

タンパク質のFolding Funnelの珍しさ

大阪大学サイバーメディアセンター 菊池誠

目的: タンパク質のファネル的エネルギー景観がどれくらい珍しいかを調べ、タンパク質の進化について唆示を得る

内容: ランダムネットワーク上のランダムエネルギーモデルがファネル的構造になる確率をマルチカノニカルモンテカルロ法によって計算した

結果: ファネルの実現確率はネットワークごとに大きく違い、1000ネットワークの分布を取ると概ね対数正規分布になることがわかった。これはタンパク質の言葉でいうと変異に対して頑健な天然構造が少数存在することを意味し、タンパク質のfoldの種類が少ない理由を説明すると考えている

利用した計算機
並列化

Vcc
100並列(5ノード)