

卒業論文要旨

関係性データ解析による低分子医薬品化合物のコミュニティ抽出 Community detection of small drug molecules: network analysis

1210227 鈴木 亮佑
Ryosuke Suzuki

創薬にかかる莫大な費用と時間を削減するために様々なスクリーニング方法が研究されている。そこで本研究では、多次元データを関係性データとして扱うことで、ネットワーク解析の insilico 創薬における有効性を検証することを目的とした。

医薬品データベース DrugBank に掲載される承認済み医薬品の低分子化合物情報をデータとして用いた。これらのデータを物理化学的性質と化学構造を関係性データに変換し化合物の関係を辺の重みとして用いたネットワークデータを形成し解析を行なった。

図1はある重みフィルター値のネットワークの様子を示している。本方法により生成されたネットワークにより、密結合したノード群(コミュニティ)を複数生成することができた。また、このネットワーク構造を重み付き Deepwalk により解析した結果、ハブ化合物を用いて構造式が大きく異なる高薬効性化合物群を抽出できることが分かった。

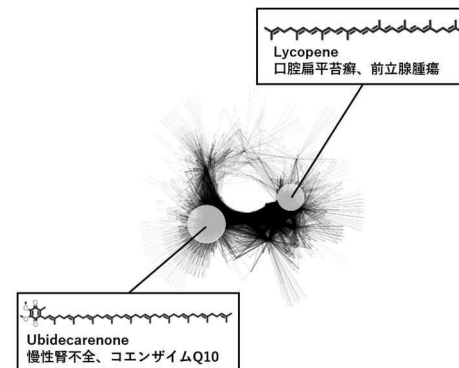


図1 コミュニティのハブ化合物