

【作者】	区卫民, 谭泗桥, 袁哲明, 柏连阳, 熊洁仪
【单位】	广东科贸职业学院, 广东广州
【卷号】	36
【发表年份】	2008
【发表刊期】	35
【发表页码】	15284-15286
【关键字】	支持向量机回归; K-最近邻; 组合预测; 定量构效关系
【摘要】	<p>[目的] 探索一种有效的组合预测方法, 用于定量构效关系 (QSAR) 的研究分析。[方法] 提出一种基于支持向量机回归 (SVR) 与 K-最近邻法 (KNN) 的组合预测方法: 以均方误差 (MSE) 最小为择优准则, 对SVR实施核函数寻优; 基于最优核函数以SVR进行描述符筛选并得到保留描述符; 以“多轮末尾强制淘汰法”阐述各保留描述符对预测精度影响的程度; 基于保留描述符, 以不同KNN预测值反映样本集异质性并构建子模型, 最后基于SVR以留一法实施组合预测。运用该组合预测方法研究磺酰胺和三唑并嘧啶磺酰胺类除草剂QSAR建模。[结果] 建模结果表明, 基于SVR与KNN的组合预测方法在参比模型中预测精度最高, 具有结构风险最小、非线性、能有效克服过拟合、泛化推广能力优异等优点。[结论] 基于SVR与KNN的组合预测具有许多优点, 在QSAR研究中应用前景广泛。</p>
【附件】	 PDF下载 PDF阅读器下载

关闭