



ارائه شده توسط:

سایت ترجمه فا

مرجع جدیدترین مقالات ترجمه شده

از نشریات معتبر

شبکه های عصبی مصنوعی در تحقیقات مرتبط با تحویل دارو و موضوعات دارویی

چکیده

تکنولوژی های شبکه های عصبی مصنوعی (ANNها) ظرفیت های شناسایی شبکه های عصبی مغز را مدل سازی میکند. مشابه با نورون ها داخل مغز، شبکه های عصبی ورودی ها را از بسیاری از منابع خارجی دریافت کرده، آن ها را پردازش کرده و بر اساس آن ها تصمیم گیری میکنند. بسیار جالب است که بدانیم که ANN ها سیستم نورون های عصبی را شبیه سازی کرده و مقایسه های نورون های تطبیقی عصبی را انجام میدهد. این شبکه های مصنوعی نیازمند ساختار های صلب و آزمایشی نیستند و میتوانند توابع را تنها با استفاده از داده های پیش زمینه ای و یا داده های ناقص نیز نگاشت کنند که این موضوع موجب میشود این شبکه ها ابزار بسیار قوی برای شبیه سازی سیستم های مختلف غیر خطی باشند. این شبکه های عصبی مصنوعی در زمینه های مختلف کاربرد دارند، مانند زمینه های مهندسی، زمینه های تشخیص الگو، و مدل سازی. ANN ها در بسیاری از ابعاد داروسازی شامل مدل سازی شبکه های عصبی مغزی، تحلیل داده ها، مدل سازی دارویی، ساختار پروتئین ها و عملکرد آن ها، بهینه سازی دوز دارو ها و تولید دارو، مدل سازی های شناسایی و تحویل دارو و تحقیقات دارویی نیز به صورت گسترده مورد استفاده قرار میگیرد.

1. مقدمه

در دهه ی گذشته، شبکه های عصبی مصنوعی توجه بسیار زیادی را از طرف دانشمندان و مهندسان دریافت کرده اند و به عنوان یکی از بزرگترین ابزار محاسباتی در این زمینه مورد استفاده قرار میگیرد. بسیاری از این توجه به این دلیل است که این شبکه ها میتوانند توانایی مغز انسان را شبیه سازی کنند تا فرآیند یادگیری را انجام دهند. این شبکه میتواند تصمیم گیری کرده و زمانی که در معرض اطلاعات ناقص قرار میگیرد نتیجه گیری مناسب انجام دهند. علاوه بر این، در بعضی از سطوح اولیه، شبکه های عصبی میتوانند روند های خلاقیت مغز انسان را برای تطبیق با شرایط

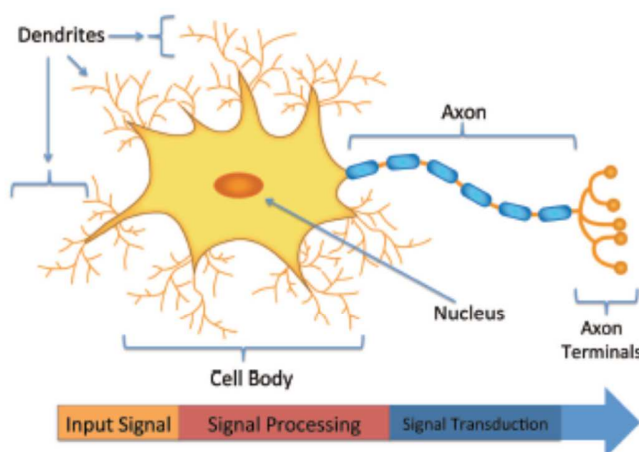
جدید، تقلید کنند. این ابزار، یکی از بهترین روش ها برای محاسبات عددی و همچنین محاسبات غیر عددی میباشد. به صورت خاص، ANN ها یکی از ابزار قوی برای شبیه سازی سیستم های غیر خطی مختلف هستند و در بسیاری از روش ها و مسائل عددی با پیچیدگی زیاد، از این شبکه ها استفاده میشود، در زمینه هایی شامل مهندسی، روان شناسی، شیمی دارویی، تشخیص بیماری، و تحقیقات دارویی.

