



---

## 2018分子模拟与蛋白互作研习班

---

尊敬的\_\_\_\_\_先生/女士，您好！

您好！您关注的《2018分子模拟与蛋白互作研习班》将于2018年09月在北京召开。

### 会议内容

---

蛋白质组学是研究生命科学现象与科学规律的重要途径，在各个研究领域都有广泛应用。

有许多蛋白质相关的数据库资源及生物信息学分析工具，在研究蛋白质的鉴定、结构分析与模拟、蛋白与核酸相互作用、与蛋白-蛋白相互作用、分子对接，乃至分子相互作用网络等各个层面为科学研究提供助力。

为进一步推进相关研究发展，助力广大科研工作者提高蛋白质组学相关数据分析及生物信息学技能，

北京市计算中心生物计算事业部推出“蛋白质组学及分子模拟”研习班。欢迎您参加！

#### 【主办单位】

中国生物工程学会计算生物学与生物信息学专委会

#### 【承办单位】

北京市计算中心

#### 【协办单位】

云计算关键技术与应用北京市重点实验室

中国医药生物技术学会生物医学信息技术分会

北京市基因测序与功能分析工程技术研究中心

中国生物工程杂志

北京唐唐天下生物医学信息科技有限公司

北京微生太科技有限公司

北京依托华茂生物科技有限公司

### 【培训地点】

北京海淀区丰贤中路7号3号楼，北京市计算中心三层会议室

### 【培训时间】

2018年9月14日-16日 上午：9：30-12：00 下午：1：30-5：00

## 北京市计算中心·生物计算事业部培训内容

### 生物分子结构预测与优化

该部分主要包含对蛋白质和小分子结构的构建与优化。对于未知结构的蛋白质分子，在已知基因或氨基酸序列基础上，通过同源建模方法进行结构预测和同源构建。随后在建模蛋白质结构基础之上，利用动力学软件进行分子动力学模拟，以得到其最优结构模式。

