

# 科学研究費助成事業(科学研究費補助金)研究成果報告書

平成 25 年 5 月 24 日現在

機関番号: 14602

研究種目:挑戦的萌芽研究 研究期間:2010 ~ 2012

課題番号: 22654047

研究課題名(和文)揺らぐ環境にある生体分子における機能発現機構の「頑健性」の解明

研究課題名 (英文)

Research on the mechanism of robust manifestation of biological functions under fluctuating environment

研究代表者

戸田 幹人 (TODA MIKITO)

奈良女子大学・自然科学系・准教授

研究者番号: 70197896

#### 研究成果の概要(和文):

タンパク質分子の分子動力学データに対し、ウエーブレットによる集団運動の抽出、抽出された集団運動に対する次元縮約、相空間の不変集合に基づく集団運動の解析を遂行した。これらの手法を、具体的な生体分子の分子動力学データに応用し、生体分子の分子機能を動的メカニズムに依拠して解明する研究を推進しつつある。

# 研究成果の概要 (英文):

We have developed methods to extract slow collective motions using wavelet transformation, to find a low-dimensional description of these collective motions and to analyze them using invariant manifolds in the phase space. We have applied these methods to numerical data obtained by molecular dynamics simulation, and are revealing how molecular functions are related to collective motions of biomolecules.

# 交付決定額

(金額単位:円)

	直接経費	間接経費	合 計
2010 年度	900, 000	0	900, 000
2011 年度	900, 000	270, 000	1, 170, 000
2012 年度	900, 000	270, 000	1, 170, 000
年度			
年度			
総計	2, 700, 000	540, 000	3, 240, 000

研究分野: 非線形物理

科研費の分科・細目:物理学・数理物理・物性基礎

キーワード:ウエーブレット・不変集合・分子機能・生体分子・統計的因果推論・階層性

## 1. 研究開始当初の背景

近年の一分子計測実験の発展は、生体高分子の運動の非定常性を明かにしている。非平衡非定常な環境の下で生体分子の機能発現がいかに可能なのか、分子における階層的集団運動が動的に連関して生起する機構の解明が問われる。研究代表者の戸田は、大自由度カオス系に基づく非平衡反応動力学の構築(Adv.Chem.Phys.130A(2005)337)と、生体分子の分子動力学データから機能に寄与

する集団運動の抽出する試みを行ってきた。(櫻井・戸田・渕上・木寺、「タンパク質分子の分子動力学に対する時系列解析 I・II・III」、日本物理学会)。生体分子の分子動力学計算・解析では、階層的アルゴリズムや階層的データの「データマイニング」が不可欠であり、計算科学の高見(Multi-physics extention of OpenFMO framework、AIP Conference Proceedings, 963, 122-125, 2007)、統計的因果推論の福水(Kernel

dimension reduction in regression, Ann. Stat., 37, 1871-1905, 2009)を研究分担者として新たな展開を計画するに至った。

#### 2. 研究の目的

本研究の目的は、非平衡非定常な環境において、生体分子の機能が頑健に発現する動力学的機構を解明する事である。生体分子の機能とは、揺らぐ外界のもとで、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である。本研究では、計算科学・統計科学・非線型物理の学際的共同研究により、

- (1)分子動力学計算で得られる大規模時系 列データから階層的集団運動を抽出する「データマイニング」の開拓、
- (2)「データマイニング」で抽出された階層的集団運動に対して相関・因果関係を解析する統計的因果推論の構築、
- (3)大自由度非線型力学系の不変集合解析 による「粗視化」とそれに基づく階層的アル ゴリズムの開発

