

Protein Similarity Measures as Kernels for Proteomechemometrics

Die Proteomechemometrik stellt einen neuen Ansatz zur QSAR Modellierung dar, bei dem sowohl Liganden- als auch Rezeptorinformationen verwendet werden. Die Verwendung der Rezeptorinformation ermöglicht es, die Selektivität eines Liganden zu berücksichtigen, was bei manchen Proteinklassen von zentraler Bedeutung ist. Die Basis hierfür stellt die Affinitätsmatrix einer Menge von Liganden und Rezeptoren mit den paarweisen Affinitäten dar. Basierend auf dieser Information wird ein Modell trainiert.

Um dieses Modell mit modernen maschinellen Lernverfahren, wie Support Vektor Maschinen und Gauß-Prozessen, zu inferieren, benötigt man sowohl Ähnlichkeitsmaße für die Liganden als auch für die Rezeptoren, die die Kerneigenschaften erfüllen. Im Rahmen dieser Arbeit soll eine Reihe von solchen Proteinähnlichkeitsmaßen, wie der *Local Alignment Kernel*, implementiert werden. Weiterhin sollen etablierte Stringkernels auf ihre Eignung in der Proteomechemometrik untersucht werden.

Anforderungen:

Erfahrung im Programmieren
mit Java.

Kontakt

Nikolas Fechner
Sand 1, Raum 317
Tel. (07071) 29-77174
nikolas.fechner@uni-tuebingen.de



Quelle: http://en.wikipedia.org/wiki/Image:Alignment_of_thioredoxins.png