2. مدل سازی شبکه های عصبی مصنوعی

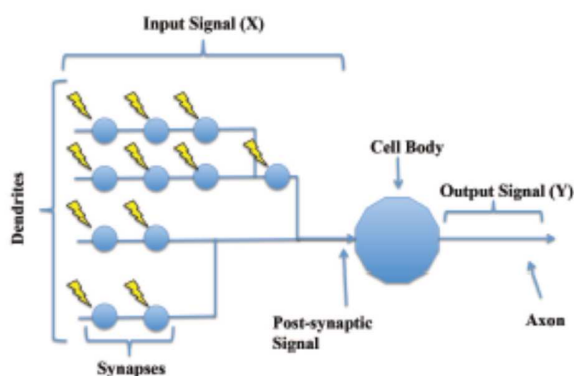
مدل های محاسبه ای که از فرآیند های زیستی الهام گرفته است، موجب شده که این ANN ها بتوانند بسیاری از توانایی های پردازشی عصبی مغز انسان را شبیه سازی کنند. به صورت میانگین مغز انسان شامل 100 میلیارد نورون عصبی است که هر کدام از آن ها با هم 1000 تا 10000 اتصال دارند. یک نورون شامل سه بخش اصلی میباشد - دندریت ها (که به شاخه های زیادی منشعب میشود) که سیگنال ها را به سلول منتقل میکند، بدنه ی سلولی که اطلاعات را دریافت و آن ها را پردازش میکند، و آکسون (یک دنباله ی طولانی) میباشد. (شکل 1). این آکسون سیگنال ها را از سلول خارج کرده و آن را به دندریت های نورون بعدی و یا دریافت کننده ی یک سلول، منتقل میکند. سیگنال ها در همه و یا هیچ کدام از نورون ها تفسیر میشوند. تمام اتصالات در مغز، این قابلیت را به مغز داده است تا الگو ها را شناسایی کرده و خروجی ها را پیش بینی کند. به صورت مشابه با مغز، ANN ها شامل نورون هایی هستند که به عنوان واحد های پردازشی فعالیت میکنند که به آن ها نورون های مصنوعی گفته میشود. اتصالات میان تمام این نورون ها از نظر قوت تفاوت دارد که این تفاوت توسط وزن های لایه مشخص میشود. ANN ها عملکرد مغز انسان را تقلید کرده و به صورت پتانسیل میتواند رویای دانشمندان برای ایجاد ماشین هایی که بتوانند مانند انسان فکر کنند را محقق سازد. ANN ها یادگیری و عمومی سازی رفتار مغز انسان را از طریق مدل سازی داده ها و شناسایی الگو های مغزی برای حل مسئله های پیچیده، شبیه سازی میکنند. یک تفاوت بسیار محسوس بین شبکه های عصبی و یک مدل آماری این است که ANN ها میتوانند روابط بین متغیر های مستقل و وابسته را بدون توابع خاص ریاضی، عمومی سازی کنند. ازین رو، یک ANN برای حل مسئله های غیر خطی با متغیر ها و پاسخ های مختلف حل کنند،

مانند تحلیل های فضایی در روابط فعالیت های ساختاری کمی در مطالعه های دارویی و پیش بینی ساختار در توسعه ی دارو ها.

انواع بسیار متفاوتی از شبکه های عصبی وجود دارد و در عین حال بسیاری از شبکه های جدید نیز اختراع میشود : اما، تمام پویش ANN را میتوان با تابع تبدیل شان در واحد پردازش (PE) ، قوانین یادگیری و فرمول های اتصالات آن توصیف کرد. PE که بخش ساختاری ANN است، بسیاری از سیگنال ها را به عنوان متغیر های فرآیندی وزن دار از پاسخ دیر واحد ها دریافت میکند و پردازش را روی آن ها انجام میدهد. رایج ترین ANN هایی که مورد استفاده قرار میگیرد ، شبکه های پیش انتشار هستند که توسط روش پس انتشار خطا تمرین داده میشوند.



