

عنوان مقاله:

مدلسازی و پیش بینی فاکتور بازداری یک سری از ترکیبات آلی با استفاده اصول QSRR در کروماتوگرافی سیال فوق بحرانی

محل انتشار:

همایش ملی یافته های نوین شیمی در صنعت پزشکی (سال: 1388)

تعداد صفحات اصل مقاله: 6

نویسندگان:

محمدحسین فاطمی - دانشیار - شیمی تجزیه گرایش کمومتریکس

هانیه ملک زاده - دانشجوی کارشناسی ارشد - شیمی تجزیه گرایش کمومتریکس

خلاصه مقاله:

در این پژوهش ارتباط کمی ساختار فعالیت برای مدلسازی و پیش بینی فاکتور ظرفیت (k') در کروماتوگرافی سیال فوق بحرانی (SFC) به کار رفته است. در ابتدا مولکول هایی به عنوان سری داده ها انتخاب شدند و سپس این مولکولها به طور تصادفی به سه دسته تقسیم شدند: سری آموزشی، پیش بینی و آزمایشی. به کمک روش های انتخاب متغیر، توصیف کننده های مهمتر انتخاب و سپس به کمک روش رگرسیون خطی چندتایی (MLR) و شبکه های عصبی مصنوعی (ANN) بین این توصیف کننده ها و کمیت مورد نظر مدلسازی انجام شد. بدین منظور ابتدا پارامترهای شبکه عصبی مصنوعی که شامل تعداد گره های لایه ی مخفی، ممنتوم و سرعت آموزش وزن ها و بایاس می باشد با استفاده از داده های سری آموزشی بهینه شدند. سری آموزشی و پیش بینی برای ساختن و بهینه کردن مدل QSRR استفاده می شود و سری ارزیابی برای سنجش قدرت پیش بینی مدل به کار می رود. نتایج حاصل از بررسی ها، برتری مدل ANN را به MLR نشان میدهد. این امر می تواند ناشی از توانایی شبکه های عصبی مصنوعی در توجه کردن به برهم کنش بین توصیف کننده ها و در نظر گرفتن امکان ارتباط غیر خطی بین آنها و فعالیت مورد مدلسازی باشد.

کلمات کلیدی:

کروماتوگرافی سیال فوق بحرانی - رگرسیون خطی چند تایی - شبکه عصبی مصنوعی

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:

<https://civilica.com/doc/70964>

