چکیده

یکی از بیماری‌هایی که امروزه در جوامع بشری رو به فزونی است سیندرم کوشینگ نامیده می‌شود که سالانه بیش از ۱۰ میلیون نفر را در جهان درگیر می‌کند. این بیماری که به دلیل اختلال در غده هیپوفیز و یا اختلال در غده آدرنال بروز می‌دهد منجر به بیماری خطرناک‌تری مانند سرطان می‌شود. در این تحقیق ارتباط کمی میان مشتقات دارویی پیریدین برای درمان بیماری کوشینگ با کمک محاسبات QSAR صورت گرفته است. الگوریتم ژنتیک (GA)، شبکه‌های عصبی مصنوعی(ANN)، و روش رگرسیون خطی چندگانه(MLR) برای مدل‌های خطی و غیرخطی QSAR ایجاد و مورد استفاده قرار گرفت. با استفاده از روش DFT(B3LYP) و سری پایه 6-31G ساختارهای بهینه از این مشتقات به دست آورده شد. از نرم‌افزارهای Chemoffice, Hyperchem و Dragon, Gaussian برای بهینه‌سازی مولکول‌ها و محاسبات توصیفگرهای شیمی کوانتومی استفاده شده است.

در نهایت برای آنالیز داده‌ها از Lasso و نرم‌افزار unscrambler استفاده گردید و سرانجام با بررسی روش‌های GA-PCR و GA-PLS و ... لایه‌های مختلف به پیش‌بینی ترکیب‌های مناسب‌تر برای ساخت دارو دست یافتیم.