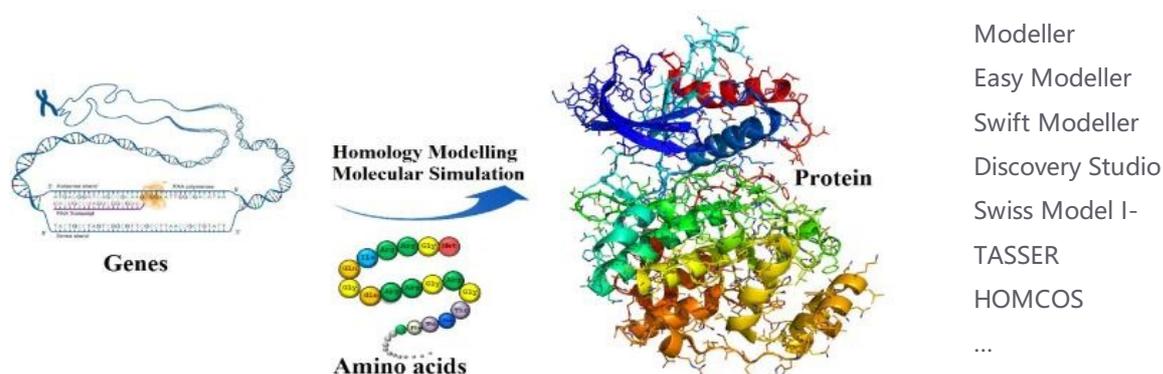


图1 蛋白质同源建模与相关软件

通过经典化学构图方法对小分子化合物进行结构构建，并采用量化软件（Gaussian，ORCA等）计算分子电荷分布、分子轨道和反应活化能等对其进行结构优化。

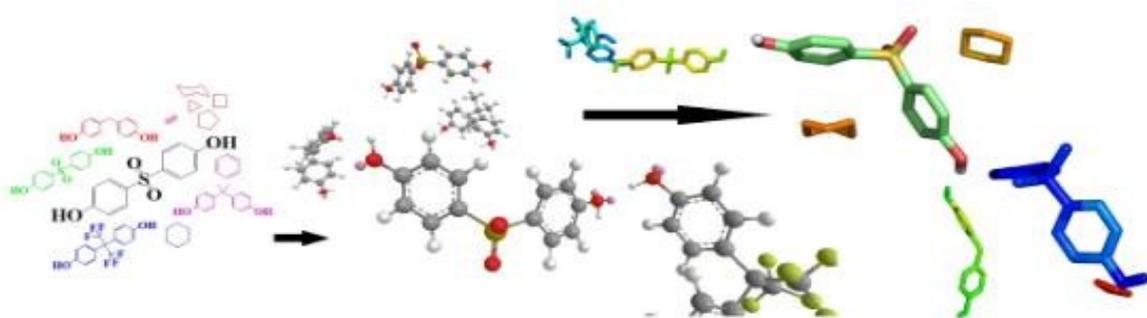


图2 小分子模型构建

### 生物分子间作用机理研究

生物分子间作用研究步骤，主要包含生物分子（蛋白 - 蛋白，蛋白 - 核酸和蛋白 - 配体）间相互作用模式。在获悉生物分子间作用模式前，首先对蛋白质进行活性口袋鉴定，而后利用对接软件进行分子间对接，并基于动力学软件进行动态模拟，通过分析相互作用模式和分子间相互作用能等来鉴定分子间作用机理。

