

République Algérienne Démocratique Et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche
Scientifique

Université Constantine 3

Faculté de Génie de procédés pharmaceutiques

Département de chimie industrielle

Mémoire

Présenté pour obtenir le diplôme de Master

En

Génie pharmaceutique

Intitulé

*Prédiction du coefficient d'activité et
de la solubilité utilisant un modèle
hybride : réseaux de neurones-
NRTL, comparaison avec
UNIQUAC.*

Fait par:

TALOUB Nadia

ZAOUT Samiya

Sous la direction de Mme:

O. KOUTCHOUKALI

Promotion 2012/2013

SOMMAIRE

Introduction générale.....	1
----------------------------	---

Chapitre I

Équilibre liquide-solide et modèles thermodynamiques

Introduction.....	3
I.1 Équilibre liquide-solide et solubilité.....	3
I.1.1 Définition de la solubilité.....	3
I.1.2 Thermodynamique de l'équilibre liquide-solide.....	4
I.2 Modèles de coefficients d'activité, application aux équilibres liquide-solide.....	5
I.2.1. Le modèle NRTL.....	6
I.2.2. Le modèle UNIFAC.....	7

Chapitre II

Équilibres de phase et réseaux de neurones

Introduction.....	9
II.1 Définition d'un réseau de neurones artificiel.....	9
II.2. Modélisation par réseaux de neurones.....	13
II.3. Application des réseaux de neurones dans les équilibres de phase.....	14
Conclusion.....	14

Chapitre III

Résultats

Introduction.....	15
III.1 Détermination des paramètres d'interaction binaires NRTL.....	15
III.2 Mise en œuvre du réseau de neurones et apprentissage	16
III.3 Résultats	20

Résumé

L'une des caractéristiques fondamentales des médicaments est leur solubilité. Elle joue un rôle fondamental dans leur biodisponibilité. La synthèse organique d'un principe actif implique souvent de nombreuses étapes, et il faut en plus à posteriori consacrer beaucoup de temps pour trouver les solvants appropriés pour la solubilité optimale. L'utilisation d'une méthode prédictive pour la solubilité constitue donc un défi majeur. Dans ce travail, un modèle hybride combinant les réseaux de neurones artificiels (RNA) et une méthode de contribution de groupe a été utilisé pour créer un algorithme permettant de prédire les coefficients d'activité. L'apprentissage du réseau de neurones a été réalisé en utilisant une base de données expérimentales de solubilité, recensées dans la littérature. Les systèmes étudiés sont constitués essentiellement de principes actifs pharmaceutiques. Les résultats obtenus ont été comparés au modèle prédictif UNIFAC.

Abstract

One of the fundamental characteristics of drugs is their solubility. It plays a fundamental role in their bioavailability. Organic synthesis of an active ingredient often involves many steps, and there must also be a posteriori spend a lot of time to find suitable solvents for optimal solubility. Thus the use of a predictive method for solubility is a major challenge. In this work, a hybrid model combining artificial neural networks (ANN) and a group contribution method was used to create an algorithm to predict the activity coefficients. The learning of the neural network was made using a base of experimental solubility data found in the literature. The systems studied consist mainly of active pharmaceutical ingredients. The results were compared to the model predictive UNIFAC.