





دانشگاه زابل

مدیریت تحصیلات تکمیلی

دانشکده علوم پایه

گروه بیوانفورماتیک

پایان نامه جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد در رشته بیوانفورماتیک

بر آورد حلالیت داروی های آناستروزول، اگزامستان و لتروزول مهارکننده آروماتاز در سیال فوق بحرانی کربن دی اکسید با استفاده از هوش مصنوعی

استاد راهنما:

دکتر مصطفی خواجه

استادان مشاور :

دکتر موسی بهلولی

دکتر غفاری مقدم

تهیه و تدوین:

شکوفه بلواری زاده دشتستانی

شهریور ۱۴۰۲

چکیده

امروزه از روش سیال فوق بحرانی به دلیل آسیب نزدن به محیط زیست و بازدهی بالا در صنایع مختلف استقبال گسترده ای شده است. اصلی ترین حسن استفاده از سیال فوق بحرانی استفاده نکردن از حلال آلی است. در این فناوری از یک حلال در شرایط فوق بحرانی جهت جداسازی استفاده می شود مهمترین حلال فوق بحرانی شناخته شده در این فرایند CO_2 می باشد. در این تحقیق از شبکه عصبی پرسپترون جهت تخمین میزان حلالیت داروی های آناستروزول (آریمیدکس)، اگزمستان (آروماسین)، لتروزول (فمارا) مهارکننده آروماتاز با استفاده از سیال فوق بحرانی کربن دی اکسید استفاده شده است. از داده ها در شرایط مختلف دما، فشار و چگالی در مدل سازی استفاده شده است. نرون های لایه میانی از توابع تبدیل تانژانت سیگموئید و نرون های لایه خروجی از توابع تبدیل خطی به منظور تابع فعالیت استفاده می کنند و برای آموزش و بهینه سازی شبکه عصبی از الگوریتم لونبرگ-مارکوات به عنوان روش آموزش شبکه عصبی انتخاب شده است. جهت ارزیابی شبکه از میانگین مربعات خطا (MSE) و ضریب همبستگی (R^2) استفاده شده است. در این تحقیق میانگین مربع خطا (MSE) روی عدد 0.078295 و ضریب همبستگی (R^2) روی عدد 0.9764 ثابت می شوند که عددهای مطلوبی است که نشان می دهد این شبکه نتایج مورد انتظار ما را فراهم می آورد.

کلمات کلیدی: سیال فوق بحرانی، کربن دی اکسید، دارو آروماتاز، هوش مصنوعی

Abstract

Today, the supercritical fluid method is widely accepted in various industries due to its environmental friendliness and high efficiency. The main advantage of using supercritical fluid is not to use organic solvent. In this Science China Technological Sciencesogy, a solvent is used in supercritical conditions for separation. The most important supercritical solvent known in this process is CO₂. In this research, perceptron neural network has been used to estimate the solubility of Anastazole (Arimidex), Exemestane (Aromasin), Letrozole (Femara) aromatase inhibitors using carbon dioxide supercritical fluid. The data in different conditions of temperature, pressure and density have been used in modeling. The intermediate layer neurons use sigmoid tangent transformation functions and the output layer neurons use linear transformation functions for the activity function, and for training and optimizing the neural network, Lunberg-Marquardt algorithm is chosen as the neural network training method. Mean square error (MSE) and correlation coefficient (R^2) have been used to evaluate the network. In this research, the mean square error (MSE) is 0.078295 and the correlation coefficient (R^2) is 0.9764, which are favorable numbers that show that this network provides the expected results.



University of Zabol
Graduate school
Faculty of Agriculture
Department of Basic Sciences

**The Thesis Submitted for the Degree of M.Sc
(in the field of Bioinformatic)**

**Estimation of solubility
Anastasol(Arimidex),Exemestane
(Aromasin),Letrozole (Femara) drugs
dioxide in supercritical fluid of carbon
using artificial intelligence**

Supervisors:
Dr. M.Khajeh

Advisors:
Dr. M. Ghafari Moghadam
Dr. M. Bohlooli

By:
Shekoofeh Bolvary zadeh dashtestani

September 2023