



MAGYAR BIOINFORMATIKAI TÁRSASÁG KUTATÓSZEMINÁRIUM

Időpont:

2022. április 7, 14:00

Helyszín:

Zoom

Előadó:

Varga Julia (Jeruzsálemi Héber Egyetem, Izrael)

Cím:

AlphaFold és alkalmazása peptid-fehérje komplexek modellezésére

Kivonat:

Az elmúlt években a fehérjeszerkezet predikciójára alkalmas programok teljesítménye ugrásszerűen nőtt, elsősorban a mély neurális hálóknak köszönhetően. A DeepMind által fejlesztett AlphaFold első verziója már a CASP (Critical Assessment of Structure Prediction) 2018-as fordulóján kitűnt a pontosságával, a második verziója 2020-ban pedig a célpontok $\frac{2}{3}$ -ra adott kísérleti szerkezeteket megközelítő pontosságú eredményt. Egy ilyen pontosságú algoritmus valódi hatását a biológiai tudományokra egyelőre csak találgatni tudjuk. Előadásom első részében röviden szeretném bemutatni az AlphaFold felépítését és működését.

Az AlphaFold azonban nem csak szerkezetbecslésre használható. Kutatócsoportunkban a fehérje-peptid dokkolásra alkalmaztuk az AlphaFoldot, mivel a peptide-fehérje kölcsönhatás felfogható a fehérje folding utolsó, befejező lépéseként, amikor is a kötődő peptid kiegészíti a receptor szerkezetét. Hogy ezt hogyan csináltuk és milyen eredményekkel, erről fog szólni az előadás második része.