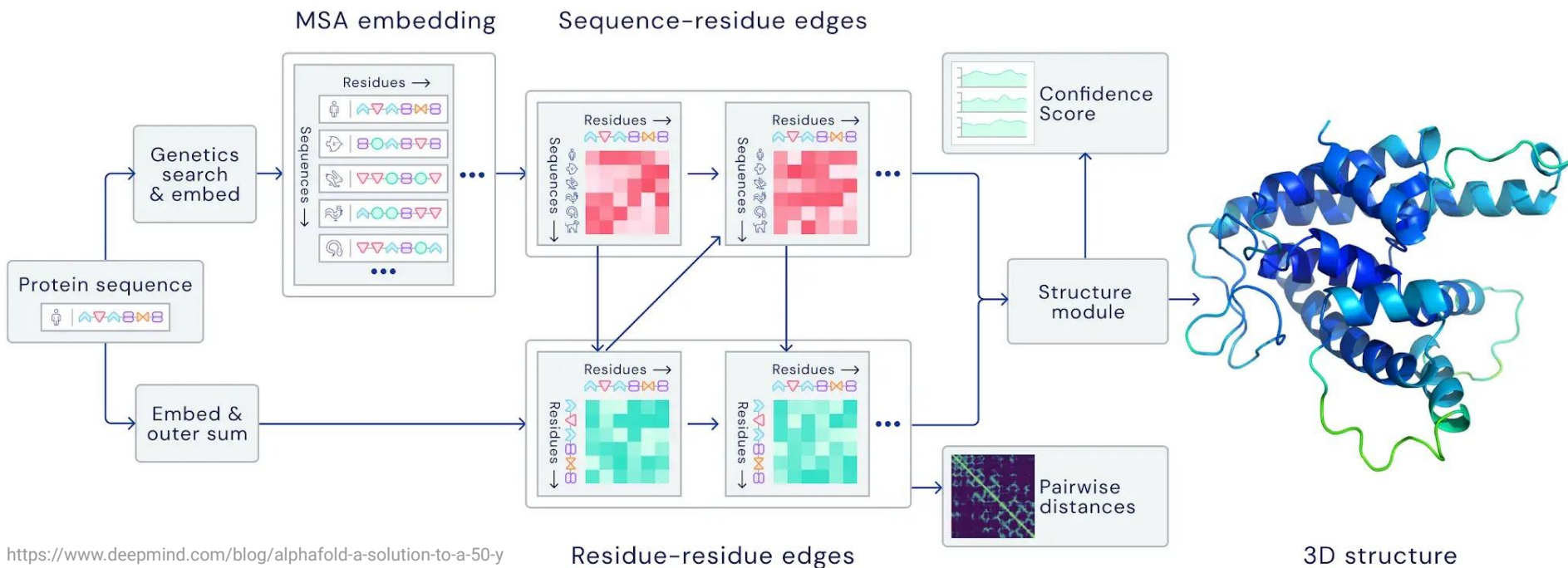
AlphaFold 1, 2018

- Otimizou as pontuações por meio de gradiente descendente.
- Resultou em estruturas altamente precisas.

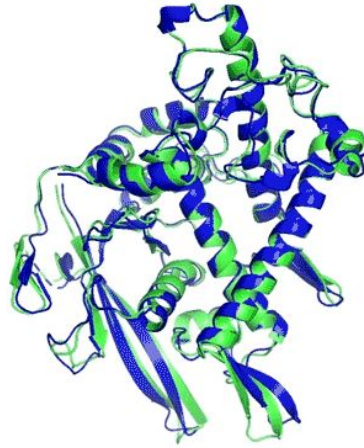


AlphaFold 2, 2020

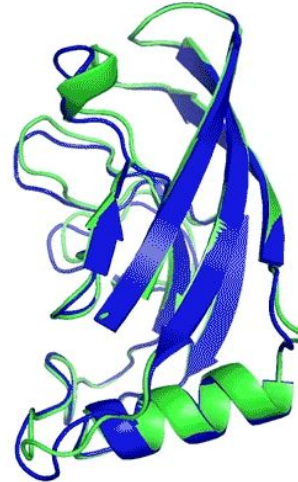
O modelo opera sobre sequências de proteínas relacionadas evolutivamente, bem como pares de resíduos de aminoácidos, passando iterativamente informações entre ambas as representações para gerar uma estrutura.



Resultados



T1037 / 6vr4
90.7 GDT
(RNA polymerase domain)

