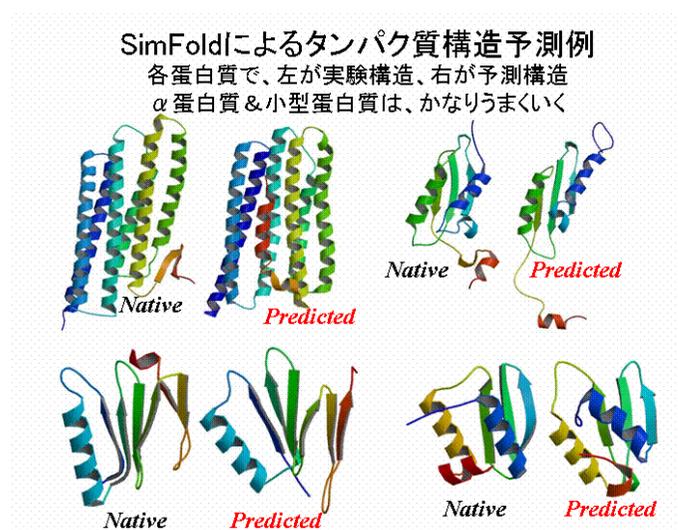


分野名: ライフ

# タンパク質立体構造の予測

- プログラム名: SimFold
- 開発
  - 神戸大学理学部 助教授 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
  - FORTRAN77
- 現状での計算規模
  - 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
- 次世代スパコンでの計算規模
  - 粗視化モデルでアミノ酸 300 残基程度まで
  - 原子モデルでアミノ酸 120 残基程度まで
  - 必要なモンテカルロステップは未知



- どのよう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。