

学术报告会

时间：2023年12月8日 10:30

地点：电信群楼2-410会议室

所有蛋白质结构的高精度预测：未来已来

周耀旗
资深研究员，深圳湾实验室



摘要:

最近，AlphaFold2 实现了一项被认为几乎不可能实现的目标：预测的蛋白质结构达到了实验测定的精确度。这个出乎意料的高精度预测是通过端到端的深度学习、利用大数据和大模型，找到了多个同源序列与相应的“单一”结构之间的关系。也就是说，AlphaFold2强烈依赖于多序列比对（MSA）中的进化和协同进化信息。对于找不到太多同源序列的蛋白质（例如抗体，病毒蛋白，复合物结构等），AlphaFold2 预测的精确度就会大幅度下降，导致了人类蛋白质组里的残基只有36%可以被高可信地预测。在这个报告里，我们采用人工生成的、结构稳定性选择、高通量测序获得的同源序列来拓展AlphaFold2的应用范围。初步结果为快速、低廉、通过测序来对所有蛋白质实现高精度结构预测走出了第一步。

简介:

周耀旗教授于2021年3月起作为资深研究员全职加入了深圳湾实验室，在这之前，他是中国科技大学近代化学系的学士，美国纽约石溪大学的博士，北卡州立大学、哈佛大学的博士后，布法罗大学助理教授，副教授，印第安纳大学正教授，澳大利亚格里菲斯大学教授。他长期在结构生物信息学方面工作，曾经多次在国际蛋白质/RNA结构预测和功能预测比赛中名列前茅。他的科研成果的原创力和影响力获得了世界专家同行的肯定，入选了全球前2%顶尖科学家“终身科学影响力排行榜”和“年度科学影响力排行榜”，“中国高被引学者（生物学）榜”等。谷歌学者总引用17,000余次，H因子70。目前，周耀旗课题组通过AI计算和高通量实验的结合，从事蛋白质/RNA的序列、结构与功能关系方面的基础研究和生物分子检测、药物开发方面的应用研究。寻找在RNA/蛋白方面有定向进化和分子/细胞生物学，以及AI计算的博士后和助理研究员。