#### 1. 分子对接

分子对接是分子模拟的重要方法之一，其本质是两个或多个分子间的识别过程，涉及分子之间的空间匹配和能量打分，根据能量排名最终得到分子间的初步最优结构和结合模式。

“蛋白-配体”间对接软件繁杂，本中心已有软件主要包括Autodock，Vina，Dock等等。

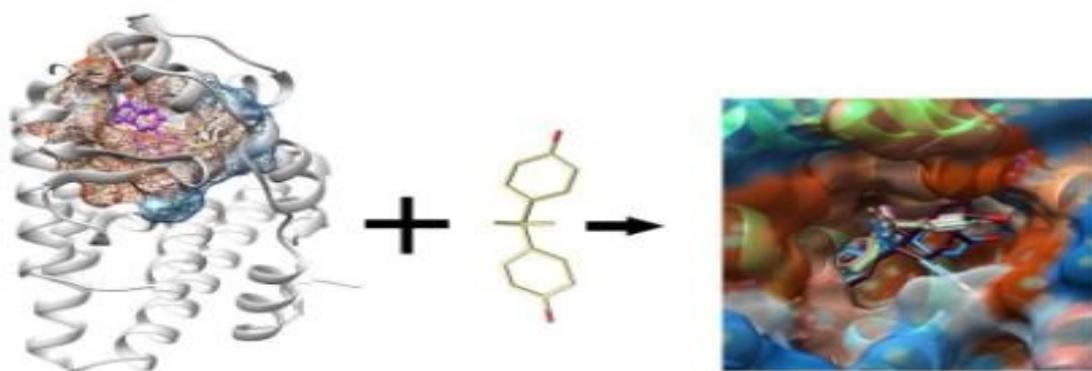


图3-1 蛋白-配体分子对接

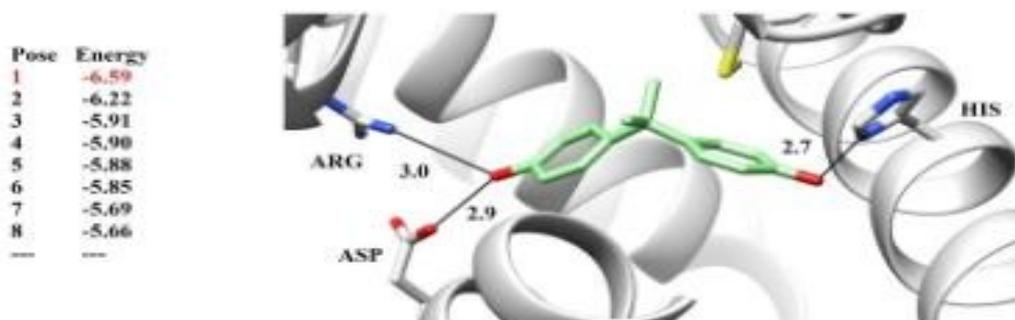


图3-2 蛋白-配体分子对接结果分析

目前针对“蛋白-蛋白”与“蛋白-核酸”分子间的对接软件较少，最常用的为Rosetta。

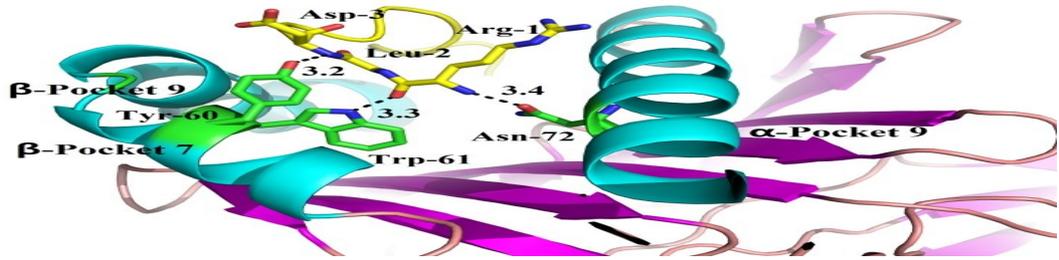
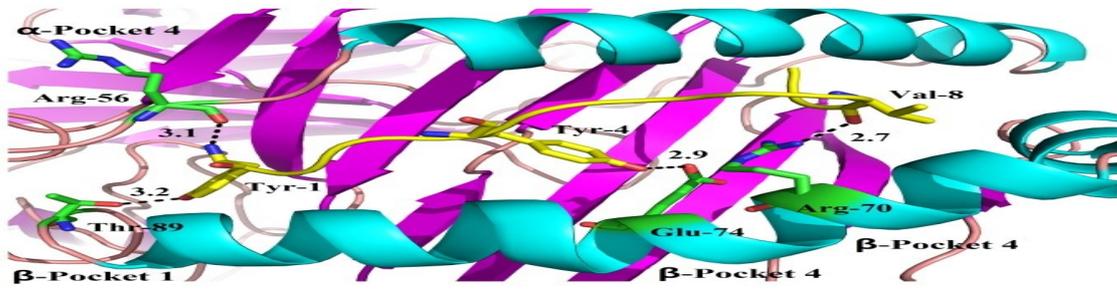