を遂行し、その成果を結集して分子機能が頑 健に発現する動力学的過程を解明する。

## 3. 研究の方法

本研究では生体分子における階層的集団運 動の動力学の解明に向けて、統計科学・非線 型物理の近年の成果をさらに発展させ、その 結果を具体的な分子動力学データに適応す ることで理論的な有効性を検証する。階層的 な集団運動の抽出に応用される「データマイ ニング」の方法として、ウエーブレット解 析・非線形主成分解析・独立成分解析・カー ネル相関解析・特異値分解・ランダム行列理 論などがあるが、これらの手法は単独で用い られることはあっても、系統的に組合されて 応用される事例はまだほとんどない。さらに 本研究では、統計科学における統計的因果推 論、大自由度力学系の成果である不変集合解 析など近年の成果をさらに発展させること で、生体分子における階層的集団運動におけ る機能発現の頑健なメカニズムを解明する。 以上のような研究は、計算科学・統計科学・ 生物物理・非線型物理など広い関連分野の成 果を結集する必要があり、国内外の研究者と の学際的共同研究として遂行する。

# 4. 研究成果

(1)分子動力学計算で得られる大規模時系列データから階層的集団運動を抽出する「データマイニング」の開拓:タンパク質分子の分子動力学データに対し、ウエーブレットにより集団運動的な振動を取り出すことができた。さらに抽出された集団運動に対して、その動的な挙動の解析に向け、特異値分解などの手法を駆使し、集団運動の動力学を抽出する「データマイニング」

の方法を開拓しつつある。

- (2)「データマイニング」で抽出された階層的集団運動に対して相関・因果関係を解析する統計的因果推論の構築:従来、時系列の因果性の解析は、定常性など限定的な状況でなければ困難だと思われてきた。しかし近年、福水らが中心となりカーネル非線形回帰分析にもとづいて因果関係を推定する方法論が展開されている。本研究では、これらの理論に依拠しながら、実際のデータ解析で重要となる原像問題・カーネル最適化問題に取り組み、従来の方法が不十分であることを明らかにした。
- (3) 大自由度非線型力学系の不変集合解析による「粗視化」とそれに基づく階層的アルゴリズムの開発:大自由度力学系における階層的集団運動の特徴、時空間スケールにおける階層性の起源など、非平衡現象における集団運動を不変集合に基づいて現象でした。特に「法双曲性の破れによる分岐現象」の存在を明らかに、この分岐現象が、反応座標の切り替わり等、力学系の階層構造の変化に帰結することを明らかにした。

## 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

〔雑誌論文〕(計30件)

- Measuring dynamical randomness of quantum chaos by statistics of Schmidt eigenvalues, H. Kubotani, S.Adachi and M. Toda, Physical Review E, accepted and to be published.
- 2. 大自由度力学系の集団運動抽出に向けた問題提起-化学反応動力学の観点から-寺本央、<u>戸田幹人</u>、小松崎民樹 数理研講究録 Vol.1827, 154-170, 2013 http://www.kurims.kyoto-u.ac.jp/~kyodo/ kokyuroku/contents/pdf/1827-15.pdf
- 3. Fluctuations of Healthy and Unhealthy Heartbeat Intervals, Boon Leong Lan and Mikito Toda, Europhysics Letters, Vol. 102, 18002 (6pages), 2013, DOI: 10.1209/0295-5075/102/18002
- 4. Time series analysis of molecular dynamics simulation using wavelet Mikito Toda, PROCEEDINGS OF THE 8th International Summer School/Conference LET'S FACE CHAOS THROUGH NONLINEAR DYNAMICS, Vol. 1468, 367-374, 2012 DOI: 10.1063/1.4745595
- 5. Nanosecond simulations of the dynamics of C60 excited by intense near-IR laser pulses: Impulsive Raman excitation, rearrangement, and fragmentation, Naoyuki Niitsu, Miyu Kikuchi, Hayato Ikeda, Kaoru Yamazaki, Manabu Kanno,

