Multi Dimensional Quantitative Structure Activity Relationship

کمومتریکس مولکولی شاخه‌ای از علم کمومتریکس است که در آن به ارتباط کمی بین ساختار و فعالیت، مدل‌سازی کیفی و دسته بندی سیستم‌های شیمیایی می‌پردازد. کمومتریکس مولکولی با روابط کمی بین ساختار و فعالیت بیولوژیکی را (QSAR) گویند.

روش‌های مدل‌سازی چند بعدی QSAR به چند گروه تقسیم می‌شوند که به دو مورد آن اشاره می‌شود:

۱-Two Dimensional QSAR (2D- QSAR)

۲-Three Dimensional QSAR (3D-QSAR)

در روش 2D-QSAR ساختار دو بعدی مولکول مورد بررسی قرار می‌گیرد و مولکول به قطعاتی تقسیم شده و براساس الگوریتم‌های به خصوصی تعدادی توصیف کننده‌ی مولکولی بدست می‌آید و در مجموع با در نظر گرفتن فعالیت مشاهده شده از مولکول و توصیف کننده‌ها مدل ساخته می‌شود.

در روش 3D-QSAR ساختار سه بعدی مولکول مورد بررسی قرار گرفته و مولکول در یک شبکه منظم سه بعدی قرار می‌گیرد و سپس برهمکنشهای الکتروستاتیک و فضایی بین مولکول مورد نظر و یک اتم فرضی قرار گرفته در محل نقاط تقاطع این شبکه محاسبه شده و به عنوان توصیف کننده استخراج می‌شود. در نهایت با استفاده از روش‌های مدل‌سازی، مدل بین فعالیت مولکول و توصیف کننده‌های مربوطه به دست می‌آید. این روش مزایای بیشتری نسبت به روش دو بعدی دارد اما پیچیدگی‌های آن نیز بیشتر است و اجازه می‌دهد که نگرشی روشن‌تر نسبت به برهمکنش بین مولکول و هدف داشته باشیم که نقش مهمی در فعالیت‌های تجربی مشاهده شده ایفا می‌کند.

از کاربردهای این دو روش، یافتن داروهای موثر برای مقابله با بیماری‌هایی از قبیل سرطان، ایدز، بیماری‌های مشترک انسان و دام، مقاوم شدن ویروس‌ها در مقابل آنتی بیوتیک‌ها و ... است که سلامت انسان را به مخاطره انداخته است. در این روش‌ها، با برقراری رابطه کمی بین ساختار و فعالیت بیولوژیکی داروهای شناخته شده، مدل ساخته می‌شود و سپس مدل ساخته شده به پیش بینی فعالیت ترکیبات دارویی جدید، قبل از سنتز و یا انجام آزمایش برروی آن‌ها می‌پردازد، چرا که انجام آزمایش مستلزم صرف زمان و هزینه‌های زیادی است. بنابراین ظهور این روش‌ها توانسته است راه حلی برای رفع این مشکلات باشد.