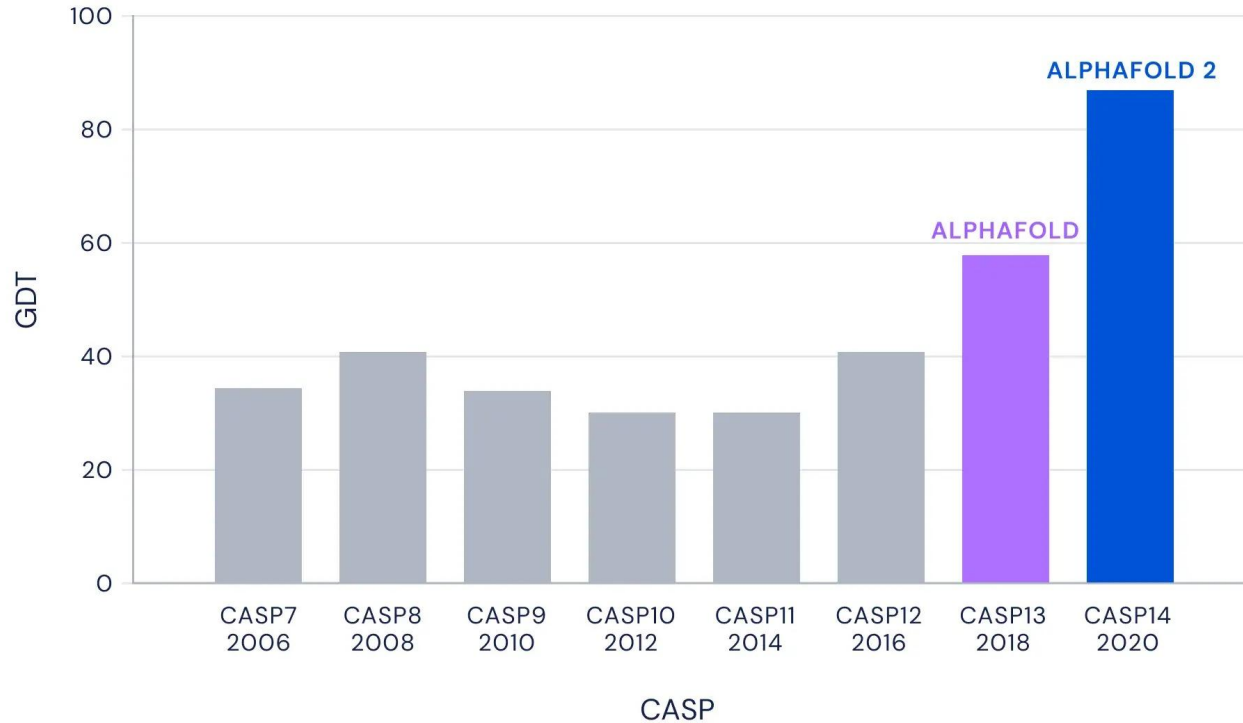


T1049 / 6y4f
93.3 GDT
(adhesin tip)

- Experimental result
- Computational prediction

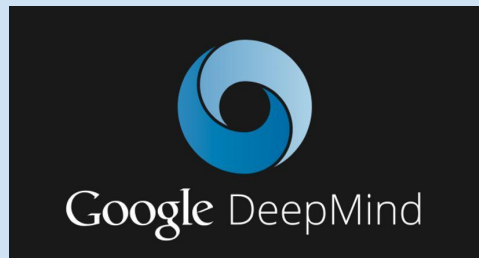
Resultados

Median Free-Modelling Accuracy



O potencial de impacto no mundo real

- Analisar como as previsões de estrutura de proteínas podem contribuir para nossa compreensão de doenças específicas.
- Ajudar a identificar proteínas que não funcionam bem e a raciocinar sobre como elas interagem.
- Permitir um trabalho mais preciso no desenvolvimento de medicamentos.
- Complementar os métodos experimentais existentes para encontrar tratamentos promissores mais rapidamente.



O potencial de impacto no mundo real

- Pode ser útil em futuros esforços de resposta à pandemia.
- Previu várias estruturas de proteínas do vírus SARS-CoV-2.
- Previu a estrutura de outra proteína de coronavírus, a ORF8 .
- Explorar as centenas de milhões de proteínas para as quais não temos modelos atualmente.

The logo for AlphaFold, featuring the word "AlphaFold" in a white serif font on a dark blue rectangular background. To the right of the text is a white icon of a protein structure, resembling a vertical bar with a crossbar and a small vertical line on the right side.

AlphaFold



Google DeepMind

"Este será um dos conjuntos de dados mais importantes desde o mapeamento do Genoma Humano."

Professor Ewan Birney

Diretor Geral Adjunto do EMBL e Diretor do EMBL-EBI



Referências

- AlphaFold. Wikipédia. Disponível em: <https://pt.wikipedia.org/wiki/AlphaFold>. Acesso em: 28/05/2022.
- Revoluções da IA na biologia. Embo reports. Disponível em: <https://www.embopress.org/doi/full/10.15252/embr.202154046>. Acesso em: 28/05/2022.
- AlphaFold. Deep Mind. Disponível em: <https://www.deepmind.com/research/highlighted-research/alphafold>. Acesso em: 28/05/2022.
- Banco de dados de estrutura de proteínas AlphaFold. Deep Mind. Disponível em: <https://alphafold.ebi.ac.uk/>. Acesso em: 29/05/2022.
- Linha do tempo de um avanço. Deep Mind. Disponível em: <https://www.deepmind.com/research/highlighted-research/alphafold/timeline-of-a-breakthrough>. Acesso em: 29/05/2022.
- AlphaFold: uma solução para um grande desafio de 50 anos em biologia. Deep Mind. Disponível em: <https://www.deepmind.com/blog/alphafold-a-solution-to-a-50-year-old-grand-challenge-in-biology>. Acesso em: 29/05/2022.
- AlphaFold: Usando IA para descobertas científicas. Deep Mind. Disponível em: <https://www.deepmind.com/blog/alphafold-using-ai-for-scientific-discovery-2020>. Acesso em: 29/05/2022.