

الحمد لله رب العالمين



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده شیمی

گروه شیمی فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد شیمی فیزیک

عنوان:

ارتباط کمی ساختار – خاصیت غیر خطی برای پیش بینی دانسیته‌ی مجموعه‌ی متنوعی از

ترکیبات آلی

نگارنده:

مریم مقصودی

اساتید راهنما:

دکتر زهرا کلانتر

دکتر حسین نیکوفرد

دی ماه ۱۳۹۷

شماره: ۱۸۸۹۸
تاریخ: ۹۷/۱۱/۲۹

باسمه تعالی

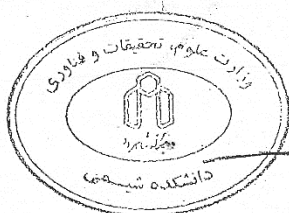


مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۳) صورتجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با نام و یاد خداوند متعال، ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد خانم مریم مقصودی با شماره دانشجویی ۹۴۳۹۱۲۴ رشته شیمی گرایش شیمی قویک تحت عنوان ارتباط کمی ساختار - خاصیت غیرخطی برای پیش بینی دانسیته‌ی مجموعه‌ی متنوعی از ترکیبات آلی که در تاریخ ۱۳۹۷/۱۰/۲۶ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می‌گردد:

قبول (با درجه: ☒ خیلی خوب) ☐ مردود			
نوع تحقیق: ☒ نظری ☐ عملی			
عضو هیأت داوران	نام و نام خانوادگی	مرتبه علمی	امضاء
۱- استاد راهنمای اول	دکتر زهرا کلاتر کهدمی	استادیار	
۲- استاد راهنمای دوم	دکتر حسین نیکوفرد	دانشیار	
۳- استاد مشاور			
۴- نماینده تحصیلات تکمیلی	دکتر قدمعلی باقریان دهقی	دانشیار	
۵- استاد ممتحن اول	دکتر محسن سرگلزایی	استادیار	
۶- استاد ممتحن دوم	دکتر زینب موسوی تکیه	استادیار	



نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده: دکتر مهدی مهرزایی

تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:

تبصره: در صورتی که کسی مردود شود حداکثر یکبار دیگر (در مدت مجاز تحصیل) می‌تواند از پایان نامه خود دفاع نماید (دفاع مجدد نباید زودتر از ۴ ماه برگزار شود).

تقدیم بہ

روح پاک پدرم

کہ عالمائے بہ من آموخت تا چگونہ در عرصہ زندگی، ایستادگی را تجربہ نمایم

مادرم

دریای بی کران فداکاری و سنگ صبری کہ الفبای زندگی بہ من آموخت

ہمسرم

کہ اسوہ صبر و تحمل بودہ و مشکلات مسیر را برایم تسہیل نمود

و دلبندم

امید بخش جانم کہ آسایش او آرامش من است

تشکر و قدردانی

پاس خدای را که سخوران، در ستودن او بماند و شازندگان، شردن نعمت های او بماند و کوشندگان، حق او را گزارش کردن نتوانند. خدایی که آفرید جهان را، انسان را، عقل را، علم را، معرفت را، عشق را و کسانی که غششان را در وجودم دید.

باتقدیر و تشکر شایسته از استاد فرهیخته و فرزانه سرکار خانم دکتر زهرا کلاشگر که با نکته های دلاویز و گفته های بلند، صحیفه های سخن را علم پرور نمود، آموزگاری که برایم زندگی، بودن و انسان بودن را معنا کرد و همواره راهبنا و راه گشای محارمه در اتمام و تکمال پایان نامه بوده است.

تشکر و پاس از استاد دانشمند و پرمایه ام جناب آقای دکتر حسین نیکوفر که از محضر پر فیض تدریستان، بهره بارده ام.

در پایان از دوستان عزیزم، خانم باسیلا میوند، بنت الهدی کوهزری و تمامی کسانی که در طی این مدت همراه و بحکم من بودند کمال تشکر را دارم.

تهدنام

اینجانب **مریم مقصودی** دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی فیزیک دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی

شاهرود نویسنده پایان نامه "ارتباط کمی ساختار - خاصیت غیرخطی برای پیش بینی دانسیته‌ی مجموعه‌ی

متنوعی از ترکیبات آلی" تحت راهنمایی دکتر زهرا کلانتر و دکتر حسین نیکوفرد متعهد می‌شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است .
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است .
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است .
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید .
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است .
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است .

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج ، کتاب ، برنامه های رایانه ای ، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد . این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود .

استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی‌باشد.

چکیده

در این تحقیق، مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار- خاصیت (QSPR)، برای پیش‌بینی دانسیته‌ی مجموعه‌ی متنوعی از ترکیبات آلی شامل هیدروکربن‌های آلیفاتیک و آروماتیک، الکل‌ها، آمین‌ها، استرها، اترها، کربوکسیلیک اسیدها و همچنین کتون‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار انجام شد. در این مطالعه از دو نوع روش انتخاب توصیف‌کننده (ویژگی) استفاده شده است. در اولین روش انتخاب، بعد از آنالیز ساختار شیمیایی تمام ترکیبات مورد مطالعه در این تحقیق، ۲۴ گروه عاملی بر اساس روش سهم گروه (GCM) شناسایی شدند. در روش دوم، ۳۲۲۴ توصیف‌کننده با استفاده از نرم افزار دراگون برای هر یک از ترکیبات آلی مورد مطالعه محاسبه شد. سپس زیرمجموعه‌ای از توصیف‌کننده‌های محاسبه شده از ۲۲ دسته توصیف‌کننده‌ی دراگون با الگوریتم ژنتیک بر اساس روش حداقل مربعات جزئی (GA-PLS) به عنوان تکنیک انتخاب ویژگی انتخاب شد. تنها ۷ توصیف‌کننده به عنوان بهترین توصیف‌کننده‌ها توسط الگوریتم ژنتیک بدست آمدند. توصیف‌کننده‌های انتخاب شده با دو روش انتخاب ویژگی و دو متغیر تجربی (دما و فشار) به همراه جرم مولکولی ترکیبات به عنوان ورودی شبکه‌ی عصبی مصنوعی (ANN) مورد استفاده قرار گرفتند. ۴ مدل شبکه‌ی عصبی مصنوعی از ترکیب دو الگوریتم آموزشی به نام‌های لونیگ-مارکوارت و تنظیم بایزین با دو تابع انتقال (لگاریتم سیگموئید و تانژانت سیگموئید) طراحی گردیدند. پس از آموزش هریک از مدل‌ها، پارامترهای شبکه‌های عصبی مصنوعی مانند تعداد نرون‌های لایه‌ی ورودی و لایه‌ی پنهان و تعداد دوره‌های آموزشی، بر مبنای کمترین مقدار میانگین مربعات خطا (MSE) برای پیش‌بینی سری ارزیابی بهینه‌سازی شدند. سپس، عملکرد مدل‌های بهینه‌ی انتخابی با هر یک از دو روش GCM-ANN و GA-ANN توسط سری‌های تست داخلی و خارجی مورد بررسی قرار گرفتند. مقدار MSE و ضریب تعیین (R^2) برای سری تست داخلی با استفاده از مدل بهینه شده‌ی GCM-ANN به ترتیب برابر ۱۸/۱۵ و ۰/۹۹۹۰ و برای مدل بهینه شده‌ی GA-ANN به ترتیب ۲۲/۹۲ و ۰/۹۹۸۸ شدند. به طور مشابه، مقدار این پارامترها برای سری تست خارجی با استفاده از

مدل GCM-ANN به ترتیب ۹۶/۷۴ و ۰/۹۸۹۹ و برای مدل GA-ANN به ترتیب ۱۷۲۱/۷۱ و ۰/۸۶۲۲ به دست آمدند. نتایج نشان می‌دهد که مدل بهینه شده‌ی GCM-ANN می‌تواند روابط بین توصیف‌کننده‌های ساختاری و دانسیته‌ی ترکیبات آلی را دقیق‌تر از مدل بهینه شده‌ی GA-ANN شبیه‌سازی کند.

کلمات کلیدی: ارتباط کمی ساختار- خاصیت (QSPR)، شبکه عصبی مصنوعی (ANN)، دانسیته ترکیبات آلی، الگوریتم ژنتیک (GA)، روش سهم‌گروه (GCM).

نتایج حاصل از این پایان نامه در دو مقاله تحت عناوین

Modelling of density of organic compounds using QSPR approach

A new GA-ANN model for density prediction of organic compounds

در بیست و یکمین سمینار بین المللی شیمی فیزیک ایران در شهریور ماه ۱۳۹۷ ارائه گردید.

فهرست مطالب

فصل اول: مقدمه

- ۱-۱- مقدمه..... ۲
- ۲-۱- دانسیته..... ۲
- ۳-۱- روش‌های پیش‌بینی دانسیته‌ی هیدروکربن‌ها..... ۲
- ۱-۳-۱- پیش‌بینی دانسیته به کمک معادلات حالت..... ۳
- ۱-۱-۳-۱- پیش‌بینی دانسیته ترکیبات آلی با استفاده از معادله ی حالت MLIR..... ۳
- ۲-۱-۳-۱- پیش‌بینی دانسیته سیالات خالص با استفاده از معادله حالت GCM-GMA..... ۵
- ۲-۳-۱- پیش‌بینی دانسیته از طریق مطالعات QSPR..... ۶
- ۱-۲-۳-۱- پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌ها با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک..... ۷
- ۲-۲-۳-۱- پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های خطی و سیکلوآلکان‌ها به کمک شبکه عصبی موجک..... ۷
- ۳-۲-۳-۱- پیش‌بینی دانسیته کتون‌ها به کمک شبکه عصبی مصنوعی..... ۷
- ۴-۲-۳-۱- پیش‌بینی دانسیته‌ی سیالات آلی خودتجمعی به کمک شبکه عصبی مصنوعی..... ۸
- ۵-۲-۳-۱- پیش‌بینی دانسیته‌ی هیدروکربن‌ها به کمک شبکه عصبی مصنوعی..... ۸
- ۴-۱- هدف تحقیق..... ۹

فصل دوم: کمومتریکس

- ۱-۲- کمومتریکس..... ۱۲
- ۲-۲- ارتباط کمی ساختار- خاصیت و ساختار- فعالیت..... ۱۳
- ۱-۲-۲- رابطه کمی ساختار- فعالیت (QSAR)..... ۱۳
- ۲-۲-۲- رابطه کمی ساختار- خاصیت (QSPR)..... ۱۳
- ۳-۲- مراحل مدل‌سازی QSPR..... ۱۵
- ۱-۳-۲- فراهم کردن سری داده‌ها..... ۱۵
- ۲-۳-۲- رسم و بهینه‌سازی ساختار هندسی مولکول‌ها..... ۱۵
- ۳-۳-۲- محاسبه‌ی توصیف‌کننده‌های تئوری..... ۱۶

- ۲-۳-۴- حذف توصیف کننده‌های نامناسب..... ۱۸
- ۲-۳-۵- تقسیم‌بندی داده‌ها..... ۲۰
- ۲-۳-۶- انتخاب بهترین توصیف کننده‌ها..... ۲۰
- ۲-۳-۶-۱- انتخاب بهترین توصیف کننده‌ها توسط الگوریتم ژنتیک..... ۲۱
- ۲-۳-۶-۱- الف- مقدمه..... ۲۱
- ۲-۳-۶-۱- ب- الگوریتم ژنتیک..... ۲۱
- ۲-۳-۶-۱- ج- نحوه‌ی انتخاب توصیف کننده‌ها و شرایط توقف الگوریتم ژنتیک..... ۲۳
- ۲-۳-۷- انتخاب توصیف کننده‌ها بر مبنای روش سهم گروه (GCM)..... ۲۴
- ۲-۳-۸- ساختن مدل..... ۲۶
- ۲-۳-۸-۱- شبکه عصبی مصنوعی..... ۲۶
- ۲-۳-۸-۲- تاریخچه‌ی شبکه عصبی مصنوعی..... ۲۸
- ۲-۳-۸-۲- الف- ساختار شبکه عصبی مصنوعی..... ۲۹
- ۲-۳-۸-۲- ب- انواع شبکه‌ها از نظر ارتباطات بین نرونی..... ۳۱
- ۲-۳-۸-۲- ج- روش‌های آموزش..... ۳۲
- ۲-۳-۹- ارزیابی قدرت پیش‌بینی مدل..... ۳۳
- ۲-۳-۹- الف- استفاده از پارامترهای آماری..... ۳۳
- ۲-۳-۹- ب- استفاده از نمودار برگشتی..... ۳۶
- ۲-۳-۹- ج- استفاده از نمودار خطای باقیمانده..... ۳۶
- ۲-۳-۹- د- استفاده از سری تست خارجی..... ۳۶

فصل سوم: محاسبات

- ۳-۱- انتخاب سری داده‌ها..... ۳۸
- ۳-۲- مدل سازی شبکه عصبی..... ۴۸
- ۳-۲-۱- مدل سازی شبکه عصبی مصنوعی با استفاده از روش سهم گروه (GCM-ANN)..... ۴۸

۴۸.....	۳-۲-۱-۱- محاسبه‌ی توصیف‌کننده‌های ترکیبات آلی خالص با استفاده از روش سهم‌گروه.....
۵۰.....	۳-۲-۱-۲- دسته بندی داده‌ها.....
۵۰.....	۳-۲-۱-۳- مدل‌سازی شبکه عصبی مصنوعی با توصیف‌کننده‌های حاصل از روش سهم‌گروه (GCM-ANN).....
۵۶.....	۳-۲-۱-۴- ارزیابی شبکه GCM-ANN بهینه شده.....
۵۹.....	۳-۲-۲- مدل‌سازی شبکه عصبی مصنوعی با استفاده از توصیف‌کننده‌های تئوری.....
۵۹.....	۳-۲-۲-۱- رسم و بهینه‌سازی ساختار مولکول‌ها و محاسبه توصیف‌کننده‌ها.....
۶۰.....	۳-۲-۲-۲- انتخاب بهترین توصیف‌کننده‌ها به روش الگوریتم ژنتیک.....
۶۲.....	۳-۲-۲-۳- بهینه‌سازی شبکه عصبی مصنوعی با توصیف‌کننده‌های الگوریتم ژنتیک.....
۶۵.....	۳-۲-۲-۴- ارزیابی شبکه‌ی بهینه شده‌ی GA-ANN.....
۶۷.....	۳-۳- ارزیابی قدرت پیش‌بینی مدل‌های غیرخطی بهینه شده برای سری تست خارجی.....
۷۰.....	۳-۴- ارزیابی پارامترهای آماری.....
۷۲.....	۳-۵- بررسی ارتباط توصیف‌کننده‌های انتخاب شده در مدل GA-ANN با دانسیته‌ی ترکیبات.....
۷۲.....	۳-۵-۱- توصیف‌کننده‌ی E1s.....
۷۳.....	۳-۵-۲- توصیف‌کننده‌های Ss و Me.....
۷۵.....	۳-۵-۳- توصیف‌کننده‌های TIC4 ، TIC5.....
۷۷.....	۳-۵-۴- توصیف‌کننده X2Av.....
۷۸.....	۳-۶- بررسی میزان مشارکت توصیف‌کننده‌های منتخب شبکه‌ی عصبی مصنوعی.....
۸۱.....	۳-۷- مقایسه با کارهای قبلی.....
۸۴.....	۳-۸- نتیجه‌گیری.....
۸۵.....	۳-۹- آینده‌نگری.....
۸۶.....	پیوست.....
۱۱۰.....	منابع.....

فهرست اشکال

- شکل (۲-۱) - ساختار یک نرون زیستی..... ۲۸
- شکل (۲-۲) - ساختار یک شبکه عصبی مصنوعی سه لایه..... ۳۰
- شکل (۱-۳) - نمودار میانگین مربعات خطا بر حسب μ حول نقطه بهینه برای سری ارزیابی..... ۵۵
- شکل (۲-۳) - نمودار برگشتی مقادیر پیش‌بینی شده‌ی دانسیته‌ی ترکیبات آلی بر حسب مقادیر تجربی برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست داخلی..... ۵۷
- شکل (۳-۳) - نمودار خطای باقیمانده در پیش‌بینی دانسیته بر حسب مقادیر تجربی دانسیته‌ی ترکیبات آلی برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست داخلی..... ۵۸
- شکل (۴-۳) - نمودار میانگین مربعات خطای حاصل از پیش‌بینی دانسیته سری ارزیابی بر حسب پارامتر μ حول نقطه‌ی بهینه..... ۶۴
- شکل (۵-۳) - نمودار برگشتی مقادیر پیش‌بینی شده‌ی دانسیته‌ی ترکیبات آلی بر حسب مقادیر تجربی برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست داخلی..... ۶۵
- شکل (۶-۳) - نمودار خطای باقیمانده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات آلی بر حسب مقادیر تجربی دانسیته برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست داخلی..... ۶۶
- شکل (۷-۳) - نمودارهای برگشتی مقادیر پیش‌بینی شده دانسیته بر حسب مقادیر تجربی برای سری تست خارجی برای مدل‌های بهینه شده‌ی (الف) GCM-ANN و (ب) GA-ANN..... ۶۸
- شکل (۸-۳) - نمودار خطای باقیمانده مقادیر پیش‌بینی شده دانسیته بر حسب مقادیر تجربی برای سری تست خارجی برای مدل‌های بهینه شده‌ی (الف) GCM-ANN و (ب) GA-ANN..... ۶۹
- شکل (۹-۳) - درصد مشارکت توصیف‌کننده‌ها در مدل GA-ANN..... ۷۹

فهرست جدول‌ها

- جدول (۱-۲) - انواع توصیف‌کننده‌های محاسبه شده توسط نرم افزار Dragon.....۱۹
- جدول (۱-۳) - نام ترکیبات، محدوده‌ی دما و فشار و تعداد نقاط مورد استفاده برای هر ترکیب به همراه مرجع مورد استفاده برای هر یک از آن‌ها.....۳۹
- جدول (۲-۳) - گروه‌های عاملی موجود در ترکیبات آلی مورد مطالعه در این پایان‌نامه طبق روش سهم گروه.....۴۹
- جدول (۳-۳) - مقادیر MSE برای پیش‌بینی سری ارزیابی با استفاده از شبکه‌ی GCM-ANN آموزش داده شده الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین و تابع انتقال لگاریتم سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت.....۵۱
- جدول (۴-۳) - مقادیر MSE برای پیش‌بینی سری ارزیابی با استفاده از شبکه‌ی GCM-ANN آموزش داده شده الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین و تابع انتقال تانژانت سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت.....۵۲
- جدول (۵-۳) - مقادیر MSE برای پیش‌بینی سری ارزیابی با استفاده از شبکه‌ی GCM-ANN آموزش داده شده الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوارت و تابع انتقال لگاریتم سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت.....۵۳
- جدول (۶-۳) - مقادیر MSE برای پیش‌بینی سری ارزیابی با استفاده از شبکه‌ی GCM-ANN آموزش داده شده الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوارت و تابع انتقال تانژانت سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت.....۵۴
- جدول (۷-۳) - توابع و مقادیر بهینه‌ی پارامترهای شبکه‌های GCM-ANN مختلف.....۵۵
- جدول (۸-۳) - توابع و مقادیر پارامترهای شبکه‌ی GCM-ANN بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات آلی بر حسب دما و فشار.....۵۶
- جدول (۹-۳) - تعداد دفعات تکرار توصیف‌کننده‌ها در روش انتخابی الگوریتم ژنتیک پس از ۱۶ بار اجرا.....۶۰
- جدول (۱۰-۳) - طبقه و نام کامل توصیف‌کننده‌های تئوری انتخابی توسط الگوریتم ژنتیک.....۶۱
- جدول (۱۱-۳) - همبستگی بین توصیف‌کننده‌های انتخابی الگوریتم ژنتیک.....۶۱

جدول (۳-۱۲) - مقادیر همبستگی توصیف‌کننده‌های تئوری انتخابی با روش GA با دانسیته.....	۶۲
جدول (۳-۱۳) - توابع و پارامترهای بهینه‌ی شبکه GA-ANN.....	۶۳
جدول (۳-۱۴) - توابع و پارامترهای بهینه شده شبکه‌ی عصبی با استفاده از توصیف‌کننده‌های تئوری انتخابی GA.....	۶۴
جدول (۳-۱۵) - پارامترهای آماری مدل‌های بهینه شده‌ی GCM-ANN و GA-ANN برای دو سری ارزیابی و تست.....	۷۱
جدول (۳-۱۶) - مقدار توصیف‌کننده‌ی E1s برای n- آلکان‌ها و الکل‌های خطی در فشار ۰/۱ Mpa و دمای ۲۹۸/۱۵ K.....	۷۳
جدول (۳-۱۷) - مقدار توصیف‌کننده‌های Ss و Me برای تعدادی از ترکیبات در فشار ۰/۱ Mpa و دمای ۳۵۳/۱۵ K.....	۷۵
جدول (۳-۱۸) - مقدار توصیف‌کننده‌های TIC4 و TIC5 برای تعدادی از ترکیبات در فشار ۰/۱ Mpa و دمای ۳۲۳/۱۵ K.....	۷۶
جدول (۳-۱۹) - مقدار توصیف‌کننده‌ی X2Av برای تعدادی از ترکیبات در فشار ۰/۱ Mpa و دمای ۲۹۳/۱۵ K.....	۷۸
جدول (۳-۲۰) - مقایسه‌ی مقادیر پیش‌بینی شده‌ی دانسیته برای چند ترکیب آلی توسط روش GCM-ANN در این پایان‌نامه با کارهای قبلی بر حسب kg.m^{-3}	۸۱
جدول (پ-۱) - تعدادی از اتم‌های Kier-Hall.....	۸۶
جدول (پ-۲) - مقایسه‌ی مقادیر تجربی و مقادیر پیش‌بینی شده‌ی دانسیته برای ترکیبات سری ارزیابی بر حسب kg.m^{-3}	۸۷

فصل اول

مقدمه

۱-۱- مقدمه

از بین خواص ترمودینامیکی مختلف، دانسیته بر حسب دما و فشار یک ویژگی بسیار مهم است که از اهمیت زیادی در صنایع شیمیایی و پتروشیمیایی و در طراحی‌های صنعتی، خطوط لوله و پمپاژها برخوردار است. با وجود اهمیت دانسیته‌ی سیالات خالص در صنایع شیمیایی، اندازه‌گیری تجربی دانسیته‌ی سیالات خالص در دما و فشار گوناگون نیاز به صرف هزینه و وقت زیادی دارد. در این شرایط، استفاده از روش‌های پیش‌بینی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار هستند.