- Hirohiko Kono, Koichiro Mitsuke, Mikito Toda, and Katsunori Nakai, Journal of Chemical Physics, Vol. 136, 164304(12 pages), 2012, DOI: 10.1063/1.4704896
- 6. Toshiya <u>Takami</u> and Akira Nishida, Parareal Acceleration of Matrix Multiplication, Advances in Parallel Computing, Vol. 22, pp. 437-444 (2012), DOI: 10.3233/978-1-61499-041-3-437
- (2012)С. K. Fukumizu, Leng Gradient-based kernel method for feature extraction and variable selection. Advances Neura1 inInformation Processing Systems 25 (NIPS2012), pp. 2123-2131.
  - http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/research.html.
- 8. K. Muandet, <u>K. Fukumizu</u>, F. Dinuzzo, B. Schoelkopf. (2012) Learning from Distributions via Support Measure Machines.
  - Advances in Neural Information Processing Systems 25 (NIPS2012), pp. 10-18.
  - http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/research.html.
- 9. A. Gretton, B. Sriperumbudur, D. Sejdinovic, H. Strathmann, S. Balakrishnan, M. Pontil, <u>K. Fukumizu</u> (2012) Optimal kernel choice for large-scale two-sample tests.
  - Advances in Neural Information Processing Systems 25 (NIPS2012), pp. 1214-1222.
  - http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/resear ch.html.
- B. Sriperumbudur, <u>K. Fukumizu</u>, A. Gretton, B. Schoelkopf, G. Lanckriet (2012) On the empirical estimation of integral probability metrics.
  - Electronic Journal of Statistics 6, 1550-1599.
  - http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/resear ch.html.
- 11. <u>高見利也</u>,藤崎弘士,複雑量子系の最 適制御理論、日本医科大学紀要,第41号, 1-24(2012)
- 12. Analysis of motion features for molecular dynamics simulation of proteins, M. Kamada, M. Toda, M. Sekijima, M. Takada and K. Joe, Chem. Phys. Lett., Vol. 502 (2011), pp. 241-247,
- DOI: 10.1016/j.cplett.2010.12.028
- 13. A dynamical switching of a reaction coordinate to carry the system through to a different product state at high

- energies, H. Teramoto, <u>M. Toda</u> and T. Komatsuzaki, Physical Review Letters, Vol. 106(2011) 054101,
- DOI: 10.1103/PhysRevLett.106.054101
- 14. Asymptotic analysis of singular values of rectangular complex matrices in the Laguerre and fixed-trace ensembles, S. Adachi, H. Kubotani and M. Toda, Journal of Physics A, Vol. 44(2011), 292002 (8 pages),
  - DOI: 10.1088/1751-8113/44/29/292002
- 15. Non-Brownian Phase Space Dynamics of Molecules, the Nature of their Vibrational States, and non-RRKM Kinetics, D. M. Leitner, Y. Matsunaga, A. Shojiguchi, C-B. Li, T. Komatsuzaki, and M. Toda, Adv. Chem. Phys., Vol. 145(2011), pp. 83-122,
  - DOI: 10.1002/9781118087817.ch3
- 16. Dynamical Reaction Theory based on Geometric Structures in Phase Space, S. Kawai, H. Teramoto, C-B. Li, T. Komatsuzaki and M. Toda, Adv. Chem. Phys., Vol. 145(2011), pp. 123-169, DOI: 10.1002/9781118087817.ch4
- 17. Ergodic Problems for Real Complex Systems in Chemical Physics, T. Komatsuzaki, A. Baba, S. Kawai, M. Toda, J. E. Straub, and R. S. Berry, Adv. Chem. Phys., Vol. 145 (2011), pp. 171-220,
  - DOI: 10.1002/9781118087817.ch5
- 18. B. Sriperumbudur, <u>K. Fukumizu</u>, G. Lanckriet (2011) Learning in Hilbert vs. Banach Spaces: A Measure Embedding Viewpoint. *Advances in Neural Information Processing Systems 24 (NIPS2011)* http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/research.html.
- 19. <u>K. Fukumizu</u>, L. Song, A. Gretton (2011) Kernel Bayes' Rule. *Advances in Neural Information Processing Systems 24* (NIPS2011)
- http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/researc
- 20. Yuichi Shiraishi, Kenji Fukumizu, (2011) Statistical approaches to combining binary classifiers for multi-class classification, Neurocomputing, 74, (5), Pages 680-688. http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/research.html.
- 21. Bharath K. Sriperumbudur, <u>Kenji</u>
  <u>Fukumizu</u>, Gert R.G. Lanckriet (2011)
  Universality, Characteristic Kernels and
  RKHS Embedding of Measures; (Jul2011.

