



CAS IR Grid / 大连化学物理研究所 / 中国科学院大连化学物理研究所

基于可极化力场以及pso优化的蛋白质设计方法

文献类型: 专利

作者 李国辉;张鼎林

发表日期 2014

专利国别 CN

专利号 CN201210563431.X

专利类型 发明

权利人 中国科学院大连化学物理研究所

是否PCT专利 否

中文摘要 本发明涉及基于可极化力场以及pso优化的蛋白质设计方法,包括以下步骤:通过蛋白质设计模板得到若干个蛋白质;对每一个蛋白质进行如下优化:在4n维空间中连续移动的每一个粒子的子向量在rotamerlib中寻找最近的rotamer;然后用这些找到的rotamer构造一个临时的粒子;计算每个临时粒子的适应度,并根据这些临时粒子的适应度更新局部最优粒子以及邻居最优粒子;并更新所有非临时粒子位置速度;通过比较所有邻居最优粒子的位置得到全局最优位置;用粒子群进行侧链构象组合空间搜索得到优化后的蛋白质。本发明使用了pso处理离散问题,利用了pso高效性,采用可极化力场作为评价的基础;并可以在理论上对蛋白质进行改造进行预测,在理论上进行筛选。

公开日期 2014-06-25

申请日期 2012-12-21

语种 中文

专利申请号 CN201210563431.X

源URL [http://159.226.238.44/handle/321008/120397]

专题 大连化学物理研究所_中国科学院大连化学物理研究所

推荐引用方式 李国辉,张鼎林. 基于可极化力场以及pso优化的蛋白质设计方法. 基于可极化力场以及pso优化的蛋白质设计方法.

GB/T 7714 CN201210563431.X. 2014-01-01.

入库方式: OAI收割

来源: [大连化学物理研究所](#)

浏览

86

下载

0

收藏

0

其他版本

除非特别说明,本系统中所有内容都受版权保护,并保留所有权利。