۱-۲- دانسیته

نسبت جرم به حجم یک ماده در دما و فشار مشخص دانسیته نامیده می‌شود. واحد دانسیته در سیستم SI، kg m^{-3} است، اما واحدهای دیگر مثل g cm^{-3} یا g ml^{-1} نیز استفاده می‌شوند. اگر شرایط اندازه‌گیری دانسیته، شرایط ترمودینامیکی نرمال ($p=101/325 \text{ kPa}$) یا شرایط استاندارد ($p=100 \text{ kPa}$) باشد، دانسیته‌ی اندازه‌گیری شده به ترتیب، دانسیته‌ی نرمال و دانسیته‌ی استاندارد نامیده می‌شود [۱].

۱-۳- روش‌های پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات آلی

همان‌طور که در مقدمه شرح داده شد خواص ترمودینامیکی سیالات خالص، ابزار مهمی برای طراحی مهندسی و آنالیز فرآیندهای شیمیایی است. اگرچه داده‌های تجربی دقیق هستند اما اندازه‌گیری آن‌ها در یک دامنه وسیع دما و فشار کاری وقت‌گیر و هزینه‌بر است. لذا باید از روش‌های پیش‌بینی استفاده نمود. مهم‌ترین روش‌های پیش‌بینی دانسیته استفاده از معادلات حالت و مطالعات QSPR می‌باشد که در ادامه راجع به هر یک توضیح داده خواهد شد.

۱-۳-۱- پیش بینی دانسیته به کمک معادلات حالت

یکی از مهم‌ترین روش‌های پیش‌بینی دانسیته‌ی سیالات خالص استفاده از معادلات حالت است. معادله‌ی حالت یک رابطه‌ی ریاضی است که فشار را به صورت تابعی از دما و دانسیته بیان می‌کند. با استفاده از معادله‌ی حالت و یک مشتق مناسب از آن می‌توان سایر خواص ترمودینامیکی را بدست آورد. دو معادله‌ی حالتی که در سال‌های اخیر برای پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی ترکیبات آلی چگال برحسب دما و فشار معرفی شده‌اند و از کارایی بالایی برخوردارند معادلات حالت MLIR^۱ و GCM-GMA^۲ هستند. در ادامه بطور مختصر راجع به هر کدام از آن‌ها توضیح داده خواهد شد.

۱-۱-۳-۱- پیش‌بینی دانسیته ترکیبات آلی با استفاده از معادله‌ی حالت MLIR

قاعده‌ی همدمای خطی (LIR)^۳ قاعده‌ای است که در سال ۱۹۹۳ برای سیالات چگال زیر بحرانی و فوق بحرانی براساس مفهوم متوسط پتانسیل جفت موثر (AEPP)^۴ به دست آمده و دارای مبنای نظری است. این قاعده بیان می‌کند که کمیت $(Z-1)v^2$ بر حسب ρ^2 برای هر همدمای سیال چگال خطی است، که $\rho = \frac{1}{v}$ دانسیته‌ی مولی سیال است.

$$(Z-1)v^2 = A + B\rho^2 \quad (1-1)$$

وابستگی دمایی پارامترهای A و B نیز به صورت زیر بدست آمده است:

$$A = A_1 - \frac{A_2}{RT} \quad (2-1)$$

$$B = B_1 - \frac{B_2}{RT} \quad (3-1)$$

۱- Modified Linear Isotherm Regularity (MLIR)

۲ - Group Contribution Method-Goharshadi-Morsali-Abbaspour (GCM-GMA)

۳ - Linear Isotherm Regularity (LIR)

۴ - Average Effective Pair Potential (AEPP)

این معادله، رفتار خطی فوق را برای سیالات چگال قطبی و غیرقطبی با مولکول‌های کوچک در محدوده‌های $\rho > \rho_B$ و $T < 2T_B$ نشان می‌دهد که ρ_B و T_B به ترتیب دانسیته و دمای بویل سیال می‌باشند [۲]. پارسافر و کلانتر با استفاده از روش سهم‌گروه توانستند معادله‌ی حالت LIR را برای پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی ترکیبات آلی بلند زنجیر شامل آلکان‌های خطی، الکل‌های نوع اول و دوم و سوم، کتون‌ها، اسیدهای کربوکسیلیک و مخلوط‌های آن‌ها اصلاح کنند [۴۳]. آن‌ها برای ارائه‌ی این معادله، هر ترکیب آلی را به صورت یک مخلوط فرضی از گروه‌های عاملی تشکیل دهنده‌اش در نظر گرفتند که تصادفی در مخلوط توزیع شده‌اند. سپس طبق تقریب تک سیال واندروالس، معادله‌ی حالت LIR را عیناً برای چنین مخلوط فرضی در نظر گرفتند اما در این حالت پارامترهای معادله‌ی حالت LIR علاوه بر دما به ترکیب گروه‌ها در سیستم (در اینجا طول زنجیر) نیز وابسته شد. طبق روش آن‌ها، اگر در دمای T و فشار P ، دانسیته‌ی مولی سیال ρ باشد، دانسیته‌ی کل گروه‌ها در مخلوط $n\rho$ می‌شود که n تعداد گروه‌های عاملی در مولکول است. در این صورت معادله‌ی LIR به شکل زیر در می‌آید:

$$\left(\frac{p}{n\rho RT} - 1\right) / n^2 \rho^2 = A_m B_m n^2 \rho^2 \Rightarrow \left(\frac{Z}{n} - 1\right) / \rho^2 = n^2 A_m + n^4 B_m \rho^2 \quad (۴-۱)$$

که در آن A_m و B_m پارامترهای LIR به ازای یک گروه در سیال مورد نظر هستند. سپس آن‌ها با تعریف دو پارامتر A' و B' به صورت معادله‌های (۵-۱) و (۶-۱)،

$$A' = A_m n^2 \quad (۵-۱)$$

$$B' = B_m n^4 \quad (۶-۱)$$

معادله‌ی (۷-۱) را به صورت کلی زیر تعریف نمودند و آن را قاعده‌ی همدمای خطی اصلاح شده (MLIR) نامیدند.

$$\left(\frac{Z}{n} - 1\right) v^2 = A' + B' \rho^2 \quad (۷-۱)$$

طبق این معادله نمودار $\left(\frac{Z}{n}-1\right)v^2$ بر حسب ρ^2 برای هر همدمای ترکیب آلی چگال، خطی است. برای تمامی ترکیبات آلی مورد مطالعه شامل آلکان‌های خطی [۳]، الکل‌های نوع اول و دوم و سوم، کتون‌ها، اسیدهای کربوکسیلیک [۴]، آمین‌ها [۵] و استرها [۶] مشخص شده است که رفتار خطی معادله‌ی MLIR نسبت به معادله‌ی LIR بسیار بهتر بوده و حتی این رفتار خطی با افزایش طول زنجیر حفظ می‌شود. این در حالیست که برای معادله‌ی LIR چنین وضعی مشاهده نمی‌شود. با استفاده از معادله‌ی MLIR، دانسیته‌ی این ترکیبات در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار با متوسط خطای نسبی کمتر از ۱/۵٪ پیش‌بینی شده است.

۱-۳-۲- پیش‌بینی دانسیته سیالات خالص با استفاده از معادله حالت

GCM-GMA

در سال ۲۰۰۵ گوهرشادی و همکارانش بر اساس مفهوم متوسط انرژی پتانسیل جفت مؤثر، توانستند معادله حالت عمومی GMA را برای پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی سیالات چگال ارائه کنند [۷]. این معادله حالت بیان می‌کند که، نمودار $(2Z-1)v_m^2$ بر حسب ρ برای هر همدمای سیال چگال خطی است که $\rho = 1/v_m$ دانسیته‌ی مولی سیال است.

$$(2Z-1)v_m^3 = A + B\rho \quad (۸-۱)$$

در این رابطه Z و v_m به ترتیب فاکتور تراکم‌پذیری و حجم مولی بوده و A و B به ترتیب عرض از مبدأ و شیب نمودار هستند که از طریق روابط زیر به دما وابسته‌اند:

$$A = A_0 - \frac{2A_1}{RT} + \frac{2A_2 \ln T}{R} \quad (۹-۱)$$

$$B = B_0 - \frac{2B_1}{RT} + \frac{2B_2 \ln T}{R} \quad (۱۰-۱)$$

در روابط (۹-۱) و (۱۰-۱) کمیت‌های A_0 تا A_2 و B_0 تا B_2 ثابت هستند. این معادله‌ی حالت می‌تواند در محدوده‌ی $\rho > \rho_c$ و $T > T_c$ دانسیته‌ی طیف وسیعی از سیالات قطبی، غیرقطبی و

سیالات دارای پیوند هیدروژنی را پیش‌بینی کند که، ρ_c و T_c به ترتیب دانسیته و دمای بحرانی سیال هستند [۸-۱۱].

موسوی در سال ۲۰۱۱ توانست از ترکیب روش سهم گروه با معادله حالت GMA که توسط گوهرشادی و همکارانش ارائه شده بود، دانسیته‌ی ترکیبات آلی مختلف و مخلوط‌های آن‌ها را پیش‌بینی کند [۱۲]. او نیز در این کار، هر یک از این ترکیبات را به عنوان یک مخلوط فرضی از گروه‌های متیل، متیلن و یک گروه عاملی تشکیل دهنده‌ی آن‌ها در نظر گرفت و سپس معادله‌ی GMA را به صورت زیر به این مخلوط فرضی تعمیم داد.

$$\left(\frac{2Z}{n} - 1\right)v_m^3 = A_m n^3 + B_m n^4 \rho \quad (11-1)$$

در این معادله که GCM-GMA نامیده شده، n تعداد گروه‌های کربنی و A_m و B_m پارامترهای معادله‌ی حالت به ازای یک گروه کربنی هستند. او توانست با استفاده از این معادله‌ی جدید، دانسیته‌ی ترکیبات آلی خالص و مخلوط‌های آن‌ها را به ترتیب با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۱/۲٪ و ۱/۷٪ پیش‌بینی کند.

۱-۳-۲- پیش‌بینی دانسیته از طریق مطالعات QSPR

مهم‌ترین مشکل استفاده از معادلات حالت این است که هر کدام برای دسته‌ی خاصی از مواد و در محدوده‌ی معینی از دما و فشار کارایی دارند. از طرف دیگر اگر برای ماده‌ای اندازه‌گیری PVT انجام نشده باشد معادله‌ی حالت برای آن ماده کارایی ندارد زیرا ثابت‌های معادله‌ی حالت برای ماده‌ی مورد نظر وجود ندارد. یکی از راه‌حل‌های خوبی که در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته است مطالعات QSPR است که می‌تواند ارتباطی را بین ساختار مولکولی مواد و خواص مختلف فیزیکوشیمیایی مواد پیدا کند. در این مطالعات برای پیدا کردن توصیف‌کننده‌های مناسب بر مبنای ساختار مولکولی بطور معمول از دو روش سهم گروه‌ها و توصیف‌کننده‌های تئوری حاصل از

اندیس های توپولوژیکی استفاده می شود. مهم ترین ویژگی روش QSPR این است که می توان با استفاده از آن برای مواد جدید و همچنین برای موادی که هنوز سنتز نشده اند، توصیف کننده ها را محاسبه و خاصیت مورد نظر را پیش بینی نمود.

۱-۲-۳-۱- پیش بینی دانسیته ی کتون ها با استفاده از شبکه ی عصبی موجک

در سال ۲۰۰۸ نامجو و کلانتر یک مدل شبکه عصبی موجک بر مبنای روش سهم گروه برای پیش بینی دانسیته انواع کتون ها در محدوده ی وسیعی از دما و فشار ارائه نمودند که می توانست دانسیته ی این ترکیبات را با متوسط خطای نسبی کمتر از ۰/۵٪ پیش بینی کند [۱۳].

۱-۲-۳-۲- پیش بینی دانسیته ی آلکان های خطی و سیکلوآلکان ها به کمک

شبکه عصبی موجک

در سال ۲۰۰۹ شعبانی و کلانتر یک مدل شبکه عصبی موجک بر مبنای روش سهم گروه برای پیش بینی دانسیته آلکان های خطی و سیکلو آلکان ها ارائه نمودند که می توانست دانسیته ی این ترکیبات را با متوسط خطای نسبی کمتر از ۱٪ پیش بینی کند. در این مدل از دو متغیر دما و فشار و سه متغیر ساختاری شامل تعداد گروه های متیل، متیلن انتهایی و متیلن میانی جهت مدل سازی استفاده شده است [۱۴].

۱-۲-۳-۳- پیش بینی دانسیته کتون ها به کمک شبکه عصبی مصنوعی

در سال ۲۰۱۰ صبوری و کلانتر یک مدل شبکه عصبی مصنوعی برای پیش بینی دانسیته ی کتون ها با استفاده از توصیف کننده های تئوری ارائه کردند. آن ها در این کار با شناسایی ۴ توصیف کننده ی

توپولوژیکی بر مبنای روش رگرسیون خطی چندگانه (MLR) توانستند یک شبکه‌ی عصبی مصنوعی ارائه کنند که دانسیته‌ی این مواد را با متوسط خطای نسبی کمتر از ۱٪ پیش‌بینی کند [۱۵].

۱-۳-۲-۴- پیش‌بینی دانسیته‌ی سیالات آلی خودتجمعی به کمک شبکه عصبی

مصنوعی

در سال ۲۰۱۳ آزمونفر و کلانتر یک مدل شبکه‌ی عصبی مصنوعی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی سیالات آلی خودتجمعی شامل اسیدهای کربوکسیلیک، آمین‌ها و الکل‌ها ارائه کردند. آن‌ها در این کار با شناسایی ۱۰ گروه عاملی بر مبنای روش سهم‌گروه‌ها و دو متغیر دما، فشار توانستند یک شبکه‌ی عصبی مصنوعی ارائه کنند که دانسیته‌ی این مواد را با متوسط خطای نسبی کمتر از ۱٪ پیش‌بینی می‌کرد [۱].

۱-۳-۲-۵- پیش‌بینی دانسیته‌ی هیدروکربن‌ها به کمک شبکه عصبی مصنوعی

در سال ۲۰۱۸ متولی و کلانتر یک مدل شبکه‌ی عصبی مصنوعی بر مبنای روش الگوریتم ژنتیک (GA) برای پیش‌بینی دانسیته‌ی هیدروکربن‌های مختلف شامل آلکان‌های خطی و غیرخطی، سیکلوآلکان‌ها، آلکن‌ها و ترکیبات آروماتیک تک حلقه‌ای و ۲ حلقه‌ای ارائه نمودند که می‌توانست دانسیته‌ی این ترکیبات را با متوسط خطای نسبی کمتر از ۱٪ پیش‌بینی کند [۱۶].

۴-۱- هدف تحقیق

هدف این پایان نامه مطالعه ارتباط کمی ساختار- خاصیت غیرخطی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی دسته‌ی وسیعی از ترکیبات آلی شامل هیدروکربن‌های آلیفاتیک و آروماتیک، آمین‌ها، استرها، کتون‌ها، الکل‌های نوع اول، دوم و سوم، اترها و کربوکسیلیک اسیدها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار به کمک پارامترهای ساختاری آنهاست.

فصل دوم

کمومتریکس

۲-۱- کمومتریکس^۱

نام کمومتریکس اولین بار توسط دانشمند سوئدی جوان، اسوانت ولد^۲ در اوایل سال ۱۹۷۰ که در زمینه‌ی شیمی فیزیک آلی فعالیت داشت، مطرح گردید. همکاری او با بروس آر. کووالسکی^۳ که در آن زمان روی روش‌های تشخیص الگو در شیمی کار می‌کرد منجر به تأسیس انجمن بین‌المللی کمومتریکس^۴ (ICS) در سال ۱۹۷۴ گردید. استوانت ولد، واژه‌ی «کمومتریکس» را به این منظور به کار برد: «استخراج اطلاعات شیمیایی، از داده‌های تولید شده در آزمایش‌های شیمیایی». این امر، نیازمند به کارگیری آنالیز عددی، آمار و به طور کلی، ریاضیات کاربردی است. در کمومتریکس، مسئله‌ی اصلی، بیان ساختار شیمیایی به صورت عبارت ریاضی است. بنابراین، کمومتریکس، از شیمی، جدانشدنی نیست و حتی می‌تواند به عنوان شاخه‌ای جداگانه از شیمی مطرح شود و باید به صورت بخش جدانشدنی از شیمی باقی بماند [۱۷].

چندین تعریف برای کمومتریکس بیان شده‌است. طبق یکی از جامع‌ترین تعاریف، "کمومتریکس شاخه‌ای از شیمی است که از ریاضی، آمار و منطق برای رسیدن به اهداف زیر استفاده می‌کند:

الف) فرآیندهای تجربی بهینه را طراحی و انتخاب می‌کند.

ب) حداکثر اطلاعات شیمیایی قابل حصول را از تحلیل داده‌های شیمیایی فراهم می‌کند.

ج) می‌تواند اطلاعات بیشتری درمورد سیستم‌های شیمیایی به دست آورد [۱۸]."

رشد کمومتریکس شدیداً، به استفاده از کامپیوترها در شیمی بستگی دارد. با در دسترس قرار گرفتن کامپیوترهای شخصی در شروع ۱۹۸۰، دوره‌ی جدیدی در پردازش و تفسیر اطلاعات آغاز شد و پیشرفت‌های حاصل در کامپیوترها و نرم‌افزارها، سهولت و پیشرفت در کمومتریکس را در پی داشت [۱۹].

۱ - Chemometrics

۲- Svante wold

۳ - Kowalski

۴ - International Chemometrics Society

ظهور زمینه‌ی تحقیقاتی کمومتریکس در ایران به سال ۱۹۹۷ برمیگردد. اولین تحقیق درباره کمومتریکس در ایران در سال ۱۹۹۸ منتشر شد [۲۰].

۲-۲- ارتباط کمی ساختار - خاصیت و ساختار - فعالیت

۲-۲-۱- رابطه کمی ساختار - فعالیت^۱ (QSAR)

یکی از کاربردهای مهم کمومتریکس، مطالعاتی است که فعالیت بیولوژیکی ترکیبات را به ویژگی‌های ساختاری آنها ارتباط می‌دهد. این نوع از مطالعات، به رابطه‌ی کمی ساختار- فعالیت (QSAR) معروف است [۲۱]. دلیل استفاده از کلمه کمی^۲، مدل ریاضی است که برای بررسی فعالیت مورد استفاده قرار می‌گیرد [۲۲].

مولکول‌های مشابه با تغییر کوچکی در ساختارشان می‌توانند فعالیت بیولوژیکی کاملاً متفاوتی داشته باشند. هدف QSAR پیدا کردن رابطه‌ای هماهنگ میان فعالیت و ویژگی‌های مولکولی است تا بتواند از این قواعد برای ارزیابی فعالیت ترکیبات جدید استفاده کند [۲۳]. به طور کلی QSAR در پی پاسخ دادن به دو سوال زیر است:

(الف) چه جنبه‌هایی از مولکول روی فعالیت آن تاثیر می‌گذارد؟

(ب) برای افزایش فعالیت مولکول چه عواملی باید بهینه شوند؟

۲-۲-۲- رابطه کمی ساختار - خاصیت^۳ (QSPR)

یکی دیگر از زمینه‌های مهم کاربرد کمومتریکس، مطالعاتی است که خواص فیزیکی و شیمیایی مولکول‌ها را به ویژگی‌های ساختاری آنها نسبت می‌دهد. از نظر شیمیدانان خاصیت یک مولکول ناشی از ویژگی‌های ساختاری آن‌هاست. این نوع از مطالعات به بررسی کمی ارتباط ساختار- خاصیت

۱- Quantitative Structure-Activity Relationship

۲ - Quantitative

۳ - Quantitative Structure-Property Relationship

(QSPR) معروف می‌باشد. هدف از این مطالعات پیدا کردن رابطه‌ای است که بین رفتار فیزیکوشیمیایی یک مولکول با پارامترهای ساختاری آن وجود دارد. مانند یافتن رابطه‌ای بین ساختار مولکول‌ها با خواصی نظیر نقطه‌ی ذوب و جوش، فشار بخار و غیره. نتایج این مطالعات علاوه بر شفاف سازی نحوه‌ی ارتباط خواص مولکول‌ها با ویژگی‌های ساختمانی آن‌ها، به پژوهشگران در پیش‌بینی رفتار مولکول‌های جدید بر اساس رفتار مولکول‌های مشابه کمک می‌کند. از روش‌هایی که به منظور مطالعه‌ی ارتباط خطی ساختار - خاصیت مورد استفاده قرار می‌گیرند می‌توان به روش‌هایی مثل حداقل مربعات متداول^۱ (OLS)، تحلیل مؤلفه‌های اساسی^۲ (PCA)، رگرسیون خطی چندگانه^۳ (MLR)، رگرسیون اجزای اصلی^۴ (PCR) و حداقل مربعات جزئی^۵ (PLS)، اشاره نمود. روش‌های دیگری مانند شبکه‌ی عصبی مصنوعی^۶ (ANN) و ماشین بردار پشتیبان^۷ (SVM)، ارتباط غیرخطی میان ساختار و خواص ترکیبات را مورد مطالعه قرار می‌دهند.

