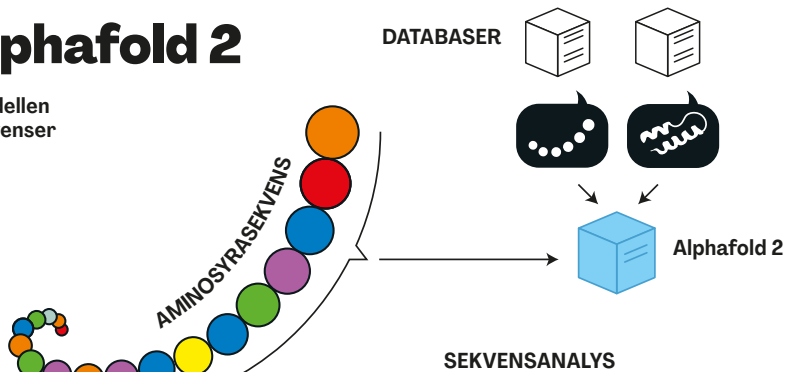


Så fungerar Alphafold 2

I utvecklingen av Alphafold 2 har AI-modellen fått träna på alla kända aminosyrasekvenser och kartlagda proteinstrukturer.

1. INMATNING OCH DATABASSÖKNING

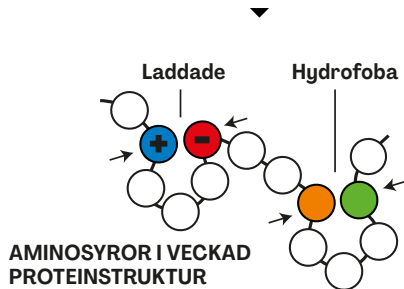
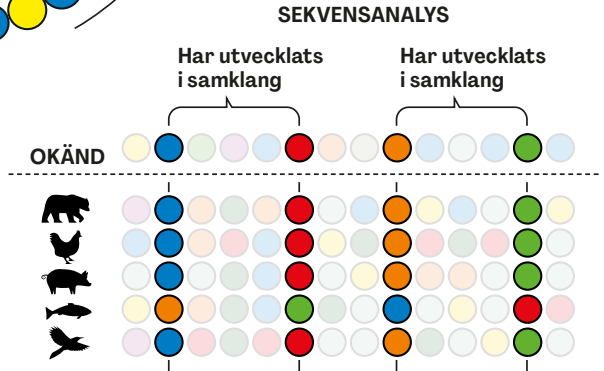
En aminosyrasekvens med ökad struktur matas in i Alphafold 2, som söker efter liknande aminosyrasekvenser och proteinstrukturer i olika databaser.



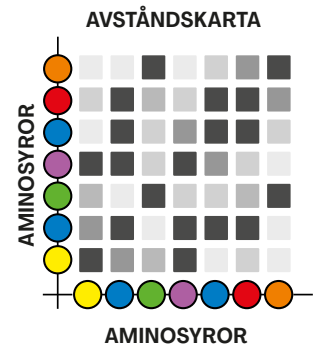
2. SEKVENSANALYS

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 Alphafold 2 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 Alphafold 2 en avståndskarta som uppskattar hur nära olika aminosyror ligger varandra i strukturen.



3. AI-ANALYS

I en sökande process förfinar Alphafold 2 sekvensanalysen och avståndskartan. AI-modellen utnyttjar neuron nät kallade *transformers*. De identifierar vad bland alla data som är viktigt att fokusera på. Information från andra proteinstrukturer – om sådan hittats i steg 1 – utnyttjas också.

4. HYPOTETISK STRUKTUR

Alphafold 2 lägger ett pussel med alla aminosyrasekvenser och testar sig fram till en hypotetisk struktur. Denna körs in i steg 3 igen. Efter tre cykler har Alphafold 2 letat sig fram till en bestämd struktur. AI-modellen uppskattar hur stor sannolikheten är att olika delar av strukturen stämmer med verkligheten.

