

⑦ Folding Simulation using Temperature Parallel Simulated Annealing

M.Hirosawa*, M.Ishikawa, M.Hoshida(ICOT,日本)

R.J.Feldmann, G.Michaels(National Institutes of Health,米国)

D.Rawn(Towson Univ., 米国)

発表要旨

蛋白質の折り畳みシミュレーションは、蛋白質が伸びきった状態から本来の蛋白質の状態までにいたる過程をシミュレートすることにより蛋白質の立体構造を予測する研究である。これは、計算機的には蛋白質の各立体構造に割り当てた評価値を最適化する過程であると定式化できる。この定式化のためには二つの方式を指定する必要がある。一つは、各立体構造にどのように評価値を割り当てるかという蛋白質のモデル化の問題。もう一つは、どのように評価値を最適化するという最適化問題である。我々は蛋白質のモデル化方法として、Water-counting modelそして、最適化アルゴリズムとして Temperature-parallel Simulated Annealingを採用した。

我々は、上記の定式化を用いてFlavodoxinという蛋白質の折り畳み過程をシミュレーションした。結果の蛋白質構造は、全体の構造の類似性は低かったが、部分的な構造の類似性が認められた。また、Temperature-parallel Simulated Annealingの他の最適化アルゴリズムに対する優位性を検出することができた。

質疑応答

なし