

Foldit: タンパク質フォールディングを実感できるゲーム

ふと気になってGoogleで「タンパク質 パズル」という検索をしたところ、上位の10位まではすべてが「Foldit」というタンパク質フォールディングのゲームにリンクされていることが判明した。たとえば、こんな感じ。



タンパク質パズルで医療に貢献、米大学がゲーム開発
ワシントン大学は、時間のかかるコンピュータシミュレーションに人間の直感力を取り入れようとしている。
(ITmedia news 2008年05月09日)

さっそくソフトをダウンロードして実行してみた¹。まずはイントロ的なパズルで練習を積んだ後に本格的なタンパク質のフォールディングを行う。実によくできていて、マウスでポリペプチドの側鎖や主鎖をつかんで動かしたりして遊びながら、フォールディングの基礎を学ぶことができる。例えば、側鎖同士が近すぎると立体的な反発が生ずるのでマイナス点、うまく離すと「Congratulations!」・・・他にも、疎水側鎖を内側に隠すコアとか、主鎖を折り曲げてタンパク質内の隙間をなるべく小さくするとカイントロパズルで練習できる。

開発者の中には、人工タンパク質のデザイン、フォールディング予測など計算によるタンパク質研究で飛び鳥を落とす勢いのDavid Bakerが加わっている。右図左上のような感じでBaker博士が専門家として「助言」もしてくれるようだ。

まだイントロ的なところを遊んでいるだけだが、サイエンスパズルと称する本丸はかなり本格的である。というより、今まさにBakerラボで予測している構造未知タンパク質がパズルとして

出されているのである。そして、そこにこのゲームの目的がある。サイトの科学的背景のページから引用すると、

Foldit attempts to predict the structure of a protein by taking advantage of humans' puzzle-solving intuitions・・・

ということで、人間のもつ「パズルを解く直感」をタンパク質の立体構造予測に使おうというもくろみだ。実際、BakerラボではRosettaというタンパク質構造予測アルゴリズムを使って



構造予測をしているが、このFolditの位置づけはインタラクティブなRosettaというものらしい。

とは言え、本番の問題はおそろしく難しそうだ。側鎖を良さそうな方に動かしたら別の相互作用に不都合が生じるといふ「あちらを立てればこちらが立たず」状態にすぐ陥る。すべての相互作用を矛盾なく(郷信広博士が最初に提唱した「consistency principle」)安定に仕上げるのは至難の業であるのがすぐわかる。

Rosettaで人の直感をどう使うのかはよくわからないが、このゲームが公開されてから1年くらいの間にコンピュータよりすぐれた結果を出した「直感」をもつ人が現れたのか気になる。いずれにせよ、ふだんタンパク質の立体構造は完成型を眺めるだけだが、このソフトでは自分でいじれるのが楽しい。

「田口英樹のサプリメント」より抜粋
<http://taguchi-hideki.blogspot.com>

(田口 英樹)

1. オフラインでも遊べるが、基本はオンライン。開発元のサーバとデータをやりとりするようになっている。