

1Pa041

生体分子時系列情報からの状態空間の再構成と主成分解析

神戸大学大学院自然科学研究科

○星野恭子、松永康佑、小松崎民樹

【序】

現在実験の分野では、アンサンブルとしての分子の動きではなく、分子の動きを直接“見る”ことのできる 1 分子測定技術が進展著しい。これらの実験から得られる時系列情報は、我々にこれまでアンサンブルの中に埋もれていた生体分子の新たなダイナミクスの様相を呈示してくれるだろう。しかしながら、それらの時系列情報を如何に解析したら背後のダイナミクスについての有益な情報が抽出できるのであろうか？たとえば、タンパク質 MD シミュレーションでは個々の原子座標のダイナミクス情報から主成分座標などの集団座標の解析を行うことが可能であるが、スカラー量である 1 分子計測時系列情報からこのような集団座標の振る舞いを抽出することは可能であろうか？ Duan&Kollman によって行われた villin headpiece subdomain(36 残基)の 1 μ 秒 MD シミュレーション結果[1]から、1 分子測定実験で見積もることができる N 末端から C 末端の 2 点間距離(末端残基の重心間の距離)の時系列情報を取り出し、我々がこれまで用いてきた多変量統計学ならびに非線形時系列解析の手法を応用することで、実験で得られる時系列データからも同様の集団座標情報を得る時系列解析手法を開発することを目的とした。

【方法】

我々が用いてきた非線形時系列解析の手法(埋め込み論[2])は、あるスカラー量 $s(t)$ の時系列情報から、遅延座標系 $y(t)=(s(t),s(t+\tau),s(t+2\tau),\dots,s(t+(m-1)\tau))$ (ここで、 τ は遅延時間と呼ばれるもので、 m は次元の数を表す)というものを使い、元々の系の多次元状態空間 $x(t)$ と動力学的に同じ性質を持った状態空間 $y(t)$ を再構成する理論である。元々の系の運動が力学的であれば、微分方程式の解の一意性から、ある次元 m から交差の無い状態空間を再構成できるが、運動が確率的であれば次元を上げていっても交差が解けず再構成はできない。これによって規則的な運動と不規則な運動を区別し、運動の次元性を推定することができる[2]。1 μ 秒の villin headpiece subdomain(36 残基)の MD シミュレーション結果[1]において、1 分子計測実験からも見積もることができる N 末端から C 末端の 2 点間距離(N 末端と C 末端の C_{α} ・ C_{α} 間の距離、末端残基の重心間の距離の 2 つを用意した)の時系列情報を遅延座標系に埋め込み、その座標系での主成分を求め、オリジナル全原子座標系での主成分と比較検討をした。また、確認のために、3 次元散逸力学系として知られるローレンツアトラクターについての解析も併せて行った。

【解析結果】

ローレンツアトラクターについて、オリジナル変数の (x,y,z) 座標系に投影した軌道から計算される主成分座標 Q と $x(t)$ 時系列を遅延時間 $\tau=1,5,100$ に対して埋め込んだ遅延座標系における主成分座標 Q^* の時系列を図 1 に示す(図中、実線および破線は Q および Q^* を示している)。 $\tau=1$ のとき遅延座標系における第一主成分と (x,y,z) 座標系での第一主成分はほぼ一致するが、第二,三主成分では一致が悪くなる(これは

τ が小さすぎると揺らぎの小さい成分に由来する情報が十分得られないことに起因する)。また、 $\tau=100$ では両空間の第一、二、三主成分の一致は殆ど見られない。一方、(最適な値として知られる) $\tau=5$ のとき両者の第一、二、三主成分はいずれも良い一致を示しており、このように埋め込みがうまくいくときは、ひとつの時系列情報から状態空間の主成分ダイナミクスを再構成できることが分かる。1 μ 秒の villin headpiece subdomain の MD シミュレーション結果に対する N 末端から C 末端の 2 点間距離の時系列情報に基づく(埋め込まれた)遅延座標系での主成分座標とオリジナル全原子座標系での主成分座標の結果については当日発表する。

