12-DA03

戸田幹人（奈良女子大学）

生体分子の大規模分子動力学計算に対する時系列解析とその応用

生体分子機能が、揺らぐ環境下、頑健に発現する動力学的機構を解明する

生体分子機能とは、揺らぐ外界の下、刺激に対する応答としての階層的集団運動が、分子自身の非線型動力学により頑健かつ自発的に形成され、それがさらに一連の構造変化・化学反応を動的に誘起すること。

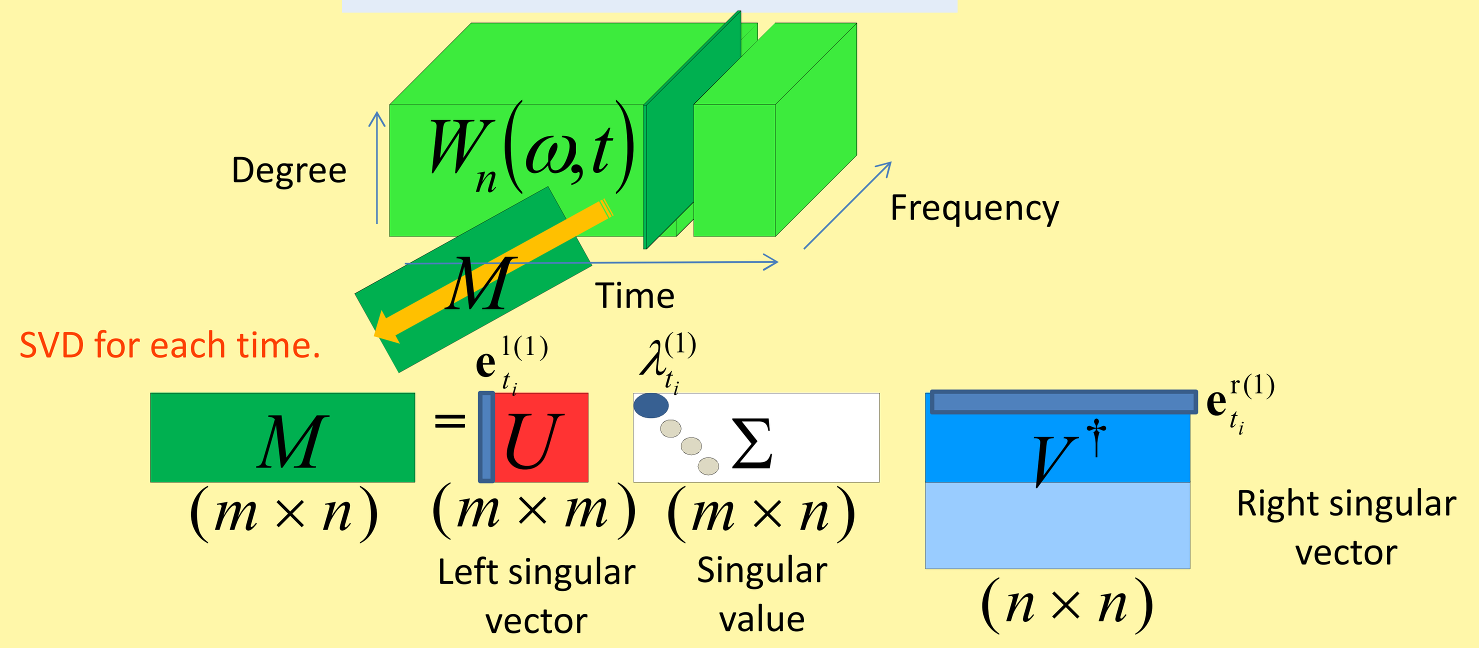
その動力学的機構を理解するため、分子動力学計算で得られる大規模時系列データから、様々な階層的集団運動を抽出し、それらの集団運動の動力学的な特性と機能との関連を明らかにする。

階層的集団運動を抽出する「データマイニング」

タンパク質分子の2次構造・3次構造と階層的集団運動との対応を明らかにし、特に近年新たに提唱されているfly-casting 機構の動力学的側面など、機能発現における「運動と構造」の関連を解明する。

そのために、ウエーブレット変換や特異値分解などを応用し、集団運動を抽出する「データマイニング」の新たな手法を開拓する。左特異ベクトルは空間、右特異ベクトルは周波数の情報を表す。

$$M = U\Sigma V^{\dagger}$$



集団運動の張る線形空間の時間変動

集団運動の張る線形空間は、時々刻々と変動する。その相似性を測る指標として、下記の二つを考えている。

幾何学的相似性（指標１）：$\frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}|\langle u_k, v_l\rangle|^2$

縮約可能性を考慮した相似性（指標２）：

$$\sum_{k=1}^{N}\sum_{l=1}^{N}\lambda_k\mu_l|\langle u_k, v_l\rangle|^2 \Big/ \sum_{k=1}^{N}\lambda_k\mu_k$$

ここで、$\{u_k\}_{k=1}^{N}$ と $\{v_k\}_{k=1}^{N}$ は、それぞれ異なる時刻における集団運動の成すベクトルである。このような指標を用いることで、集団運動の張る線形空間の不変な部分空間の次元と運動方向、あるいは逆に、時間変化する運動方向を抽出できると予想している。

集団運動に対するカーネル解析１：（位相コヒーレンスを考慮するカーネル）

集団運動の非線形な特徴づけを目指して、カーネル関数を導入する。ウエーブレット変換で得られる複素振幅ベクトルに対して、その相似性を表すカーネルを導入する。良く用いられるガウスカーネルは、

$$k_1(W_1,W_2) = \exp(-\|W_1 - W_2\|^2/2\sigma^2)$$

である。ただし振幅を表す複素ベクトルを考えているので、カーネルの位相に関する特性に注目する。ここで導入するカーネルは、

$$k(W_1,W_2) \neq k(W_1,W_2e^{i\theta})$$

に着目すると、位相のずらしに関して不変ではない。これは、周囲の環境などの影響に依る「コヒーレンスの破れ」があれば、「相似ではない」と判断するカーネル関数であると言える。

集団運動に対するカーネル解析2：（位相コヒーレンスを考慮しないカーネル）

集団運動の非線形な特徴づけを目指して、カーネル関数を導入する。上と同様に、ウエーブレット変換で得られる複素振幅ベクトルに対して、その相似性を表すカーネルを導入するが、ここでは位相ずらしに関して不変なカーネル、

$$k_2(W_1,W_2) = \exp(-|\langle W_1|W_2\rangle|^2/2\sigma^2)$$

を考える。このカーネルは、

$$k(W_1,W_2) = k(W_1,W_2e^{i\theta})$$

という不変性を持っており、位相コヒーレンスが破れていても、振動成分の空間方向が同じ向きであれば相似と判断する。

以上の２種類のカーネルを用いたクラスター解析により、位相コヒーレンスの効果が集団運動の特性にどう影響するか、さらに分類された特性の間の時間変化を解析し、線形解析との比較を行う。