

【目的】創薬インフォマティクスの知見に基づいて、高生理活性ファイトケミカル（植物由来化合物）のネットワーク解析を行った。これにより、ネットワーク解析のファイトケミカル・インシリコ創薬における有効性を検証することが、本研究の目的である。

【方法】高生理活性ファイトケミカル（1124 種類）の Fingerprint(線形表記法) 形式の化学構造情報、ならびに創薬要件（リピンスキー条件）に関わる物理化学的性質データを複数のデータベース経由で収集した。更に、化学構造と物理化学的性質の両者を適切に反映した類似度指標を設定し、その類似度を辺の重みとするネットワーク図を作成した。

【結果・議論】図 1 は、辺の重みについてハイパスフィルターを行なった際の最大ネットワーク構造の頂点占有率変化を示している。図 1 より、1 次相転移的なパーコレーション転移が起きていることがわかる。図 2 は、パーコレーション転移直後の次数分布（両対数プロット）を示している。べき乗フィッティングの結果得られた指数は約 0.9 であった。図 3 は、パーコレーション転移直後のネットワーク図である。これより、当該ネットワークが 2 つのコミュニティーから成るマルチレイヤー構造を有しており、2 コミュニティーの連結有無が図 1 における 1 次相転移的挙動をもたらしていることがわかる。なお、2 コミュニティー間の特徴量相違が化学構造とリピンスキー条件の両者を反映していることについては、当日詳報する。

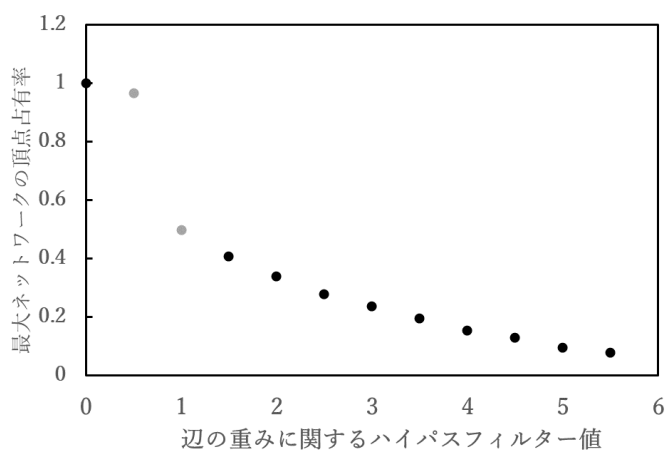


図 1 最大ネットワークの頂点占有率

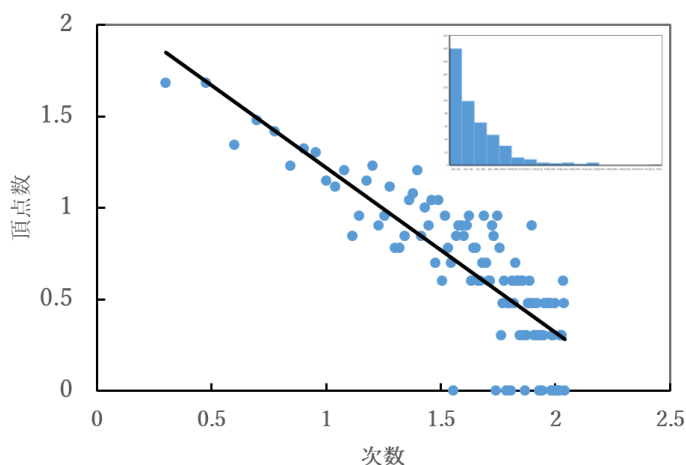


図 2 頂点数の次数依存性に関する両対数プロット  
挿入図はそのヒストグラム

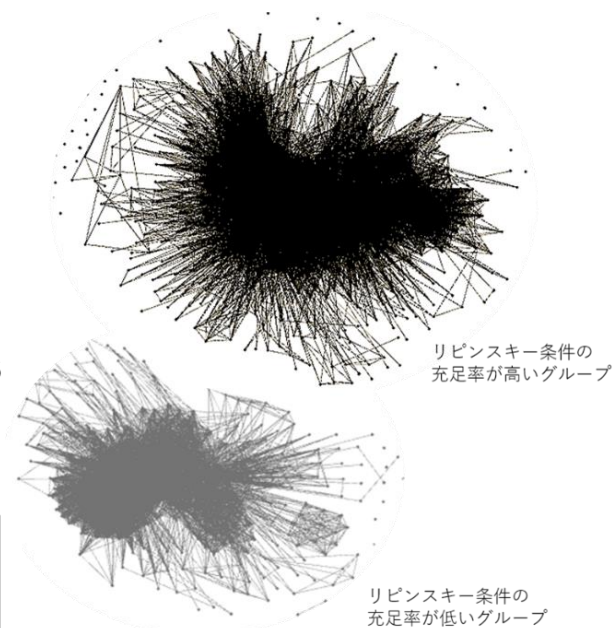


図 3 パーコレーション転移直後に 2 分裂した  
ネットワーク図