

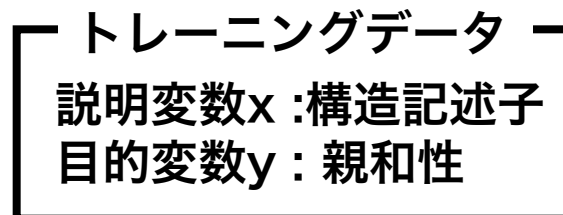
# ドッキングシミュレーションおよび 機械学習を活用した医薬品化学構造の設計

May. 12, 2016  
ディスカッション

酒井研究室      宮崎 大輝

# リード化合物設計

求められること：ドッキングシミュレーションの回数を最低限に



トレーニングデータの大きさもなるべく小さくしたい



少ないトレーニングデータで精度の良い物性予測モデル



データ密度と目標達成確率を考慮に

# GP法を用いた予測モデル

## 予測性能の確認

- ・ {・ 構造記述子：水溶解度} の組み合わせのデータから 9 点を抽出
- ・ この 9 点をトレーニングデータとして水溶解度予測モデルを構築
- ・ これに対しテストデータとして 5 構造を選択

NC(c(cccc1)c1O)=O : -1.52

BrCCCl : -1.32

CCNc1nc(N(CC)CC)nc(Cl)n1 : -4.06

OCc1cccnc1 : 0.96

c1(c2nc(cccc4)c4cc2)nc(cccc3)c3cc1 : -5.4

- ・ パラメタを変化させ構造記述子から予測された水溶解度と実際のデータを比較

PEIOPT.pyでerror...

```
File "PEIOPT_modified.py", line 296, in <module>
    de_result = result_cont(Xeval[eval.argmin(),:],eval.argmin())
IndexError: index 19 is out of bounds for axis 0 with size 5
```