محاسبات QSAR مشتقات تیازول برای درمان بیماری دیابت با روش LASSO-ICA

رویا عسگری *,151,

1396-6-31

بيماري ديابت شايع ترين بيماری متابوليک در انسان شناخته شده است، که نيازمند طراحي داروهاي جديد با عملکرد بهتر مي‌باشد. در اين تحقيق، مطالعه ارتباط کمي ساختار و فعاليت (QSAR) بر روي مشتقات تيازول به عنوان داروهاي ضد ديابت انجام شده است. الگوريتم ژنتيك (GA)، الگوريتم رقابت استعماری (ICA)، شبکه عصبي مصنوعي (ANN) و روش رگرسيون خطي چند گانه (MLR) براي ايجاد مدلهاي خطي و غير خطي (QSAR) مورد استفاده قرار گرفته است. با استفاده از روش نرم از .شد آورده بدست مشتقات اين از بهينه ساختارهاي (d)31G- 6 پايه سري و DFT(B3LYP) افزارهايHyperchem , Chemoffice Gaussian 03 W و Dragon براي بهينه سازي هندسی مولکولها و محاسبه توصيف گرها ي شيمي کوانتومي استفاده شده است. در نهايت براي آناليز داده ها -از نرم افزارUnscrambler استفاده گرديد. بطور کلي با بررسي انجام شده با روشهاي GA , PCR-GA دارو ساخت برای ترکيبات بهترين ،مختلف تجربي اهداف و مختلف هاي‌لايه در نايف جك روش و PLS عبارت اند از: 17 و 19. همچنين بهترين توصيفگرها عبارتند از:Mor23m , nAT , PJI3 , GATS8p . ترکيب شماره ۱۷ ترکيب شماره19

کلمات کلیدی : ارتباط کمی ساختار- فعالیت – دیابت – الگوریتم ژنتیک – الگوریتم رقابت استعماری- شبکه عصبی مصنوعی.

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