

Pharmacophore Kernel on Conformation Ensembles

Geometrisch basierte *Machine Learning* Verfahren können nur aus aktiven Konformationen von Molekülen ein sinnvolles Modell lernen. Diese biologisch aktiven Geometrien müssen durch teure Experimente wie NMR oder Kristallstrukturanalysen gewonnen werden. Ein Ausweg besteht darin, nicht nur eine Konformation eines Moleküls zu betrachten, sondern die kompletten Konformationsräume der Strukturen.

Im Rahmen dieser Arbeit soll ein Molekülkernel, der auf räumlichen 3-Punktbeziehungen der Strukturen basiert, erweitert werden. Diese neue Variante soll nicht nur einzelne Geometrien vergleichen, sondern die kompletten Konformationsräume kodieren, so dass der Molekülkernel sowohl effizient die Strukturen, als auch die Konformationsräume vergleichen kann. Die Kodierung soll dabei auf probabilistischen Modellen basieren. Dadurch kann der Konformationsraum durch generative Modelle dargestellt werden.

Die resultierenden Modelle sollen mit der ursprünglichen Variante auf einer Reihe von Moleküldatensätzen verglichen werden. Zusätzlich sollen ihre Vor- und Nachteile bezüglich unterschiedlicher biologischer Problemstellungen diskutiert werden.

Anforderungen: Sehr gute Java-Kenntnisse, Grundlegende *Machine Learning* Kenntnisse von Vorteil.

Kontakt

Andreas Jahn
Sand 1, Raum A316
Tel. (07071) 29-77175
Andreas.jahn@uni-tuebingen.de

