



タンパク質のフラグメント分割に基づく 折り畳み計算の効率化

鈴木正昭, 奥田洋司 (東京大学)

概要

アミノ酸配列情報のみ用いた折り畳みシミュレーションによるタンパク質立体構造予測

計算手法

- 局所アミノ酸配列 – 構造相関の存在
- 局所構造精度が大域構造形成に強く影響

- 知識ベースの取り扱い = FA法
- 非知識ベースの取り扱い = 本研究

局所構造予測能と大域構造予測能を同時に担保する多次元レプリカ交換MDを開発

- MFREM (Multiple Fragment-size REM)

結論

- α, βペプチドにおいて有効性を確認
- 高速・高効率な低エネルギー構造サンプリングを実現
- 必要レプリカ数を大きく削減

