محاسبات آغازین در رابطه¬ی کمی ساختار-فعالیت مشتقات دارویی متوترکسات

حمید رحمانی *,149,

1396-6-30

در این مطالعه، ارتباط ساختار با فعالیت(QSAR)، در 31 مشتق دارویی متوترکسات انجام شد. ترکیبات به روش زیر 6-31g/B3Lyp در نرم افزار گوسین 09 بهینه شدند. مدل SCRF برای بهینه کردن ترکیبات در حلال آب استفاده شد . رگرسیون خطی(MLR) و شبکه عصبی مصنوعی (ANN) به عنوان ابزار مدلسازی و الگوریتم های شبیه سازی (SA) و ژنتیک به عنوان روش بهینه سازی برای انتخاب بهترین توصیف کننده‌ها بکار برده شدند. نتایج بدست آمده از روشهای ترکیبی مدلسازی-بهینه سازی با هم مقایسه شدند و روش ANN-GA نشان داد که بهترین ضریب همبستگی (R2) و مقدار میانگین خطا مقدار GA-ANN و GA-MLR و SA-ANN و MLR-ANN وMLR-MLR های¬روش در .دارد (RMSE) میانگین خطا (RMSE) به ترتیب 643/0 و 262/0 و 182/0و 223/0 و 127/0 در فاز گازی و 643/0 و 305/0 و 183/0 و 276/0 و 139/0 در فاز محلول محاسبه شد و ضریب همبستگی (R2) درفاز گازی به ترتیب 888/0 و 917/0 و 934/0 و 920/0 و 957/0 و در فاز محلول 888/0 و 82/0 و 938/0 و 9/0 و 949/0 مشاهده شد. نتایج بدست آمده از روش ANN-GA نشان می‌دهد که فعالیت مشتقات به پارامترهای مختلفی مثل DP02و RDF140u و ESpm10x و BEHv1وRDF085e و H1m و R5v در فازگازی و پارامترهای EEig05r و VED2 و Mor23e و Mor05u و BEHm4 و Mor20m و Mor08u در فاز محلول بستگی دارد.

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

Islamic Azad University, Rasht Branch - Thesis Database
دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت - سامانه بانک اطلاعات پایان نامه ها