

一种新多肽表征方法及支持向量机用于肽HPLC定量结构-保留建模预测

梁桂兆;李志良;周原;何留;周鹏

重庆大学化学化工学院; 重庆大学生物力学与组织工程教育部重点实验室, 重庆 400030

摘要:

从20种天然氨基酸的1369种性质参数经主成分分析得出一种新多肽序列表征方法——SZOTT. 将其用于71个不同长度肽序列表征, 以偏最小二乘(PLS)和支持向量机(SVM)建立定量结构-保留模型(QSRM). 研究表明, SZOTT能够较好表征71个肽序列特征, 其含信息量大且易操作, 与PLS相比, SVM具有较强的拟合能力和良好外部预测能力, SZOTT表征方法和SVM建模可进一步用于肽HPLC保留行为研究.

关键词: 肽 SVM QSRM SZOTT

收稿日期 2006-01-10 修回日期 2006-03-21 网络版发布日期 2006-09-04

通讯作者: 李志良 Email: zll2662@163.com

本刊中的类似文章

1. 张强;张霞;杨志志. 环多肽晶体的浮动电荷极化力场模拟[J]. 物理化学学报, 2006,22(10): 1243-1247
2. 蒋云;苗振伟;徐筱杰;唐有祺. 某些环肽及其相应线型肽在不同溶剂中构象的CD谱研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(01): 91-95
3. 高峰;沙印林;邱阳;王跃丰;李银玲;来鲁华;吴厚铭.  $\beta$ -转角肽的溶液构象[J]. 物理化学学报, 2001,17(07): 619-621
4. 沙印林;黄永亮. 蛋白质全新设计: 八残基序列形成发夹结构的圆二色谱[J]. 物理化学学报, 2002,18(06): 504-507
5. 陶鹏;王任小;来鲁华. 用氨基酸加和法计算多肽的脂水分配系数[J]. 物理化学学报, 1999,15(05): 449-453
6. 梁桂兆;梅虎;周鹏;周原;李志良. 三维原子场作用全息矢量用于二氢叶酸还原酶抑制剂及苦味二肽QSAR研究[J]. 物理化学学报, 2006,22(03): 388-390
7. 来鲁华;王乐宇;邓巧临;韩玉真;马立斌;徐筱杰;唐有祺. 蒙特卡罗模拟退火与距离限制相结合的方法——在多肽溶液构象分析中的应用[J]. 物理化学学报, 1994,10(10): 867-869
8. 来鲁华;许惠娟;王鹏良;徐筱杰;苗振伟;季爱雪. 简化的系统搜索法及其在构象分析中的应用[J]. 物理化学学报, 1993,9(05): 581-583
9. 刘亮;王任小;来鲁华;李崇熙. 促生长激素释放素三维定量构效关系及药效团模型[J]. 物理化学学报, 1997,13(12): 1090-1096
10. 汪志勇;张志成;张曼维;姚思德;屠铁成;林念芸;张其锦. 磷酸化肽链中电子转移的ESR研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(04): 375-380
11. 王俊梅;胡照林;叶学其. 亮氨酸脑啡肽构象的分子动力学方法研究[J]. 物理化学学报, 1995,11(08): 673-677
12. 梅虎;周原;孙立力;李志良. 一种新的氨基酸描述子及其在肽QSAR中的应用[J]. 物理化学学报, 2004,20(08): 821-825
13. 王芳斌;彭勇;范美意;刘又年;黄可龙. 谷胱甘肽-二茂铁的合成及其与牛血清白蛋白的相互作用[J]. 物理化学学报, 2009,25(06): 1125-1130
14. 邓益斌;胡炳文;周平. 类蜘蛛丝聚合物结构及分子运动的固体核磁共振研究[J]. 物理化学学报, 2009,25(07): 1427-1433
15. 储艳秋;潘婷婷;戴兆云;俞卓伟;郑松柏;丁传凡. 谷胱甘肽与D型氨基酸非共价复合物的质谱[J]. 物理化学学报, 2008,24(11): 1981-1987
16. 黄飞娟;杜为红;王保怀. 含有D型氨基酸的新型毒肽——芋螺马芬在pH 5的溶液结构[J]. 物理化学学报, 2008,24(09): 1558-1562
17. 王邦宁;谈夫. 磷脂DHPC和短杆菌肽D相互作用的DSC研究[J]. 物理化学学报, 1998,14(06): 548-551
18. 张向东;刘岩;孙锦玉;刘祁涛. 胶束溶液中某些氨基酸和二肽的解离常数[J]. 物理化学学报, 2000,16(04): 351-355
19. 计明娟;杨鹏程. 甲硫氨酸-脑啡肽的活性位点[J]. 物理化学学报, 2000,16(07): 596-600
20. 计明娟;叶学其;杨鹏程. 甲硫氨酸-脑啡肽的分子动力学模拟[J]. 物理化学学报, 1999,15(11): 1011-1016
21. 丁晓琴;陈常英;李玉林;陈冀胜;罗宇;来鲁华;徐筱杰.  $\mu$ -芋螺毒素及其类似物的定量构效关系研究[J]. 物理化学学报, 1996,12(06): 485-490
22. 任吉民;牛春吉;袁奎奎;王文韵;倪嘉缙. 双甘肽稀土配合物溶液结构的 $^{13}\text{C}$ 和 $^1\text{H}$  NMR研究[J]. 物理化学学报, 1992,8(02): 270-273
23. 孟明;夏凌燕;郭丽红. 甘氨酸在高岭土表面的吸附和热缩合反应[J]. 物理化学学报, 2007,23(01): 32-36
24. 仝建波;张生万. 一种新的三维氨基酸描述子及其在肽类药物QSAR中的应用[J]. 物理化学学报, 2007,23(01): 37-43