مراحل کلی یک مدل سازی QSPR یا QSAR به صورت زیر است [۲۴].

۱- فراهم کردن سری داده‌ها

۲- انتخاب و محاسبه توصیف‌کننده‌ها

۳- ارزیابی، تجزیه و تحلیل آماری توصیف‌کننده‌ها

۴- تقسیم‌بندی سری داده‌ها به سری‌های آموزش، ارزیابی و تست

۵- آنالیز آماری مدل‌ها و انتخاب مدل مناسب

۶- ارزیابی اعتبار مدل‌های انتخاب شده

۷- پیش‌بینی خصوصیت موردنظر

۱- Ordinary Least Square

۲- Principle Component Analysis

۳- Multiple Linear Regression

۴ - Principal Componet Regression

۵- Partial Least Squares

۶ -Artificial Neural Network

۷ -Support Vector Machine

در ادامه راجع به هر یک از مراحل یک مدل سازی QSPR توضیح داده خواهد شد.

۲-۳- مراحل مدل سازی QSPR

۲-۳-۱- فراهم کردن سری داده ها

اولین مرحله در یک مطالعه QSPR، جمع آوری و انتخاب یک سری داده ی مناسب و معتبر است که خاصیت مورد مطالعه برای آن ها در شرایط عملی یکسانی به دست آمده باشد. جمع آوری داده ها از طریق جستجو در مقالات و مراجع علمی صورت می گیرد و هرچه سری داده ها وسیع تر و متنوع تر باشد مدل بدست آمده، مدل کلی تر و معتبرتری بوده و محدود به یک گروه خاص از ترکیبات نخواهد بود.

۲-۳-۲- رسم و بهینه سازی ساختار هندسی مولکول ها

ایجاد توصیف کننده های ساختاری بر مبنای ساختار و هندسه ی دقیق مولکولی استوار است و اگر ساختار مولکول به صورت صورتبندی^۱ با حداقل انرژی نباشد، مقادیر غیرصحیحی برای این توصیف کننده ها ایجاد می شود [۲۵]. بنابراین ابتدا باید ساختار هندسی ترکیب بهینه شود؛ یعنی مختصاتی از ساختار ترکیب به دست آید که در آن مختصات، انرژی مولکول حداقل باشد. این کار توسط شیمی محاسباتی انجام می شود. دو روش مهم در شیمی محاسباتی که برای بهینه سازی ساختار مولکول ها مورد استفاده قرار می گیرد روش مکانیک مولکولی و روش مکانیک کوانتومی است [۲۶].

روش های مکانیک مولکولی که بر مبنای روابط کلاسیک بنا شده اند، به طور خیلی ساده ساختمان مولکولی را به صورت گوی و فنر در نظر می گیرند. در این روش انرژی مولکول به صورت مجموعه ای از انرژی های کششی، خمشی، الکترواستاتیکی و ... بیان می شود. سپس با استفاده از برنامه های

۱ - Conformation

کامپیوتری مربوط به روش مکانیک مولکولی طول پیوندها، زوایای پیوندی و صورت‌بندی تغییر می‌کند تا ساختاری که عبارت انرژی مکانیک مولکولی را مینیمم کند، پیدا شود. این روش بهینه سازی بیشتر برای ماکرومولکول‌ها به کار می‌رود [۲۷]. ولی در مکانیک کوانتومی از معادله‌ی شرودینگر^۱ برای محاسبه‌ی انرژی مولکول استفاده می‌شود. روش‌های محاسباتی بر پایه‌ی مکانیک کوانتومی شامل روش‌های آغازین^۲، روش‌های نیمه تجربی^۳ و نظریه تابع چگالی است [۲۶]. در روش‌های آغازین از داده‌های تجربی استفاده نمی‌شود و انرژی مولکول‌ها از حل معادله‌ی شرودینگر با استفاده از یک سری تقریب به دست می‌آید. در این روش چون کل الکترون‌ها در محاسبات وارد می‌شوند، محاسبات پیچیده‌تر شده و به صرف وقت زیادی نیاز دارد [۲۸ و ۲۶].

روش‌های نیمه تجربی، روش‌هایی هستند که بر خلاف روش‌های آغازین فقط الکترون‌های لایه ظرفیت را در محاسبات وارد می‌کنند. در نتیجه زمان محاسبات در این روش‌ها، کوتاه‌تر از روش‌های آغازین بوده و می‌تواند برای مولکول‌های بزرگ‌تر نیز به کار رود.

در این مرحله، ساختار ترکیبات مربوط به سری داده‌ها با استفاده از نرم‌افزارهای تجاری در دسترس رسم شده و سپس توسط روش‌های کوانتوم - مکانیکی مختلف نظیر AM1, PM3, MNDO و..... بهینه می‌شود [۲۹]. نرم‌افزاری که برای این منظور معمولاً مورد استفاده قرار می‌گیرد نرم افزار Hyper Chem است. در این پروژه از روش AM1 استفاده شده است.

۲-۳-۳- محاسبه‌ی توصیف‌کننده‌های تئوری

توصیف‌کننده‌های مولکولی نتیجه‌ی نهایی یک فرایند منطقی و ریاضی هستند که اطلاعات شیمیایی مربوط به ساختار مولکول را به اعداد تبدیل می‌کنند. این اعداد می‌توانند برای تفسیر خواص مولکولی استفاده شوند و یا برای پیش‌بینی تعدادی از ویژگی‌های مولکولی در یک مدل شرکت کنند. به عبارت

۱- Schrodinger Equation

۲- Ab Initio

۳- Semi empirical

دیگر هر توصیف کننده، بیانگر خصوصیت ویژه‌ای از مولکول است که ممکن است بر خاصیت مورد نظر مؤثر باشد [۳۰]. این توصیف‌کننده‌ها به دو گروه کلی توصیف‌کننده‌های تجربی و تئوری تقسیم بندی می‌شوند.

برخی از ویژگی‌های یک توصیف‌کننده‌ی مناسب عبارت است از:

- ساده بودن
- توانایی تفسیر ساختار مولکول
- عدم همبستگی با سایر توصیف‌کننده‌ها
- قابلیت تمایز بین ایزومرهای مختلف یک مولکول
- قابلیت کاربرد برای دامنه‌ی وسیعی از ساختارهای مولکولی

توصیف‌کننده‌های مولکولی به دو دسته اصلی تقسیم‌بندی می‌شوند:

- ۱- توصیف‌کننده‌های حاصل از اندازه‌گیری‌های تجربی (مانند قطبش‌پذیری و ممان دوقطبی)
- ۲- توصیف‌کننده‌های تئوری که فقط با استفاده از ساختار مولکول و بدون نیاز به داده‌های تجربی محاسبه می‌شوند و برای هر مولکول واقعی یا فرضی که هنوز سنتز نشده نیز قابل محاسبه است. [۲۵ و ۳۱]. در این تحقیق ۳۲۲۴ توصیف‌کننده‌ی تئوری توسط نرم افزار دراگون^۱ ۵/۵ محاسبه شد که این توصیف‌کننده‌ها از نظر بیان چگونگی خصوصیات مولکول به ۲۲ دسته‌ی متفاوت تقسیم می‌شوند. در جدول (۲-۱) نام انواع این توصیف‌کننده‌ها آورده شده است [۱].

۲-۳-۴- حذف توصیف کننده‌های نامناسب

پس از آن که توصیف‌کننده‌ها محاسبه شدند، باید توصیف‌کننده‌هایی که اطلاعات کمتری درمورد تغییرات خواص شیمیایی و یا بیولوژیکی موردنظر دارند را حذف نمود. از این رو توصیف‌کننده‌هایی که برای تمام مولکول‌ها، مقادیر ثابت، تقریباً ثابت و یا صفر داشته باشند، حذف می‌شوند. همچنین توصیف‌کننده‌هایی که کمتر از ۱۰٪ مقادیر غیر صفر و یا بیش از ۹۰٪ مقادیر یکسان دارند، مفید نبوده و کنار گذاشته می‌شوند. برای حذف بقیه توصیف‌کننده‌های غیرمفید، ماتریس همبستگی از طریق نرم‌افزار Matlab بین توصیف‌کننده‌ها تشکیل می‌شود. همبستگی بیش از ۹۰٪ بین توصیف‌کننده‌ها بیانگر رابطه‌ی خطی بین آنهاست. در این صورت توصیف‌کننده‌ای که ارتباطش با متغیر وابسته مشکل‌تر بوده و ضریب همبستگی‌اش کمتر باشد، حذف می‌گردد.

جدول (۲-۱) - انواع توصیف‌کننده‌های محاسبه شده توسط نرم افزار Dragon

۱	توصیف‌کننده‌های زیرساختاری ^۱	۲	توصیف‌کننده‌های توپولوژی ^۲
۳	شمارنده‌های مولکولی ^۳	۴	شاخص‌های اتصال ^۴
۵	شاخص‌های اطلاعاتی ^۵	۶	خود ارتباطی‌های دو بعدی ^۶
۷	شاخص‌های مجاورت لبه ^۷	۸	خصوصیات بارگذاری ^۸
۹	شاخص بار توپولوژیکی ^۹	۱۰	شاخص‌های مبتنی بر مقادیر ویژه ^{۱۰}
۱۱	پروفایل‌های مولکولی راندیک ^{۱۱}	۱۲	توصیف‌کننده‌های هندسی ^{۱۲}
۱۳	توصیف‌کننده‌های RDF ^{۱۳}	۱۴	توصیف‌کننده‌های سه بعدی موریس ^{۱۴}
۱۵	توصیف‌کننده‌های WHIM ^{۱۵}	۱۶	توصیف‌کننده‌های GETAWAY ^{۱۶}
۱۷	گروه‌های عاملی ^{۱۷}	۱۸	اجزای میان اتمی ^{۱۸}
۱۹	توصیف‌کننده‌های باردار ^{۱۹}	۲۰	خصوصیات مولکولی ^{۲۰}
۲۱	اثر دو بعدی باینری ^{۲۱}	۲۲	اثر فرنکانس دو بعدی ^{۲۲}

۱- Constitutional Descriptors

۲- Topological Descriptors

۳- Walk and path Counts

۴- Connectivity Indices

۵- Information Indices

۶- 2D Autocorrelations

۷- Edge adjacency Indices

۸- Burden eigenvalues

۹- Topological charge indices

۱۰- Eigenvalue-based indices

۱۱- Randic molecular profiles

۱۲- Geometrical descriptors

۱۳- Radical Distribution Function descriptors

۱۴- 3D-MORSE descriptors

۱۵- Weighted Holistic Invariant Molecular descriptors

۱۶- Geometry, Topology and Atom Weighted Assembly descriptors

۱۷- Functional group counts

۱۸- Atom-centred fragments

۱۹- Charge descriptors

۲۰- Molecular properties

۲۱- 2D binary fingerprints

۲۲- 2D frequency fingerprints

۲-۳-۵- تقسیم‌بندی داده‌ها

قبل از ساختن مدل، سری داده‌ها به سه زیر مجموعه تقسیم می‌شوند. اولین زیر مجموعه، سری آموزش^۱ است که اکثریت داده‌ها را در بر گرفته و از آن برای ساخت مدل‌های خطی و غیرخطی استفاده می‌شود. دومین زیر مجموعه، سری ارزیابی^۲ نام دارد که مدل‌های به دست آمده از سری آموزش توسط آن ارزیابی شده و به این ترتیب بهترین مدل انتخاب می‌شود. زیر مجموعه‌ی سوم سری تست^۳ یا آزمایش نام دارد که در طول فرآیند مدل‌سازی دخالتی نداشته و از آن برای مقایسه‌ی مدل‌های متفاوت استفاده می‌شود. تقسیم‌بندی داده‌ها به این سه زیر مجموعه معمولاً به صورت تصادفی و یا با روش تحلیل مولفه‌های اساسی (PCA) انجام می‌شود.

۲-۳-۶- انتخاب بهترین توصیف‌کننده‌ها

با وجودی که با به کار بردن روش‌های کاهش متغیر برای حذف توصیف‌کننده‌های نامناسب، تعداد توصیف‌کننده‌ها به میزان زیادی کاهش می‌یابد، اما هنوز تعداد توصیف‌کننده‌های باقیمانده برای ساخت یک مدل مناسب زیاد است. هرچه در مدل نهایی تعداد توصیف‌کننده‌ها کمتر باشند، مدل ساده‌تر خواهد شد. بنابراین باید به ترتیبی، بهترین توصیف‌کننده‌ها را از میان توصیف‌کننده‌های باقی‌مانده، انتخاب نمود. دو روش مرسوم برای انتخاب توصیف‌کننده‌ها، روش خطی رگرسیون مرحله‌ای (MLR) و روش غیرخطی الگوریتم ژنتیک^۴ است. چون در این پایان‌نامه از روش GA برای انتخاب بهترین توصیف‌کننده‌ها استفاده شده در ادامه به اختصار راجع به این روش توضیحاتی ارائه می‌گردد.

۱ - Train

۲ - Validation

۳ - Test

۴ - Genetic algorithm

۲-۳-۶-۱- انتخاب بهترین توصیف‌کننده‌ها توسط الگوریتم ژنتیک

۲-۳-۶-۱- الف - مقدمه

الگوریتم ژنتیک یک روش بهینه‌سازی الهام گرفته از طبیعت جاندار است که می‌توان در طبقه‌بندی‌ها، آن را به عنوان یک روش عددی جستجوی مستقیم و تصادفی معرفی کرد. این الگوریتم، الگوریتمی مبتنی بر تکرار بوده که اصول اولیه‌ی آن از علم ژنتیک اقتباس شده است و با تقلید از تعدادی از فرایندهای مشاهده شده در تکامل طبیعی ارائه شده است. این روش به طور موثری از طبیعت موجود در یک جمعیت استفاده می‌کند تا راه‌حل‌های جدید و بهبود یافته را ایجاد کند. این الگوریتم در مسایل متنوعی نظیر بهینه‌سازی، شناسایی و کنترل سیستم، پردازش تصویر و مسایل ترکیبی، تعیین توپولوژی و آموزش شبکه‌های عصبی مصنوعی و سیستم‌های مبتنی بر تصمیم و قاعده به کار می‌رود.

۲-۳-۶-۱- ب - الگوریتم ژنتیک

الگوریتم ژنتیک (GA) یک تکنیک جستجو در علم رایانه برای یافتن راه‌حل بهینه و مسائل جستجو می‌باشد. الگوریتم‌های ژنتیک یکی از انواع الگوریتم‌های تکاملی هستند که از علم زیست‌شناسی مانند وراثت، جهش، انتخاب ناگهانی، انتخاب طبیعی و ترکیب الهام گرفته‌اند. ساز و کار الگوریتم ژنتیک بر مبنای قوانین موجود در علم ژنتیک است. در ادامه با برخی مفاهیم و تعاریف الگوریتم ژنتیک آشنا خواهیم شد.

ژن: به منظور نمایش جواب یک مسئله که قرار است با الگوریتم ژنتیک پاسخ آن پیدا شود، لازم است تا یک ساختار داده‌ای^۱ مناسب انتخاب گردد. به این ساختار داده‌ای ژن یا کروموزوم^۲ گفته می‌شود. هر ژن مبین یک متغیر یا یک پارامتر است که تمامی اطلاعات لازم در مورد یک جواب را در خود دارد [۳۲].

۱ - Data Structure

۲ - Chromosome Like

افراد^۱ یا کروموزوم^۲: در الگوریتم ژنتیک، هر فرد تنها یک کروموزوم دارد و هر کروموزوم به معنای یک راه حل مسئله به صورت رمزی شده می باشد. کروموزوم ها از ترکیب مقادیر مختلف متغیرها یا ژن ها به وجود می آیند که هر ژن مبین یک متغیر است [۳۳].

جمعیت: به تعداد مشخصی از کروموزوم ها که در کنار هم قرار می گیرند جمعیت گفته می شود و با نماد N نشان داده می شود. هر جمعیت توسط عملگرهای وراثتی مثل انتخاب، تلفیق و جهش جمعیت بعدی را می سازد.

نمایش و کدگذاری کروموزوم ها: تاکنون در حل مسائل بهینه سازی روش های مختلفی برای نمایش پارامترها و اطلاعات مسأله (کروموزوم ها) به کار برده شده است که انتخاب هر کدام از این روش ها باید با توجه به نوع مسأله و فضای جستجوی مورد نیاز برای حل و بهینه سازی آن صورت پذیرد. از پرکاربردترین روش ها، کدگذاری رشته ای است.

تابع شایستگی^۳: برتری کروموزوم ها (افراد) نسبت به یکدیگر با توجه به یک معیار سنجیده می شود. این معیار، تابع شایستگی است.

تعیین جمعیت اولیه: بعد از تصمیم گیری در مورد شیوهی کدگذاری کروموزوم ها، جمعیت اولیه باید اتخاذ گردد. این مرحله معمولاً با انتخاب تصادفی مقادیر در محدوده ی مجاز صورت می گیرد.

روش های انتخاب کروموزوم ها: روش های مختلفی برای انتخاب کروموزوم ها وجود دارند که در زیر به معمولترین آن ها اشاره می شود.

انتخاب چرخ رولت^۴: در این روش هر عنصری که عدد برازش (تناسب) بیشتری داشته باشد، شانس انتخاب بیشتری دارد.

انتخاب نخبه گرا یا ممتازگرا^۱: در این روش مناسب ترین عضو هر اجتماع انتخاب می شود.

۱- Individuals

۲- Chromosome

۳- Fitness function

۴ - Roulette wheel

انتخاب مقیاس^۲: در این روش به موازات افزایش متوسط عدد برآزش جامعه، سنگینی انتخاب هم بیشتر می‌شود. این روش وقتی به کار می‌رود که مجموعه دارای عناصری با عدد برآزش بزرگ باشد و فقط تفاوت‌های کوچکی آنها را از هم تفکیک کند.

انتخاب مسابقه‌ای^۳: روشی است که در آن یک زیرمجموعه از صفات یک جامعه، انتخاب می‌شوند و اعضای آن مجموعه با هم رقابت می‌کنند تا سرانجام فقط یک صفت از هر زیر گروه برای ادغام، انتخاب شوند [۳۴].

۲-۳-۶-۱-ج- نحوه‌ی انتخاب توصیف‌کننده‌ها و شرایط توقف الگوریتم ژنتیک

الگوریتم‌های ژنتیک ذاتاً موازی هستند و به دلیل موازی بودن می‌توانند چندین رشته را در یک لحظه مورد ارزیابی قرار دهند. الگوریتم‌هایی که موازی نیستند فقط می‌توانند فضای مسأله مورد نظر را در یک جهت در یک لحظه جستجو کنند و اگر راه‌حل پیدا شده یک جواب بهینه‌ی محلی باشد و یا زیر مجموعه‌ای از جواب اصلی باشد باید تمام کارهایی که تا به حال انجام شده را کنار گذاشت و دوباره از اول شروع کرد. از آنجایی که الگوریتم ژنتیک چندین نقطه‌ی شروع موازی دارد، در یک لحظه می‌تواند فضای مسأله را از چند جهت مختلف جستجو کند. اگر یکی به نتیجه نرسید سایر راه‌ها ادامه می‌یابند و منابع بیشتری را در اختیار قرار می‌دهند. الگوریتم ژنتیک تغییرات تصادفی در راه‌حل‌های کاندید شده را نشان می‌دهد سپس از تابع برآزش برای سنجش این‌که آیا تغییرات تصادفی پیشرفتی در انتخاب ژن مناسب ایجاد کرده‌اند یا نه استفاده می‌کند.

از شرایط زیر می‌توان برای توقف روند تکرار الگوریتم ژنتیک استفاده نمود:

۱- تعداد نسل‌ها: الگوریتم زمانی متوقف می‌شود که تعداد نسل‌ها به مقدار معینی برسد.

۲- محدودیت زمانی: در جعبه ابزار GA می‌توان این محدودیت را برحسب واحد ثانیه تعیین نمود.

۱- Elitist

۲ - Scalin

۳ - Tournament

۳- محدودیت شایستگی: الگوریتم زمانی متوقف می‌شود که بهترین مقدار شایستگی در جمعیت حاضر کوچکتر یا مساوی یک مقدار معین گردد.

۴- رکود نسلی: اگر در نسل‌ها به تعداد معینی هیچ گونه پیشرفتی حاصل نشود، الگوریتم متوقف می‌گردد.

۵- رکود زمانی: در صورتی که در تابع هدف برای زمان معینی هیچ گونه پیشرفتی حاصل نشود، الگوریتم متوقف می‌گردد.

الگوریتم در صورتی که هر یک از شرایط فوق برآورده گردد متوقف می‌شود.

