

چکیده فارسی

مقدمه: گیرنده‌های جفت شونده با پروتئین‌های جی بزرگترین گروه گیرنده‌های غشایی هستند که توسط ژنوم انسان کد می‌شوند. آنها به دلایل مختلفی از جمله هدف بودن برای بیش از ۶۰ درصد از داروها بسیار مورد توجه محققان و دانشمندان هستند. این گیرنده‌ها در مسیرهای متفاوتی دخالت دارند که این مسیرها در اثر واکنش با یک لیگاند فعال می‌شوند. در این پژوهش هدف آن بود که با استخراج ویژگی‌های جدید و استفاده از روش‌های مختلف ساختارمند کردن آنها و بهره‌گیری از روش‌های داده کاوی لیگاندهای جدید برای این گیرنده‌ها پیشنهاد شود.

روش پژوهش: این مطالعه از نوع کاربردی بوده که در سال ۱۳۹۵ به منظور شناسایی لیگاند برای گیرنده‌های جفت‌شونده با پروتئین جی انجام شد. در این پژوهش از روش‌های داده‌کاوی و به شکل خاص تر الگوریتم‌های کلاس‌بندی ماشین بردار پشتیبان در دو حالت خطی و غیرخطی استفاده شده است. به منظور آموزش الگوریتم از ۲۲۴ نمونه مثبت و ۲۲۴ نمونه منفی استفاده شد. از روش‌هایی مانند ترکیب ویژگی‌ها و انتخاب ویژگی نیز به منظور بهبود نتایج استفاده شد. در فرجام کار معماری که بهترین نتیجه را داشت به عنوان مدل نهایی ذخیره شد و به منظور تعمیم نتایج روی جفت‌های جدید اجرا شد.

یافته‌ها: نتایج به دست آمده بر اساس معیارهای استاندارد ارزیابی بیانگر مدلی است که با صحت ۹۵/۷۶ درصد، حساسیت ۹۶/۴۳ درصد، ویژگی ۹۵/۰۱ درصد و دقت ۹۵/۱۵ درصد قادر به پیش‌بینی واکنش گیرنده‌های جفت‌شونده با پروتئین جی و لیگاندها می‌باشد. پس از انجام پیش‌بینی از تعداد ۱۶۳۵۶ نمونه تست، تعداد ۱۴۶۳۲ جفت مستعد واکنش‌پذیری بودند.

نتیجه‌گیری: با استفاده از نتایج به دست آمده از روش‌های تجربی و بسط و توسعه آنها با استفاده از الگوریتم‌های ریاضی، نرم‌افزارهای کامپیوتری در این مطالعه زوج‌های جدیدی برای واکنش‌پذیری بین گیرنده‌های جفت‌شونده با پروتئین جی و لیگاندهای طبیعی پیشنهاد شد که از قابلیت اطمینان بالایی برخوردار بودند و زمینه را برای استفاده و بهره‌گیری از این نتایج فراهم می‌کند.

کلیدواژه‌ها: گیرنده‌های جفت‌شونده با پروتئین جی ، لیگاند، ماشین بردار پشتیبان