چکیده :

در این تحقیق ارتباط کمی ساختار و فعالیت (QSAR) در مشتقات بنزوکسازین مطالعه شده است . الگوریتم ژنتیک (GA) و شبکه های عصبی مصنوعی (ANN) و روش گام به گام رگرسیون خطی چندگانه (stepwiseMLR) برای مدل های خطی و غیر خطی QSAR ایجاد و مورد استفاده قرار گرفته است . با استفاده از روش (DFT(B3LYP و سری پایه 6-311G ساختارهای بهینه از این مشتقات بدست آورده شده است . از نرم افزارهای Hyperchem وChemOffice وGaussian03W وDragon جهت بهینه سازی مولکول ها و محاسبات توصیفگرهای شیمی کوانتومی استفاده شده است . در نهایت برای آنالیز داده ها از نرم افزار Unscrambler استفاده گردید.

در پایان با بررسی نتایج حاصل از روش های PCRو PLS و روش جک نایف در لایه های مختلف چند ترکیب به عنوان ترکیبات دارای کمترین انحراف ممکن جهت پیشنهاد برای ساخت داروی مناسب انتخاب گردید .

توصیفگرهای انتخابی عبارتند از : MSD , HATS7u , CIC2, Hypertens-50

کلمات کلیدی :

سرطان کلون, مدل ,QSARژنتیک الگوریتم , شبکه عصبی مصنوعی PCR,PCA