۲-۳-۷- انتخاب توصیف‌کننده‌ها بر مبنای روش سهم‌گروه^۱ (GCM)

روش دیگر انتخاب توصیف‌کننده‌ها، روش سهم‌گروه است. روش سهم‌گروه روشی ساده، کارآمد و در عین حال معتبر است که به طور گسترده‌ای در پیش‌بینی خواص فیزیکی و ترمودینامیکی مواد به کار می‌رود. این روش در واقع ارتباطی بین خاصیت یک ماده با ساختار شیمیایی آن برقرار می‌کند. مبنای به وجود آمدن روش سهم‌گروه‌ها این است که اگر چه هزاران ترکیب شیمیایی در دنیای علم و تکنولوژی وجود دارد اما تعداد گروه‌های ساختاری و عاملی سازنده‌ی همه‌ی این ترکیبات، بسیار کمتر از تعداد این ترکیبات می‌باشد. با این ایده، روش سهم‌گروه‌ها فرض می‌کند که خاصیت فیزیکی یا ترمودینامیکی هر ماده را می‌توان از سهم‌گروه‌های موجود در مولکول آن ماده در خاصیت موردنظر، به دست آورد. به این ترتیب یک روش عملی برای پیش‌بینی خواص تعداد زیادی ماده برحسب تعداد کمتری پارامتر به دست می‌آید که این پارامترها، سهم‌گروه‌های ساختاری را در خاصیت موردنظر مشخص می‌کنند.

لازم به توضیح است که تعریف گروه‌های تشکیل‌دهنده‌ی هر ماده، یک مقوله‌ی اختیاری است. به طور مثال ممکن است یک نفر پیشنهاد کند که باید اتم‌های اصلی شناسایی شوند. در حالی که ما می‌دانیم

^۱- Groupe Contribution Method

خواص کربن در الماس نسبت به کربن در گرافیت بسیار متفاوت است. از طرف دیگر، تجربه نشان داده است که اگر چه گروه کربونیل موجود در کتون‌ها نسبت به گروه کربونیل موجود در کربوکسیلیک اسیدها خواص متفاوتی دارد اما حداقل گروه کربونیل موجود در همه‌ی کتون‌ها مشابه است. بدیهی است هر چه تمایز بین گروه‌ها بیشتر شود، صحت روش سهم گروه‌ها افزایش می‌یابد تا جایی که سرانجام هر ترکیب فقط شامل گروه‌های مربوط به خودش باشد. اما می‌توان با انتخاب صحیح گروه‌ها به روش سودمندی دست یافت که با وجود تعداد گروه‌های کم، صحت خواص پیش‌بینی شده قابل قبول باشد [۳۵].

در مطالعات QSPR که به طور گسترده‌ای برای مدل‌سازی خواص فیزیکی و شیمیایی مواد به کار می‌رود، خاصیت مورد نظر به توصیف‌کننده‌های مولکولی مرتبط می‌شود. توصیف‌کننده‌های مولکولی مشخصه‌های عددی ماده‌ی خالص هستند که مستقیماً از روی ساختار بهینه شده‌ی مولکول و با استفاده از الگوریتم‌ها و نرم‌افزارهای خاص محاسبه می‌شوند. اما مهم‌ترین عیب این روش‌ها، مسیر طولانی و پیچیده‌ی محاسبه‌ی توصیف‌کننده‌ها از روی ساختار مولکولی و سپس انتخاب بهترین آن‌هاست. در نتیجه مدل‌های حاصل از این مطالعات برای استفاده، چندان ساده و راحت نیستند. به همین دلیل در سال‌های اخیر استفاده از روش ساده و کارآمد سهم گروه‌ها برای انتخاب توصیف‌کننده‌های مناسب جهت مطالعات QSPR پیشنهاد شده است. در این روش تعداد گروه‌های تشکیل‌دهنده‌ی هر ترکیب به عنوان توصیف‌کننده‌های آن ماده انتخاب می‌شود و در صورتی که یکی از گروه‌های تشکیل‌دهنده در ترکیبات مورد مطالعه وجود نداشته باشد توصیف‌کننده‌ی مرتبط با آن گروه، صفر در نظر گرفته می‌شود.

در طی چند سال اخیر از شبکه‌ی عصبی مصنوعی بر مبنای روش سهم گروه‌ها در پیش‌بینی خواص مختلفی از جمله برای پیش‌بینی نقطه‌ی اشتعال آلکان‌ها [۳۶]، دانسیته‌ی مایعات یونی [۳۷]، خواص نقطه‌ی بحرانی تعدادی از هیدروکربن‌ها [۳۸]، هدایت یونی و ویسکوزیته‌ی مایعات یونی [۳۹] و دانسیته‌ی هیدروکربن‌ها [۴۰] استفاده شده است.

۲-۳-۸- ساختن مدل

در این مرحله با استفاده از روش‌های آماری مختلف، مدل‌سازی انجام می‌شود. در واقع مدل یک رابطه‌ی ریاضی است که بیانگر رابطه‌ی بین متغیر وابسته و متغیرهای مستقل (توصیف‌کننده‌ها) است. با داشتن مقادیر متغیرهای مستقل وارد شده در مدل، می‌توان مقدار متغیر وابسته را محاسبه نمود. برای مدل‌سازی روش‌های خطی و غیرخطی مختلفی وجود دارد. در مدل خطی با در نظر گرفتن این که رابطه‌ی بین توصیف‌کننده‌ها و متغیر وابسته، یک رابطه‌ی خطی است، مدل‌سازی صورت می‌گیرد. زمانی که مدل‌های خطی نتایج مطلوبی ارائه ندهند و یا روابط غیر خطی بین توصیف‌کننده‌ها و متغیر وابسته وجود داشته باشد، از مدل غیرخطی استفاده می‌شود. از جمله روش‌های خطی می‌توان به روش رگرسیون خطی چندگانه (MLR)، روش تحلیل مولفه‌های اساسی (PCR) و روش حداقل مربعات جزئی (PLS) و از روش‌های غیرخطی، به شبکه‌ی عصبی مصنوعی (ANN)، الگوریتم ژنتیک (GA) و ماشین بردار پشتیبان (SVM) اشاره کرد. در این پایان‌نامه از روش غیرخطی ANN برای مدل‌سازی دانسیته‌ی ترکیبات آلی استفاده شده است. در ادامه این روش به اختصار شرح داده خواهد شد.

۲-۳-۸-۱- شبکه عصبی مصنوعی

شبکه عصبی یک برنامه نرم افزاری است که می‌تواند همانند مغز انسان عمل نماید. در واقع شبکه‌ی عصبی مصنوعی، ایده‌ای است برای پردازش اطلاعات که از سیستم عصبی زیستی الهام گرفته شده و مانند مغز انسان به پردازش اطلاعات می‌پردازد. این سیستم‌ها از تعداد زیادی عنصر پردازشگر به نام نرون^۱ تشکیل شده‌اند که هر کدام به هزاران نرون دیگر متصل هستند. اگرچه همه نرون‌ها کارکرد یکسانی دارند اما اندازه و شکل آن‌ها به محل استقرارشان در سیستم عصبی بستگی دارد اما با وجود این تنوع ساختار، نرون‌ها از سه بخش اساسی تشکیل شده‌اند:

۱ - Neuron

بدنه ی سلول یا جسم سلولی

دندريت^۱

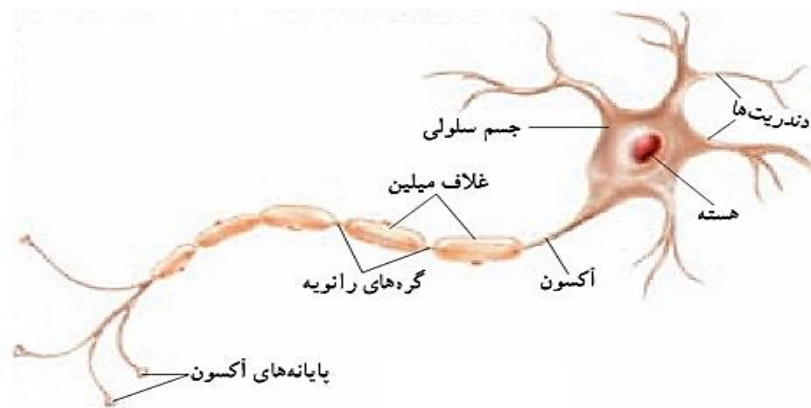
آکسون^۲

دندريت و آکسون، عناصر ارتباطی نرون را تشکیل می‌دهند. دندريت‌ها به عنوان مناطق دریافت سیگنال‌های الکتریکی، شبکه‌هایی متشکل از فیبرهای سلولی هستند که دارای سطحی نامنظم بوده و به همین علت به آن‌ها شبکه‌های دریافتی درختی نیز گفته می‌شود. دندريت‌ها گیرنده‌های نرون بوده و وظیفه ی آن‌ها انتقال سیگنال‌های الکتریکی به هسته‌ی سلول است. بدنه‌ی سلول انرژی لازم برای فعالیت نرون را فراهم آورده و بر روی سیگنال‌های دریافتی عمل می‌کند. عملیاتی که در اینجا صورت می‌گیرد در واقع انجام یک عمل جمع ساده و مقایسه‌ی آن با یک سطح آستانه است. آکسون بر خلاف دندريت از سطح صاف‌تری برخوردار بوده و شاخه‌های کمتری دارد. آکسون‌ها، بر عکس دندريت‌ها از سطحی هموارتر و تعداد شاخه‌های کمتری برخوردار هستند. آنها طول بیشتری دارند و سیگنال الکتروشیمیایی دریافتی از هسته سلول را به نرون‌های دیگر منتقل می‌کنند. محل اتصال آکسون یک سلول به دندريت‌های سلول‌های دیگر را سیناپس^۳ می‌گویند. پیام‌های عصبی تنها به صورت یک طرفه از دندريت‌ها به بدنه‌ی سلول و از آنجا به آکسون حرکت می‌کنند. وقتی پیام به انتهای آکسون می‌رسد، موجب آزاد شدن یک ماده‌ی شیمیایی به نام انتقال دهنده نرونی از انتهای آکسون می‌شود و پس از نفوذ در سیناپس‌ها، گیرنده‌های سلول‌های مجاور را فعال می‌کند [۴۱]. شکل (۱-۲) ساختار کلی یک نرون زیستی را نشان می‌دهد.

۱ - Dendrit

۲ - Axon

۳- Synapse



شکل (۱-۲) - ساختار یک نرون زیستی

شبکه‌های عصبی جزء دسته‌ای از سیستم‌های دینامیکی هستند که با پردازش روی داده‌های تجربی، دانش یا قانون نهفته در ورای آن‌ها را کشف می‌کنند. به همین دلیل به این سیستم‌ها هوشمند گفته می‌شود زیرا براساس محاسبات روی داده‌های عددی یا مثال‌ها، قوانین کلی را فرا می‌گیرند [۴۲].

۲-۳-۸-۲- تاربخچه‌ی شبکه عصبی مصنوعی

پیشرفت عمده‌ی شبکه‌های عصبی از سال ۱۹۴۳ با فعالیت‌های وارن مک کلوث^۱ و والتر پیتز^۲ آغاز شد. آن‌ها نشان دادند که شبکه‌ی عصبی می‌تواند هر تابع حسابی یا منطقی را محاسبه کند [۴۳]. به دنبال آن دونالد هب^۳ مکانیسمی برای آموزش شبکه ارائه داد. اولین کاربرد عملی شبکه‌های مصنوعی در سال ۱۹۵۸ بود که در آن از شبکه‌ای که روزنبلات^۴ پیشنهاد داده بود، استفاده شد [۴۴]. روزنبلات یک شبکه‌ی چند لایه را ارائه کرد و توانایی آن را در انجام شناسایی الگو اثبات نمود. این موفقیت زود هنگام باعث پیدایش زمینه‌ی وسیعی در تحقیقات شبکه عصبی شد. تقریباً در همان زمان برنارد

۱-Warren McCulloch

۲-Walter Pitts

۳-Donald Hebb

۴-Rosenblatt

ویدرو^۱ و تدهاف^۲ الگوریتم آموزشی جدیدی را مطرح کردند که از لحاظ ساختار به شبکه روزنبلات شبیه بود. قاعده‌ی آموزش ویدرو- هاف امروزه نیز در شبکه‌های عصبی استفاده می‌شود. اما شبکه ویدرو- هاف و روزنبلات دارای محدودیت‌هایی بود که اولین بار توسط ماروین مینسکی^۳ مطرح شد. محققان تحت تاثیر نظریه‌ی مینسکی بر این عقیده بودند که تحقیق در مورد شبکه‌های عصبی پایان یافته است [۴۵]، اما در سال ۱۹۸۶ با ظهور کامپیوترهایی با توان محاسباتی سریع، مجدد تحقیق در مورد شبکه‌های عصبی آغاز شد. در این سال الگوریتم آموزشی پس انتشار توسط جیمز مک‌کلاند^۴ ارائه شد [۴۶] که نقطه‌ی عطفی در تحقیقات شبکه‌های عصبی به شمار می‌آید. از سال ۱۹۸۶ تاکنون محققان زیادی در مورد شبکه‌های عصبی تحقیق نموده‌اند که نتیجه‌ی آن صدها مقاله در این زمینه است. امروزه از شبکه‌های عصبی به عنوان یک ابزار کارآمد در زمینه‌های مختلف علمی از جمله صنایع الکترونیک، پزشکی، اکتشاف نفت و گاز، رباتیک، شیمی و داروسازی استفاده می‌شود [۴۵].

۲-۳-۸-۲-الف - ساختار شبکه عصبی مصنوعی

مهم‌ترین جزء تشکیل دهنده‌ی هر شبکه‌ی عصبی مصنوعی نرون است. یک نرون محاسباتی کوچک‌ترین واحد پردازش اطلاعات است که در اصل مدل ساده شده‌ای از نرون طبیعی است. هر نرون از تعدادی ورودی، خروجی، وزن‌های مربوط به ایجاد سیگنال تحریک و تابع تحریک تشکیل شده است. ارتباط بین خروجی و سیگنال تحریک در قسمتی به نام تابع تحریک به وجود می‌آید. بنابراین یک نرون از دو بخش تشکیل شده است: بخش اول وظیفه‌ی دریافت ورودی‌ها، وزن‌دهی آن‌ها و محاسبه‌ی مجموع آن‌ها به عنوان سیگنال تحریک را به عهده دارد و بخش دوم وظیفه‌ی اعمال تابع تحریک روی سیگنال تحریک و ساختن پیغام خروجی نرون به لایه‌ی بعد و یا خروجی شبکه را به عهده دارد. توابع تحریک به کار رفته در شبکه‌ی عصبی مصنوعی می‌توانند خطی و یا غیرخطی باشند،

۱ - Bernard Widrow

۲ - Ted Hoff

۳ - Marvin Minsky

۴ - James McClelland

و برای مقاصد مختلف، توابع محرک متفاوتی به کار می‌روند. تعداد توابع محرک زیادی در ساختار شبکه‌ی عصبی مورد استفاده قرار می‌گیرند که سه مورد از معروف‌ترین توابع محرک عبارتند از: تابع محرک خطی^۱، تابع محرک آستانه‌ی حدی^۲ و تابع محرک سیگموئید^۳.

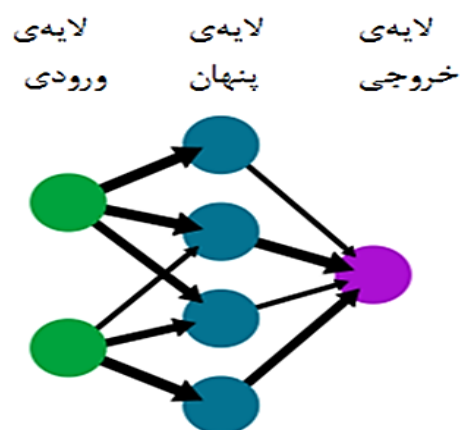
در سیستم‌های پردازش موازی سه نوع واحد پردازشگر قابل تفکیک وجود دارد که عبارتند از: واحدهای ورودی، واحدهای خروجی و واحدهای میانی یا پنهان.

واحدهای ورودی، ورودی‌ها را از منبع داده‌های ورودی دریافت می‌کنند و در اختیار سایر نرون‌ها قرار می‌دهند.

واحدهای خروجی، مقادیر محاسبه شده را به خارج از سیستم می‌فرستند. البته ممکن است برای گام‌های بعدی پردازش، این خروجی‌ها به سیستم پس‌خور شوند.

واحدهای میانی یا پنهان، به واحدهایی اطلاق می‌شوند که با خارج از سیستم ارتباط مستقیمی ندارند [۴۱].

واحدهای یک شبکه‌ی عصبی مصنوعی در شکل (۲-۲) نشان داده شده است.



شکل (۲-۲) - ساختار یک شبکه‌ی عصبی مصنوعی سه لایه

۱ - Linear Transfer Function

۲ - Hard Limit Transfer Function

۳ - sigmoid Transfer Function

۲-۳-۸-۲-ب- انواع شبکه‌ها از نظر ارتباطات بین نرونی

ارتباطات بین نرونی در یک شبکه‌ی عصبی از اهمیت بسیاری برخوردار می‌باشد و به نوعی قدرت شبکه را تعیین می‌کنند. شبکه‌های عصبی براساس شیوه‌ی پردازش اطلاعات و ارتباطات بین نرونی به دو دسته‌ی کلی تقسیم می‌شوند:

شبکه‌های پیش‌خور^۱

شبکه‌های پس‌خور^۲

در شبکه‌های پیش‌خور، هر نرون در هر لایه به کلیه‌ی نرون‌های لایه‌ی مجاور و بعدی متصل می‌شود اما هیچ سیگنالی از نرون به خودش و یا به نرون‌های لایه‌ی قبلی برنمی‌گردد. بنابراین در این شبکه‌ها، خروجی هر نرون چه به صورت مستقیم و چه به صورت غیرمستقیم، به ورودی همان نرون برنمی‌گردد. با قرار گرفتن الگوی مورد نظر در ورودی شبکه، نرون‌های لایه‌ی اول، خروجی را محاسبه کرده و به لایه‌ی دوم می‌دهند. بعد از این، هر لایه مقادیر ورودی را از لایه‌های قبلی دریافت کرده و خروجی آن، به لایه‌ی بعدی فرستاده می‌شود تا جایی که به لایه‌ی خروجی برسد و خروجی کل شبکه محاسبه شود. بنابراین در این شبکه‌ها، جریان اطلاعات همیشه در یک مسیر یک طرفه و از ورودی به سمت خروجی است و به همین دلیل هم به آن پیش‌خور می‌گویند.

در شبکه‌های پس‌خور، حداقل یک سیگنال برگشتی از یک نرون به همان نرون یا نرون‌های همان لایه و یا نرون‌های لایه‌ی قبلی وجود دارد. بنابراین آنها می‌توانند با استفاده از حلقه‌های برگشتی، سیگنال‌هایی داشته باشند که در هر دو مسیر از ورودی به خروجی و بالعکس حرکت کنند [۳۵].

۱ - Feed Forward

۲ - Feed Back

۲-۳-۸-۲-ج- روش‌های آموزش

شبکه‌های عصبی می‌توانند براساس طراحی خود، سیگنال‌های ورودی را پردازش کنند و به سیگنال‌های خروجی مورد نظر تبدیل نمایند. به طور معمول پس از این که شبکه‌های عصبی طراحی و پیاده‌سازی شدند، باید پارامترهای بایاس (b) و وزن‌ها (w) به ازای مجموعه‌هایی از سیگنال‌های ورودی، به گونه‌ای تنظیم شوند که سیگنال‌های خروجی شبکه، خروجی مطلوب را تشکیل دهند. چنین فرایندی را آموزش شبکه‌ی عصبی می‌نامند. به طور کلی دو نوع یادگیری برای شبکه‌ها وجود دارد: آموزش با ناظر^۱ و آموزش بدون ناظر^۲.

در یادگیری با ناظر، به ازای هر دسته از الگوهای ورودی، خروجی‌های متناظر نیز به شبکه داده می‌شود و تغییر وزن‌ها و بایاس‌ها تا موقعی صورت می‌گیرد که اختلاف خروجی شبکه به ازای الگوهای آموزشی با خروجی واقعی در حد خطای قابل قبولی باشد. در اکثر شبکه‌های عصبی از این نوع یادگیری استفاده می‌شود.

نوع دیگری از یادگیری به نام یادگیری بدون ناظر یا خودسامان‌ده می‌باشد که در آن جواب واقعی برای سیستم یادگیرنده موجود نیست و شبکه می‌آموزد که الگوهای ورودی را به تعداد مساوی از گروه‌ها تقسیم بندی کرده، ارتباطات موجود بین آن‌ها را پیدا و در خروجی شبکه کد نماید. باید توجه داشت که در این حالت، فرد کاربر است که هدف نهایی را مشخص می‌کند [۳۵].

در هر الگوریتم آموزشی برای حداقل شدن خطای بین مقادیر واقعی و پاسخ شبکه، باید عملکرد شبکه را بهینه نمود. برای بهینه‌سازی عملکرد شبکه، ابتدا باید یک شاخص عملکرد معرفی شود. شاخص عملکرد، معیاری برای بیان عملکرد شبکه است و با عملکرد شبکه رابطه‌ی عکس دارد یعنی هر چه عملکرد شبکه بهتر باشد، مقدار شاخص عملکرد کوچک‌تر خواهد بود و بالعکس. شاخص عملکرد در

۱ - Supervised Learning

۲ - Unsupervised Learning

بیشتر الگوریتم‌ها، متوسط مربعات خطا^۱ (MSE) است. شاخص عملکرد را تابع هدف یا تابع خطا نیز می‌گویند، یعنی تابعی که کمینه کردن آن موردنظر است. پس از تعیین شاخص عملکرد باید پارامترهای شبکه برای کاهش مقدار این شاخص عملکرد تنظیم گردد [۴۷].

