

## عنوان مقاله:

مطالعه بر ارتباط کمی ساختار - فعالیت در مشتقات دارویی ایپروتینیب

## محل انتشار:

یازدهمین کنفرانس بین المللی شیمی، مهندسی شیمی و نفت (سال: 1402)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

## نویسندگان:

میثاق دانایی - دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت، رشت، ایران  
استادیار گروه شیمی و مهندسی شیمی، دکترای شیمی معدنی، دانشکده علوم، رشت، ایران

ربابه صیادی کردآبادی - استادیار گروه شیمی و مهندسی شیمی، دکترای شیمی معدنی، دانشکده علوم، دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت، رشت، ایران

## خلاصه مقاله:

در این مطالعه روش ارتباط کمی ساختار - فعالیت (QSAR) با مقادیر فعالیت بیولوژیکی (IC<sub>50</sub>) برخی از مشتقات دارویی ایپروتینیب با استفاده از روش های مدل سازی رگرسیون خطی چندگانه (MLR) و شبکه عصبی مصنوعی (ANN) و تکنیک بهینه سازی الگوریتم شبیه سازی (SA) انجام شد. با توجه به ضریب همبستگی ۲R و میانگین خطای مجموع مربعات RMSE روش MLR-MLR بهترین عملکرد را نشان دادند. مقادیر ۲R و RMSE در روش MLR-MLR و ۰/۶۹۷-۰/۳۸۵ و در روش الگوریتم شبیه سازی S.A و ۰/۸۶۹-۰/۱۰۶ گزارش شد.

## کلمات کلیدی:

مشتقات دارویی ایپروتینیب، رابطه کمی ساختار - فعالیت

## لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/1718971>