图4 蛋白-核酸分子对接分析

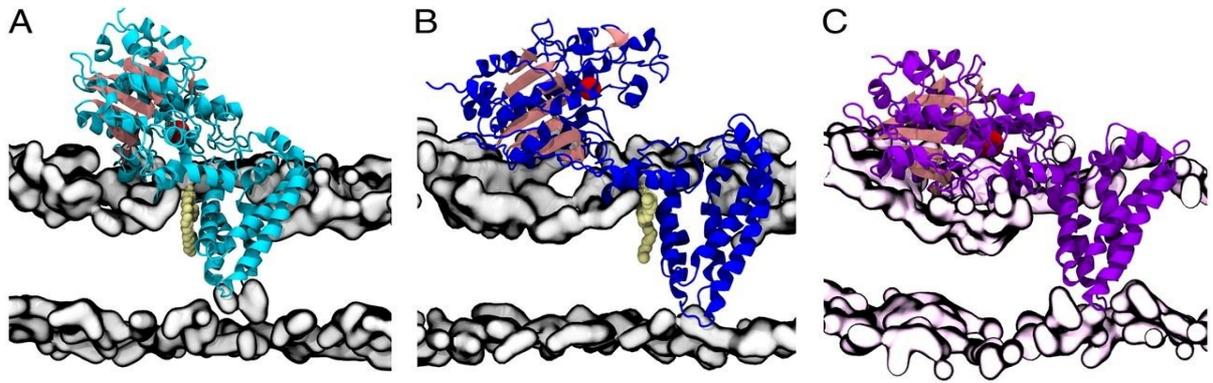
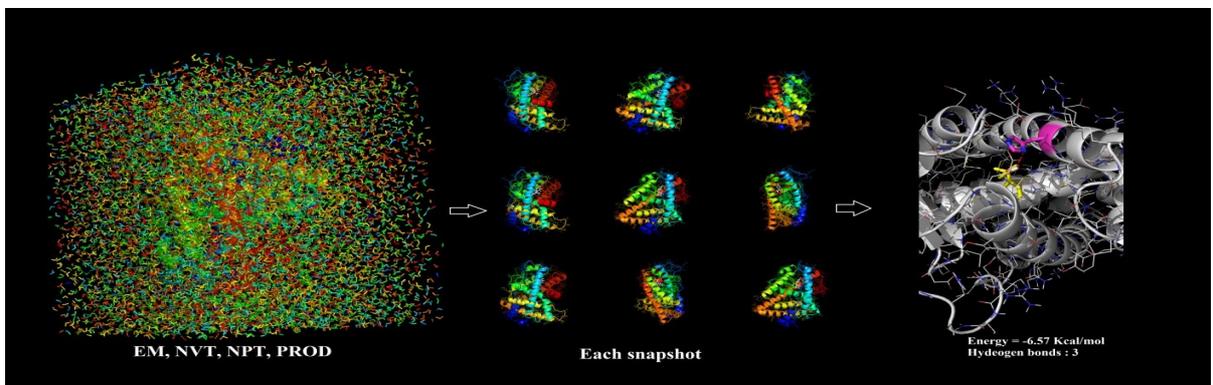


图5 蛋白-蛋白大分子对接与分析

### 1. 分子动力学模拟

本中心目前拥有AMBER, GROMACS和NAMD等分子动力学软件, 依托本中心计算资源, 短时间内可进行100ns时间跨度动力学模拟。通过对模拟轨迹进行聚簇等分析, 可获得分子间各状态相对稳定构型, 并通过分析分子间相互作用模式和相互作用能等来鉴定分子间作用机理。



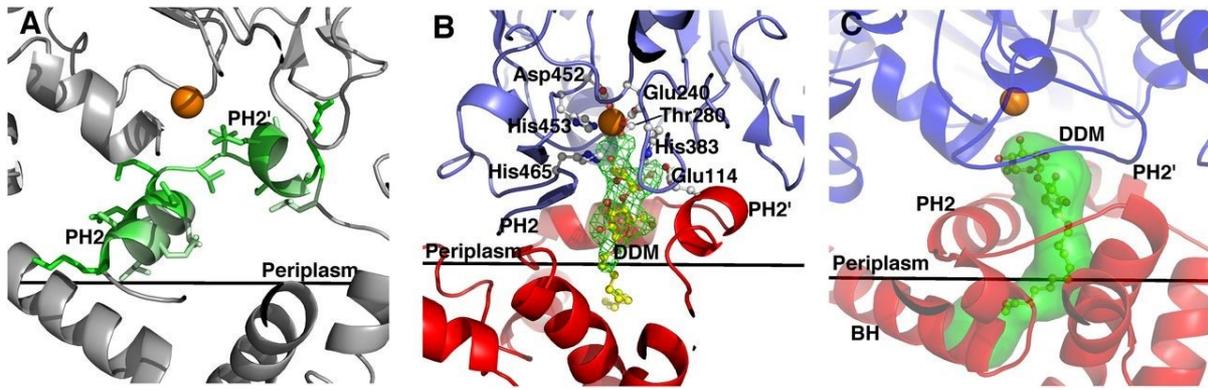


图6 分子动力学模拟与分析

### 药物先导化合物筛选、结构修饰与优化

随着科技的发展，当前已经拥有庞大的生物分子数据库以及各种各样的药物分子数据库，而传统的实验手段已经难以从庞大的数据库中快速的筛选出符合特定需求的分子体系。目前我们已经可以通过分析确定药物的作用机制，并在此基础上通过计算机模拟筛选的方式快速的筛选出符合特定条件的一系列分子，从而大大的加快分子筛选过程。



