

Computer Aided Drug Discovery

نویسنده :

دکتر محبوبه منصوریان



۱۳۹۸



منصوریان، محبوبه، ۱۳۵۸ -	سرشناسه
Mansourian, Mahboubeh	عنوان و نام پدیدآور
Computer aided drug discovery [Book]/author Mahboubeh Mansourian	م. مشخصات نشر
یاسوج، چویل، ۱۳۹۸ = ۲۰۲۰ م.	م. مشخصات ظاهری
۱۳۳ ص: مصور (رنگی).	شابک
۹۷۸-۶۰۰-۴۴۵-۰۸۱-۲	م. مشخصات فهرست نویسی
فیبا	یادداشت
انگلیسی.	آوانویسی
کامپیوتر...	موضوع
مواد مخدر -- منابع شبکه کامپیوتری	موضوع
Narcotics -- Computer network resources	موضوع
اعتیاد -- منابع شبکه کامپیوتری	موضوع
Drug addiction -- Computer network resources	موضوع
مواد مخدر -- قاچاق -- پی جویی	موضوع
Drug traffic -- Investigation	موضوع
پی جویی -- ماف -- کنتریکم	موضوع
Elective prospecting	موضوع
۳۲۸ M	رده بندی کنگره
۷۸۲۲/۶۱۵	رده بندی دیویی
۶۰۳۸۴۷۷	شماره کتابشناسی ملی



« Computer Aided Drug Discovery »

مؤلف	:	منصوریان، محبوبه
ناشر	:	چویل
صفحه آرا	:	الناز فرهنگد
تیراژ	:	۱۰۰۰ جلد
نوبت چاپ	:	اول ۱۳۹۸
تعداد صفحات	:	۱۳۳ صفحه
قطع	:	وزیری
قیمت	:	۳۰۰۰۰ تومان
شابک	:	۹۷۸-۶۰۰-۴۴۵-۰۸۱-۲
لیتوگرافی، چاپ و صحافی	:	صدف

آدرس: یاسوج، خیابان ارم، فرعی ۹، پلاک ۱۰
تلفن: ۰۹۱۷۷۴۱۰۵۹۴

Table of Contents

Acknowledgements.....	11
Introduction.....	12
Chapter 1	
1. General introduction.....	13
1.1. The cell membrane.....	13
1.1.1. Membrane proteins.....	14
1.1.2. G-Protein-coupled receptors (GPCRs).....	15
1.1.2.1. Classification of GPCRs.....	17
1.1.2.2. Activation of GPCRs.....	18
1.1.2.3. Post-translational modifications in GPCRs.....	20
1.1.2.3.1. Glycosylation.....	21
1.1.2.3.2. Palmitoylation.....	23
Chapter 2	
2. Adenosine receptors.....	25
2.1. Adenosine receptors.....	25
2.1.1. A _{2B} adenosine receptor.....	26
2.1.1.1. Signalling pathways and regulation.....	26
2.1.1.2. Therapeutic applications of... ..	28
2.1.2. A ₁ adenosine receptor.....	30
2.1.2.1. Signalling pathways and regulation.....	30
2.1.2.2. Therapeutic applications of... ..	31

Chapter 3

3. Computer aided drug discovery	33
3.1. Computational methods in drug discovery.....	33
3.1.1. Direct and indirect modeling in drug discovery methods ..	37
3.1.1.1. Indirect approaches	37
3.1.1.2. Direct approaches.....	37
3.2. Molecular Modeling.....	39
3.2.1. Homology modeling of protein target	39
1) Protein threading.....	41
2) Ab initio modeling.....	42
3) Topology modeling,	42
3.2.2. The steps of homology modeling	46
3.2.2.1. Identification of known structures (templates).....	46
3.2.2.2. Alignment of the	48
3.2.2.3. Building of the model based on	50
3.2.2.4. Refinement and optimization of	52
3.2.2.5. Quality assessment and validation of... ..	53
3.3. Molecular dynamics simulation.....	54
3.3.1. Basic concepts in molecular dynamics simulation.....	56
3.3.2. Force fields	58
3.3.3. Ensemble and periodic boundary conditions	62
3.3.4. Constraints	67
3.3.5. Energy minimization.....	68
3.3.6. Integrating molecular motion.....	69
3.4. Molecular docking.....	71
3.4.1. Posing.....	72
3.4.2. Search algorithms	75
3.4.3. Scoring	77
3.4.4. Drawbacks and challenges	81
3.5. Quantitative structure – activity relationship.....	83
3.5.1. Data set selection.....	85
3.5.2. Molecular descriptors.....	86

3.5.3. Splitting the data set into training and test sets.....	88
3.5.3.1. Objective feature selection.....	90
3.5.3.2. Subjective feature selection	91
3.5.3.3. Variable selection methods.....	91
3.5.4. Multivariate data analysis methods.....	92
3.5.4.1. Multiple linear regressions (MLR)	93
3.5.4.2. Partial least squares (PLS)	94
3.5.5. Model validation.....	98
3.5.5.1. External validation	99
3.5.5.2. Internal validation	99
3.5.5.2.1. Cross validation.....	100
3.5.5.2.2. K-fold cross validation.....	103
3.5.5.2.3. Randomization testing.....	104
3.5.5.2.4. Boot-strapping.....	104
3.5.6. Outlier	105
3.6. Overall Conclusions	106
3.7. References	109