از رایج‌ترین الگوریتم‌های آموزشی، الگوریتم‌های آموزشی لونبرگ-مارکوات و تنظیم بایزین است. این الگوریتم‌ها روش مناسبی برای آموزش شبکه‌هایی هستند که شاخص عملکرد آن‌ها حداقل متوسط مربعات خطا است. این روش‌ها به عنوان سریع‌ترین و مؤثرترین روش‌های آموزش شبکه‌های عصبی شناخته شده‌اند. سرعت همگرایی این روش‌ها صد برابر بیشتر از شیوه‌های استاندارد مشابه است. در این تحقیق نیز از این دو الگوریتم برای بهینه‌سازی عملکرد شبکه استفاده شده است [۴۸].

۲-۳-۹- ارزیابی قدرت پیش‌بینی مدل

۲-۳-۹-الف- استفاده از پارامترهای آماری

برای اطمینان از این که مدل به دست آمده توانایی پیش‌بینی نمونه‌های مختلفی از یک جمعیت را داراست، باید مدل ارزیابی گردد. این ارزیابی با محاسبه‌ی پارامترهای آماری صورت می‌گیرد. روابط ریاضی پارامترهای آماری استفاده شده در این پایان‌نامه، در ادامه توضیح داده خواهد شد.

ضریب تعیین^۲ (R^2): ضریب تعیین به عنوان یک شاخص، برای بیان دقت خط رگرسیون به کار می‌رود و نشان دهنده‌ی نسبت تغییرات متغیر وابسته نسبت به متغیر مستقل است. به عنوان مثال R^2 برابر ۰/۹۶۶۰ نشان می‌دهد ۹۶/۶۰ درصد تغییرات در متغیر وابسته می‌تواند توسط متغیر مستقل توضیح داده شود. رابطه‌ی ریاضی مربوط به ضریب تعیین به صورت زیر است:

$$R^2 = 1 - \frac{SSE}{SST} \quad (۱-۲)$$

۱- Means Square Error

۲- Determination Coefficient

که در آن SSE^1 مبین مجموع مربعات انحراف مقادیر واقعی متغیر وابسته از مقادیر پیش‌بینی شده برای آن است و طبق رابطه‌ی (۲-۲) تعریف می‌شود:

$$SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y})^2 \quad (2-2)$$

و SST^2 طبق رابطه‌ی (۳-۲) نشانگر مجموع مربعات انحراف مقادیر واقعی متغیر وابسته از میانگین مقادیر آن است:

$$SST = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (3-2)$$

در روابط (۲-۲) و (۳-۲) مقدار پیش‌بینی شده‌ی متغیر وابسته، $\hat{y}_i$ مقدار واقعی متغیر وابسته و $\bar{y}$ در دو رابطه، میانگین مقادیر متغیر وابسته است.

بنابراین با توجه به رابطه فوق می‌توان نوشت:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (4-2)$$

طبق رابطه‌ی (۴-۲) اگر تمام مقادیر پیش‌بینی شده بر روی خط برازش شده قرار گرفته باشند، یعنی به ازای تمام نقاط $y_i = \hat{y}_i$ باشد، مقدار R^2 برابر یک می‌شود و هر گونه انحرافی از این حالت باعث می‌شود که مقدار R^2 از یک کوچکتر شود.

سایر پارامترهای آماری مورد استفاده و روابط مربوط به آن‌ها به صورت زیر است.

میانگین مربع خطاها (MSE):

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y})^2}{n} \quad (5-2)$$

۱- Sum Square Error

۲- Sum Square Total

مجموع مربع باقیمانده ها ^۱(PRESS):

$$PRESS = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y})^2 \quad (۶-۲)$$

میانگین خطای مطلق ^۲(MAE):

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}|}{n} \quad (۷-۲)$$

متوسط مطلق درصد خطای نسبی ^۳(MAPE):

$$MAPE = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}}{y_i} \right| \quad (۸-۲)$$

متوسط درصد خطای نسبی ^۴(MPE):

$$MPE = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \frac{y_i - \hat{y}}{y_i} \quad (۹-۲)$$

ماکزیمم مطلق درصد خطای نسبی ^۵(D_{max}):

$$D_{Max} = \text{Max} \left(100 \left| \frac{y_i - \hat{y}}{y_i} \right| \right) \quad (۱۰-۲)$$

در روابط (۲-۲) تا (۱۰-۲) نیز y_i و $\hat{y}$ به ترتیب مقدار واقعی و مقدار پیش‌بینی شده‌ی متغیر وابسته و n تعداد داده‌های وارد شده به مدل است.

۱ - Predictive Residual Sum of Square

۲ - Mean Absolute Error

۳ - Mean Absolute Percentage Error

۴ - Mean Percentage Error

۵ - Maximum Absolute Percentage Error

۲-۳-۹-ب- استفاده از نمودار برگشتی

در نمودار برگشتی مقادیر پیش‌بینی شده‌ی کمیت مورد نظر برحسب مقادیر تجربی رسم می‌شود و به کمک ضریب تعیین (R^2) به دست آمده از نمودار، پراکندگی نقاط اطراف خط برگشت تعیین می‌شود. محدوده‌ی تغییرات ضریب تعیین به دست آمده بین ۰ و ۱ است. هرچه قدر ضریب تعیین به ۱ نزدیک‌تر باشد، نتایج پیش‌بینی شده به مقادیر واقعی نزدیک‌ترند. اما اگر این مقدار برابر صفر باشد، بین داده‌ها هیچ گونه همبستگی وجود ندارد.

۲-۳-۹-ج- استفاده از نمودار خطای باقیمانده

منظور از عبارت خطای باقیمانده، اختلاف بین مقادیر پیش‌بینی شده و مقادیر تجربی است. اگر پراکندگی مقادیر در دو طرف خط صفر یکسان باشد، این امر نشان‌دهنده‌ی تصادفی بودن خطاست. ولی اگر عمده‌ی نقاط در این نمودار، در یک طرف خط صفر باشد، این بدان معناست که خطای جهت‌داری رخ داده است.

۲-۳-۹-د- استفاده از سری تست خارجی

اعتبار و اهمیت مدل‌های پیش‌بینی کننده وقتی مشخص می‌شود که بتوانند خاصیت موردنظر را برای مولکول‌های جدیدی که در دسته‌ی آموزش موجود نیستند پیش‌بینی کنند. بدین منظور از ابتدای کار تعدادی از مولکول‌ها به عنوان سری تست خارجی کنار گذاشته می‌شود و در نهایت از مدل منتخب بهینه شده، جهت پیش‌بینی خاصیت موردنظر برای مولکول‌های موجود در سری تست خارجی که در مدل‌سازی به کار نرفته‌اند، استفاده می‌شود.

فصل سوم

محاسبات

در دو فصل قبل مطالبی راجع به دانسیته‌ی سیالات خالص و اهمیت پیش‌بینی آن و همچنین مراحل و روش‌های مدل‌سازی معرفی شدند. در این تحقیق یک مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار- خاصیت برای پیش‌بینی دانسیته‌ی مجموعه‌ی متنوعی از ترکیبات آلی چگال بر حسب دما و فشار انجام شده است. برای این منظور، از روش‌های سهم‌گروه و الگوریتم ژنتیک به عنوان روش‌های انتخاب توصیف‌کننده و از روش شبکه‌ی عصبی مصنوعی جهت مدل‌سازی غیرخطی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی طیف وسیعی از ترکیبات آلی استفاده گردید. همچنین توانایی مدل‌های به دست آمده با روش‌های مختلف مورد ارزیابی قرار گرفت. آنچه در ادامه‌ی این فصل می‌آید چگونگی مراحل طراحی و بهینه‌سازی مدل‌ها و همچنین شیوه‌ی ارزیابی آن‌هاست.

۳-۱- انتخاب سری داده‌ها

به منظور پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات آلی مختلف، ۱۴۰۳۸ نقطه داده‌ی مربوط به ۱۶۸ ترکیب آلی مختلف شامل هیدروکربن‌های آلیفاتیک (اشباع و غیراشباع) و هیدروکربن‌های آروماتیک، آمین‌ها، استرها، کتون‌ها، الکل‌ها، اترها و کربوکسیلیک اسیدها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار جمع‌آوری گردید. نام این ترکیبات به همراه محدوده‌ی دما، فشار، تعداد نقاط مورد استفاده برای هر ترکیب و مرجع مربوط به هر یک از آن‌ها در جدول (۳-۱) گزارش شده است.

جدول (۳-۱) - نام ترکیبات، محدوده‌ی دما و فشار و تعداد نقاط مورد استفاده برای هر ترکیب به همراه مرجع مورد استفاده برای هر یک از آنها

شماره ترکیب	نام ترکیب	ΔT (K)	Δp (MPa)	$\Delta \rho$ (kg.m ⁻³)	تعداد نقاط	مرجع
۱	<i>n</i> -Pentane	۳۰۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱ - ۲۵۱/۶	۶۰۳/۲ - ۷۵۲/۶	۲۹	۴۹
۲	<i>n</i> -Hexane	۲۹۸/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۵۶۴	۵۸۰/۵ - ۸۳۸/۱	۳۱	۵۰
۳	<i>n</i> -Heptane	۲۹۸/۱۵ - ۳۱۰/۶۵	۰/۱ - ۲۷۱/۱	۶۶۸/۷ - ۷۹۷/۲	۱۹	۵۱
۴	<i>n</i> -Octane	۲۹۸/۰۳ - ۳۴۸/۱۴	۰/۱ - ۴۷۹/۵	۶۵۷/۱ - ۸۶۰/۷	۲۸	۵۲
۵	<i>n</i> -Nonane	۳۰۳/۱۵ - ۴۲۳/۱۵	۰ - ۸۰۰	۶۰۸/۰۴ - ۹۰۷/۹	۵۱۵	۵۱
۶	<i>n</i> -Decane	۲۸۳/۱۵ - ۳۹۸/۱۵	۰/۱ - ۷۰	۶۴۷/۵ - ۷۷۷/۱	۴۹	۵۲
۷	<i>n</i> -Undecane	۳۰۳/۱۵ - ۵۷۳/۱۵	۰ - ۵۰۰	۴۰۳/۳ - ۸۸۶/۹	۷۷	۵۱
۸	<i>n</i> -Dodecane	۲۹۸/۱۵ - ۴۷۳/۱۵	۰/۱ - ۱۹۱/۷۴	۴۵۹/۹ - ۸۱۸/۸	۵۴	۵۳
۹	<i>n</i> -Tridecane	۳۰۳/۱۵ - ۵۷۳/۱۵	۰ - ۵۰۰	۵۰۲/۴ - ۸۹۷/۷	۷۷	۵۱
۱۰	<i>n</i> -Tetradecane	۲۹۳/۱۵ - ۴۳۳/۱۵	۰/۱ - ۱۴۰	۴۵۱/۳ - ۸۱۷/۹	۵۹	۵۴
۱۱	<i>n</i> -Pentadecane	۲۹۳/۱۵ - ۳۸۳/۱۵	۰/۱ - ۱۴۹/۵۵	۷۰۵ - ۸۲۴/۹	۱۴۲	۵۵
۱۲	<i>n</i> -Hexadecane	۲۹۸/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۴۵۰/۵	۷۱۸/۶ - ۸۲۲/۲	۲۷	۵۰
۱۳	<i>n</i> -Heptadecane	۳۰۳/۱۵ - ۳۸۳/۱۵	۰/۱ - ۱۴۹/۵۵	۷۱۶ - ۸۲۴/۹	۱۲۴	۵۵
۱۴	<i>n</i> -Octadecane	۳۱۳/۱۵ - ۳۸۳/۱۵	۰/۱ - ۱۴۹/۵۵	۷۲۰/۶ - ۸۲۳/۹	۱۱۱	۵۶
۱۵	<i>n</i> -Nonadecane	۳۱۳/۱۵ - ۳۸۳/۱۵	۰/۱ - ۱۴۹/۵۵	۷۲۴/۸ - ۸۲۶/۶	۱۰۷	۵۶
۱۶	<i>n</i> -Eicosane	۳۷۳/۱۵ - ۵۷۳/۱۵	۰ - ۵۰۰	۵۸۳/۶ - ۹۰۰/۶	۵۵	۵۱
۱۷	<i>n</i> -Octacosane	۳۵۳/۱۵ - ۴۰۳/۱۵	۰/۱ - ۱۴۹/۵۵	۷۳۵/۱ - ۸۳۱/۵	۸۷	۵۷
۱۸	<i>n</i> -Triacontane	۳۷۳/۱۵ - ۵۷۳/۱۵	۰ - ۵۰۰	۶۲۵ - ۹۱۴/۱	۵۵	۵۱

ادامه جدول (۱-۳)

شماره ترکیب	نام ترکیب	ΔT (K)	Δp (MPa)	$\Delta \rho$ (kg.m ⁻³)	تعداد نقاط	مرجع
۱۹	<i>n</i> -Hexatriacontane	۳۶۳/۱۵ - ۴۰۳/۱۵	۰/۱ - ۱۵۱/۳	۷۴۶/۰۳ - ۸۳۳/۱۱	۶۴	۵۷
۲۰	<i>n</i> -Tetracontane	۴۲۳/۱۵ - ۵۷۳/۱۵	۰ - ۵۰۰	۶۴۷/۶ - ۹۱۴/۱۶	۴۴	۵۹
۲۱	Isobutane	۲۰۰ - ۴۰۰	۰/۳ - ۳۰	۴۷۷/۱ - ۶۷۸/۵	۳۶	۵۸
۲۲	Neopentane	۳۴۳/۱۵ - ۳۸۸/۱۵	۰/۵ - ۳۱/۶	۴۵۷/۵ - ۵۸۴/۲۲	۵۸	۵۹
۲۳	2-Methylbutane	۲۰۱/۴ - ۲۵۹/۹	۰/۱ - ۳۰۰	۶۵۲/۳ - ۸۹۶/۱	۱۸۶	۶۰
۲۴	2,3-Dimethylbutane	۳۷۳/۱۵ - ۵۴۸/۱۵	۰/۳ - ۳۲/۳۳	۳۰۱/۸۲ - ۶۳۴/۵۳	۵۹	۶۱
۲۵	2-Methylpentane	۲۹۳/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۱۵۰	۵۹۲/۸ - ۷۴۵/۷	۱۳۹	۶۲
۲۶	2,3-Dimethylpentane	۲۹۳/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۱۵۰	۶۲۰/۶ - ۷۶۷/۵	۱۴۴	۶۲
۲۷	2,2,4-Trimethylpentane	۲۹۳/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۱۵۰	۶۲۱/۹ - ۷۷۶/۳	۱۴۴	۶۲
۲۸	Cyclopentane	۲۸۳/۱۵ - ۳۳۳/۱۵	۰/۱ - ۱۹/۶۹	۷۰۳/۹ - ۷۷۱/۴۳	۱۲۷	۶۳
۲۹	Methylecyclopentane	۲۸۳/۱۵ - ۳۳۳/۱۵	۰/۱ - ۱۹/۹۹	۷۱۰/۳ - ۷۷۳/۹	۱۳۳	۶۳
۳۰	Cyclohexane	۲۸۳/۱۵ - ۳۱۳/۱۵	۰/۱ - ۱۹/۵	۷۵۹/۳۵ - ۷۹۲/۷	۴۰	۶۳
۳۱	Methylcyclohexane	۲۸۳/۱۵ - ۳۳۳/۱۵	۰/۱ - ۲۰/۷۶	۷۳۴ - ۷۹۳/۵	۱۲۸	۶۳
۳۲	Ethylcyclohexane	۳۲۷/۱ - ۴۴۰/۹	۰/۴ - ۹/۷	۶۸۷ - ۷۷۸	۲۴	۶۴
۳۳	Cis-1,2-Dimethylcyclohexane	۳۲۵/۲ - ۴۶۱/۲	۰/۴ - ۹/۷	۶۸۱ - ۷۸۴	۲۱	۶۴
۳۴	Cyclooctane	۳۲۴/۴۵ - ۵۲۳/۸	۱۴ - ۲۷۵/۷	۳۳۳ - ۸۸۵	۲۹	۶۵
۳۵	Heptylcyclohexane	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۷۶۸/۲ - ۸۶۰	۴۲	۶۶
۳۶	Pentadecylcyclohexane	۳۰۳/۱۵ - ۳۸۳/۱۵	۰/۱ - ۱۵۰	۷۶۸/۰۵ - ۸۷۳/۲۴	۱۲۸	۶۷

ادامه جدول (۱-۳)

شماره ترکیب	نام ترکیب	ΔT (K)	Δp (MPa)	$\Delta \rho$ (kg.m ⁻³)	تعداد نقاط	مرجع
۳۷	Nonadecylcyclohexane	۳۲۳/۱۵ - ۳۸۳/۱۵	۰/۱ - ۱۵۰	۷۶۸/۵ - ۸۶۶/۷۷	۹۵	۶۷
۳۸	Ethylene	۱۲۰ - ۳۵۰	۰/۱ - ۲۶۰	۳۰۴/۵۸ - ۷۰۵/۸۴	۱۰۰	۶۸
۳۹	1-butene	۲۷۳/۲۴ - ۵۲۳/۲۳	۰/۶ - ۴۰/۰۱	۲۸۹/۰۲ - ۶۵۹/۴۱	۲۰۹	۶۹
۴۰	Isobutene	۲۷۳/۲۳ - ۵۲۳/۲۳	۰/۶ - ۴۰/۰۱	۲۳۳/۵۶ - ۶۵۹/۲۹	۱۹۴	۶۹
۴۱	Cis-2-butene	۲۷۳/۲۴ - ۵۲۳/۲۴	۰/۵ - ۴۰/۰۱	۳۰۱/۶۵ - ۶۸۰/۶۶	۲۱۴	۶۹
۴۲	Trans-2-butene	۲۷۳/۲۴ - ۵۲۳/۲۴	۰/۶ - ۴۰/۰۱	۲۴۱/۹۱ - ۶۶۵/۴۳	۲۱۲	۶۹
۴۳	1-Pentene	۳۵۳/۱۵ - ۴۹۸/۱۵	۰/۵ - ۳۱/۶	۴۶۳/۶۹ - ۶۲۳/۲	۵۱	۷۰
۴۴	1-Hexene	۲۹۸/۱۵ - ۴۷۲/۰۲	۰/۰۹۸ - ۲۴۵/۱۶	۵۶۰/۵۶ - ۷۹۳/۱۷	۵۲	۷۱
۴۵	1-Heptene	۲۹۸/۱۵ - ۴۲۴/۱۷	۰/۰۹۸ - ۲۴۵/۱۶	۶۱۹/۹۷ - ۸۱۶/۷۹	۴۴	۷۱
۴۶	1-Octene	۲۹۸/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۳۱۲/۷	۶۴۶/۶ - ۸۳۰/۳	۳۷	۷۲
۴۷	1-Tetradecene	۳۰۳/۱۵ - ۴۳۳/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۶۶۹/۸ - ۸۱۵/۹	۲۱۰	۷۳
۴۸	1-Hexadecene	۳۰۳/۱۵ - ۴۳۳/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۶۸۳/۲ - ۸۲۴/۳	۱۵۴	۷۴
۴۹	Cis-hexa-1,3,5-triene	۲۹۸/۱۵ - ۳۲۳/۲	۰/۱	۷۴۹/۳ - ۷۷۲/۲	۴	۷۵
۵۰	Trans-hexa-1,3-diene	۲۹۸/۱۵ - ۳۲۳/۲	۰/۱	۶۷۵/۹ - ۷۰۱/۱	۴	۷۵
۵۱	Trans-hexa-1,4-diene	۲۹۹/۲۹ - ۳۲۳/۶۱	۰/۱	۶۶۷/۸ - ۶۹۲	۴	۷۵
۵۲	Trans-trans-hexa-2,4-diene	۲۹۹/۲۹ - ۳۲۳/۶۱	۰/۱	۶۸۷/۴ - ۷۰۹/۹	۴	۷۵
۵۳	Trans-hexa-1,5-diene	۲۹۸/۱۵ - ۳۲۳/۴۳	۰/۱	۶۶۳/۶ - ۶۸۹/۴	۴	۷۵
۵۴	Cyclohex-1-ene	۲۹۹/۲۹ - ۳۲۳/۶۱	۰/۱	۷۹۰/۷ - ۸۱۴/۵	۴	۷۵

ادامه جدول - (۱-۳)

