

P037 化合物-タンパク質活性空間における特徴選択

新島 聡, 奥野 恭史

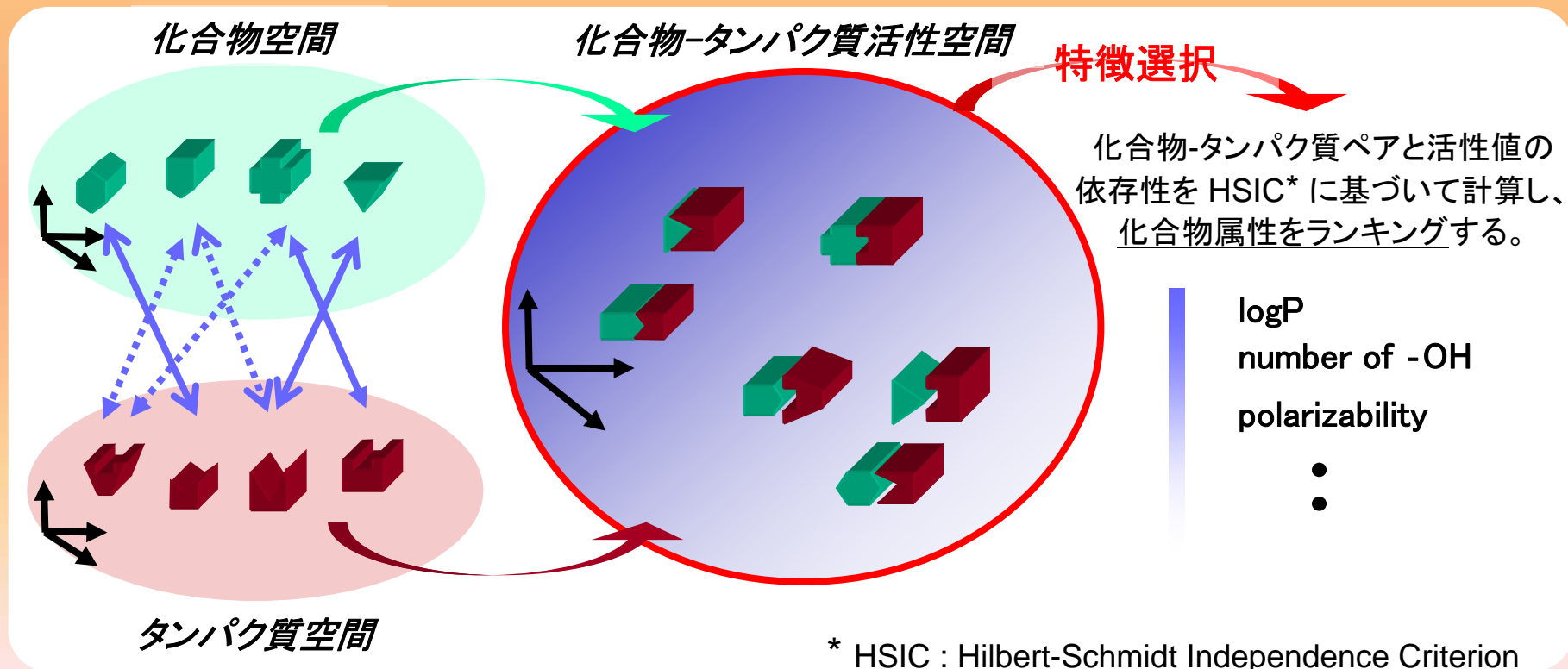
京都大学大学院薬学研究科

{niiijima,okuno}@pharm.kyoto-u.ac.jp

目的

カーネル関数を介して構成される化合物-タンパク質活性空間において特徴選択を可能とする効率的アルゴリズムを提案し、活性予測に寄与する化合物属性を同定する。

方法

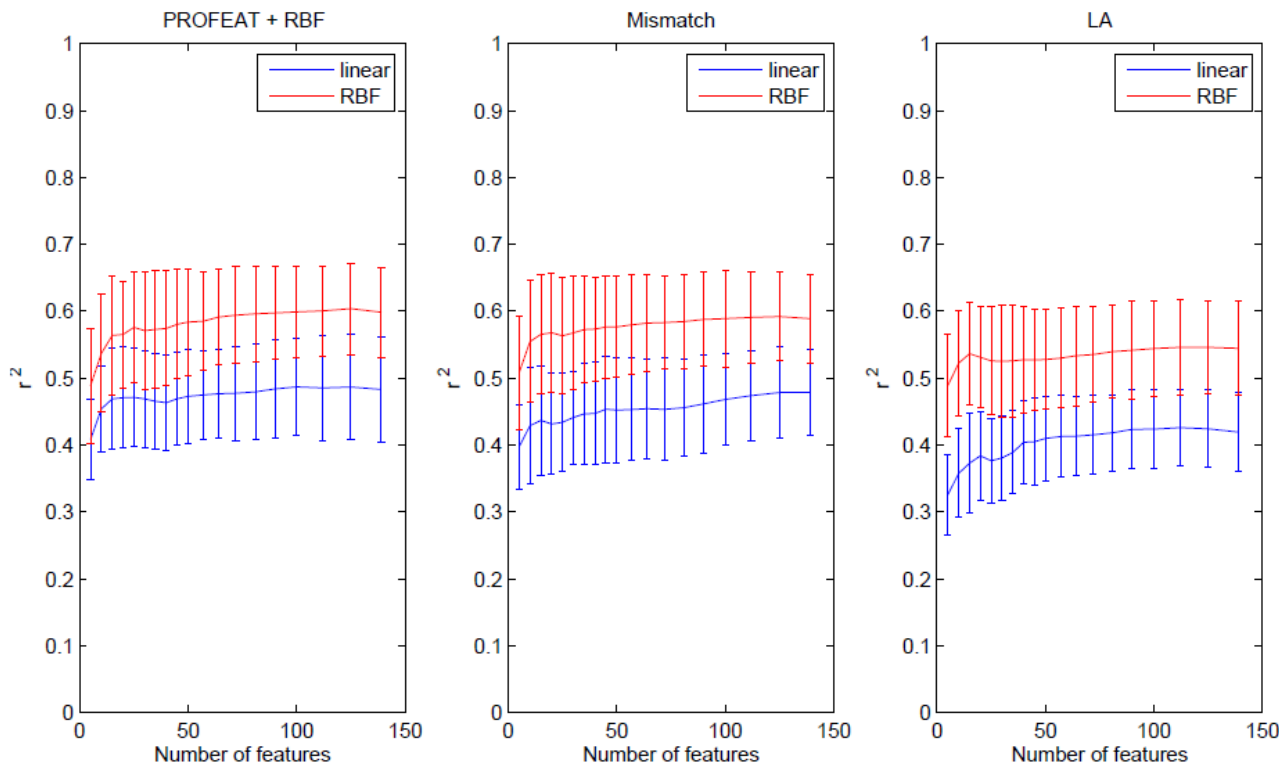


■ 実験結果 CYP阻害活性予測

◆ 活性データ(化合物-タンパク質ペア)数 = 798

◆ タンパク質(CYP)数 = 14 ◆ 化合物数 = 371 ◆ 化合物属性数 = 139

SVR の予測性能



化合物 : linear / RBF kernel

タンパク質 : PROFEAT+RBF / Mismatch / LA (Local Alignment) kernel

化合物-タンパク質ペア : tensor product kernel

化合物属性のランキング

rank	description
1	AlogP
2	MlogP ²
3	number of benzene-like rings
4	aromatic ratio
5	number of 6-membered rings
6	number of rotatable bonds
7	MlogP
8	mean absolute charge (charge polarization)
9	AlogP ²
10	number of ethers (aliphatic)