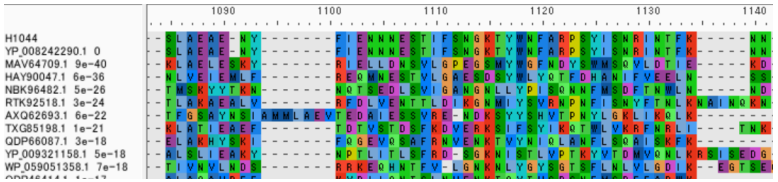
2020/07/17
実験家のためのデータ駆動科学オンラインセミナー
データドライなライフサイエンスへの誘い

大規模配列データからの
タンパク質立体構造予測及び機能予測

東北大学 大学院情報科学研究科　日本学術振興会特別研究員(PD)
産業技術総合研究所 人工知能研究センター　協力研究員
中村　司

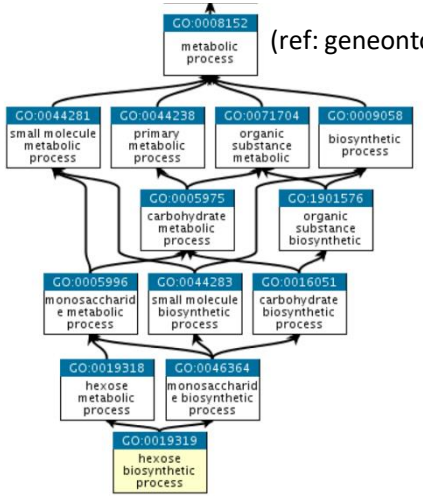
Self Introduction

Protein Informatics



MAFFT-MPI

(Nakamura *et. al.*, *Bioinformatics*, 2018)



(ref: geneontology.org)

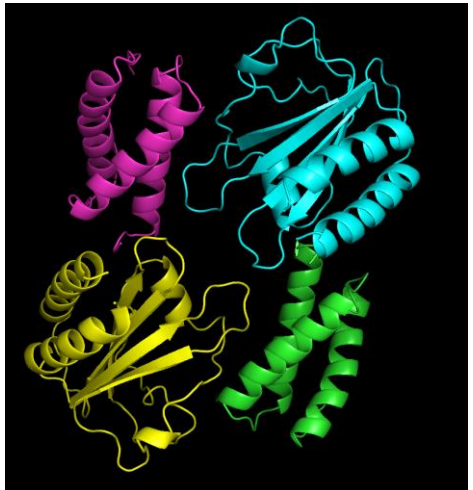
Critical Assessment of Functional Annotation
(CAFA4, last Feb.)

Sequence → Function

Critical Assessment of Structure Prediction
(CASP11, 12, 13, 14(ongoing))
(Quaternary Structure Prediction:
Nakamura and Oda *et. al.*, *Proteins*, 2017;
CASP-CAPRI: *Proteins*, 2016)

Structure

Comparing Pockets
(Nakamura and Tomii,
Biophysics and Physicobiology, 2016;
Nakamura and Tomii, *Methods*, 2015)
Comparing Interfaces



>H1046 RI-T complex, , subunit 1, 74 residues;
MNVDPHFDKFMESGIRHVYMLFENKSVESSEQFYSFMRT…
>H1046 RI-T complex, , subunit 2, 142 residues;
RFESVALEQLQIVHISSEADFSAVYSFRPKNLNYFVDIIAYEGKLPST…

H1046 model structure (stoichiometry: A2B2; PDB: 6PX4)

The complex between periplasmic domains of antiholin RI and holin T
Organism: *T4 phage*