شماره ترکیب	نام ترکیب	ΔT (K)	Δp (MPa)	$\Delta \rho$ (kg.m ⁻³)	تعداد نقاط	مرجع
۵۵	Cyclohex-1,3-diene	۲۹۸/۱۸ - ۳۲۳/۵۴	۰/۱	۸۱۰/۹ - ۸۳۷/۷	۴	۷۵
۵۶	Cyclohex-1,4-diene	۲۹۹/۲۹ - ۳۲۳/۶۱	۰/۱	۸۲۴/۸ - ۸۴۹/۷	۴	۷۵
۵۷	Benzene	۳۰۰/۶۵ - ۶۷۳/۱۵	۰/۱ - ۳۰۰	۵۲۷ - ۹۶۶	۱۱۷	۷۶
۵۸	Toluene	۲۸۳/۱۵ - ۳۹۸/۱۵	۰/۱ - ۷۰	۷۶۵/۱ - ۹۱۶/۴	۴۸	۷۷
۵۹	<i>o</i> -xylene	۳۱۸/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۱۰	۸۱۰/۲۴ - ۸۶۵/۸	۷۲	۷۸
۶۰	<i>m</i> -xylene	۲۹۸/۱۵ - ۴۷۳/۱۵	۰/۱ - ۱۹۸/۵	۷۳۱/۱ - ۹۵۰/۹	۴۷	۵۲
۶۱	<i>p</i> -xylene	۳۲۳/۱۵ - ۴۴۸/۱۵	۰/۴ - ۵۰	۷۱۵/۹۷ - ۸۷۱/۴	۸۲	۷۹
۶۲	Ethylbenzene	۲۹۳/۱ - ۳۵۳/۱	۱-۴۰	۸۱۳/۱ - ۸۹۳/۱	۳۶	۸۰
۶۳	Propylbenzene	۳۱۸/۱۵ - ۳۳۳/۱۵	۰/۱ - ۵/۰۳	۸۲۸/۰۵ - ۸۴۴/۷۴	۱۹	۸۱
۶۴	Isopropylbenzene	۳۱۸/۱۵ - ۳۳۳/۱۵	۰/۱ - ۴/۹۸	۸۲۷/۴۱ - ۸۴۴/۴۵	۲۰	۸۱
۶۵	Butylbenzene	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۱-۴۰	۸۱۲/۵ - ۸۸۴/۳	۳۶	۸۰
۶۶	Hexylbenzene	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۱-۴۰	۸۱۶/۳ - ۸۸۵/۲	۳۶	۸۰
۶۷	Diphenylmethane	۳۳۳/۱۵ - ۴۱۳/۱۵	۰/۱ - ۳۰	۹۱۰/۱ - ۹۹۲/۷	۲۱	۸۲
۶۸	Heptylbenzene	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۸۱۲/۷ - ۹۰۶/۸	۴۲	۶۶
۶۹	Octylbenzene	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۱-۴۰	۸۱۳/۱ - ۸۷۸	۳۶	۸۰
۷۰	Nonylbenzene	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۱-۴۰	۸۱۴/۴ - ۸۷۸/۷	۳۶	۸۰
۷۱	1-Phenyldecane	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۶۵	۸۱۴ - ۸۸۷/۷	۵۶	۸۳
۷۲	1-Phenylundecane	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۶۵	۸۱۴/۵ - ۸۸۸/۲	۹۸	۸۳

ادامه جدول-(۱-۳)

شماره ترکیب	نام ترکیب	ΔT (K)	ΔP (MPa)	$\Delta \rho$ (kg.m ⁻³)	تعداد نقاط	مرجع
۷۳	1-Phenyltridecane	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۱۵۰	۸۱۳/۶۲ - ۹۰۶/۱۴	۸۵	۸۴
۷۴	1-Phenylpentadecane	۳۰۳/۱۵ - ۳۶۳/۱۵	۰/۱ - ۱۵۰	۸۰۸/۶۱ - ۹۱۰/۸۵	۸۸	۸۴
۷۵	1-Phenylheptadecane	۳۱۳/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۱۵۰	۸۰۱/۱۱ - ۸۹۷/۵	۸۶	۸۵
۷۶	1-Phenylloctadecane	۳۱۳/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۱۵۰	۸۰۰/۸۹ - ۸۹۴/۰۴	۷۷	۸۵
۷۷	Naphthalene	۳۷۸/۷۱ - ۷۴۶/۴۸	۲۰/۹ - ۳۹/۹	۶۷۸ - ۹۹۸/۵	۱۲	۸۶
۷۸	Tetraline	۲۹۸/۱۵ - ۴۴۸/۱۵	۰/۱ - ۲۰۱	۸۶۳/۱ - ۱۰۴۲	۴۸	۵۲
۷۹	1-Methylnaphthalene	۲۹۸/۱۵ - ۴۷۳/۱۵	۰/۱ - ۲۰۲/۴	۸۸۲/۸ - ۱۰۸۳	۵۷	۵۲
۸۰	Ethanol	۲۷۸/۱۵ - ۳۵۸/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۷۲۹/۵ - ۸۴۱/۸	۱۲۶	۸۷
۸۱	1-Propanol	۲۷۸/۱۵ - ۳۵۸/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۷۴۷/۷ - ۸۵۲/۱	۱۲۶	۸۷
۸۲	1-Butanol	۲۷۸/۱۵ - ۳۵۸/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۷۵۶/۶ - ۸۵۵/۶	۱۲۶	۸۷
۸۳	1-Pentanol	۲۲۸/۸ - ۴۳۳	۱۰ - ۲۰۰	۷۰۳/۴ - ۹۱۱/۲	۸۷	۸۸
۸۴	1-Hexanol	۲۷۸/۱۵ - ۳۵۸/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۸۲۶/۴ - ۸۶۰/۹	۱۲۶	۸۷
۸۵	1-Heptanol	۲۷۸/۱۵ - ۳۵۸/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۷۷۴/۲ - ۸۶۳/۹	۱۲۶	۸۷
۸۶	1-Octanol	۲۷۸/۱۵ - ۳۵۸/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۷۷۸ - ۸۶۵/۵	۱۲۶	۸۷
۸۷	1-Nonanol	۲۷۸/۱۵ - ۳۵۸/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۷۸۰/۹ - ۸۶۶/۴	۱۲۶	۸۷
۸۸	1-Decanol	۲۸۸/۱۵ - ۳۵۸/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۷۸۳/۶ - ۷۶۲/۷	۱۱۲	۸۷
۸۹	1-Undecanol	۲۹۸/۱۵ - ۳۵۸/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۷۸۶ - ۸۵۸/۷	۹۸	۸۷
۹۰	1-Dodecanol	۳۲۳/۱۵ - ۳۴۸/۱۵	۰/۱ - ۴۰	۷۹۵/۲ - ۸۳۶/۱	۲۳	۸۹

ادامه جدول (۱-۳)

شماره ترکیب	نام ترکیب	ΔT (K)	Δp (MPa)	$\Delta \rho$ (kg.m ⁻³)	تعداد نقاط	مرجع
۹۱	tetradecanol	۳۲۳/۱۵ - ۳۴۸/۱۵	۰/۱ - ۳۹/۶۵	۷۹۸ - ۸۳۷/۹	۲۴	۸۹
۹۲	hexadecanol	۳۴۸/۱۵	۰/۱ - ۴۰/۱	۸۰۰/۲ - ۸۲۴/۹	۱۱	۸۹
۹۳	2-Propanol	۳۱۳/۱۶ - ۳۶۲/۸۱	۰/۵ - ۲۵/۱۲	۷۱۹/۶ - ۷۹۰/۳۹	۱۵۶	۹۰
۹۴	2-butanol	۳۱۳/۱۴ - ۳۶۲/۷۹	۱/۰.۲ - ۲۵/۰.۴	۷۴۰/۱۳ - ۸۰۸/۱۶	۱۵۰	۹۱
۹۵	2-Pentanol	۲۳۴ - ۴۳۳	۱۰ - ۲۰۰	۶۸۰/۶ - ۹۰۸/۱	۸۹	۸۸
۹۶	3-Pentanol	۲۳۳/۶ - ۴۳۳/۱	۱۰ - ۲۰۰	۶۹۱/۹ - ۹۱۹	۸۵	۸۸
۹۷	Hexan-2-ol	۳۱۳/۱۳ - ۳۶۲/۷۳	۱/۰.۲ - ۲۲/۰.۱	۷۵۴/۹۷ - ۸۱۴/۴	۱۳۲	۹۲
۹۸	2-heptanol	۳۱۳/۱۶ - ۳۶۲/۷۲	۰/۱ - ۲۲/۰.۶	۷۶۰/۱ - ۸۱۷/۲	۱۳۲	۹۳
۹۹	2-Methyl-1-butanol	۲۹۳/۱۵ - ۳۱۸/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۷۹۹/۶۷ - ۸۷۰/۸۸	۶۶	۹۴
۱۰۰	3-Methyl-3-pentanol	۳۰۳/۱۵ - ۳۶۸/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۷۵۳/۵۴ - ۸۷۶/۸۵	۸۸	۹۵
۱۰۱	2-Ethyl-1-hexanol	۲۹۳/۱۵ - ۳۱۸/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۸۱۴/۱۱ - ۸۸۱/۰.۵	۶۶	۹۶
۱۰۲	3-Ethyl-3-pentanol	۳۰۳/۱۵ - ۳۶۸/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۷۷۰/۳۲ - ۸۸۸/۰.۸	۸۷	۹۵
۱۰۳	1,2-Ethenediol	۲۷۸/۱۵ - ۳۵۸/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۱۰۶۶/۱ - ۱۱۴۳/۳	۱۲۶	۹۷
۱۰۴	1,2-Propanediol	۲۷۸/۱۵ - ۳۵۸/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۹۸۵/۸ - ۱۰۷۱/۴	۱۲۶	۹۷
۱۰۵	1,2-Butanediol	۲۹۳/۱۵ - ۳۱۸/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۹۸۷/۰.۵ - ۱۰۴۴/۴	۵۵	۹۸
۱۰۶	1,3-Butanediol	۲۹۳/۱۵ - ۳۱۸/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۹۸۶/۶۷ - ۱۰۴۲/۷	۶۶	۹۸
۱۰۷	1,5-Pentanediol	۲۵۳/۱۵ - ۳۰۸/۱۵	۰/۰.۱ - ۲۷۴/۴	۹۷۹/۷ - ۱۰۳۶/۹	۴۶	۹۹
۱۰۸	2-Methyl-2,4-pentanediol	۲۹۳/۱۵ - ۳۱۸/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۹۰۳/۸۴ - ۹۷۱/۹	۶۶	۱۰۰

ادامه جدول (۱-۳)

شماره ترکیب	نام ترکیب	ΔT (K)	Δp (MPa)	$\Delta \rho$ (kg.m ⁻³)	تعداد نقاط	مرجع
۱۰۹	1-Amino-2-propanol	۲۹۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱	۹۳۶/۲۴ - ۹۶۱/۲۲	۷	۱۰۱
۱۱۰	3-Amino-1-propanol	۲۹۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱	۹۶۶/۸۸ - ۹۹۱/۳۵	۷	۱۰۱
۱۱۱	2-Amino-2-methyl-1-propanol	۲۹۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱	۹۱۱/۴۳ - ۹۳۶/۷۵	۷	۱۰۱
۱۱۲	Diethanolamine	۲۹۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱	۱۰۷۷/۴۹ - ۱۰۹۷/۲۵	۷	۱۰۱
۱۱۳	Triethanolamine	۲۹۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱	۱۱۰۶/۷۸ - ۱۱۲۳/۵۴	۷	۱۰۱
۱۱۴	Glycerol	۲۲۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۰.۱ - ۲۷۴/۴	۱۲۲۰/۹ - ۱۳۳۱/۴	۸۱	۹۹
۱۱۵	Acetic Acid	۲۹۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱ - ۲۵	۱۰۱۴/۵ - ۱۰۶۷/۷	۶۹	۱۰۲
۱۱۶	Propanoic Acid	۲۹۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱ - ۲۵	۹۶۱/۳ - ۱۰۱۳/۸	۷۰	۱۰۲
۱۱۷	Butanoic Acid	۲۹۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱ - ۲۵	۹۲۷/۹ - ۹۷۸/۲	۷۰	۱۰۲
۱۱۸	Pentanoic Acid	۲۹۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱ - ۲۵	۹۱۱/۲ - ۹۵۸/۴	۷۰	۱۰۲
۱۱۹	Hexanoic Acid	۲۹۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱ - ۲۵	۸۹۹/۶ - ۹۴۴/۹	۷۰	۱۰۲
۱۲۰	Heptanoic Acid	۲۹۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱ - ۲۵	۸۹۱/۶ - ۹۳۵/۷	۶۹	۱۰۲
۱۲۱	Octanoic Acid	۲۹۳/۱۵ - ۳۲۳/۱۵	۰/۱ - ۲۵	۸۸۷ - ۹۲۹/۹	۶۸	۱۰۲
۱۲۲	Decanoic acid	۳۴۳/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۹	۸۳۸/۶۱ - ۸۶۸/۲۲	۳۶	۱۰۳
۱۲۳	Dodecanoic acid	۳۴۳/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۹	۸۳۳/۵۱ - ۸۶۲/۲۷	۳۶	۱۰۳
۱۲۴	Tetradecanoic acid	۳۵۳/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۹	۸۲۹/۶۶ - ۸۵۱/۳۲	۳۰	۱۰۳
۱۲۵	Hexadecanoic acid	۳۵۳/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۹	۸۲۶/۹۴ - ۸۴۸/۱۵	۳۰	۱۰۳
۱۲۶	Pentylamine	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۱۴۰	۶۹۸ - ۸۲۲	۱۰۵	۱۰۴

ادامه جدول (۱-۳)

شماره ترکیب	نام ترکیب	ΔT (K)	Δp (MPa)	$\Delta \rho$ (kg.m ⁻³)	تعداد نقاط	مرجع
۱۲۷	Hexylamine	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۱۴۰	۷۱۲/۴ - ۸۳۰/۵	۱۰۵	۱۰۴
۱۲۸	Heptylamine	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۱۴۰	۷۲۴/۴ - ۸۳۸/۳	۱۰۵	۱۰۴
۱۲۹	2-Aminobutane	۲۹۳/۱۵ - ۴۰۳/۱۵	۰/۱ - ۱۴۰	۶۲۳/۹ - ۸۰۱/۵	۱۷۲	۱۰۵
۱۳۰	2-Aminopentane	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۷۰۹/۹ - ۸۰۳/۸	۲۳	۱۰۶
۱۳۱	2-Aminoheptane	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۱۰۰	۷۱۳/۲ - ۸۱۶/۷	۲۴	۱۰۶
۱۳۲	2-Aminooctane	۲۹۳/۱۵ - ۴۰۳/۱۵	۰/۱ - ۱۴۰	۶۸۰/۱ - ۸۳۷/۶	۱۸۰	۱۰۵
۱۳۳	trimethylamine	۲۷۳/۱ - ۳۷۳/۳	۱۰ - ۲۰۰	۵۷۷ - ۷۵۱	۴۶	۱۰۷
۱۳۴	dimethyl ether	۲۷۳/۲۲ - ۵۲۳/۲۹	۰/۸۸ - ۴۰/۰۱	۳۰۲/۹۷ - ۷۴۴/۹۵	۹۲	۱۰۸
۱۳۵	diethyl ether	۲۴۳/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۱۹/۵۶	۶۱۰/۷۹ - ۷۸۳/۱۶	۴۰	۱۰۹
۱۳۶	Diisopropyl Ether	۲۷۳/۲۱ - ۴۷۳/۱۳	۰/۳۴ - ۳۴/۹۸	۴۷۰/۹۳ - ۷۷۳/۸۳	۸۷	۱۱۰
۱۳۷	Dibutyl Ether	۲۴۳/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۲۱/۱۲	۶۹۹/۱۲ - ۸۲۲/۶۱	۷۰	۱۱۱
۱۳۸	Diheptyl Ether	۲۹۳ - ۵۵۳	۰/۱۰۱ - ۹۸/۱	۵۷۸/۹ - ۸۵۴/۲	۱۶۸	۱۱۲
۱۳۹	Methyl tert-Butyl Ether	۲۷۳/۲۱ - ۴۷۳/۱۳	۰/۳۲ - ۳۹/۹۷	۴۵۴/۶۱ - ۷۹۲/۰۷	۱۷۲	۱۱۰
۱۴۰	tert-Amyl Methyl Ether	۲۸۸/۱۵ - ۳۲۸/۱۵	۰/۱ - ۸	۷۴۶/۶۳ - ۷۸۰/۲۳	۵۰	۱۱۳
۱۴۱	Tetrahydrofuran	۲۸۸/۱۵ - ۳۲۸/۱۵	۰/۱ - ۸	۸۵۹/۰۴ - ۸۹۵/۵۱	۵۰	۱۱۳
۱۴۲	Tetrahydropyran	۲۸۸/۱۵ - ۳۲۸/۱۵	۰/۱ - ۸	۸۵۸/۷ - ۸۹۱/۴۱	۵۰	۱۰۹
۱۴۳	1,4-Dioxane	۲۸۸/۱۵ - ۳۲۸/۱۵	۰/۱ - ۸	۱۰۰۵/۵۷ - ۱۰۴۰/۳	۵۰	۱۱۳
۱۴۴	Ethyl tert-Butyl Ether	۲۷۳/۲۱ - ۴۳۸/۱۳	۰/۳ - ۳۹/۹۸	۵۶۳/۳۹ - ۷۹۱/۷۸	۱۵۰	۱۱۰

ادامه جدول-(۱-۳)

شماره ترکیب	نام ترکیب	ΔT (K)	Δp (MPa)	$\Delta \rho$ (kg.m ⁻³)	تعداد نقاط	مرجع
۱۴۵	Propylene Glycol Propyl Ether (PGPE)	۲۸۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۲۵	۸۲۷/۳ - ۹۱۱/۱	۷۲	۱۱۰
۱۴۶	Diethylene Glycol Monobutyl Ether (DEGBE)	۲۸۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۲۵	۹۰۰/۹ - ۹۷۴/۴	۷۲	۱۱۴
۱۴۷	Mono ethylene Glycol Dimethyl Ether (MEGDME)	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۷۹۷/۶ - ۹۱۰/۴	۹۱	۱۱۵
۱۴۸	Diethylene Glycol Dimethyl Ether (DEGDME)	۲۹۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۸۸۳/۳ - ۹۸۰/۹	۹۱	۱۱۵
۱۴۹	Diethylene Glycol Monomethyl Ether (DEGME)	۲۸۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۲۵	۹۶۵/۷ - ۱۰۴۱/۴	۷۲	۱۱۶
۱۵۰	Diethylene Glycol monoethyl Ether (DEGEE)	۲۸۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۲۵	۹۳۴/۱ - ۱۰۱۱/۳	۷۲	۱۱۶
۱۵۱	Triethylene Glycol Dimethylether (TriEGDME)	۲۸۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۹۲۷/۹ - ۱۰۲۷/۵	۱۰۴	۱۱۷
۱۵۲	Tetraethylene Glycol (TEGDME) Dimethyl Ether	۲۸۳/۱۵ - ۳۵۳/۱۵	۰/۱ - ۶۰	۹۵۵/۶ - ۱۰۵۱/۵	۱۰۴	۱۱۷
۱۵۳	Ethyl Acetate	۲۹۸/۱۵ - ۳۹۳/۱۵	۰/۱ - ۳۵	۷۷۱ - ۹۲۶/۳	۲۳۱	۱۱۸
۱۵۴	Propyl Acetate	۲۹۸/۱۵ - ۳۹۳/۱۵	۰/۱ - ۳۵	۷۷۱/۸ - ۹۱۱/۷	۲۲۰	۱۱۸
۱۵۵	Butyl Acetat	۲۷۸/۱۵ - ۳۳۸/۱۳	۲/۵۵ - ۳۹۰/۳۶	۸۳۷/۱ - ۱۰۳۸/۳۲	۱۳۱	۱۱۹
۱۵۶	N-Pentyl Acetate	۲۹۸/۱۵ - ۳۹۳/۱۵	۰/۱ - ۳۵	۷۷۷/۲ - ۸۹۷/۹	۲۴۰	۱۱۸
۱۵۷	Ethyl Propionate	۲۹۸/۱۵ - ۳۹۳/۱۵	۰/۱ - ۳۵	۷۶۶/۹ - ۹۱۳/۶	۱۹۰	۱۲۰
۱۵۸	Ethyl Butyrate	۲۷۸/۱۵ - ۳۳۸/۱۳	۲/۵۴ - ۳۷۸/۶۹	۸۳۳/۸۷ - ۱۰۴۳/۵	۱۳۱	۱۲۱
۱۵۹	Ethyl Pentanoate	۲۹۸/۱۵ - ۳۹۳/۱۵	۰/۱ - ۳۵	۷۶۹ - ۸۹۸/۱	۱۹۲	۱۲۰
۱۶۰	1-Methylethyl Acetate	۲۷۸/۱۵ - ۳۳۸/۱۳	۲/۵۵ - ۳۸۳/۸۵	۸۲۲/۴ - ۱۰۴۶/۴۷	۱۳۸	۱۱۹

ادامه جدول (۱-۳)

شماره ترکیب	نام ترکیب	ΔT (K)	Δp (MPa)	$\Delta \rho$ (kg.m ⁻³)	تعداد نقاط	مرجع
۱۶۱	diethyl adipate	۳۰۳/۱۵ - ۳۷۳/۱۵	۰/۱ - ۱۹/۹۱	۹۳۴/۷۵ - ۱۰۱۲/۵۲	۴۰	۱۲۲
۱۶۲	di-isodecyl phthalate	۲۹۳/۱۵ - ۴۱۳/۱۵	۰/۱ - ۱۴۰	۸۸۱/۴ - ۱۰۲۵/۸	۴۰	۱۲۳
۱۶۳	2-propanone	۲۷۸/۱۵ - ۲۹۸/۱۵	۲/۵ - ۳۸۸/۵۲	۷۸۶/۸۴ - ۹۶۴/۲۶	۶۲	۱۲۴
۱۶۴	butan-2-one	۲۷۸/۱۵ - ۳۳۸/۱۵	۲/۳۲ - ۲۸۲/۴۵	۷۵۹/۷۷ - ۹۴۳/۵۱	۱۳۸	۱۲۵
۱۶۵	pentan-2-one	۲۷۸/۱۵ - ۳۳۸/۱۳	۲/۵۵ - ۳۸۶/۸۶	۷۶۴/۷۷ - ۹۶۳/۵۳	۱۳۴	۱۲۶
۱۶۶	pentan-3-one	۲۷۸/۱۵ - ۳۳۸/۱۵	۲/۵۳ - ۳۲۳/۷۲	۷۷۳/۱۲ - ۹۳۷/۳۶	۱۱۸	۱۲۷
۱۶۷	4-Methylpentan-2-one	۲۷۸/۱۵ - ۳۳۸/۱۳	۲/۵۵ - ۳۸۳/۱۳	۷۶۱/۸۱ - ۹۵۲/۷۳	۱۳۲	۱۲۶
۱۶۸	Hexan-2-one	۲۷۸/۱۵ - ۳۳۸/۱۳	۲/۵۵ - ۳۷۱/۱۲	۷۷۳ - ۹۴۲/۴۱	۱۲۴	۱۲۶

۲-۳- مدل سازی شبکه عصبی

۳-۲-۱- مدل سازی شبکه عصبی مصنوعی با استفاده از روش سهم گروه

(GCM-ANN)

۳-۲-۱-۱- محاسبه ی توصیف کننده های ترکیبات آلی خالص با استفاده از روش

سهم گروه

برای محاسبه ی توصیف کننده های ترکیبات آلی با استفاده از روش سهم گروه، ابتدا باید گروه های ساختاری ترکیبات را مشخص نمود. پس از آنالیز ساختار ترکیبات مورد مطالعه در این پایان نامه ۲۴ گروه عاملی در این ترکیبات شناسایی شدند که در جدول (۲-۳) نام آنها به همراه شناسه گروه گزارش شده است.

