

عنوان مقاله:

بهبود تخمین اثر بیولوژیکی ترکیبات کرومونی ضد پلاسمودیوم فالسی پاروم با استفاده از روش الگوریتم ژنتیک

محل انتشار:

چهارمین کنفرانس ملی شیمی کاربردی (سال: 1398)

تعداد صفحات اصل مقاله: 7

نویسندگان:

رویا آرین - ایران اصفهان دانشگاه علوم پزشکی اصفهان دانشکده فناوری های نوین گروه بیوانفورماتیک

فهیمة قاسمی - ایران اصفهان دانشگاه علوم پزشکی اصفهان دانشکده فناوری های نوین گروه بیوانفورماتیک

خلاصه مقاله:

کشف داروهای جدید با روشهای آزمایشگاهی و مراحلی که از زمان کشف تا عرضه آنها به بازار دارویی طی میگردد، از جمله موضوعات هزینه بردار و زمانبر میباشد. بررسی رابطه بین ساختار مولکولی و میزان فعالیت آن و نیز پیش بینی رفتار یک مولکول جدید براساس رفتار مولکولهای مشابه با آن که قبلا مورد بررسی قرار گرفته اند، در طراحی و کشف نمونه های جدید دارویی از اهمیت بسیار زیادی برخوردار می باشد. یکی از رویکردهای مهم در طراحی محاسباتی دارو، به آنالیز عددی توصیفگرهای بدست آمده از ساختار ترکیبات برمیگردد و هدف آن بدست آوردن مدلی مناسب بر اساس لیگاندها میباشد. هدف از این مقاله به کار گیری سه روش استخراج توصیف گر از ساختارهای مولکولی، PCA، t-test و الگوریتم ژنتیک، و مقایسه این روشها با یکدیگر است. به منظور بررسی عملکرد روشهای پیشنهادی، از مدل رگرسیون خطی مینیم خطای جزئی به منظور تخمین میزان اثر بیولوژیکی مولکولها استفاده شد. ترکیباتی که در این مطالعه مورد بررسی قرار گرفته اند، ترکیبات مهارکنندگی رشد بیماری مالاریا در بدن انسان است. بیماری مالاریا، یکی از بیماریهای انگلی مرتبط با مناطق گرمسیر است که اهمیت آن به شیوع زیاد و مرگ میر گسترده در انسانها بر میگردد. نتایج بدست آمده از این تحقیق نشان داده است که روش الگوریتم ژنتیک با دقت بسیار خوبی، میزان همبستگی 0.92، عملکرد مناسبتری در مقایسه با سایر روشهای اعمالی داشته باشد.

کلمات کلیدی:

طراحی محاسباتی دارو، مدلسازی آماری، الگوریتم ژنتیک، مالاریا.

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/957088>

