

Ekstramateriale til artiklen:

Biologisk kodebrydning - Kunstig intelligens fik has på proteinfoldningsproblemet

## Prøv selv! AlphaFold2 med ColabFold

### Forudsætninger:

Computer, Google-konto, internetforbindelse.

ColabFold er en online-version af AlphaFold. Med ColabFold kan enhver bruge AlphaFold uden at installere hele AlphaFold-programmet på egen computer.

### Trin 1)

Klik på dette link, der tager dig til ColabFold:

<https://colab.research.google.com/github/sokrypton/ColabFold/blob/main/AlphaFold2.ipynb>

### Trin 2)

Klik på 'Fil' i øverste venstre hjørne og derefter tryk 'Gem en kopi i Drev'. Dette laver en kopi af notesbogen på din egen Google-konto, så du kan gemme dine resultater. Du kan trykt lukke den fane, der popper op med 'Produktbemærkninger'.

### Trin 3)

Øverst ser du et felt der hedder 'query\_sequence:'. Her kan du indsætte din egen proteinsekvens, eller blot prøve med den sekvens der allerede står i feltet. Du kan fx. prøve med nogle af de følgende:

#### Hæmoglobin subunit alfa fra *Homo sapiens* (menneske):

```
MVLSPADKTNVKA AWGKVG AHAGEYGAEALERMFLSFPTTKTYFPHFDLSHGSAQVKGHGKKVADALTNAVAHVDDMP-  
NALSALSDLHAHKLRVDPVNFKLLSHCLLVTLAAHLPAEFTPAVHASLDKFLASVSTVLTISKYR
```

#### Hæmoglobin subunit alfa fra *Physeter macrocephalus* (kaskelothval):

```
VLSPADKTNVKA AWAKVGNHAADFGAEALERMFMFSFPSTKTYFSHFDLGHNSTQVKGHGKKVADALTNAVAHVDDMP-  
DALSDLHAHKLRVDPVNFKLLSHCLLVTLAAHLPGDFTPSVHASLDKFLASVSTVLTISKYR
```

#### Alpha synuclein fra *Homo sapiens* (et protein involveret i Parkinsons sygdom):

```
MDVFMKGLSKAKEGVVAAAEKTKQGVAAEAGKTKEGVLYVGSKTKEGVVHGVATVAEKTKEQVTNVGGAVVTGV-  
TAVAQKTVEGAGSIAAATGFVKKDKLQKNEEGAPQEGILEDMPVDPDNEAYEMPSEEGYQDYEPEA
```

### Trin 4)

Når du har indsat den sekvens du gerne vil forudsige strukturen af, skal du trykke oppe øverst på fanen 'Kørselstid' og så vælge 'Kør alle'.

Du kan følge med længere nede på siden hvor der efter lidt tid vil dukke nogle strukturer op. Efter et par minutter vil du kunne se en færdig struktur under fanen 'Display 3D structure'. Du kan tage fat i strukturen med din mus og dreje den rundt.

Strukturen er farvet efter dens 'pLDDT score', som beskriver hvor sikker AlphaFold er på dens egen strukturforudsigelse. Hvis du prøver både med hæmoglobin og med alpha synuclein, vil du bemærke, at hæmoglobin er helt mørkeblå: AlphaFold er meget sikker på, at denne struktur er den rigtige.

Alpha-synuclein er derimod farvet rød, gul, og grøn. Det er fordi, det er et 'uordnet protein', som AlphaFold ikke kan forudsige. Dem kan du læse lidt mere om i artiklen.