جدول (۳-۲) - گروه‌های عاملی موجود در ترکیبات آلی مورد مطالعه در این پایان‌نامه طبق روش سهم‌گروه

توضیحات	شناسه گروه	
کربن (sp^3) نوع اول انتهایی (متیل)	$-CH_3$	۱
کربن (sp^3) نوع دوم	$-CH_2-$	۲
کربن (sp^3) نوع سوم	$\backslash CH-$	۳
کربن (sp^3) نوع چهارم	$\begin{array}{c} \\ -C- \\ \end{array}$	۴
کربن (sp^3) نوع دوم داخل حلقه اشباع	$-CH_2-\textcircled{R}$	۵
کربن (sp^3) نوع سوم داخل حلقه اشباع	$\backslash CH-\textcircled{R}$	۶
کربن (sp^2) نوع اول انتهایی	$=CH_2$	۷
کربن (sp^2) نوع دوم	$=CH-$	۸
کربن (sp^2) نوع سوم	$=C\backslash$	۹
فرم سیس	$\begin{array}{c} H \\ \\ R-C=C-R' \\ \\ H \end{array}$	۱۰
فرم ترانس	$\begin{array}{c} R \\ \\ H-C=C-R' \\ \\ H \end{array}$	۱۱
کربن حلقه آروماتیک استخلاف نشده	$=CH-(Ar)$	۱۲
کربن حلقه آروماتیک استخلاف شده	$=CR-(Ar)$	۱۳
کربن مشترک بین دو حلقه آروماتیک	$=CR_2(2Ar)$	۱۴
گروه عاملی الکل نوع اول	$-CH_2OH$	۱۵
گروه عاملی الکل نوع دوم	$>CHOH$	۱۶
گروه عاملی الکل نوع سوم	$\begin{array}{c} \\ -C-OH \\ \end{array}$	۱۷
گروه عاملی کربوکسیلیک اسید	$-COOH$	۱۸
گروه عاملی آمین نوع اول	$-NH_2$	۱۹
گروه عاملی آمین نوع دوم	$>NH$	۲۰
گروه عاملی آمین نوع سوم	$\begin{array}{c} \\ -N \\ \end{array}$	۲۱
گروه عاملی اتری	$-O-$	۲۲
گروه عاملی استری	$-COO-$	۲۳
گروه عاملی کتونی	$>C=O$	۲۴

پس از شناسایی توصیف‌کننده‌های سهم‌گروه برای ترکیبات آلی مورد مطالعه سه متغیر دما، فشار و جرم‌مولی نیز به این توصیف‌کننده‌ها اضافه شدند.

۳-۲-۱-۲- دسته بندی داده‌ها

در این مرحله، ابتدا از ۱۴۰۳۸ نقطه داده جمع‌آوری شده از مراجع مختلف برای ۱۶۸ ترکیب آلی مختلف، ۲۰۰۷ نقطه مربوط به ۲۴ مولکول به عنوان سری تست خارجی کنار گذاشته شدند و مابقی نقطه داده‌ها به طور تصادفی به سه دسته‌ی آموزش (۸۴۲۱ نقطه)، ارزیابی (۱۸۰۵ نقطه) و تست داخلی (۱۸۰۵ نقطه) تقسیم‌بندی شدند.

۳-۲-۱-۳- مدل‌سازی شبکه عصبی مصنوعی با توصیف‌کننده‌های حاصل از

روش سهم‌گروه (GCM-ANN)

۲۴ توصیف‌کننده‌ای که از روش سهم‌گروه به دست آمدند به همراه دو متغیر تجربی دما، فشار و همچنین توصیف‌کننده‌ی جرم مولی ترکیبات به عنوان ورودی اجباری به شبکه عصبی داده شدند. خروجی شبکه نیز دانسیته‌ی متناظر ورودی‌ها را نشان می‌دهد. برای آموزش شبکه، دو الگوریتم آموزشی لورنبرگ-مارکوارت (lm) و تنظیم بایزین (br)، و برای انتخاب تابع انتقال مناسب، دو تابع انتقال تانژانت سیگموئید (tan sig) و لگاریتم سیگموئید (log sig) مورد استفاده قرار گرفتند که از ترکیب این دو الگوریتم و دو تابع انتقال، چهارنوع شبکه‌ی عصبی مختلف طراحی گردید. در هر یک از این شبکه‌ها باید تعداد نرون‌های لایه‌ی پنهان و تعداد دور آموزشی بهینه گردند که مقدار بهینه‌ی هریک از این پارامترها زمانی است که میانگین مربع خطا (MSE) برای سری ارزیابی دارای کمترین مقدار باشد. برای بهینه‌سازی این دو پارامتر از روش تغییر هم‌زمان استفاده شد به این صورت که تعداد گره در لایه‌ی پنهان از ۱۳ تا ۴۰ با گام ۱ و تعداد دور آموزشی از ۶۰ تا ۳۰۰ با گام ۱۰ در نظر

گرفته شدند. به ازای همه‌ی ترکیبات ممکن از این پارامترها، شبکه‌های طراحی شده به طور جداگانه آموزش داده شدند. بخشی از نتایج حاصل از این محاسبات حول مقدار بهینه، در جداول (۳-۳) تا (۳-۶) ارائه شده است. در هر یک از چهار شبکه‌ی طراحی شده، شبکه‌ی دارای کمترین مقدار MSE برای پیش‌بینی داده‌های سری ارزیابی، به عنوان شبکه‌ی بهینه انتخاب گردید.

جدول (۳-۳) - مقادیر MSE برای پیش‌بینی سری ارزیابی با استفاده از شبکه‌ی GCM-ANN آموزش داده شده
الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین و تابع انتقال لگاریتم سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت

		تعداد گره لایه پنهان									
		۳۱	۳۲	۳۳	۳۴	۳۵	۳۶	۳۷	۳۸	۳۹	۴۰
دور آموزشی	۶۰	۸۴/۷۰۹	۸۴/۵۶۵	۴۷/۶۵۵	۵۰/۲۴۴	۴۲/۲۱۹	۴۰/۳۶۰	۵۸/۰۸۳	۵۴/۱۱۳	۷۷/۳۰۶	۷۱/۴۶۵
	۷۰	۷۴/۲۱۸	۷۲/۴۹۸	۴۲/۵۳۳	۴۴/۲۱۹	۳۸/۸۶۲	۳۵/۵۵۳	۴۹/۴۲۸	۴۵/۹۱۶	۶۴/۰۸۲	۶۰/۲۲۹
	۸۰	۵۸/۲۰۴	۶۳/۴۲۱	۳۵/۳۴۹	۳۹/۵۵۷	۳۶/۳۶۴	۳۲/۷۳۴	۴۲/۴۵۱	۴۱/۰۴۰	۵۵/۲۶۲	۵۱/۱۸۸
	۹۰	۵۰/۳۴۴	۵۷/۵۵۸	۳۲/۶۳۳	۳۶/۲۶۳	۲۷/۹۰۸	۳۱/۰۴۵	۳۷/۶۷۰	۳۷/۵۶۶	۴۹/۴۴۰	۴۴/۷۱۷
	۱۰۰	۴۵/۴۳۶	۵۲/۱۶۰	۳۱/۴۹۵	۳۴/۲۳۴	۲۴/۰۵۸	۲۹/۸۶۳	۲۸/۸۲۹	۳۵/۰۴۸	۴۵/۷۳۰	۳۹/۷۲۷
	۱۱۰	۴۱/۳۰۷	۴۶/۶۲۱	۳۰/۵۶۹	۳۳/۰۴۲	۲۱/۴۸۸	۲۸/۸۹۵	۲۳/۵۲۹	۳۳/۲۰۴	۴۲/۰۳۹	۳۶/۰۷۴
	۱۲۰	۳۷/۵۵۴	۴۱/۱۶۶	۲۹/۷۷۰	۳۲/۰۰۵	۱۹/۴۲۹	۲۸/۰۵۲	۲۱/۹۷۰	۳۱/۷۷۲	۳۸/۱۰۴	۳۳/۷۷۸
	۱۳۰	۳۴/۵۴۴	۳۶/۵۳۶	۲۹/۰۴۴	۳۱/۰۸۰	۱۸/۰۲۲	۲۷/۲۸۳	۱۹/۲۴۳	۳۰/۶۸۹	۲۸/۷۱۲	۳۲/۲۴۸
	۱۴۰	۳۱/۸۱۲	۲۹/۶۲۵	۲۸/۳۴۷	۳۰/۱۹۸	۱۸/۲۰۳	۲۶/۴۱۳	۱۸/۵۸۷	۲۹/۸۸۵	۲۴/۳۰۴	۳۱/۰۳۸
	۱۵۰	۳۰/۰۵۵	۲۷/۴۴۸	۲۷/۶۳۲	۲۹/۳۳۶	۱۸/۹۸۷	۲۵/۲۹۵	۱۸/۷۵۲	۲۸/۲۷۰	۲۱/۷۷۸	۲۹/۹۷۸
	۱۶۰	۲۹/۰۱۴	۲۶/۶۸۳	۲۶/۸۷۲	۲۸/۵۲۸	۲۰/۲۳۵	۲۴/۲۶۰	۱۸/۳۴۴	۲۷/۷۶۰	۲۰/۱۴۴	۲۹/۰۲۱
	۱۷۰	۲۸/۳۱۱	۲۵/۹۲۸	۲۶/۰۷۲	۲۷/۸۱۴	۲۰/۳۴۶	۲۳/۴۵۸	۱۷/۳۳۷	۲۷/۲۷۵	۲۰/۳۴۸	۲۸/۱۸۸
	۱۸۰	۲۷/۶۹۸	۲۵/۲۶۸	۲۵/۳۲۴	۲۷/۱۹۵	۱۹/۹۹۹	۲۲/۸۸۹	۱۶/۳۴۵	۲۶/۸۴۴	۱۹/۸۸۴	۲۷/۴۶۲
	۱۹۰	۲۷/۱۱۰	۲۴/۷۵۳	۲۴/۷۶۱	۲۶/۶۳۵	۱۸/۷۶۴	۲۲/۴۶۸	۱۶/۱۲۶	۲۶/۴۴۵	۱۸/۹۶۹	۲۶/۸۳۳
	۲۰۰	۲۶/۵۱۳	۲۴/۳۶۷	۲۴/۳۸۰	۲۶/۱۱۹	۱۷/۶۹۲	۲۲/۱۳۰	۱۶/۵۶۳	۲۶/۰۷۳	۱۸/۲۶۰	۲۶/۳۰۹

جدول (۳-۴) - مقادیر MSE برای پیش‌بینی سری ارزیابی با استفاده از شبکه‌ی GCM-ANN آموزش داده شده
الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین و تابع انتقال تانژانت سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت

		تعداد گره لایه پنهان									
		۳۱	۳۲	۳۳	۳۴	۳۵	۳۶	۳۷	۳۸	۳۹	۴۰
دور آموزشی	۶۰	۳۵/۱۱۸	۵۲/۷۹۹	۳۶/۲۱۶	۲۶/۷۳۵	۳۰/۸۴۶	۵۵/۰۷۹	۸۶/۱۶۷	۵۱/۵۹۴	۶۹/۸۵۴	۶۷/۵۲۷
	۷۰	۳۰/۴۶۳	۳۶/۲۳۹	۳۱/۷۱۱	۲۴/۶۵۹	۲۷/۴۲۲	۴۴/۱۷۲	۶۶/۸۵۸	۳۶/۶۳۲	۵۰/۵۷۴	۶۱/۵۵۲
	۸۰	۲۸/۱۵۸	۲۹/۸۷۷	۲۸/۵۳۱	۲۳/۲۰۰	۲۵/۰۱۲	۳۲/۳۲۳	۴۲/۰۲۷	۳۱/۰۸۷	۴۰/۵۱۰	۴۶/۷۶۸
	۹۰	۲۶/۰۵۳	۲۷/۲۵۹	۲۶/۵۰۰	۲۱/۹۵۷	۲۳/۴۳۲	۲۸/۹۵۷	۳۳/۰۹۹	۲۸/۵۶۲	۳۸/۷۶۷	۳۲/۳۱۰
	۱۰۰	۲۴/۲۲۸	۲۵/۴۰۶	۲۵/۲۱۸	۲۰/۶۷۳	۲۲/۱۱۳	۲۶/۴۵۳	۲۹/۳۷۴	۲۶/۴۱۱	۳۷/۰۱۸	۲۹/۰۳۲
	۱۱۰	۲۲/۷۹۵	۲۳/۶۸۱	۲۴/۲۲۲	۱۹/۷۳۳	۲۱/۰۸۶	۲۴/۴۰۷	۲۶/۷۳۸	۲۴/۴۲۵	۳۵/۴۹۳	۲۵/۴۹۴
	۱۲۰	۲۱/۶۸۶	۲۲/۴۴۲	۲۳/۳۹۷	۱۹/۵۳۰	۲۰/۴۲۲	۲۲/۶۱۴	۲۴/۹۷۶	۲۲/۹۶۰	۳۲/۵۸۹	۲۳/۷۰۸
	۱۳۰	۲۰/۷۵۸	۲۱/۴۹۶	۲۲/۴۶۱	۱۹/۴۳۷	۲۰/۰۸۹	۲۰/۹۵۴	۲۳/۶۰۷	۲۱/۹۲۹	۲۷/۷۸۱	۲۲/۳۸۶
	۱۴۰	۱۹/۹۳۰	۲۰/۶۱۶	۲۱/۸۹۴	۱۹/۰۳۴	۲۰/۰۰۱	۱۹/۹۶۴	۲۲/۲۸۳	۲۰/۹۲۹	۲۵/۳۳۶	۲۱/۳۳۷
	۱۵۰	۱۹/۲۱۷	۱۹/۸۳۴	۲۱/۲۰۷	۱۸/۲۳۸	۱۹/۲۲۱	۱۹/۴۴۰	۲۱/۲۸۳	۲۰/۱۲۷	۲۳/۲۰۱	۲۰/۷۸۸
	۱۶۰	۱۸/۶۷۰	۱۹/۲۱۷	۲۰/۵۸۵	۱۷/۵۴۴	۱۸/۷۵۰	۱۹/۰۰۰	۲۰/۳۴۶	۱۹/۴۹۵	۲۱/۸۵۹	۲۰/۷۲۸
	۱۷۰	۱۸/۳۲۱	۱۸/۸۰۱	۱۹/۹۶۱	۲۴/۸۵۶	۱۸/۵۲۴	۱۸/۷۶۵	۱۹/۶۷۱	۱۸/۸۳۵	۲۰/۹۱۵	۲۰/۲۴۸
	۱۸۰	۱۸/۰۹۵	۱۸/۵۳۰	۱۹/۳۲۹	۴۴/۳۷۲	۱۸/۲۵۱	۱۸/۵۱۳	۱۹/۴۳۶	۱۷/۹۷۲	۲۰/۳۵۹	۱۹/۵۶۳
	۱۹۰	۱۸/۰۱۶	۱۸/۳۳۷	۱۸/۹۶۶	۴۸/۶۳۳	۱۷/۹۵۴	۱۸/۱۹۹	۱۹/۵۷۵	۱۷/۲۷۵	۱۹/۸۸۸	۱۸/۹۳۶
۲۰۰	۱۷/۹۵۷	۱۸/۱۱۲	۱۹/۲۶۰	۵۲/۳۶۶	۱۷/۷۹۲	۱۸/۰۵۱	۱۹/۶۰۶	۱۶/۸۸۱	۱۹/۴۲۸	۱۸/۵۹۵	

جدول (۳-۵) - مقادیر MSE برای پیش‌بینی سری ارزیابی با استفاده از شبکه‌ی GCM-ANN آموزش داده شده الگوریتم آموزشی لونیبرگ - مارکوارت و تابع انتقال لگاریتم سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت

		تعداد گره لایه پنهان									
		۳۱	۳۲	۳۳	۳۴	۳۵	۳۶	۳۷	۳۸	۳۹	۴۰
دور آموزشی	۶۰	۲۲/۳۰۲	۲۷/۹۸۷	۴۴/۵۵۶	۲۳/۹۵۶	۲۲/۶۹۰	۳۷/۵۹۲	۵۶/۶۹۵	۱۹/۷۴۹	۲۰/۳۸۵	۲۳/۷۳۱
	۷۰	۲۱/۳۵۰	۲۴/۲۷۴	۴۰/۶۳۲	۲۱/۲۵۴	۲۲/۱۲۳	۳۱/۸۳۵	۵۱/۹۲۲	۱۵/۴۹۲	۲۰/۳۶۱	۲۱/۶۵۸
	۸۰	۲۰/۴۸۲	۲۲/۴۹۸	۳۸/۰۷۳	۱۹/۹۰۶	۲۱/۷۰۱	۲۵/۹۴۰	۴۸/۳۶۴	۱۸/۴۸۲	۲۰/۳۳۳	۱۹/۸۶۳
	۹۰	۱۹/۶۵۰	۲۲/۹۰۰	۳۶/۴۷۲	۱۹/۱۱۴	۲۰/۹۰۳	۲۷/۴۶۲	۴۵/۲۸۵	۳۳/۸۸۴	۲۰/۴۴۷	۱۸/۹۰۵
	۱۰۰	۱۹/۰۳۶	۲۵/۶۹۷	۳۱/۶۷۲	۱۸/۶۳۸	۱۷/۰۶۹	۳۰/۵۳۴	۴۲/۷۹۴	۶۳/۰۸۵	۲۰/۶۳۳	۱۸/۷۲۶
	۱۱۰	۱۸/۵۹۴	۳۱/۸۹۴	۲۵/۹۸۱	۱۸/۳۶۴	۱۴/۳۱۹	۳۳/۲۸۴	۴۰/۳۰۱	۱۰۷/۱۹۴	۲۰/۶۶۸	۱۸/۸۱۷
	۱۲۰	۱۸/۱۸۰	۴۱/۲۸۵	۲۲/۸۱۴	۱۸/۲۲۴	۱۳/۷۸۴	۳۶/۳۳۳	۳۷/۵۹۳	۱۵۳/۵۳	۲۰/۴۸۷	۱۹/۰۵۲
	۱۳۰	۱۷/۸۰۳	۵۶/۳۰۳	۲۱/۳۰۴	۱۸/۱۳۳	۱۳/۱۸۲	۳۹/۶۹۹	۳۳/۵۹۰	۲۰/۵۰۰۸	۲۰/۲۴۹	۱۹/۱۳۰
	۱۴۰	۱۷/۴۸۰	۷۷/۰۵۴	۱۹/۹۲۰	۱۸/۰۳۲	۱۴/۱۲۵	۴۳/۴۷۱	۳۰/۶۹۶	۲۶۱/۹۴۶	۲۰/۱۰۶	۱۸/۲۱۰
	۱۵۰	۱۷/۱۷۶	۹۸/۳۶۹	۱۹/۳۱۴	۱۷/۹۱۱	۱۷/۸۹۱	۴۸/۴۰۸	۲۹/۱۳۲	۲۹۸/۴۶۹	۱۹/۹۵۲	۱۶/۴۱۷
	۱۶۰	۱۶/۹۵۸	۱۱۷/۹۵	۱۸/۹۶۵	۱۷/۷۰۳	۲۲/۷۹۲	۵۳/۰۹۷	۲۸/۱۴۹	۲۷۹/۲۲	۱۹/۳۷۱	۱۵/۶۷۲
	۱۷۰	۱۶/۸۱۷	۱۳۶/۷۱	۱۸/۹۳۷	۱۷/۳۶۲	۳۶/۵۲۰	۵۶/۹۶۷	۲۷/۰۵۶	۲۴۸/۳۸	۱۸/۴۵۱	۱۵/۵۰۹
	۱۸۰	۱۶/۶۹۵	۱۵۵/۵۴	۱۹/۱۲۳	۱۶/۹۹۵	۵۹/۴۶۷	۵۹/۲۷۰	۲۶/۶۰۹	۲۳۹/۵۸	۱۷/۴۸۹	۱۵/۵۵۳
۱۹۰	۱۶/۶۳۳	۱۷۳/۶۴	۱۹/۳۰۰	۱۶/۷۰۴	۷۹/۵۵۹	۵۹/۶۰۳	۲۶/۳۴۰	۲۴۰/۴۵	۱۶/۷۸۵	۱۵/۷۱۱	
۲۰۰	۱۶/۶۶۶	۱۸۸/۷۰	۱۹/۴۵۴	۱۶/۵۱۷	۸۶/۲۷۴	۵۶/۷۱۵	۲۵/۹۲۵	۲۴۶/۷۹	۱۶/۴۰۱	۱۵/۹۸۳	