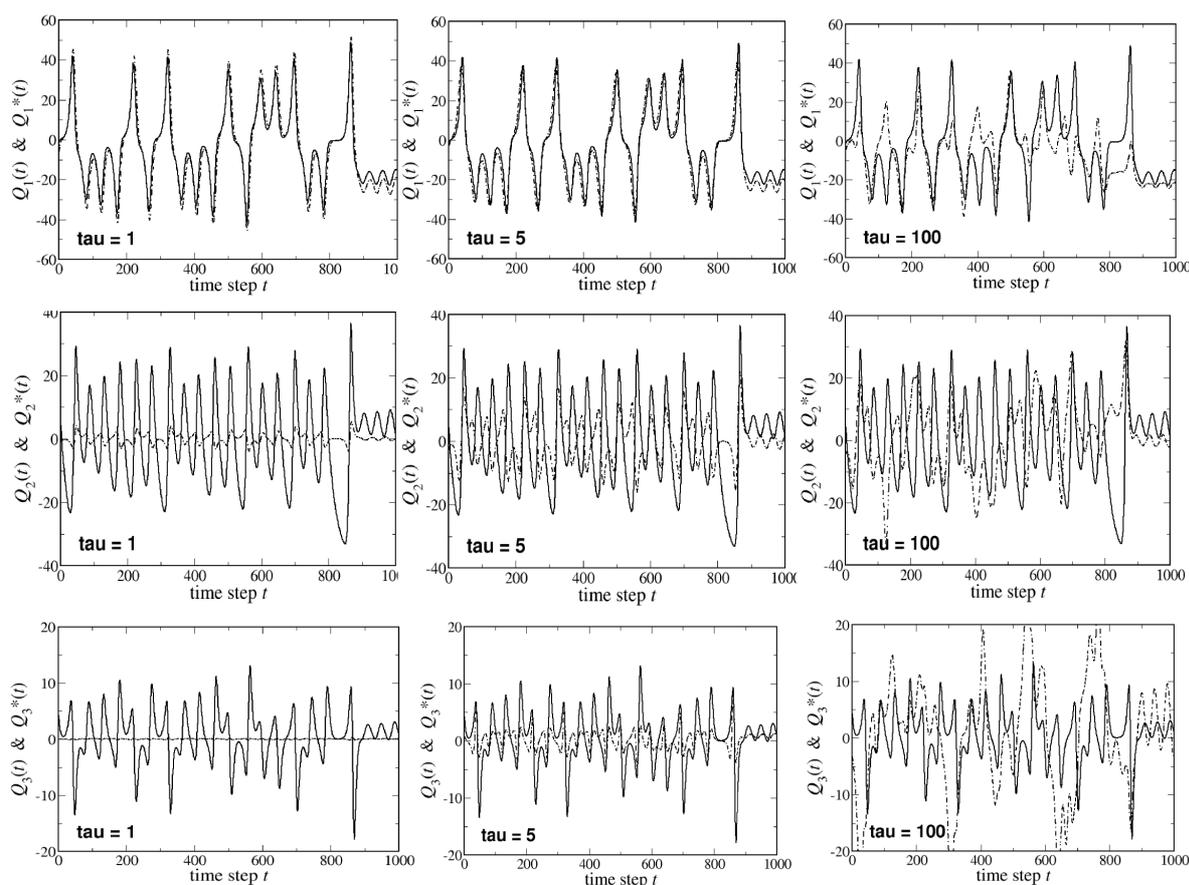


図 1 ローレンツアトラクターの (x,y,z) 座標系および $\tau=1,5,100$ に対して埋め込んだ遅延座標系における主成分座標 Q および Q^*

【参考文献】

- [1] Y. Duan, P. A. Kollman *Science* **282**, 740 (1998).
- [2] H. D.-I. Abarbanel, *Analysis of Observed Chaotic Data*, Springer-Verlag New York, Inc. (1996); Y. Matsunaga, K. S. Kostov and T. Komatsuzaki, *Journal of Physical Chemistry A* **106**,10898(2002)