### Virtual Screening & Scoring



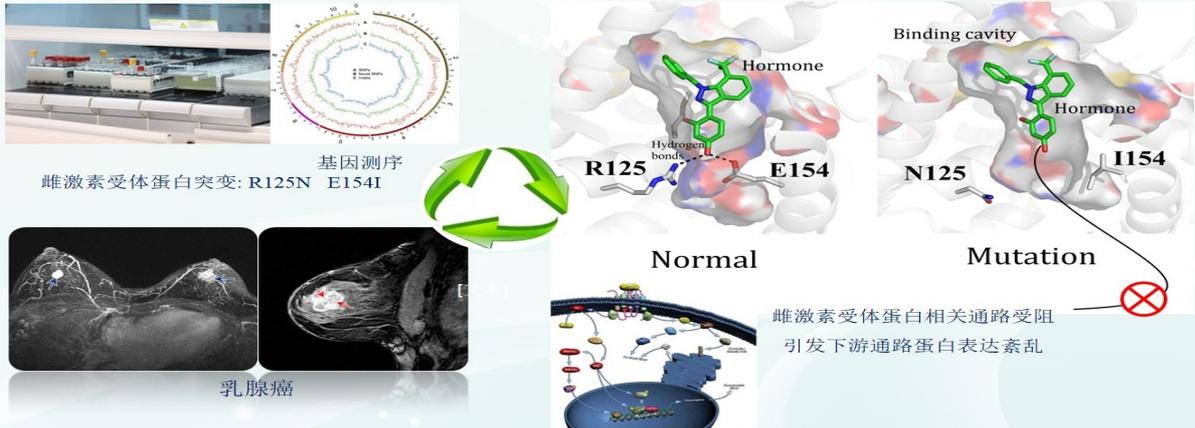
图7通过分子对接和分子动力学模拟的手段来筛选所需要的分子

### Cell、Nature、Science、PNAS发表文献实例讲解（举例）

随着计算生物学的发展，目前该学科已经被广泛认可。其中Cell、Nature、Science、PNAS、JMC等顶尖杂志中作图出现频率越来越广泛，我们将挑选文献中相关图形、表格，对整个文献思路进行阐述，并遵照文献中作图进行原图呈现，案例如下：

- (1) 基因序列突变引发对应蛋白三维结构变化状况分析；
- (2) 小分子结合位点相互作用体系变化分析；
- (3) 文献作图实例操作。

## 基因序列突变引发乳腺癌的致病机理研究



【特色】真正实战经验丰富的一线专业团队，与您一起交流、学习、探讨您工作中实际遇到和将要面对的问题。

## 会议门票

### 【报名费用】

培训费4000元，（含听课费、资料费、上机费，请自带笔记本电脑以备上机实践使用）；教材：《高通量测序与高性能计算理论和实践》北京科学技术出版社；附近最近酒店为：如家酒店（永丰店），可自行网上预定，食宿自理。

### 【报名优惠政策】

- 1、8.10日前报名并缴费可优惠200元；
- 2、3人以上团体报名每人可减少300元；
- 3、4+1团报，可免费赠送一个名额；

以上优惠政策不能同时享受，只能享受其中一种。

培训以收到学员培训费为成功报名，培训座位按收到费用先后顺序安排。

注：培训前一周前后，会有邮件/电话通知开班与否；如未收到，请电话联系确认。

2018基于多组学的慢性疾病研究研讨班09.17-09.21

2018第三代测序技术及信息分析研讨班09.07-09.09

2018数据分析与R语言制图专题研讨班09.03-09.06

2018宏基因组分析专题研讨班09.01-09.02

- 1、在线购票支持支付宝、微信及银联支付；
- 2、如果您需要以对公转账的方式进行购票，收款账号信息如下：  
银行帐户：成都云数海量智能科技有限公司  
开户银行：中国银行成都中和支行  
银行账号：117169457814  
购票咨询电话：028-69761252

此致!



