

26L-pm09

側鎖環境コンセンサスコアに基づいたタンパク質予測立体構造評価法の開発
加納 和彦¹, ○平田 朋子¹, 寺師 玄記¹, 酒井 博子¹, 竹田-志鷹 真由子¹,
梅山 秀明¹(¹北里大薬)

【目的】タンパク質予測立体構造を評価する手法において、多数意見を反映させるコンセンサス法 (3D-Jury 法) は、タンパク質の骨格構造 (Ca) レベルで精度の良いモデルを選ぶのに非常に有用な手法であることが分かっている。しかし、この手法は骨格構造の多数意見を反映したスコアであるため、必ずしも側鎖の精度の良いモデルを選択できるとは限らない。そこで、側鎖のレベルでも精度の良いモデルを選択する手法として、モデルの側鎖環境の多数意見を反映したコンセンサスコアを開発した。また、2008 年に開催されたタンパク質立体構造予測コンテスト (CASP8) において、予測構造の評価を行う Quality Assessment (QA) 部門に参加し、本手法の検証を行った。

【方法】まず評価する全ての立体構造モデルについて、側鎖の衝突の排除および欠落した原子の補完を目的として、ホモロジーモデリングプログラム FAMS を用いて再構築を行った。次に、アミノ酸側鎖環境 (fraction buried, fraction polar) の類似度に基づいたコンセンサスコア、および配列から予測される二次構造とモデルの二次構造の一致度スコアを組み合わせ、最終的なスコアとした。各種パラメータは CASP7 のデータセットを用いて最適化した。

【結果および考察】CASP8 の結果から、本手法により主鎖だけでなく側鎖精度の良いモデルを選択することができることがわかった。また従来の 3D-Jury 法により選択されたモデルと比較すると、骨格構造の精度は若干劣るものの、側鎖の精度においては 3D-Jury 法を上回っていた。さらに、本手法と 3D-Jury 法を組み合わせることで、主鎖、側鎖共に精度の良いモデル構造を選ぶことができる。