  Journal of Machine Learning Research, 12

2389-2410

http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/research.html.

- 22. 押川雄大,小林泰三,森江善之,<u>高見</u>利也,青柳睦,「連成・連携計算によるデータ量削減の評価」情報処理学会研究報告2011-HPC-132(4), 1-8, 2011.11
- 23. <u>高見利也</u>,西田晃,「時間方向並列化の 線形計算への適用可能性」情報処理学会研 究報告 2011-HPC-131(6),1-8,2011.10
- 24. 押川雄大, 小林泰三, 森江善之, <u>高見</u> <u>利也</u>, 青柳睦, 「ヘテロジニアスな並列計 算環境を応用した連成・連係計算の提案」 情報処理学会研究報告 2011-HPC-130(20), 1-7, 2011.07
- 25. <u>高見利也</u>, 戸田幹人, 福水健次, 「一次 データを保存しない大規模科学計算の可 能性」情報処理学会研究報告 2011-HPC-129(3), 1-8, 2011.03
- 26. Watanabe, Y. and <u>Fukumizu</u>, <u>K</u>. (2010) New graph polynomials from the Bethe approximation of the Ising partition function *Combinatorics*, *Probability and Computing*. Published online (June, 2010) http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/researc h.html.
- 27. Bharath K. Sriperumbudur, Arthur Gretton, <u>Kenji Fukumizu</u>, Bernhard Scholkopf, Gert R.G. Lanckriet. (2010) Hilbert Space Embeddings and Metrics on Probability Measures.

Journal of Machine Learning Research. 11 (Apr):1517-1561.

http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/research.html.

28. Sriperumbudur, B., <u>K. Fukumizu</u>, A. Gretton, G. Lanckriet and B. Scholkopf. Kernel Choice and Classifiability for RKHS Embeddings of Probability Distributions.

Advances in Neural Information Processing Systems 22, 1750-1758, MIT Press (2010)

http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/research.html.

29. Gretton, A., Z. Harchaoui, <u>K. Fukumizu</u>, B. SriperumbudurA Fast, Consistent Kernel Two-Sample Test. .

Advances in Neural Information Processing Systems 22, 673-681, MIT Press (2010)

http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/research.html.

30. Watanabe, Y. and <u>K.Fukumizu</u>. Graph Zeta Function in the Bethe Free Energy and Loopy Belief Propagation.

Advances in Neural Information

Processing Systems 22, 2017-2025, MIT Press (2010) http://www.ism.ac.jp/~fukumizu/researc h.html.

