

Формулировка и решение задачи оптимизации, сочетающей классификацию и регрессию, для оценки энергии связывания белка и маленьких молекул*

Грачева А. С., Соавтор И. О., Фамилия И. О.

gracheva.as@phystech.edu

¹ФИВТ МФТИ

При разработке лекарства для поиска маленьких молекул - лигандов, наиболее сильно взаимодействующих с исследуемым белком, а значит являющихся основными кандидатами в лекарства, необходимо оценивать свободную энергию (или аффинность) их связывания с белком. Есть две задачи, решение которых поможет оценить качество этого связывания: pose prediction - среди нескольких сгенерированных положений лиганда в белке определить наиболее близкое к реальному и scoring - предсказать аффинность для комплексов различных белков с лигандами. Существует решение первой задачи с помощью модифицированного SVM, но качество предсказания может быть повышено, если использовать экспериментальные данные с аффинностями и решать одновременно задачи регрессии и классификации. В статье будут рассмотрены эксперименты с алгоритмом, использующим эту идею.

1 Введение

После аннотации, но перед первым разделом, располагается введение, включающее в себя описание предметной области, обоснование актуальности задачи, краткий обзор известных результатов, и т. п.

2 Название раздела

Данный документ демонстрирует оформление статьи, подаваемой в электронную систему подачи статей <http://jmla.org/papers> для публикации в журнале «Машинное обучение и анализ данных». Более подробные инструкции по стилевому файлу `jmla.sty` и использованию издательской системы \LaTeX 2_ε находятся в документе `authors-guide.pdf`. Работу над статьёй удобно начинать с правки \TeX -файла данного документа.

2.1 Название параграфа.

Нет ограничений на количество разделов и параграфов в статье. Разделы и параграфы не нумеруются.

2.2 Теоретическую часть работы

желательно структурировать с помощью окружений `Def`, `Axiom`, `Hypothesis`, `Problem`, `Lemma`, `Theorem`, `Corollary`, `State`, `Example`, `Remark`.

Определение**Definition 1.** Математический текст хорошо структурирован, если в нём выделены определения, теоремы, утверждения, примеры, и т. д., а неформальные рассуждения (мотивации, интерпретации) вынесены в отдельные параграфы.

Утверждение**Statement 1.** Мотивации и интерпретации наиболее важны для понимания сути работы.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект №00-00-00000. Научный руководитель: Стрижов В. В. Задачу поставил: Эксперт И. О. Консультант: Консультант И. О.

Таблица Table 1 Подпись размещается над таблицей.

Задача	CCEL	boosting
Cancer	3.46 ± 0.37 (3.16)	4.14 ± 1.48
German	25.78 ± 0.65 (1.74)	29.48 ± 0.93
Hepatitis	18.38 ± 1.43 (2.87)	19.90 ± 1.80

Теорема Theorem 1. Не менее 90% коллег, заинтересовавшихся Вашей статьёй, прочитают в ней не более 10% текста.

Доказательство. Причём это будут именно те разделы, которые не содержат формул. ■

Замечание Remark 1. Выше показано применение окружений Def, Theorem, State, Remark, Proof.

3 Некоторые формулы

Образец формулы: $f(x_i, \alpha^\gamma)$.

Образец выключной формулы без номера:

$$y(x, \alpha) = \begin{cases} -1, & \text{если } f(x, \alpha) < 0; \\ +1, & \text{если } f(x, \alpha) \geq 0. \end{cases}$$

Образец выключной формулы с номером:

$$y(x, \alpha) = \begin{cases} -1, & \text{если } f(x, \alpha) < 0; \\ +1, & \text{если } f(x, \alpha) \geq 0. \end{cases} \quad (1)$$

Образец выключной формулы, разбитой на две строки с помощью окружения align:

$$R'_N(F) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(P(+1 | x_i) C(+1, F(x_i)) + \right. \\ \left. + P(-1 | x_i) C(-1, F(x_i)) \right). \quad (2)$$

Образцы ссылок: формулы (1) и (2).

4 Пример иллюстрации

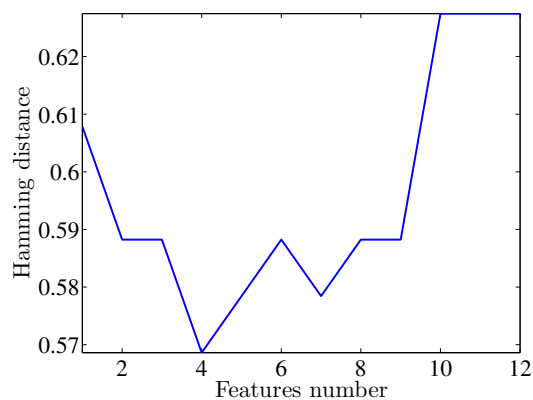
Рисунки вставляются командой `\includegraphics`, желательно с выравниванием по ширине колонки: `[width=\linewidth]`.

Практически все популярные пакеты рисуют графики с подписями, которые трудно читать на бумаге и на слайдах из-за малого размера шрифта. Шрифт на графиках (подписи осей и цифры на осях) должны быть такого же размера, что и основной текст.

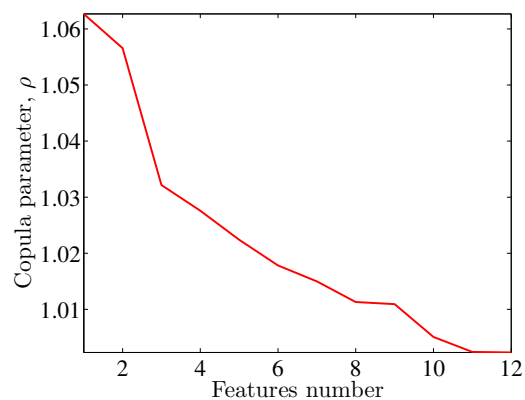
При значительном количестве рисунков рекомендуется группировать их в одном окружении `{figure}`, как это сделано на рис. 1.

5 Пример таблицы

Подпись делается *над таблицей*, см. таблицу 1.



(a) Первый рисунок



(б) Второй рисунок

Рис. Figure 1 Подпись должна размещаться под рисунком.

6 Заключение

Желательно, чтобы этот раздел был, причём он не должен дословно повторять аннотацию. Обычно здесь отмечают, каких результатов удалось добиться, какие проблемы остались открытыми.

ЛитератураReferences