

# タンパク質立体構造の予測

## ■ 開発者

□ 神戸大学 高田彰二

## ■ 概要

□ 構造未知タンパク質のアミノ酸配列情報をもとに、擬似フォールディングシミュレーションによってタンパク質立体構造予測を行う。

## ■ アルゴリズム

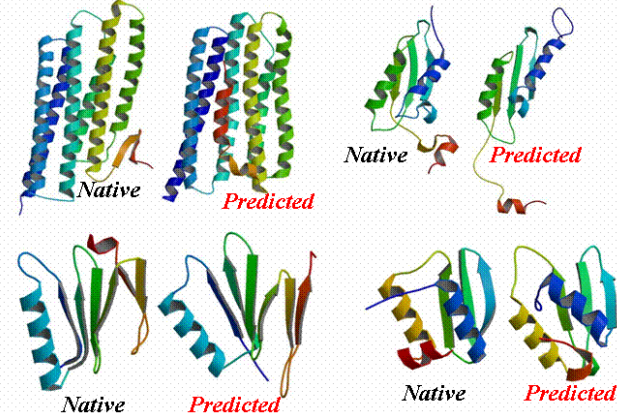
- 知識ベースのエネルギー関数 SimFold
- 知識ベースのフラグメントアセンブリモンテカルロ法
- 拡張アンサンブル法

## ■ 計算規模

- 粗視化モデルでアミノ酸120残基程度まで
- 累積で 40 億モンテカルロステップ程度
- 使用メモリ量 1 GB、ディスク容量 1 GB

## SimFoldによるタンパク質構造予測例

各蛋白質で、左が実験構造、右が予測構造  
α蛋白質&小型蛋白質は、かなりうまくいく



## ■ どんなことが期待されるか？

- 「たんぱく3000」などの構造情報を直接利用して、構造未知タンパク質の3次元構造を擬似フォールディングシミュレーションにより決定することができる。
- 高精度タンパク質モデリングは、構造ベースの創薬研究のコアバイオインフォマティクス技術の一つである。その技術の確立によって、ハイスループットなリード化合物のスクリーニングが可能になる。