



Evento	Salão UFRGS 2022: SIC - XXXIV SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2022
Local	Campus Centro - UFRGS
Título	Desenvolvimento de modelos preditivos para a formulação de carregadores de fármacos nanoestruturados baseados em redes neurais artificiais
Autor	KETHERIN ANTONI
Orientador	VIVIANE RODRIGUES BOTELHO

Os nanossistemas carreadores de moléculas bioativas possuem grandes vantagens, sendo a principal o fato de que estes sistemas podem modular a biodisponibilidade e parâmetros farmacocinéticos dos compostos. Dentre eles, as microemulsões se destacam uma vez que são sistemas coloidais dinâmicos, isotrópicos e termodinamicamente estáveis formados espontaneamente pela dispersão de dois líquidos não-miscíveis entre si. Entretanto, o desenvolvimento massivo dessas formulações ainda é um desafio visto que requer uma carga experimental exaustiva. Visando contornar este problema, o uso de redes neurais artificiais vem se mostrando uma alternativa promissora para a predição da formação de microemulsões. Dessa forma, O presente projeto tem como objetivo o desenvolvimento de redes neurais artificiais para predição da formação de microemulsões a partir da concentração e de propriedades físico-químicas de misturas compostas por água, óleos e tensoativos. O procedimento da caracterização das formulações se deu a partir de sistemas preparados experimentalmente. A rede neural foi estruturada na linguagem *Python*, treinada e testada considerando os dados de composição e equilíbrio hidrofílico-lipofílico (EHL). Realizou-se o ajuste de hiperparâmetros através da avaliação de diferentes funções de ativação, arquiteturas e combinações de variáveis de entrada. O melhor modelo foi obtido a partir de dados de concentração e EHL, levando a acurácias superiores à 90%. Foi realizado levantamento na literatura para elencar novas propriedades físico-químicas e estas foram calculadas por meio de métodos de química computacional. Atualmente está sendo avaliada a utilização dos percentuais de carbono, hidrogênio e oxigênio provenientes dos tensoativos como novas entradas para o modelo. Os resultados preliminares apontam que a inserção dessas novas propriedades é satisfatória visto que o modelo apresentou curva de aprendizado com comportamento adequado. De forma paralela foi realizada a implementação de um algoritmo capaz de gerar diagramas ternários a partir do modelo treinado para viabilizar a visualização das regiões de formação de nanossistemas preditos.