

26L-pm07

Fams-ace2: ローカルコンセンサスと側鎖精度の評価法に基づく、構造評価プログラム

○寺師 玄記¹, 酒井 博子¹, 加納 和彦¹, 平田 朋子¹, 竹田-志鷹 真由子¹,
梅山 秀明¹(¹北里大薬)

【目的】タンパク質の予測立体構造評価手法の開発。今回は、2008年に参加したタンパク質立体構造予測コンテスト CASP8・3D coordinate prediction 部門における結果を発表する。

【方法】複数の予測構造を収集し、以下の手順で評価し、上位のものを提出した。1) 明らかに不自然な衝突や主鎖の破壊があるものを除く 2) ローカルコンセンサス値が上位 10 以内のものを選択する 3) 選択した構造を、当研究室で開発した全自動ホモロジーモデリングソフト FAMS で再構築する 4) 当研究室で開発した立体構造評価ソフト CIRCLE で評価し、上位 5 以内のものを選択する。

【結果】CASP 終了後に公表された正解構造と各チームの予測構造との GDT_TS の平均を以下に示す。当チームの結果は良好であった(網部分)。

