

총설

단백질 접힘(Protein folding)

한국고등과학원
이주영

계산과학이란 매우 광범위한 분야의 연구 수행을 수반함으로 그 정의가 쉽지 않지만 단순히 글자 그대로 그 뜻을 분석한다면 과학 현상 연구를 computer를 이용하여 이해하려는 학문으로 생각할 수 있다. 이 분야의 광범위함은 오늘날 과학 분야의 다양성과 같다. 계산과학 출현 이전의 과학은 크게 이론과학과 실험과학으로 나눌 수 있고 이론과 실험 과학의 끊임 없는 상호 보완적 feedback은 오늘날 눈부신 과학의 원동력이 되어왔다. 계산과학은 이론과학과 실험과학의 중간정도로 볼 수도 있는데, 그 이유는 계산과학에는 이론과학과 실험과학의 양면성이 있기 때문이다. 영어로 실험연구실을 wet lab(oratory)이라고 부르는 한편 계산과학연구실을 dry lab 혹은 in silico lab 이라고도 부르는데서 그 양면성을 엿볼 수 있다. 계산과학자들은 computer 안에서 모든 이론과 실험을 정립 검토하기 때문이다.

단백질 접힘(Protein Folding)은 계산과학에서 뿐만 아니라 자연과학 전반에 걸쳐서 매우 중요한 문제로 이 문제를 정확히 이해하고 풀 수 있다면 인류에 미칠 그 파급효과는 이루 말할 수 없을 정도로 크다. 이 단백질 접힘 문제는 20 세기 들어서면서 점점 생명현상과 유전정보에 대한 이해가 늘어나면서 대두되기 시작한 문제이지만 이미 수학에서 다루어 왔던 combinatorial optimization 문제의 절정판이라고 볼 수 있기 때문에 더욱 더 과학자들의 흥미를 끌어들였다. 수학에 traveling salesman problem (TSP) 이라는 classic problem 이 있는데 이는 salesman이 처음 출발하는 도시로부터 N 개의 도시를 거쳐 다시 출발지로 돌아오는 $\{(N-1)!/2\}$ 가지의 여정 중에 가장 최단거리를 주는 여정을 찾는 문제로 polynomial time step만의 계산(computation)으로 그 해답을 찾을 수

있는지의 여부가 관심사 중의 하나이고 아직 해결되지 않은 문제이다.