(A)

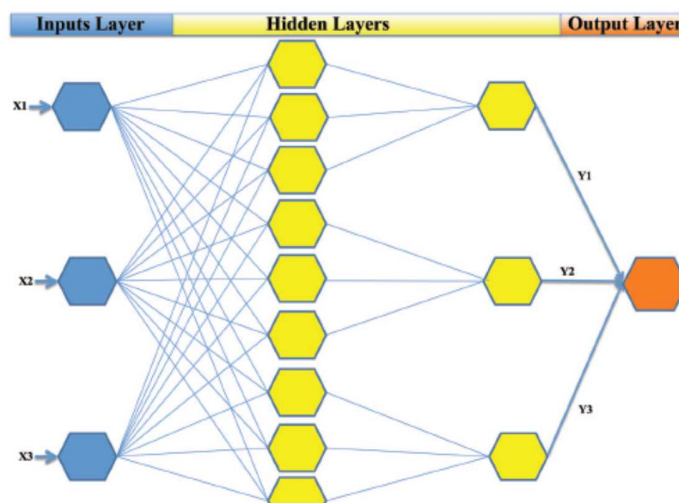


شکل 1

شبکه ی پیش انتشار شامل لایه ی ورودی، یک و یا چند لایه ی خروجی (شکل 2) میباشد. لایه ی ورودی شامل داده هایی است که از منبع خارجی فراهم میشود. نگاشت داده های ورودی توسط شبکه های عصبی پنهان انجام میشود، سپس سیگنال نماینده ی نهایی توسط لایه ی خروجی ایجاد میشود. توانایی شبکه های عصبی برای طبقه بندی اطلاعاتی مبتنی بر لایه های پنهان است که کاملاً توسط سیناپس ها به لایه های بعدی متصل شده است. در هر لایه ی پنهان و لایه ی خروجی، واحد پردازشی ورودی از لایه ی قبل را با یک تابع هلالی (سیگموئید) جمع میکند تا خروجی را به لایه ی بعدی بر اساس معادله ی 1 و 2 بدهد :

$$y_q = \sum w_{pq} x_p \quad (1)$$

$$f(y_q) = \frac{1}{1 + \exp(-\alpha y_q)} \quad (2)$$



شکل 2

که w_{pq} نشان دهنده ی قدرت اتصالات بین واحد q در لایه ی فعلی به واحد p در لایه ی قبلی میباشد، x_p نیز مقدار خروجی از لایه ی قبلی است، نیز به عنوان مقدار خروجی به لایه ی بعدی به عنوان مقدار خروجی منتقل شده است و α نیز پارامتر مرتبط با شکل تابع هلالی میباشد. این شبکه های عصبی به صورتی هستند که میتوانند فضای جستجو را بررسی کرده و بتوانند به پاسخ بهینه دست پیدا کنند. بیشتر روش هایی که اکنون مورد

استفاده قرار میگیرد از شبکه های پس انتشار خطا استفاده میکنند . به این صورت که یک مرحله ی تمرینی بر روی مدل سازی کار میکند تا بتواند خطا را به حداقل برساند.

طراحی شبکه نیز به این صورت است که تعدادی از لایه های پنهان برای عملکرد شبکه مورد نیاز هستند که این لایه ها بر روی تعداد اتصالات در شبکه تاثیر دارند و ازین رو بر روی عملکرد تاثیر میگذارد. یکی از روش های رایج برای مشخص کردن تعداد گره های پنهان در شبکه استفاده از روش آزمون و خطا است . البته کران بالایی تعداد گره های پنهان بر روی مدل ANN را میتوان با استفاده از معادله ی زیر به دست آورد :

