6. 展望

本研究では、これまでタンパク質の表面構造からFpocket[4]で特徴量を生成した。その後、クリプトサイトを予測する機械学習モデルを作成し、因子分析してきた。つまりは鍵と鍵穴理論でいうと、鍵穴であるポケットに着眼してきた。しかし、この観点のみではクリプトサイトの位置はわかっても、どのリガンドを誘導すれば良いかわからない。そのため、鍵であるリガンドについて着眼し、先行研究[1]のようにクリプトサイトを誘導するリガンドとノーマルバインディングサイトについても因子分析し、クリプトサイトを誘導するリガンドを選定するための性質や因子の理解を進める必要がある。

　さらに、タンパク質の表面構造からFpocket[4]で特徴量を生成したと述べた。しかしながら、タンパク質によってはクリプトサイトになり得る凹みが存在するが、Fpocket[4]が検出できない例もいくつか存在した。幸いにも、Fpocket[4]はOSSかつユーザーマニュアルが充実しており、独自のポケット検出スコアを追加設計することが可能である。本研究を通して、モデルの推論において、Hydrophobicity score、Alpha sphere density、Polarity scoreが重要特徴量の上位であることがわかったため、この結果を考慮して、スコア設計をすることで、これまで検出できなかったタンパク質のクリプトサイトになり得る凹みの検出を試みたい。