

چکیده

در این مطالعه، ارتباط ساختار با فعالیت (QSAR)، در ۳۱ مشتق دارویی متوترکسات انجام شد.

ترکیبات به روش زیر $B_3Lyp/6-31g$ در نرم افزار گوسین ۰۹ بهینه شدند. مدل SCRF برای بهینه کردن ترکیبات در حلال آب استفاده شد. رگرسیون خطی (MLR) و شبکه عصبی مصنوعی (ANN) به عنوان ابزار مدل سازی و الگوریتم های شبیه سازی (SA) و ژنتیک به عنوان روش بهینه سازی برای انتخاب بهترین توصیف کننده ها بکار برده شدند. نتایج بدست آمده از روش های ترکیبی مدل سازی-بهینه سازی با هم مقایسه شدند و روش GA-ANN نشان داد که بهترین ضریب همبستگی (R^2) و مقدار میانگین خطا (RMSE) دارد.

در روش های MLR-MLR و MLR-ANN و SA-ANN و GA-MLR و GA-ANN مقدار میانگین خطا (RMSE) به ترتیب ۰/۶۴۳ و ۰/۲۶۲ و ۰/۱۸۲ و ۰/۲۲۳ و ۰/۱۲۷ و در فاز گازی ۰/۶۴۳ و ۰/۳۰۵ و ۰/۱۸۳ و ۰/۲۷۶ و ۰/۱۳۹ در فاز محلول محاسبه شد و ضریب همبستگی (R^2) در فاز گازی به ترتیب ۰/۸۸۸ و ۰/۹۱۷ و ۰/۹۳۴ و ۰/۹۲۰ و ۰/۹۵۷ و در فاز محلول ۰/۸۸۸ و ۰/۸۲ و ۰/۹۳۸ و ۰/۹ و ۰/۹۴۹ مشاهده شد. نتایج بدست آمده از روش GA-ANN نشان می دهد که فعالیت مشتقات به پارامترهای مختلفی مثل DP02 و RDF140u و ESpm10x و BEHv1 و RDF085e و H1m و R5v+ در فاز گازی و پارامترهای EEig05r و VED2 و Mor23e و Mor05u و BEHm4 و Mor20m و Mor08u در فاز محلول بستگی دارد.

کلید واژه: داروی متوترکسات، الگوریتم ژنتیک، ارتباط ساختار فعالیت (QSAR)، رگرسیون خطی MLR.