$$n_s = \beta \{n_h(n_i + 1) + n_o(n_h + 1)\} \quad (3)$$

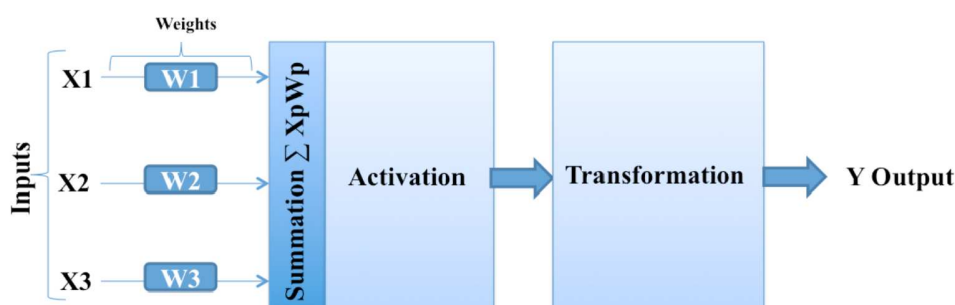
که N_{hidden} تعداد لایه های پنهان ؛ N_{trn} تعداد نمونه های تمرینی میباشد ؛ R نیز یک ثابت با مقادیری است که بین 5 تا 10 میباشد، N_{inp} نیز تعداد ورودی ها و N_{out} تعداد خروجی ها میباشد.

هدف مجموعه ی تمرینی نیز بررسی فضای جستجو برای به دست آوردن وزن های مختلف در لایه های مختلف است تا میزان خطا به حداقل مقدار ممکن برسد. در بعضی از نقطه ها این شبکه ممکن است در حالت بهینه ی محلی گیر کند، که خطا کمتر است اما میزان خطا نسبت به حالت بهینه بیشتر میباشد. روش های تجربی مانند استفاده از تکنیک های القای تکرار و یا کاهش گام پیشروی ، پیشنهاد شده است تا از این مینیموم محلی پیش گیری شود.

میزان تمرین ها نیز دارای اهمیت زیادی میباشد زیرا ANN هایی که تمرین کمی انجام داده باشند در سیگنال خروجی خودشان خطای زیادی را ایجاد میکنند و دیگر این شبکه نمیتواند الگو ها را به خوبی شناسایی کند. معادله ی 4 نشان دهنده ی تعداد مورد نیاز واحد ها در لایه های ورودی، لایه های پنهان و لایه های بهینه ی خروجی میباشد که میتوان برای پیش بینی تعداد جفت های تمرینی از آن ها استفاده کرد :

$$AIC = n_s \ln(SS) + 2xI \quad (4)$$

که n_h تعداد لایه های پنهان، n_i تعداد لایه های ورودی، n_o تعداد لایه های خروجی و n_s نیز تعداد جفت های تمرینی میباشد. ثابت بتا نیز پارامتری است که مرتبط با درجه تعیین میباشد



شکل 3

یادگیری در شبکه های عصبی به دو صورت سرپرست دار و بدون سرپرست انجام میشود. در حالت سرپرست دار، یک خروجی به عنوان خروجی مطلوب به شبکه داده میشود و سپس شبکه سعی میکند تا با استفاده از داده های ورودی و الگو های آن ها، یک خروجی نزدیک به خروجی مطلوب به دست بیاورد و زمانی که خطای خروجی به دست آمده نزدیک به صفر میشود، در واقع روند یادگیری متوقف میشود. در حالت یادگیری بدون سرپرست، هیچ خروجی مطلوبی برای شبکه وجود ندارد و شبکه باید خودش تصمیم گیری کند که باید چه ویژگی هایی را برای به دست آوردن خروجی انتخاب کند که به این روند خود سازمان دهی و یا تطبیق گفته میشود. یکی از رایج ترین الگوریتم های تمرینی بر اساس قانون دلتا میباشد که بر اساس آن، هر کدام از داده های تکرار (که به آن ها یک گام گفته میشود) به صورت معادله ی زیر ایجاد میشود :

تغییر وزن جدید = قانون یادگیری * خطا + اندازه حرکت + تغییرات وزنی نهایی

3. کاربرد شبکه های عصبی مصنوعی و مدل سازی آن ها در تحقیقات تحویل دارو و داروسازی

کاربرد شبکه های مصنوعی در این زمینه بسیار گسترده است زیرا این شبکه ها قابلیت الگو سازی، مدل سازی، و شناسایی الگو ها را دارد که میتواند به تعیین دوز مورد نیاز، شناسایی ساختار های پروتئینی، و پیش بینی ساختار های مورد نیاز به ما کمک کند.

