

Evaluation sequenz- und strukturbasierte Deskriptoren zur Klassifikation antimikrobieller Peptide

Sebastian Spänig

AG Bioinformatik (Prof. Dr. Dominik Heider)
sebastian.spaenig@uni-marburg.de

Zusammenfassung

Fälle mit multiresistenten Krankheitserregern sind in den letzten Jahren auf ein bedrohliches Maß gestiegen. Eine Strategie zur Bekämpfung dieser Pathogene umfasst auch die Verwendung natürlich vorkommender, antimikrobiell wirksamer Peptide (AMP). In den letzten Jahren wurden deshalb Deskriptoren und maschinelle Lernverfahren zur automatisierten und genauen Klassifizierung von AMPs entwickelt. Auch die Pharmaindustrie erkennt das enorme Potenzial der gewonnenen Erkenntnisse für medizinische Behandlungen durch Forschung in diesem Bereich an [1].

Weiterhin erfordern die meisten Algorithmen des maschinellen Lernens eine feste Länge der Merkmalsvektoren sowie eine metrische Ausprägung dieser. So beinhaltet ein wesentlicher Teil der Klassifizierung die Konstruktion von repräsentativen Kodierungen der Peptidsequenz. Zu diesem Zweck wurden im Rahmen von Klassifizierungsstudien bereits eine Vielzahl an sequenz- und strukturbasierter Kodierungen entwickelt [2].

Die Vielfalt der verfügbaren Encodings führt allerdings zur Frage, ob eine Kodierung für eine bestimmte Klassifikationsaufgabe besser geeignet ist und ob Kodierungen bei einem bestimmten Datensatz besser abschneiden. Ziel dieser Arbeit soll daher 1) die Implementation verschiedener sequenz- und strukturbasierte Deskriptoren sein, 2) mit Hilfe maschineller Lernverfahren die Vorhersagequalität dieser Peptidkodierungen zu vergleichen und schließlich 3) die Robustheit der Resultate statistisch auszuwerten.

Literatur

- [1] Mahlapuu, M., Håkansson, J., Ringstad, L., Björn, C. (2016). Antimicrobial Peptides: An Emerging Category of Therapeutic Agents. *Front. Cell. Infect. Microbiol.* 6, 194.
- [2] Spänig S. and Heider D. (2019). Encodings and models for antimicrobial peptide classification for multi-resistant pathogens. *BioData Mining* 12,7.

