

บทคัดย่อ

Project Code : MRG6180226

(รหัสโครงการ)

Project Title : แบบจำลองทางคอมพิวเตอร์เพื่อใช้ในการออกแบบและพัฒนาสายเปปไทด์ที่มีประสิทธิภาพเพื่อใช้ในการทำลายเนื้องอก

Investigator : ผศ. ดร. วัชร ชุ่มบัวทอง เทคนิคการแพทย์ มหาวิทยาลัยมหิดล

Mentors : รศ. ดร. ชรินทร์ นันทเสนามาตร เทคนิคการแพทย์ มหาวิทยาลัยมหิดล

รศ. ดร. สุรรัตน์ พรธาดาวิทย์ เทคนิคการแพทย์ มหาวิทยาลัยมหิดล

E-mail Address : watshara.sho@mahidol.ac.th

Project Period : 2 ปี (2 พฤษภาคม พ.ศ. 2561 ถึง 1 พฤษภาคม พ.ศ. 2563)

(ระยะเวลาโครงการ)

บทคัดย่อ

สายเปปไทด์ที่มีประสิทธิภาพเพื่อใช้ในการทำลายเนื้องอกได้ถูกนำมาใช้ในการรักษาโรคมะเร็งเนื่องจากสายเปปไทด์ตัวนี้มีค่าความเป็นพิษต่ำและมีความจำเพาะต่อเซลล์มะเร็งมากกว่ายาชนิดอื่น แต่อย่างไรก็ตามวิธีการทางทดลองเพื่อใช้ในการระบุสายเปปไทด์ที่มีประสิทธิภาพเพื่อใช้ในการทำลายเนื้องอกนั้นใช้เวลาและเสียค่าใช้จ่ายค่อนข้างสูง ดังนั้นจึงมีความจำเป็นที่ต้องพัฒนาตัวแบบการทำนายทางคอมพิวเตอร์เพื่อใช้ในการวิเคราะห์ข้อมูลดังกล่าวอย่างรวดเร็วและมีประสิทธิภาพ โดยงานวิจัยชิ้นนี้ผู้วิจัยจึงได้มีการพัฒนาตัวแบบการทำนายทางคอมพิวเตอร์ที่สามารถวิเคราะห์ผ่านทางสายลำดับเปปไทด์เพื่อใช้ในการทำนายและวิเคราะห์สายเปปไทด์ที่มีประสิทธิภาพเพื่อใช้ในการทำลายเนื้องอกที่มีชื่อว่า ACPred โดยพัฒนาจากซอฟต์แวร์เวกเตอร์แมชชีน และ แรนด้อมฟอเรส จากผลการทำนายโดยใช้ jackknife test พบว่า ACPred ให้ค่าความถูกต้อง 95.61% ยิ่งไปกว่านั้นเพื่อความสะดวกแก่นักวิจัยที่ได้ทำแลปผู้วิจัยจึงได้สร้างเว็บไซต์ <http://codes.bio/acpred/>

คำหลัก : สายเปปไทด์ที่มีประสิทธิภาพเพื่อใช้ในการทำลายเนื้องอก, เปปไทด์ที่ใช้ในการรักษา, การจำแนก, การเรียนรู้จากแมชชีน, แรนด้อมฟอเรส

Abstract

Project Code : MRG6180226

Project Title : *In silico* approaches for designing and developing highly effective anticancer peptides

Investigator : Assist. Prof. Dr. Watshara Shoombuatong Faculty of Medical Technology, Mahidol University

Mentors : Assoc. Prof. Dr. Chanin Nantasenamat Faculty of Medical Technology, Mahidol University
Assoc. Prof. Dr. Sureerut Porntadavit Faculty of Medical Technology, Mahidol University

E-mail Address : watshara.sho@mahidol.ac.th

Project Period : 2 years (2 May 2018 – 1 May 2020)

Abstract:

Anticancer peptides (ACPs) have emerged as a new class of therapeutic agent for cancer treatment due to their lower toxicity as well as greater efficacy, selectivity and specificity when compared to conventional small molecule drugs. However, the experimental identification of ACPs still remains a time-consuming and expensive endeavor. Therefore, it is desirable to develop and improve upon existing computational models for predicting and characterizing ACPs. In this study, we present a bioinformatics tool called the ACPred, which is an interpretable tool for the prediction and characterization of the anticancer activities of peptides. ACPred was developed by utilizing powerful machine learning models (support vector machine and random forest) and various classes of peptide features. It was observed by a jackknife cross-validation test that ACPred can achieve an overall accuracy of 95.61% in identifying ACPs. Finally, for the convenience of experimental scientists, the ACPred web server was established and made freely available online at <http://codes.bio/acpred/>.

Keywords : Anticancer peptide, therapeutic peptide, classification, machine learning, random forest, support vector machine