

[本期目录] [下期目录] [过刊浏览] [高级检索]

[打印本页] [关闭]

论文

神经网络用于环丙胺类衍生物的构效关系研究

李志良;胡芳;梁本熹;余虎;石乐明;李梦龙;酒井诚

湖南大学化学化工系,长沙 410082; *中国科学院化工冶金研究所,北京 100080

摘要:

将神经网络应用于定量构效关系研究。用改进的反传算法探讨了单胺氧化酶抑制剂N-(苯氧乙基)环丙胺取代衍生物的生物活性与取代基电子效应 σ 、疏水作用n、空间效应Es等参数之间的定量关系。给出了精密拟合和准确预测(最大误差均小于10%),优于经典的多元线性回归及逐步回归方法。作为一种有效的计量化学新方法,神经网络有良好的预测能力和非线性处理功能,从而可望在QSAR研究中发挥重要作用。

关键词: 神经网络 计量化学 定量构效关系 环丙胺类衍生物

NEURAL NETWORKS IN QSAR STUDIES:ESTIMATION AND PREDICTION OF BIOLOGICAL ACTIVITY FOR N-(SUBSTITUTED PHENOXYETHYL)-CYCLOPROPYLAMINES

ZL Li;F Hu;BX Liang;H Yu;ML Li;LM Shi and M Sakai

Abstract:

Neural networks(NN)methods were applied to quantitative structure-activity relationship(QSAR) studies. The relationship between biological activity($pC = pIC_{50}$)and electronic, hydrophobic and steric parameters and dummying index(sigma, pi, Es, was investigated by using modified backpropagation(MBP) neural networks. The biological activity of N-(substituted phenoxyethyl)-cyclopropylamines derivative regression was estimated and predicted with relative errorless than 16% and with correct classification ratio being 94.4%. The results obtained by the developed NN(MBP) method seem to be better than those by multivariate regression(MR) and step-wise regression(SR). The NN(MBP) method was, therefore, regarded as an excellent chemometric modeling technique for estimating and predicting biological activity on basis of chemical structure for QSAR studies.

Keywords: Chemometric QSAR N-(Substituted phenoxyethyl)-cyclopropylamines Neural networks

收稿日期 1994-12-08 修回日期 网络版发布日期

DOI:

基金项目:

通讯作者:

作者简介:

参考文献:

扩展功能

本文信息

► Supporting info

► PDF(274KB)

► [HTML全文]

► 参考文献

服务与反馈

► 把本文推荐给朋友

► 加入我的书架

► 加入引用管理器

► 引用本文

► Email Alert

► 文章反馈

► 浏览反馈信息

本文关键词相关文章

► 神经网络

► 计量化学

► 定量构效关系

► 环丙胺类衍生物

本文作者相关文章

► 李志良

► 胡芳

► 梁本熹

► 余虎

► 石乐明

► 李梦龙

► 酒井诚

PubMed

► Article by

- 王泽;李新城;朱伟兴.药物生物利用度遗传神经网络预测研究[J].药学学报, 2006,41(12): 1180-1183
- 吴涛;潘卫三;陈济民;张汝华.多目标同步优化法优化硫酸沙丁胺醇渗透泵控释片的制备工艺[J].药学学报, 2000,35(8): 617-621
- 傅旭春;梁文权;俞庆森.用理论参数预测药物的经皮渗透性[J].药学学报, 2001,36(2): 145-147
- 高守国;李睿;相秉仁.FAM神经网络用于药物反相高效液相色谱的流动相强度推荐[J].药学学报, 2001,36(9): 676-678
- 魏晓红;吴建军;梁文权.神经网络用于口服缓释制剂的处方设计[J].药学学报, 2001,36(9): 690-694
- 亓云鹏;吴玉田;方慧生;李通化.Madaline 网络用于药物复方制剂的含量测定[J].药学学报, 2001,36(12): 925-927
- 乔延江;王玺;毕开顺;罗旭.人工神经网络在中药蟾酥化学模式识别特征提取中的应用[J].药学学报, 1995,30(9): 698-701

文章评论 (请注意:本站实行文责自负,请不要发表与学术无关的内容!评论内容不代表本站观点.)

反馈人	<input type="text"/>	邮箱地址	<input type="text"/>
反馈标题	<input type="text"/>	验证码	<input type="text"/> 0937