บทคัดย่อ

214290

การคัดกรองเสมือนของสารยับยั้งเอช ไอ วีโดยวิธีทางสถิติ

การคัดกรองเสมือนเป็นวิธีการใหม่ที่ได้รับความสนใจอย่างมากในอุตสาหกรรมยา เนื่องจากเป็นเทคโนโลยีที่ได้ผลดี และใช้ต้นทุนอย่างมีประสิทธิภาพในการหาสารประกอบที่มีแนวโน้มเป็นยาใหม่ การศึกษาประยุกต์การทำนายโครงสร้างและหน้าที่ของไวรัสเอช ไอ วี / เอดส์ โดยความร่วมมือของเครือข่ายการคัดกรองอินซิลิโก: ทุนเมธีวิจัยอาวุโส และ ทุนเคมีแบบมุ่งเป้า โครงการการใช้เทคนิคใหม่ทางสถิติเพื่อหาการยึดจับระหว่างลิแกนด์ และตัวรับ เพื่อการประยุกต์สำหรับการคัดกรองข้อมูลเพื่อค้นหายาอย่างรวดเร็ว ได้สร้างเวปไซต์ในการออกแบบโมเดลสารชีวโมเลกุลและการคัดกรองอินซิลิโกขึ้นที่ *http://chemoinfo.science.cmu.ac.th/dock-html/screening.html* การประยุกต์ใช้เทคนิควิเคราะห์ตัวแปรพหุ (การวิเคราะห์ตัวประกอบหลัก, (PCA) และการวิเคราะห์ความแตกต่าง, (DA)) และเครือข่ายนิวรอนแบบโคโฮแนน เพื่อสำรวจกลุ่มแอคติวิตีของสารยับยั้งต่อไวรัสเอช ไอ วี ความสัมพันธ์ระหว่างแอคติวิตีทางชีวภาพ และตัวแปรทางโครงสร้าง หรือตัวชี้วัดความเหมือนทำให้แยกแยะกลุ่มโครงสร้างจากฐานข้อมูลโปรตีน (PDB) ฐานข้อมูลสารเคมีจากสถาบันมะเร็งแห่งชาติ และฐานข้อมูลผลิตภัณฑ์ธรรมชาติของไทย โดยค้นพบโมเลกุลที่มีแนวโน้มสำหรับเป็นสารยับยั้งเชื้อเอช ไอ วี ในฐานข้อมูลผลิตภัณฑ์ธรรมชาติของไทยจากการทำการคัดกรองเสมือน

ABSTRACT

214290

Virtual Screening of HIV inhibitors by Statistical Method

Virtual screening is a new approach attracting increasing levels of interest in the pharmaceutical industry as a productive and cost-effective technology in the search for novel lead compounds. To this end, application studies on structure and function prediction of HIV/AIDS virus are being conducted in cooperation with research groups from medical institutes associated with the *In Silico* Screening Network: TRF senior researchers grants, and the Novel Statistical Techniques to Estimate Ligand Receptor Binding: An Application for High Throughput Screening Drug Discovery Data, directed basic research grants from the Thailand Research Fund. Biomolecular modeling and *In silico* screening website has been created at *http://chemoinfo.science.cmu.ac.th/dock-html/screening.html*. The application of two multivariate analysis techniques (principle component analysis (PCA) and discriminant analysis (DA)) and Kohonen neural network (KNN) were applied as a tool to explore the inhibitory activity of classes of inhibitors against HIV virus. The analysis of correlations between biological activity and molecular descriptors or similarity indexes allowed a reliable classification of the structures from the protein databank (PDB), National Cancer Institute (NCI) chemical database, and Thailand Natural Products database. Lead molecules for HIV inhibitors from Thailand Natural Products have been discovered from virtual screening.