

分子行列の固有値・固有ベクトルを用いた

化学構造プロファイリングとその応用

氏 名

若栗 佳介

研究室名

計算システムズ生物学研究室

主指導教員名（論文博士の場合は推薦教員名）

金谷 重彦

内容梗概（1ページ目に収めること）

化学構造の定量化と数値的な特徴付けに基づく化学構造プロファイリングは、構造類似性検索や定量的構造物性相関をはじめとする化学データマイニングにおいて重要な基盤を提供する。本研究では、化合物の原子結合情報から生成される分子行列の固有値解析によって得られる固有値や固有ベクトルを用いた化学構造プロファイリングのためのアプローチを提案するとともに、化合物の構造類似性の定量的評価や構造物性相関への応用の可能性について検証を行った。提案手法では、化学構造式の原子を点、結合を辺としたグラフと見なし、その原子間の結合関係を行列（原子結合行列）で表現した。原子結合行列の固有値は、化学構造全体のトポロジカルな構造特徴を、固有ベクトルは、各々の頂点原子まわりの局所構造を表す特徴量と見なすことができる。本研究ではこれらの特徴量と種々の化合物分子の構造特徴との関係を調べ、固有ベクトルの各成分は分子内の各原子周辺の局所構造特徴を反映した数値特性量であることを明らかにした。また、化合物データベース検索における類似構造検索や化合物間の構造類似性解析のための構造プロファイリング手法として有効であることを示した。さらに、これら特性量を構造記述子とし、沸点および蒸気圧に対する構造物性相関モデルの作成とデータ予測を試み、その有効性を示した。また、固有ベクトル中心性に基づく化合物データベースの不均一性／多様性解析への応用の可能性について検討し、その有用性を示唆する結果を得た。