## [学会発表] (計 45件)

- 1. 生体分子の分子動力学時系列データに対する統計解析 4, 日本物理学会年会, 2013/03/29、広島大学, <u>戸田幹人</u>, <u>高見</u> 利也, <u>福水健次</u>, 菊地浩人, 藤崎弘士
- 2. シグナル伝達に関与する PDZ ドメインの分子動力学データに対する時系列解析 日本物理学会年会,2013/03/29広島大学, 岸田直子,藤崎弘士,戸田幹人
- 3. 大域結合振動子系における遷移現象 V 日本物理学会年会,2013/03/27 広島大学,甲谷里奈,郡宏,佐藤譲,島 伸一郎,戸田幹人
- 4. 生体分子の分子動力学に対する時系列解析—集団運動の揺らぎと構造変化の関係を探る—III, 日本物理学会年会2013/03/27,広島大学,冨士香奈,関嶋政和,藤崎弘士,戸田幹人
- 5. 法双曲的不変多様体崩壊の量子的兆候 日本物理学会年会,2013/03/26広島大学, 寺本央,<u>戸田幹人</u>,小松崎民樹
- 6. Stationary Lagrangian Coherent Structure による化学反応動力学の理解 日本化学会第 93 春季年会,立命館大学,2013/03/23,寺本 央・戸田 幹人・小松 崎 民樹
- 7. Time-series analysis for protein dynamics using discrete wavelet transform with kernel canonical correlation analysis, Biophysical Society of Japan2012/09/22, Nagoya Univ., Mayumi Kamada, Mikito Toda, Tatsuya Akutsu
- 8. The time series analysis of molecular dynamics data about PDZ domain in synapse, Biophysical Society of Japan 2012/09/22, Nagoya Univ., Naoko Kishida, Hiroshi Fujisaki, Mikito Toda
- 9. Time-series analysis of molecular dynamics: Conformational change and dynamics of collective behavior Biophysical Society of Japan 2012/09/22, Nagoya Univ.,
  Kana Fuji, Masakazu Sekijima,
  Hiroshi Fujisaki, Mikito Toda
- 10.シナプス結合に関与する PDZ ドメインの 分子動力学データに対する時系列解析 日本物理学会秋期大会 2012/09/21、横浜 国大、岸田直子,藤崎弘士,戸田幹人
- 11. 生体分子の分子動力学に対する時系列解析-集団運動の揺らぎと構造変化の関

- 係を探る-II 日本物理学会秋期大会 2012/09/20、横浜国大,富士香奈,関嶋 政和,藤崎弘士,<u>戸田幹人</u>
- 12. 分子の階層モデルによる量子ダイナミクス3日本物理学会秋期大会2012/09/20、横浜国大、藤崎弘士、菊地浩人、戸田幹人、高見利也
- 13. 生体分子の分子動力学時系列データに対する統計解析 3, 日本物理学会秋期大会 2012/09/20、横浜国大, <u>戸田幹人</u>, <u>高見</u>利也, 福水健次, 菊地浩人, 藤崎弘士
- 14. 大域結合振動子系における遷移現象 III 日本物理学会秋期大会, 2012/09/19、横 浜国大, 甲谷里奈, 郡宏, 佐藤譲, 島伸 一郎, 戸田幹人
- 15. Collective vs individual motions of biomolecules, International Workshop: Physics of information, information in physics, and the demon, Invited talk, 2012/06/29, Institute of Molecular Science, Okazaki, Japan, Mikito Toda
- 16. 藤崎弘士, 菊地浩人, <u>戸田幹人</u>, <u>高見利</u> 也, 分子階層モデルを使った量子ダイナ ミクス II, 26pAH-7, 日本物理学会年会, 2012. 3. 26 関西学院大学.
- 17. 甲谷里奈, 郡宏, 佐藤譲, 島伸一郎, <u>戸</u> <u>田幹人</u>, 大域結合振動子系における遷移 現象 II, 25pPSA-32, 日本物理学会年会, 2012.3.25, ポスター. 関西学院大学.
- 18. <u>戸田幹人</u>,<u>高見利也</u>,<u>福水健次</u>, 菊地浩 人,藤崎弘士,生体分子の分子動力学時 系列データに対する統計解析 2,24pAA-5, 日本物理学会年会,2012.3.24. 関西学院 大学.
- 19. 寺本央, <u>戸田幹人</u>, 小松崎民樹, 局所スペクトルを用いた大自由度力学系の解析, 24pAE-15, 日本物理学会年会, 2012.3.24.
- 20. 高見利也,藤崎弘士,カオス系の最適制 御問題における量子古典対応2,24pAG-3, 日本物理学会年会,2012.3.24関西学院大 学.
- 21. 冨士香奈, 関嶋政和, 藤崎弘士, <u>戸田幹</u> 人, 生体分子の分子動力学に対する時系 列解析-集団運動の揺らぎと構造変化の 関係を探る-, 24pAA-6, 日本物理学会年 会, 2012.3.24. 関西学院大学.
- 22. M. Toda, "Fractional behavior in chemical reaction processes involving complex systems", International Workshop on Anomalous Statistics, Generalized Entropies, and Information Geometry, March 6-10, 2012, Nara, Japan, Invited talk.
- 23. 富士香奈、関嶋政和、<u>戸田幹人</u>、「分子動力学の時系列データ解析-生体分子の複雑な動きとその意味-」2011. 9. 24 日本