3.1 کاربرد های تحلیل های داده ها در ANN ها و رابطه ی ساختار بازبایی (SRP) در تحقیقات دارویی

ANN ها به این دلیل که میتوانند الگو ها را در طیف گسترده ای از داده ها شناسایی کنند و میتوانند روابط غیر خطی را در این حوزه ها مدل سازی کنند، دارای فایده ی بسیار زیادی میباشند. همچنین این شبکه ها میتوانند نمونه های

مختلف را در طیف شناسایی های مختلف شناسایی کند. به عنوان مثال این شبکه ها میتوانند بر اساس اطلاعات طیف شناسی نوری، میتوانند ساختار های مختلفی را شناسایی کند. به عنوان مثال میتوان با استفاده از داده های انعکاس نوری IR و یا داده های پراش Xray، ساختار های مختلف را در مواد شناسایی کرد که این موضوع میتواند در زمینه ی دارو سازی بسیار مفید باشد. همچنین ANN ها نیز یکی از روش های بهینه برای جدا سازی در روند های رنگ آمیزی میباشد. ANN هایی با معماری های 9-10-1 میتوانند زمان بازیابی برای آنیون ها در شویش شیب خطی کروماتوگرافی یونی بسیار مفید میباشد. همچنین میتوان از ANN ها برای پیش فرمول سازی برای ساختار های پلیمری و پیش بینی خاصیت آن ها نیز استفاده کرد.

به عنوان مثال Takayama و همکارانش از ANN ها استفاده کردند تا بتوانند زمان بهینه ی آزاد سازی دارو ها در بدن را فراهم کنند. نتایج بررسی های آن ها نشان داد که با استفاده از ANN ها میتوان ویژگی های رها سازی دارو ها را بر اساس ساختار به خوبی پیش بینی کرده و آن ها را در صورت نیاز اصلاح کرد.

همچنین به دلیل توانایی این شبکه ها در تشخیص الگو ها، ANN ها میتوانند دامنه های شناسایی را گسترش داده و بتوانند پروتئین ها، طبقه بندی آنزیم ها، و توالی آن ها و ترکیب ها و ویژگی های آن ها را شناسایی کنند. این ویژگی ها در مطالعه ی ساختار پروتئین ها و پیش بینی ساختار سوم پروتئین ها بسیار مناسب هستند.

همچنین شبکه های عصبی نیز کاربرد بسیار زیادی در بررسی حرکت دارو ها در بدن (PK) و تاثیر و مکانیزم عمل آن ها دارد (PD) و میتواند تعامل های دارویی در سیستم های زیستی مختلف را بررسی کند. این شبکه های عصبی به عنوان یکی از ابزار تحلیل برای تحلیل داده های دارو شناسی استفاده میشود و توانایی های بسیار بالایی را نشان داده است.



این مقاله، از سری مقالات ترجمه شده رایگان سایت ترجمه فا میباشد که با فرمت PDF در اختیار شما عزیزان قرار گرفته است. در صورت تمایل میتوانید با کلیک بر روی دکمه های زیر از سایر مقالات نیز استفاده نمایید:

لیست مقالات ترجمه شده ✓

لیست مقالات ترجمه شده رایگان ✓

لیست جدیدترین مقالات انگلیسی ISI ✓

سایت ترجمه فا ؛ مرجع جدیدترین مقالات ترجمه شده از نشریات معتبر خارجی