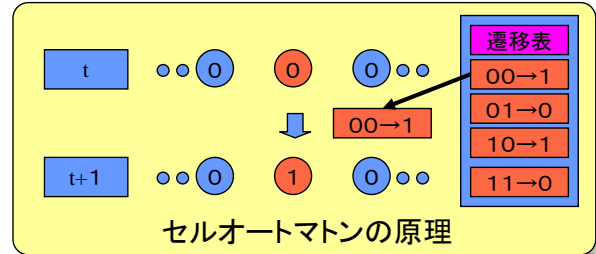


セルオートマトンによる高分子の立体構造推定

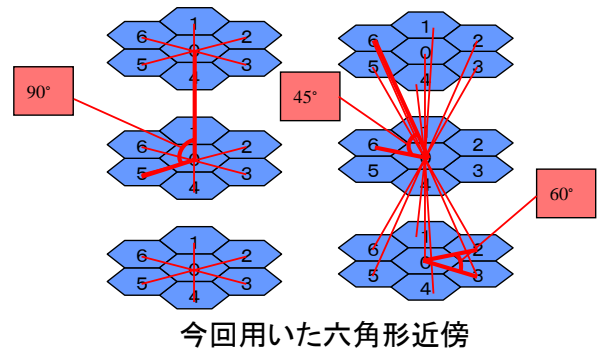
- タンパク質をはじめとする高分子の立体構造を決定するためには、物理化学的に求める手法と、分子動力学などを用いて数値計算的に概算する手法がある。後者では物理化学実験が不要であるが、膨大な計算量が必要である。

- 数値計算を用いる場合は物理・化学理論を元に厳密な計算を行なうのが一般的であるが、ここでは『分子模型を組み立てる時の立体パズルの感覚で』開発した高分子の立体構造を“組み合わせ論的に”推定する方法の概略を紹介する。



アプローチの方針:

- セルオートマトンの状態遷移規則を最適化する。
- 物理化学的要素はできるだけ排除して考える。
- 立体構造を最適化する「空間」をデザインする。
- その空間中に配置した初期構造を変化させる。
- エネルギーの極小状態になったら停止させる。
- 新材料創出などにも適用できるようにする。(新しい炭素化合物の創出など)

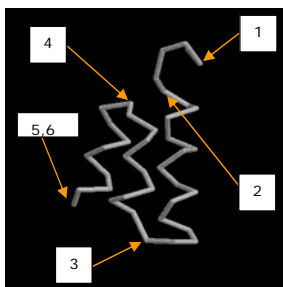
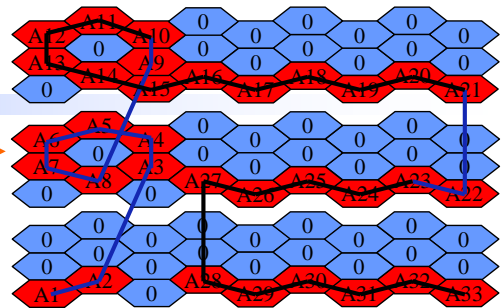


1

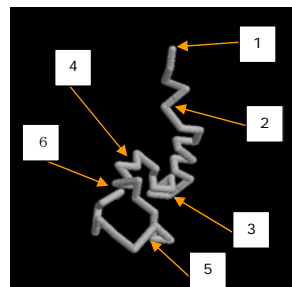
実験例

- 本方式で表現されるタンパク質の主鎖の例
- 方式の有効性の確認のため、構造が既知のタンパク質の構造を推定した結果を次に示す

(計算時間は Pentium4(3GHz)のPCで約1.5時間程度)

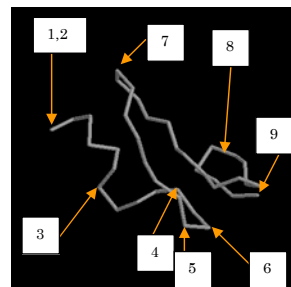


実際の構造

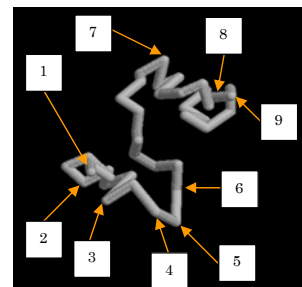


推定結果

2erl(40)の実験結果



実際の構造



推定結果

1ixa(39)の実験結果

- 推定結果では、全体的に構造が似ている部分もあるが部分的な構造には違いが見受けられるので、方式のさらなる改良が必要であるが、非常に少ない計算量で立体構造の概形ができることは興味深いと考えられる。