

## 29【P1】Ⅱ-007

構造活性相関解析への自己組織化マップの応用—カルボキノンとベンゾジアゼピン—

○川上 準子<sup>1</sup>, 星 憲司<sup>1</sup>, 石山 晶子<sup>1</sup>, 宮城島 清香<sup>1</sup>, 中村 仁<sup>1</sup>, 佐藤 憲一<sup>1</sup> (1 東北薬大)

【目的】自己組織化マップ(SOM)は脳におけるマッピング機構をモデル化したKohonenの教師なしニューラルネットワークにより与えられる。このネットワークはデータの特徴抽出やビジュアル化にすぐれた能力を示し、また、逆伝播型ニューラルネットワークなどに比べて計算の安定性が良いことも知られている。それゆえ、SAR解析の1つの手法としてSOMを利用できれば有用な場合があるものと期待できる。そこで、我々はその可能性について検討した。

【方法】カルボキノンのデータセットとしては、吉本らが測定した37個の誘導体を、また、ベンゾジアゼピンについてはHaefelyらの57個の誘導体を用いた。QSARにおける活性値をSOMに基づいて予測するために、入力データは誘導体のn個の構造記述変数に活性値を加えて(n+1)成分とした。活性の予測値を求めるには、leave-one-out法を採用し、残りのデータでSOMを作成し、取り除いたデータの(n+1)次元目を欠損値とし、このデータを作成したSOMに与えて勝者ニューロンを求め、その(n+1)次元目の値を予測活性値とする。

【結果・考察】カルボキノンの場合、生物活性値とleave-one-outでのSOM計算による予測値の相関係数 $\sim 0.87$ であり逆伝播型ニューラルネットワークでの予測と遜色ないレベルである。また、グレーマップよりカルボキノン誘導体の類似度を明瞭によみとることができた。ベンゾジアゼピンでは、誘導体のもつ42個の物理化学変数をそのまま入力データとすると低い相関係数しか得られないが、別の手法でのプルーニングにより確立された、重要度の高い6変数に絞ることで、相関係数 $= 0.8 \sim 0.85$ とうまく予測できる。これらの結果より、SAR解析の1つの手法としてSOMは有用であると期待できる。