- 物理学会 秋季大会、領域 12 講演番号: 24aPS-20 (ポスター). 富山大学.
- 24. <u>戸田幹人</u>,<u>高見利也</u>,<u>福水健次</u>,菊地浩人,藤崎弘士「生体分子の分子動力学時系列データに対する統計解析」2011.9.23 日本物理学会 秋季大会、領域12 講演番号: 23aGN-5.富山大学.
- 25. <u>高見利也</u>, 藤崎弘士、「カオス系の最適制御問題における量子古典対応」 2011.9.23 日本物理学会 秋季大会、領域 11 講演番号: 24aGT-4(口頭).富山大学.
- 26. 寺本央、<u>戸田幹人</u>、小松崎民樹、「法双曲不変多様体崩壊の量子力学的兆候」 2011.9.22 日本物理学会 秋季大会、領域 11,22pGS-13. 富山大学.
- 27. 甲谷里奈, 郡宏, 佐藤譲, 島伸一郎, <u>戸</u> 田幹人, 「大域結合位相振動子系における遷移現象について」2011.9.22 日本物理 学会 秋季大会、領域 11 講演番号: 22pPSB-17 (ポスター). 富山大学.
- 28. <u>高見利也</u>, 下川倫子, 藤崎弘士, 小林泰 三「遅いダイナミクスにより生成される 表面パターン」2011.9.22 日本物理学会 秋季大会、領域11 講演番号: 22pPSB-73 (ポスター).富山大学.
- 29. 藤崎弘士, 菊地浩人, <u>戸田幹人</u>, <u>高見利也</u>、「分子階層モデルを使った生体分子の量子ダイナミクス」2011.9.21 日本物理学会 秋季大会、領域 12 講演番号:21p,JF-10.富山大学.
- 30. K. Fuji, M. Sekijima and M. Toda, "Time-series analysis of molecular dynamics: Conformational change and movement of the side chain", 2011.9.18 第 49 回日本生物物理学会年会 講演番号 310912 (英語・ロ頭). 兵庫県立大学.
- 31. M. Kamada, <u>M. Toda</u>, M. Hayashida, A. Robertazzi, E. W. Knapp and T. Akutsu, "Exploring feature extraction method for time series data obtained by molecular dynamics simulation", 2011. 9. 18 第 49 回日本生物物理学会年会 講演番号 3I0924(英語・口頭). 兵庫県立 大学.
- 32. Toshiya Takami, Michiko Shimokawa, Hiroshi Fujisaki, and Taizo Kobayashi, "Coffee Patterns Generated by Slow Dynamics", Dynamics Days Europe 2011, 2011. 09. 15, poster presentation. Oldenburg, Germany.
- 33. <u>Toshiya Takami</u> and Akira Nishida, "Parareal Acceleration of Matrix Multiplication", ParCo2011, 2011.09.01, oral presentation. Ghent, Belgium.
- 34. <u>M. Toda</u>, Time series analysis using wavelet for molecular dynamics simulation of proteins, 8th

