

Level Set 関数による蛋白質表面構造の解析

窪田 綏¹ 中村太郎¹ 岡野豊明² (1 Advanced Technology Institute, 2 産業技術総合研究所)

蛋白質の表面構造の解析はドラッグデザインなどの実用面のみならず、その topological な数学構造解析の観点からも興味深いものがある。

従来手法には、Voronoi/Delaunay 分割を用いる方法や Radial Basis Function による implicit 表現などいろいろな研究があるが、一般に表面構造の再構成の問題は与えられた非構造データ点から曲線や局面を構成する問題で、ill-posed であり難しい。

我々の採用した手法は計算幾何学、流体力学、材料力学など幅広い分野で用いられている Variational Level Set 法の一応用であり、再構成した曲面や曲線を直交グリッド上の Level Set 関数の 0 - 等位面として表す Implicit 、 Non-parametric 表現であり、上記難点を克服し且つ、データ点の順序、局面の連結性、トポロジーに関する情報は不要である。

我々は Level Set 関数により、種々の蛋白質表面構造を再構成し、その数学的知見を得たので報告する。

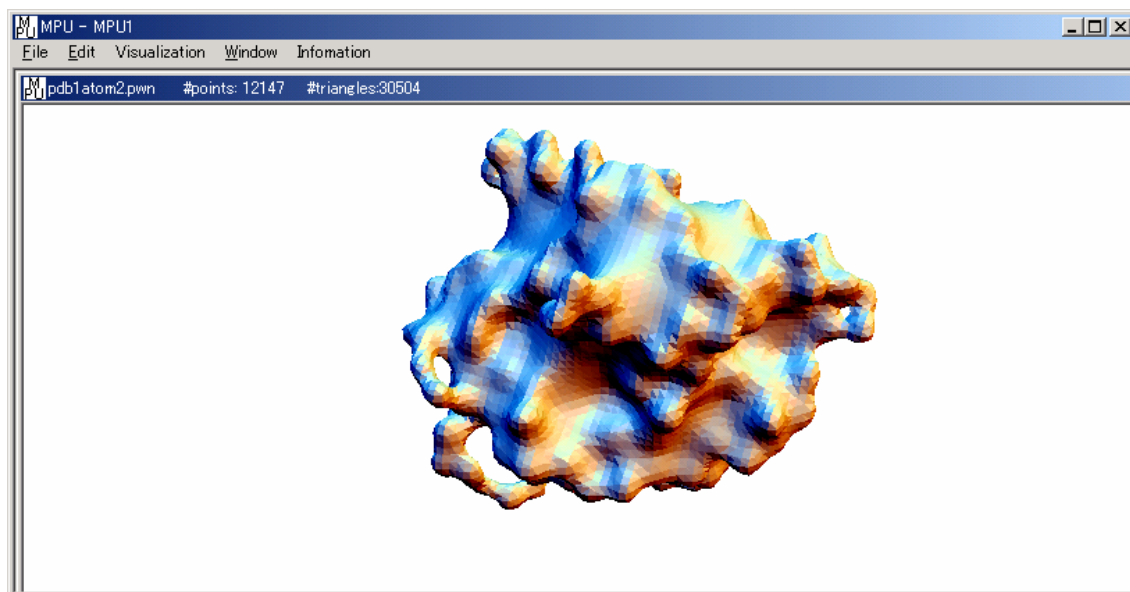


Fig . 1 Level Set 法によるエラスターゼ (pdb1est.ent) の表面構造 (但しC のみ)。

Y. Kubota, T. Nakamura and T. Okano: Analysis of Protein Surface Structure by Level Set Function