

学术报告会

时间：2024年11月20日（周三） 10:00

地点：电信群楼2-410会议室

AI辅助的蛋白质相互作用预测及其 在蛋白质结构预测中的应用

高子琪 博士研究生
香港科技大学



摘要:

蛋白质相互作用是AI4Protein领域中最基本的任务之一，对新药的发现和蛋白质结构的分析都具有重要作用。PPI任务的挑战主要体现在两个方面：一是PPI的机制非常复杂，通常需要考虑多个因素，如几何、化学和力学。二是PPI是多粒度的，包括宏观PPI的二元分类、微观相互作用界面的分析和多蛋白协同相互作用等。本报告介绍了基于图神经网络的PPI预测技术，涵盖宏观、微观和多蛋白协同等多种条件。此外，该报告还介绍了PPI技术在另一新兴应用，即多聚体结构预测中的重要作用。所汇报工作阐述了如何开发对新蛋白具有良好泛化能力且在结构不确定性可以下保持高稳健性的PPI预测模型。

简介:

高子琪是香港科技大学数据科学与分析专业的在读博士生。此前，他曾分别于华中科技大学和清华大学获得本科和硕士学位。如今，他的研究方向主要是AI4Science。具体来说，主要为基于图神经网络的蛋白相互作用研究，其中包括二元和多元相互作用两个维度的研究。近期，他致力于开发强泛化性的多蛋白协同作用预测模型，并将其应用于蛋白聚合物结构预测的研究。该研究的主要意义在于扩展AlphaFold家族的适用范围，使其能够处理更长的蛋白质序列。