





دانشگاه زابل

مدیریت تحصیلات تکمیلی

دانشکده علوم پایه

گروه بیوانفورماتیک

ارزیابی حلالیت چند دارویی استاتین درسیال فوق بحرانی با استفاده از شبکه عصبی پرسپترون

چند لایه

استاد راهنما

دکتر مصطفی خواجه

اساتید مشاور

دکتر موسی بهلولی

دکتر منصور غفاری مقدم

نگارش

راضیه افراسیابی

شهریور ۱۴۰۲

## چکیده

حلالیت دارو یک پارامتر حیاتی در صنعت داروسازی برای توسعه فرآیندهای کارآمد برای تولید نانودارو در مقیاس صنعتی است. در سال‌های اخیر تلاش‌های زیادی برای بررسی و به دست آوردن این پارامتر با استفاده از روش‌های مختلف داده کاوی از جمله شبکه‌های عصبی صورت گرفته است. در این مطالعه برای کاهش میزان خطا در پیش‌بینی حلالیت، از روش پرسپترون چند لایه (MLP) استفاده شد. برای این کار داده‌های تجربی برای حلالیت چند داروی توسط سیال فوق بحرانی کربن دی اکسید جمع‌آوری شده است. سپس نتایج این مدل‌ها مورد بررسی قرار گرفته شد و با داده‌های اندازه‌گیری شده برای کالیبره‌سازی و اعتبارسنجی مدل‌های توسعه‌یافته مقایسه شدند. نتایج حاصل نشان داد میزان صحت تخمینی با استفاده از روش پرسپترون چند لایه برای کل داده‌ها، آموزش، اعتبار سنجی و تست به ترتیب ۰/۹۳۲۶، ۰/۹۲۷۴، ۰/۹۵۶۳ و ۰/۹۱۷۳ بود که بیانگر وجود رابطه خوب بین نتایج تجربی و نتایج حاصل از پیش‌بینی بوده‌است. به طور کلی روش بکار گرفته شده بیانگر دقت بالای بین مقادیر پیش‌بینی شده و مقادیر واقعی بوده.

کلمات کلیدی: فوق بحرانی، سیال فوق بحرانی، کربن دی اکسید،  $\text{CO}_2$ ، شبکه عصبی مصنوعی، استاتین

## **Abstract**

Drug solubility is a critical parameter in the pharmaceutical industry for developing efficient processes for production of nanomedicine at industrial scale. Several attempts have been made in recent years to investigate and obtain this parameter using various data mining methods, including neural networks. In this study, to reduce the error rate in predicting solubility, methods including Multi-layer Perceptron (MLP). It have been applied to 32 rows of experimental data collected for solubility of a model drug in supercritical CO<sub>2</sub>. Afterwards, the results of these models are examined and compared with measured data to calibrate and validate the developed models. The results showed that the estimated accuracy using the multi-layer perceptron method for all data, training, validation and testing was 0.9326, 0.9274, 0.9563 and 0.9173 respectively, which indicates the existence of a good relationship between the results It is experimental and results obtained from prediction. In general, the method used showed high accuracy of predicted values and actual values.

**Keywords:** Supercritical, Supercritical fluid, Carbon dioxide, Artificial Neural Network (MLP), statin drug



University of Zabol

Graduate school

Faculty of Sciences

Department of Bioinformatics

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

# **Evaluation of stations drugs solubility in supercritical fluid with use of multilayer perceptron neural network**

**Supervisor:**

Dr. M. Khajeh

**Advisors:**

Dr. M. Bohluli

Dr. M. Ghafari-Moghadam

**By:**

R. Afrasiabi

February 2023