

基礎から学ぶ最新NMR解析法

第9回ワークショップ



AIを活用したNMR解析

2024年8月5日(月)～6日(火)

ハイブリッド開催

大阪大学蛋白質研究所 & Zoom オンライン

生体系NMR法の最前線

AIを活用した技術を目にする機会は多いですが、NMRや構造生物学の分野においてもAIを活用したツール開発が進められています。このようなAIツールは、解析を効率化し、ユーザの参入障壁を下げると期待され、今後さらに重要性が高まると考えられます。本セミナーでは、AIを活用したNMR解析ツールの開発や、AIを取り入れたNMR研究・構造生物学研究を推進する国内外の研究者を招き、ワークショップと講演会を開催します。ワークショップでは、ProteinMPNNやAlphaFoldを使ったタンパク質デザインや構造予測、DiffDockを使ったタンパク質-リガンドドッキングについてチュートリアル形式で実施します。

8/5
(月)

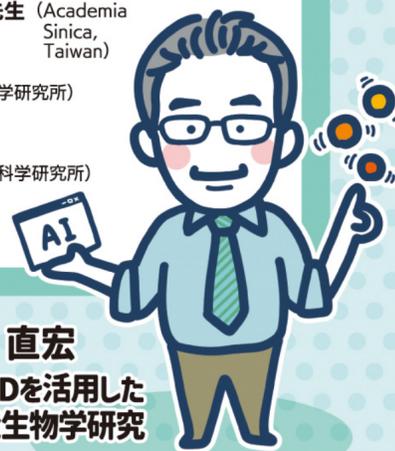
- 13:00 - 13:10 開会あいさつ 栗栖 源嗣 (大阪大学)
- 13:10 - 13:30 趣旨説明 齋尾 智英 (徳島大学)
- 13:30 - 14:30 **レクチャー**
Peter Güntert 先生 (ETH Zurich / Goethe University Frankfurt / Tokyo Metropolitan University)
- 14:30 - 15:00 休憩
- 15:00 - 18:00 **ワークショップ第1部**
Kuen-Phon Wu 先生 (Academia Sinica, Taiwan)
- 19:00 - 懇親会

8/6
(火)

- 9:00 - 10:00 **ワークショップ第2部**
Kuen-Phon Wu 先生 (Academia Sinica, Taiwan)
- 10:00 - 10:30 **レクチャー**
Kuen-Phon Wu 先生 (Academia Sinica, Taiwan)
- 10:30 - 11:15 **レクチャー**
小林 直宏 先生 (理化学研究所)
- 11:15 - 12:00 **レクチャー**
小杉 貴洋 先生 (分子科学研究所)
- 12:00 開会あいさつ



Dr. 小杉 貴洋
タンパク質デザイン



Dr. 小林 直宏
AF2/AF3とMDを活用した
構造生物学研究



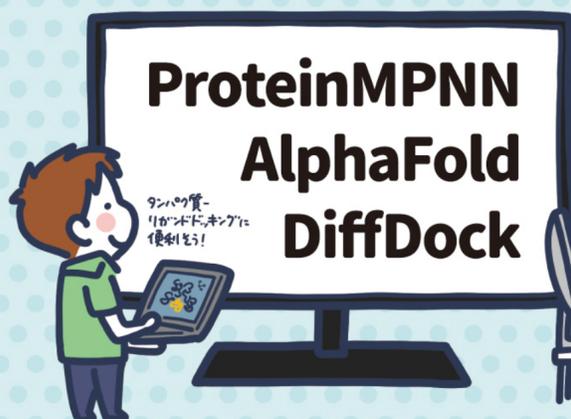
Dr. Peter Güntert
NMR構造計算プログラムを開発



学習済みAIは
蓄積したヒューズを
見分けるのが得意!



CYANA/FLYA
NMRtist



ProteinMPNN
AlphaFold
DiffDock



AF2の予測したと
そこに適合する
みつけたけど...

NMRと電顕で
検証してみよう。

アイ感性は
タンパク質の
デザインが楽だ!

Dr. Kuen-Phon Wu
AIツールでデザイン&構造予測
NMRと電顕で検証・評価

主催：大阪大学 蛋白質研究所
共催：PDBj / NMR プラットフォーム / 日本生物物理学会
次世代 NMR ワーキンググループ
後援：BINDS 創薬等先端技術支援基盤プラットフォーム
世話人：久米田 博之, 齋尾 智英, 竹内 恒, 田巻 初, 日比野 絵美, 宮ノ入 洋平, 八木 宏昌



お申し込みはこちら
<https://nextnmr.jp>

AIと
NMR
上手に活用
したいよね。

うーん...

複合体
ちゃんと
出来た?

NMRと
電顕
どっちが
いいの?

このタンパク質は
改良の余地あり
かも。

あー！
すごく便利!!

構造決定の
プロセスも
完全自動化!

解析して
時間が掛かるなあ...

何とか早く
解析時間を
短縮できれば
良いのに...

今後は
AIを使い

こういう解析を
効率化・
自動化
するといいよ