- International Summer School/Conference LET'S FACE CHAOS THROUGH NONLINEAR DYNAMICS, Maribor, Slovenia, 2011/July/09, Invited talk.
- 35. K. Fuji and M. Toda, Time series analysis of molecular dynamics simulation: Collective behavior and configuration changes, 8th International Summer School/Conference LET'S FACE CHAOS THROUGH NONLINEAR DYNAMICS, Maribor, Slovenia, 2011 June 26th July 10<sup>th</sup>, poster presentation.
- 36. 富士香奈, 戸田幹人, 関嶋政和, 分子動力学に関する構造変化と運動変化、日本物理学会 2011 年年会ポスター発表, 26pPSB31(学会は震災のため中止となったが, 発表は成立と認定. 以下 2011 年年会の発表は同様).
- 37. <u>戸田幹人</u>,<u>高見利也</u>,<u>福水健次</u>,分子動力学データに対する統計解析,日本物理学会 2011 年ポスター発表,28aPS86.
- 38. Quantum energy transfer for biomolecules, H. Fujisaki, H. Kikuchi and <u>M. Toda</u>, 日本物理学会 2011 年口頭発表, 27pGV5.
- 39. <u>高見利也</u>,藤崎弘士,多準位量子状態の 最適制御と半古典極限,日本物理学会 2011年口頭発表,26pTE7.
- 40. 寺本 央,<u>戸田幹人</u>,小松崎民樹,法双 曲的不変多様体の崩壊と生成:局所から大 域へ,日本物理学会 2011 年口頭発表, 28aTC9.
- 41. <u>戸田幹人</u>,大自由度系の集団運動:生体 分子の分子動力学計算を例として,研究 集会 Dynamics in Complex Systems (北大 2011年3月7日-9日),招待講演.
- 42. 分子動力学データに対する統計解析システムの構築と応用, 高見利也, 戸田幹人, 福水健次, 2011 年ハイパフォーマンスコンピューティングと計算科学シンポジウム(HPCS2011), (2011 年1月 18-19 日, 産業技術総合研究所) ポスター P1-4.

- 43. M. Toda, Phase Space Structures for Systems of Large Degrees of Freedom, Slovenia-Japan Seminar on Nonlinear Science (Kansai, 2010), 2010 Nov 8<sup>th</sup>-9<sup>th</sup>, Osaka Prefecture University.
- 44. K. Fuji, <u>M. Toda</u> and M. Sekijima, Time Series Analysis Using Wavelet for Molecular Dynamics Simulation of Proteins: A case for chignolin, the first designed Protein, Slovenia-Japan Seminar on Nonlinear Science (Kansai, 2010), 2010 Nov 8<sup>th</sup>-9<sup>th</sup>, Osaka Prefecture University.
- 45. M. Toda, Time Series Analysis using Wavelet toward Molecular Dynamics Simulation of Proteins, The 13<sup>th</sup> Slovenia-Japan Seminar on Nonlinear Science and Waseda AICS symposium on nonlinear and nonequilibrium phenomena in complex systems, 2010, Nov 4<sup>th</sup>-6<sup>th</sup>, Waseda University.

〔図書〕(計 2件)

- 1. 力学系理論による化学反応論の理解と発展、寺本央、<u>戸田幹人</u>、小松崎民樹、高橋陽一郎編集、高等研より出版予定
- 2. カーネル法入門、<u>福水健次</u>、朝倉書店、2010年、236 ページ.

〔その他〕 ホームページ等

http://minnie.disney.phys.nara-wu.ac.jp/~toda/index\_j.html

- 6. 研究組織
- (1)研究代表者

戸田 幹人( TODA MIKITO ) 奈良女子大学・自然科学系・准教授 研究者番号:70197896

(2)研究分担者

高見 利也( TAKAMI TOSHIYA ) 九州大学・情報基盤研究開発センター・准 教授

研究者番号:10270472

福水 健次 ( FUKUMIZU KEN,JI )

統計数理研究所・数理推論研究系・教授

研究者番号:60311362