



分子の“心拍数 (=パルス)” から、分子の“病状”を客観的に判定するための 新しいアルゴリズムの開発に初めて成功

研究成果のポイント

- ・ 時系列データから分子の状態を客観的に判定・予測する新しいアルゴリズムの開発に初めて成功。
- ・ 反応する相手の基質分子の濃度に依存して分子の状態のネットワークが動的に変化することを解明。
- ・ データ科学に基づいた新たな効率的な実験指針に大きな期待。

研究成果の概要

北海道大学電子科学研究所（三澤弘明所長）分子生命数理研究分野の李 振飈准教授、小松崎民樹教授らの研究グループは、（例えば、開いているか／閉じているか、結合しているか／離れているか、といった）有限個で連続的でない飛び飛びの値をもつ分子の時系列データから、分子の状態をネットワークという表現を用いて客観的に評価し、分子が将来取り得るデータ出力を予想する新しい解析手法を開発することに成功しました。データ科学に基づいた効率的な実験指針を新たに提供できるものとして高く期待されています。

論文発表の概要

研究論文名： Aggregated Markov Model Using Time Series of Single Molecule Dwell Times with Minimum Excessive Information（最小の過剰情報量をもつ一分子滞在時間の時系列データによる Aggregated マルコフモデル）

著者： C. B. Li and T. Komatsuzaki（北海道大学電子科学研究所）

公表雑誌： Physical Review Letters

公表日： 日本時間 2013 年 8 月 3 日（土）（米国東部時間： 2013 年 8 月 2 日（金））

研究成果の概要

（背景）

通常、医師は患者の心拍数の時系列データを測ることにより患者の病状を診察したりします。仮に、その時系列データ以外の、例えば、性別、年齢、体温、既往症などの如何なる情報も得られないとしたとき、どのようにして客観的に患者の状態を判断できるのでしょうか？時系列データは一次元の、非常に限定された情報であるため、それらの評価には恣意性が入り込む余地が高いことが知られていました。

(研究手法と成果)

李准教授らは、分子の状態を（WWWや人の繋がりネットワークなどと同じ）ネットワークという表現を用いて表し、分子の時系列データから、ネットワークを構成するノード（WWWではURL、人間社会では人）がどれくらいの数存在し、どのノードとどのノードが強くつながっているかを客観的に評価する数学的な手法を開発しました。李准教授らは、考え得るすべてのネットワークにおいて、観測されたデータが保証していない情報がどれくらい組み込まれているかを定量化する新しい指標を考案し、その指標を最小化する（データに忠実、かつ最も客観的な）ネットワークを時系列データから抽出するアルゴリズムを開発することに世界で初めて成功しました。李准教授らは、手始めにこの手法を一分子酵素反応の一分子計測データ（Englishら *Nature Chem. Bio.* 2, 87 (2006)）の解析に適用しました。その結果、反応する相手の基質分子の濃度に依存してネットワークが動的に変化することや、本研究成果で得られるネットワークを使うことによって、どのようなデータを取得すると正しいネットワークに最も近い答えを導き得るかに関する知見が得られることなどを明らかにしました。

(今後への期待)

現在、この解析手法は、分子の時系列データからできるだけ客観的に分子の状態を同定し、分子が将来取り得る状態を予想するとともに、実際にデータを計測する実験研究者に対してデータ取得上の新たな指針の提案にも繋がるものとして期待されています。

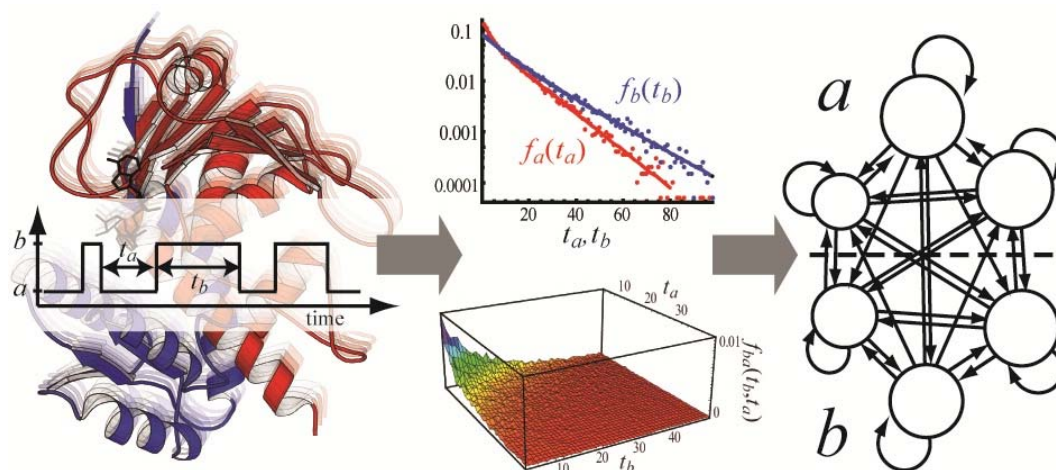


図1：(左)有限個で連続的でない飛び飛びの値をもつ1分子時系列データ。(中)時系列データがもつ統計情報（滞在時間統計）。(右)データによって保証されていない情報を最小に抑えた最も客観的なネットワーク（各ノードは分子が取り得る個々の状態を、各矢印付きのエッジはその状態間の遷移を表している）。

※本研究成果は文部科学省科学研究費・新学術領域「少数性生物学」、ヒューマン・フロンティア・サイエンス・プログラム（本部：フランス・ストラスブール）などの支援を受けました。

お問い合わせ先

所属・職・氏名：北海道大学電子科学研究所・教授 小松崎 民樹（こまつぎき たみき）
TEL：011-706-9434 FAX：011-706-9434 E-mail：tamiki@es.hokudai.ac.jp
ホームページ：http://mlns.es.hokudai.ac.jp