KHẢO SÁT SỰ LIÊN HỆ ĐỊNH LƯỢNG CẤU TRÚC - HOẠT TÍNH CỦA CÁC DẪN XUẤT ARTEMISININ

Bùi Thọ Thanh, Phùng Quán, Trịnh Thành Thuật
Khoa Hóa, Trường Đại học Khoa học Tự Nhiên - ĐHQG tp.HCM

Tóm tắt:

Mục đích của công trình này là nhằm trình bày các kết quả nghiên cứu lý thuyết về ứng dụng các phương pháp mạng nơ ron, xữ lý thống kê phối hợp với các tính toán lượng tử để khảo sát sự liên hệ định lượng giữa cấu trúc và hoạt tính của các dẫn xuất artemisinin

Đối tượng được xem xét là 21 dẫn xuất artemisinin. Các phương pháp tính toán được dùng là các tính toán hóa lượng tử bán thực nghiệm PM3, các phép thống kê phân tích số liệu (hồi qui bội, phân tích tương quan,chọn biến toàn bộ), các tính toán mạng nơ ron lan truyền ngược đáp ứng cùng lúc hai hoạt tính..

Hoạt tính được xem xét là hoạt tính chống sốt rét thực nghiệm của các dẫn xuất artemisinin. Các tham số cấu trúc có thể có ảnh hưởng đến hoạt tính là các tham số hoá lý và tham số lượng tử như năng lượng các vân đạ, hệ số phân bố 1-octanol-nước, tham số lập thể, điện tích tại các nguyên tử.

Các kết quả tính toán bằng nhiều phương pháp khác nhau đã được đối chiếu và cho thấy: trong mọi trường hợp đã khảo sát, khả năng dự đoán của mạng nơ ron là vượt trội so với các tính toán thống kê kinh điển và các tính toán mạng nơ ron kết hợp với tính toán lượng tử là phương pháp rất thích hợp để nghiên cứu sự liên hệ định lượng cấu trúc-hoạt tính của hóa chất.

QUANTITATIVE STRUCTURE - ACTIVITY RELATIONSHIPS OF ARTEMISININ DERIVATIVES

Bui Tho Thanh, Phung Quan, Trinh Thanh Thuat
Department of Chemistry, University of Natural Sciences - VNU.HCM

Abstract:

The aim of the paper is to present some recent theoretical results on the application of neural networks and statistical analysis in conjunction with quantum calculations for examining the Quantitative Structure-Activity Relationships (QSARs) of artemisinin derivatives.

QSAR models for the antimalarial agent, 21 artemisinin derivatives are established by using traditional statistical analysis (multiple regression, correlation, all case variables selection), Back-Propagation Neural Networks.The activity is estimated experimentally and the molecular descriptors is obtained from quantum mechanical calculations

The obtained results show that Neural Networks in appropriate architectures could be used as a good predictive tool for studying the QSAR.