3. 手法

3.1 構築パイプライン

ダイアグラム

自動的に生成された説明

本研究における構築パイプラインの概要を以下に示す。

1. クリプトサイトを持つ構造的に定義されたアポのデータセットを論文[1]に従って構築する。
2. タンパク質表面上のポケット検出ソフトウェアFpocket　　[4]を用いて構築したデータセットに対し、特徴量を作成する。
3. Fpocket[4]では、各タンパク質についてクリプトサイトになり得る凹みとその他の凹みを共に検出するため、ホロ構造を重ね合わせ、PyMOLによる目視でクリプトサイトになり得る凹みかどうかを確認し、ラベリングした。

表 ：構築パイプライン

1. 3.までで構築したデータセットを学習データとし、機械学習モデルを用いてクリプトサイトになり得る凹みか否かの分類するモデルを作成する。
2. 機械学習モデルの分類に関して、どの特徴量が分類の寄与度が高いかについて分析する。

　3.2 各工程の詳細

各工程について、詳細に説明する。

構築パイプライン１について、