



MAGYAR BIOINFORMATIKAI TÁRSASÁG KUTATÓSZEMINÁRIUM

Időpont:

2022. április 21, 14:00

Helyszín:

Zoom

Előadó:

Váradi Mihály (EMBL-EBI, Hinxton, UK)

Cím:

AlphaFold Fehérje Szerkezeti Adatbázis: Nagy pontosságú térszerkezeti modellek az ismert fehérjék jelentős százalékára

Kivonat:

Az AlphaFold Fehérje Szerkezeti Adatbázis (AlphaFold DB, <https://alphafold.ebi.ac.uk>) egy nyíltan elérhető, kiterjedt adatbázis magas pontosságú fehérje térszerkezeti predikciók részére. A szerkezetek a DeepMind csapat AlphaFold v2.0 mesterséges intelligencia algoritmusán alapulnak, és hatalmas mértékben növelték meg a szerkezeti biológusok és bioinformatikusok rendelkezésére álló adatok mennyiségét. Az AlphaFold DB különféle adatmegjelenítési módokat és programozott hozzáférést (API) biztosít atomi-szintű koordinátákhoz, aminosav-szintű modell konfidenciához és az úgynevezett predikált illesztési hibákhoz. Az AlphaFold DB első verziója több mint 360,000 szerkezetet tartalmazott, majdnem teljesen lefedve 21 modellorganizmus proteomját, míg további frissítések a közel teljes SwissProt adatbázis szekvenciáival és további 26, elsősorban közegészségügyi jelentőségű proteommal gazdagították az adatszettet. Míg a jelenlegi verzió közel 1-millió szerkezetet tartalmaz, a következő hónapokban ez tovább fog bővülni, több mint 150-millióra, lefedve a teljes UniRef90 szekvencia szettet. Az előadásban áttekintést nyújtok a fehérjék térszerkezeti predikcióiról, az AlphaFold v2.0 erősségeiről és gyenge pontjairól. Bemutatom az AlphaFold adatbázist, a jelenleg hozzáférhető adatok típusait, és beszélek a közeljövőben várható fejleményekről is. Végül tágabb kontextusába helyezem az AlphaFold adatbázist, más, hasonló adatforrásokhoz és integrált platformokhoz viszonyítva.
