構造遷移グラフに基づくタンパク質の非線形モーション抽出

安富祖 仁†, 峯田 克彦††, 遠藤 俊徳††

†北海道大学知識メディアラボラトリ ††北海道大学大学院情報科学研究科

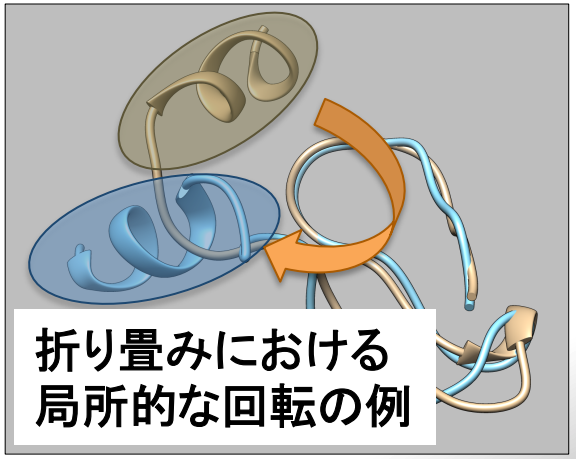
ポスター番号D-34

分子動力学法(Molecular Dynamics, MD)でタンパク質の折り畳みなどのプロセスがシミュレーション可能となった。

シミュレーション結果から生体内プロセスにとって**重要なモーションを抽出**

主成分分析(PCA)を用いたモーション抽出が行われてきた。

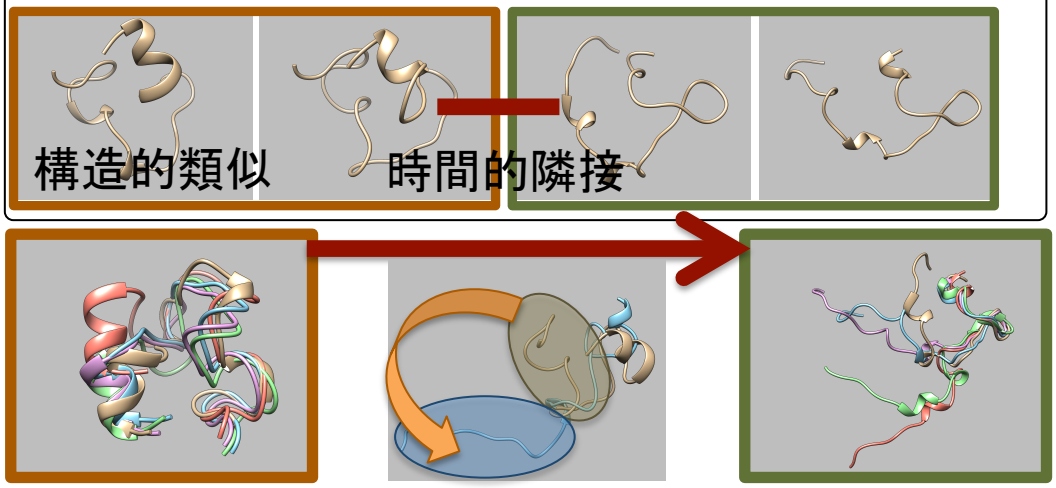
局所的な回転のような**非線形モーション抽出が困難**となる。



折り畳みにおける局所的な回転の例

構造遷移グラフを用いた非線形モーション抽出

タンパク質モーションデータ



1. タンパク質構造間距離を用いて**クラスタリングを行う**。
2. クラスタを頂点、構造間の時間的隣接関係を有向辺とする**有向グラフを構成する**。
3. クラスタ内のモーションはPCAで抽出できる。**クラスタ間変動を可視化することで、非線形モーションを抽出する**。