جدول (۳-۶) - مقادیر MSE برای پیش‌بینی سری ارزیابی با استفاده از شبکه‌ی GCM-ANN آموزش داده شده
الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوارت و تابع انتقال تانژانت سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت

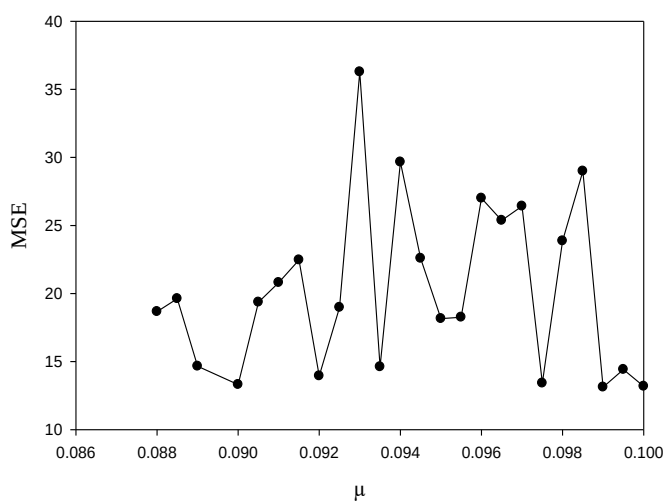
		تعداد گره لایه پنهان									
		۳۱	۳۲	۳۳	۳۴	۳۵	۳۶	۳۷	۳۸	۳۹	۴۰
دور آموزشی	۶۰	۲۴/۴۱۲	۲۵/۳۸۷	۶۷/۱۲۱	۲۵/۹۵۴	۳۱/۲۴۹	۲۲/۸۸۱	۴۹/۷۴۸	۳۴/۸۱۸	۲۵/۲۹۲	۲۶/۹۰۶
	۷۰	۲۳/۰۹۲	۲۴/۱۱۳	۴۴/۹۳۵	۲۴/۶۹۲	۲۸/۷۴۱	۲۱/۷۰۴	۴۷/۱۹۰	۲۹/۱۰۵	۲۱/۲۸۸	۲۷/۲۱۴
	۸۰	۲۲/۱۴۷	۲۳/۰۲۱	۳۷/۱۲۸	۲۳/۳۷۷	۲۶/۹۷۵	۲۰/۹۸۶	۴۵/۱۶۸	۲۸/۰۷۱	۲۰/۶۹۴	۲۸/۲۷۷
	۹۰	۲۱/۴۴۳	۲۳/۱۰۷	۳۴/۴۹۵	۲۲/۲۰۵	۲۵/۹۸۸	۲۰/۵۰۷	۴۳/۵۰۶	۲۸/۲۱۷	۲۰/۶۶۰	۲۹/۸۵۰
	۱۰۰	۲۰/۸۷۴	۲۱/۳۲۵	۳۲/۸۳۶	۲۱/۴۷۵	۲۵/۵۷۶	۲۰/۱۵۳	۴۲/۳۰۴	۲۸/۴۰۰	۱۹/۷۱۶	۳۵/۷۶۷
	۱۱۰	۲۰/۳۹۰	۲۰/۸۶۶	۳۱/۲۸۱	۱۹/۰۷۸	۲۳/۴۹۳	۱۸/۲۴۵	۴۱/۳۹۷	۲۸/۵۸۷	۱۸/۴۲۶	۶۶/۱۳۶
	۱۲۰	۱۸/۵۶۸	۲۰/۵۴۲	۲۹/۲۹۲	۱۷/۵۴۵	۲۲/۷۰۹	۱۶/۶۴۳	۴۰/۴۶۷	۲۸/۷۴۸	۱۷/۹۲۲	۹۱/۴۵۴
	۱۳۰	۱۸/۵۷۹	۲۰/۲۵۶	۲۷/۰۲۲	۱۷/۵۲۰	۲۲/۳۱۸	۱۶/۰۴۵	۳۹/۴۲۰	۲۸/۸۹۵	۱۷/۰۱۰	۱۰۷/۵۸
	۱۴۰	۱۸/۵۱۵	۲۰/۰۰۱	۲۵/۳۸۳	۱۸/۰۴۹	۲۲/۱۳۹	۱۶/۲۷۲	۳۷/۰۴۹	۲۹/۲۱۷	۱۶/۱۳۹	۱۰۵/۴۰
	۱۵۰	۱۸/۷۳۳	۱۹/۷۸۵	۲۴/۲۵۹	۱۹/۷۷۶	۲۴/۶۲۷	۱۴/۶۸۶	۳۵/۹۵۸	۲۹/۵۵۸	۱۵/۴۸۶	۸۱/۱۷۴
	۱۶۰	۱۷/۹۰۱	۱۹/۶۰۱	۲۳/۳۲۳	۲۱/۵۶۳	۳۸/۹۲۵	۱۶/۷۴۶	۳۵/۱۴۲	۲۹/۸۰۶	۱۵/۰۳۷	۶۰/۲۲۷
	۱۷۰	۱۷/۴۴۷	۱۹/۴۳۳	۲۲/۶۶۲	۲۲/۷۲۸	۵۳/۹۶۳	۲۵/۴۰۰	۳۳/۷۷۹	۳۰/۰۱۳	۱۴/۷۵۶	۴۸/۴۷۳
	۱۸۰	۱۹/۲۵۸	۱۹/۳۰۰	۲۲/۲۳۱	۲۳/۳۴۶	۶۶/۱۵۰	۳۳/۱۸۱	۳۲/۴۱۹	۲۷/۱۹۲	۱۴/۵۷۵	۴۵/۴۸۵
	۱۹۰	۲۰/۲۵۷	۱۹/۲۲۵	۲۱/۸۵۶	۲۳/۲۵۸	۶۵/۴۷۷	۳۶/۹۴۵	۳۱/۴۷۸	۲۵/۵۷۵	۱۴/۳۵۸	۴۶/۹۲۴
	۲۰۰	۲۰/۲۱۵	۱۹/۲۰۹	۲۱/۴۱۹	۲۲/۷۸۳	۵۹/۷۶۸	۳۹/۵۲۱	۳۰/۷۲۹	۲۴/۳۷۵	۱۴/۰۷۱	۵۱/۶۹۲

با توجه به نتایج حاصل از بهینه سازی شبکه‌های GCM-ANN مختلف با الگوریتم‌های آموزشی و توابع انتقال متفاوت که بخشی از آن‌ها در جداول (۳-۳) تا (۳-۶) آمده است، توابع و مقدار پارامترهای بهینه شده‌ی این شبکه‌ها برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات آلی مختلف در جدول (۳-۷) ارائه شده است.

جدول (۷-۳) - توابع و مقادیر بهینه‌ی پارامترهای شبکه‌های GCM-ANN مختلف

تابع انتقال	تابع آموزشی	تعداد توصیف کننده	تعداد نرون لایه ی پنهان	تعداد دور آموزش	MSE
لگاریتم سیگموئید	تنظیم بایزین	۲۷	۳۷	۱۹۰	۱۶/۱۲۶
لگاریتم سیگموئید	لونبرگ-مارکوارت	۲۷	۳۵	۱۳۰	۱۳/۱۸۲
تانژانت سیگموئید	تنظیم بایزین	۲۷	۳۸	۲۰۰	۱۶/۸۸۱
تانژانت سیگموئید	لونبرگ-مارکوارت	۲۷	۳۹	۲۰۰	۱۴/۰۷۱

همانطور که نتایج جدول (۷-۳) نشان می‌دهد، شبکه‌ی با الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوارت و تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی با تعداد ۳۵ نرون در لایه‌ی پنهان و دور آموزشی ۱۳۰ به عنوان شبکه‌ی بهینه انتخاب گردید. در مرحله‌ی بعد برای تعیین مقدار بهینه μ ، با استفاده از شبکه‌ی بهینه، مقدار μ از ۰/۰۰۰۵ تا ۰/۱ با گام ۰/۰۰۰۵ تغییر داده شده و بر اساس کم‌ترین مقدار میانگین مربعات خطا، MSE، مقدار بهینه‌ی پارامتر μ ، ۰/۰۹۹۰ به دست آمد. نمودار مقدار میانگین مربعات خطا بر حسب μ حول نقطه‌ی بهینه نیز در شکل (۱-۳) رسم شده است. توابع و مقادیر پارامترهای مدل GCM-ANN بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات آلی، در جدول (۸-۳) ارائه شده است.



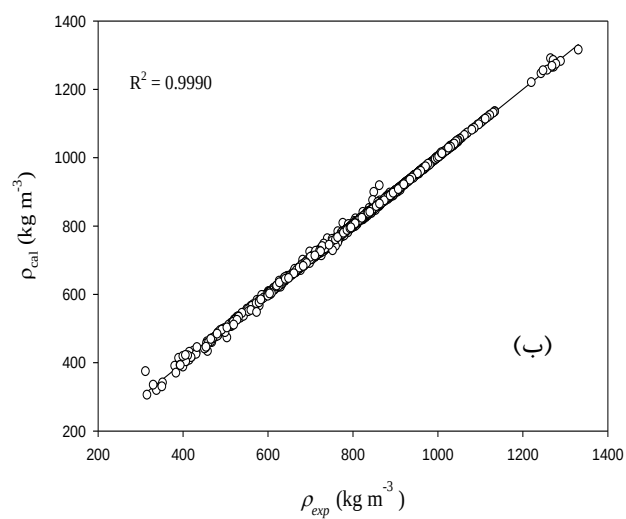
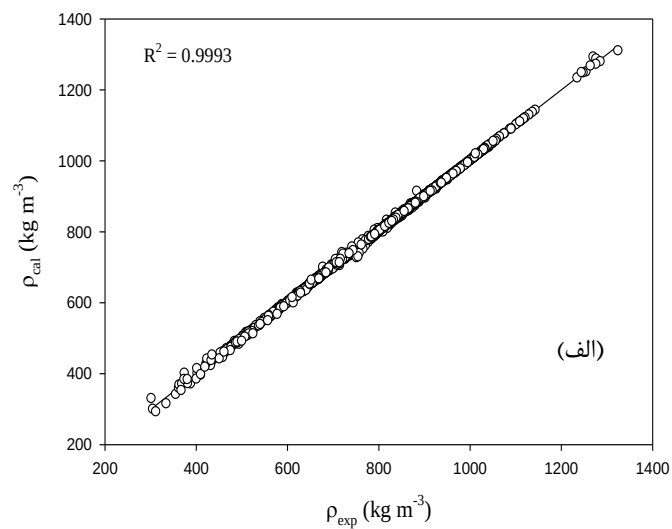
شکل (۱-۳) - نمودار میانگین مربعات خطا بر حسب μ حول نقطه بهینه برای سری ارزیابی

جدول (۸-۳) - توابع و مقادیر پارامترهای شبکه‌ی GCM-ANN بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات آلی بر حسب دما و فشار

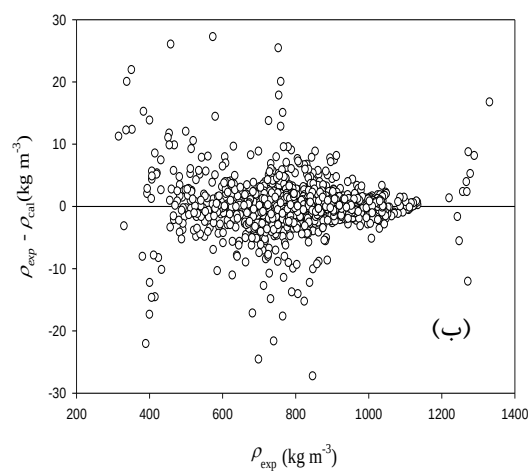
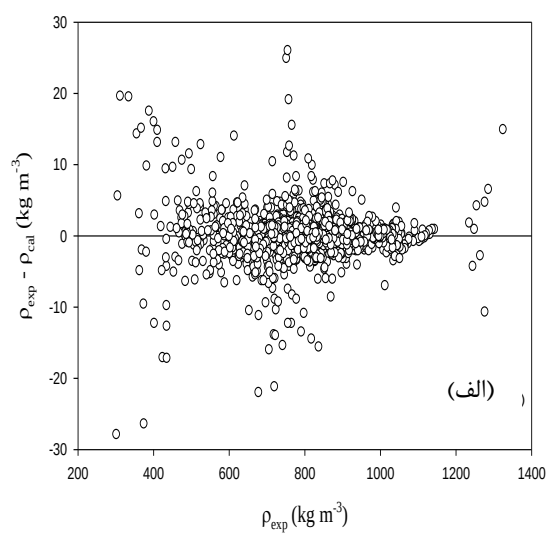
تابع آموزش	Train lm
تابع انتقال لایه‌ی پنهان	Log sig
تابع انتقال لایه‌ی خروجی	Pure line
تعداد نرون لایه‌ی پنهان	۳۵
تعداد متغیرهای ورودی	۲۷
تعداد دوره‌های آموزش	۱۳۰
پارامتر μ	۰/۰۹۹۰
مقدار MSE سری ارزیابی	۱۳/۱۲

۳-۲-۱-۴ - ارزیابی شبکه GCM-ANN بهینه شده

برای ارزیابی شبکه‌ی GCM-ANN بهینه شده، از دو روش نمودار برگشتی و نمودار خطای باقیمانده استفاده گردید. در نمودار برگشتی که در شکل (۲-۳) آمده است مقادیر پیش‌بینی شده‌ی دانسیته بر حسب مقادیر تجربی رسم گردید. در این نمودارها مقدار ضریب تعیین، R^2 ، که پراکندگی نقاط در اطراف خط برگشت را نشان می‌دهد نیز آمده است. همانطور که در این شکل‌ها مشاهده می‌شود، ضریب تعیین، بدست آمده برای دو سری ارزیابی و سری تست داخلی نزدیک به یک است که این موضوع بر توافق عالی بین مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط این مدل بهینه شده با مقادیر تجربی دلالت دارد. نمودار خطای باقیمانده نیز در شکل (۳-۳) آمده است که پراکندگی متقارن داده‌ها حول خطای صفر در این شکل‌ها نشان از عدم وجود خطای سیستماتیک در داده‌ها دارد.



شکل (۳-۲)- نمودار برگشتی مقادیر پیش‌بینی شده‌ی دانسیته‌ی ترکیبات آلی بر حسب مقادیر تجربی برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست داخلی با استفاده از مدل GCM-ANN بهینه شده



شکل (۳-۳) - نمودار خطای باقیمانده در پیش‌بینی دانسیته بر حسب مقادیر تجربی دانسیته‌ی ترکیبات آلی برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست داخلی با استفاده از مدل GCM-ANN بهینه شده

۳-۲-۲- مدل سازی شبکه عصبی مصنوعی با استفاده از توصیف کننده های

تئوری

۳-۲-۲-۱- رسم و بهینه سازی ساختار مولکول ها و محاسبه توصیف کننده ها

ابتدا ساختار تمام مولکول ها با استفاده از نرم افزار هایپرکم رسم و بعد با استفاده از روش نیمه تجربی AM1 ساختار سه بعدی ترکیبات بهینه شد. در ادامه ساختار بهینه شده ی مولکول ها به عنوان ورودی به نرم افزار دراگون ۵/۵ داده شد و برای هر مولکول ۳۲۲۴ توصیف کننده تئوری به دست آمد. از آنجا که این تعداد توصیف کننده برای مدل سازی بسیار زیاد است، باید به دنبال روشی جهت کاهش تعداد توصیف کننده ها بود تا از انجام محاسبات وقت گیر و بیهوده جلوگیری شده و از پیچیدگی کار پرهیز شود. روش مورد استفاده باید قادر باشد تا توصیف کننده هایی که بیشترین ارتباط را با متغیر وابسته، یعنی دانسیته، دارند انتخاب کرده و سایر توصیف کننده ها را حذف نماید. به همین منظور، ابتدا توصیف کننده هایی که برای تمام مولکول ها، مقادیر ثابت و یا تقریباً ثابت داشتند، حذف شدند. سپس به وسیله ی برنامه ی نوشته شده در نرم افزار MATLAB توصیف کننده هایی که همبستگی بزرگتر از ۰/۹ داشتند، نیز حذف گردیدند. در پایان این مرحله ۲۸۴ توصیف کننده از مجموع ۳۲۲۴ توصیف کننده ی تئوری باقی ماندند. در این مرحله دو متغیر تجربی دما، فشار و یک توصیف کننده جرم مولی نیز به ماتریس ورودی اضافه شدند.

هدف بعدی انتخاب بهترین توصیف کننده ها از بین توصیف کننده های باقیمانده برای ساخت مدل است. در این پایان نامه از روش غیرخطی الگوریتم ژنتیک برای انتخاب توصیف کننده های مناسب استفاده شد که در ادامه در مورد آن توضیح داده خواهد شد.

۳-۲-۲- انتخاب بهترین توصیف‌کننده‌ها به روش الگوریتم ژنتیک

به منظور اجرای برنامه‌ی الگوریتم ژنتیک، تمام ۲۸۴ توصیف‌کننده باقی مانده به همراه سه توصیف‌کننده دما، فشار و جرم مولی به عنوان ورودی به این برنامه داده شدند. برنامه M-file استفاده شده در این تحقیق در بسته‌ی نرم افزاری MATLAB دارای مقادیر پیش فرض احتمال ترکیب ۰/۵، احتمال جهش ۰/۰۱، اندازه‌ی جمعیتی برابر ۳۰ و با تکرار ۵۰۰ می‌باشد. این برنامه ۱۶ بار تکرار گردید تا احتمال انتخاب توصیف‌کننده‌های تصادفی به حداقل برسد. توصیف‌کننده‌هایی که بیش از ۵۰٪ در این الگوریتم تکرار شده اند به همراه تعداد دفعات تکرار در جدول (۳-۹) نشان داده شده اند. طبقه و نام کامل آن‌ها نیز در جدول (۳-۱۰) آورده شده است. همچنین ماتریس همبستگی بین این توصیف‌کننده‌ها در جدول (۳-۱۱) ارائه شده که این ماتریس عدم همبستگی بین توصیف‌کننده‌ها را نشان می‌دهد.

جدول (۳-۹)- تعداد دفعات تکرار توصیف‌کننده‌ها در روش انتخابی الگوریتم ژنتیک پس از ۱۶ بار اجرا

توصیف کننده	temperature	pressure	mass	Ss	Me	TIC5	TIC4	X2Av	E1s	X3A
تعداد تکرار	۱۶	۱۶	۱۶	۱۳	۱۰	۱۶	۱۶	۱۶	۱۵	۹

جدول (۳-۱۰) - طبقه و نام کامل توصیف کننده های تئوری انتخابی توسط الگوریتم ژنتیک

شماره	نشان	طبقه	نام کامل
۱	Ss	Constitiutional descriptors	Sum of kier-Hall electrotopological states
۲	Me	Constitiutional descriptors	Mean atomic sanderson electronegativity (scaled on carbon atom)
۳	TIC5	Information indices	Total information content index (neighborhood symmetry of 5-order)
۴	TIC4	Information indices	Total information content index (neighborhood symmetry of 4-order)
۵	X2Av	Connectivity indices	Average valance connectivity index chi-2
۶	E1s	WHIM descriptors	1st component accessibility directional WHIM index / weighted by atomic electrotopological states
۷	X3A	Connectivity indices	Average connectivity index chi-3

جدول (۳-۱۱) - همبستگی بین توصیف کننده های انتخابی الگوریتم ژنتیک

	Ss	Me	TIC5	TIC4	X2Av	E1s	X3A
Ss	۱						
Me	-۰/۰۰۷	۱					
TIC5	۰/۴۵۶	-۰/۱۰۲	۱				
TIC4	۰/۵۵۲	-۰/۰۷۵	۰/۵۳۸	۱			
X2Av	-۰/۰۵۲	۰/۶۸۰	-۰/۰۱۰	۰/۰۹۱	۱		
E1s	۰/۰۵۱	۰/۸۱۳	۰/۰۳۰	۰/۰۴۸	۰/۹۵۳	۱	
X3A	-۰/۰۲۰	۰/۱۳۰	۰/۰۴۶	۰/۰۰۸	۰/۱۶۵	۰/۱۶۳	۱

۳-۲-۲-۳- بهینه‌سازی شبکه عصبی مصنوعی با توصیف‌کننده‌های الگوریتم

ژنتیک

شبکه عصبی مصنوعی مورد مطالعه در این بخش، شبکه‌ای سه لایه است. در این مرحله نیز مشابه بخش ۳-۱-۲-۳، شبکه‌هایی با دو الگوریتم آموزشی متفاوت لونبرگ-مارکوات (trainlm) و تنظیم بایزین (trainbr) و دو تابع انتقال لگاریتم سیگموئید (logsig) و تانژانت سیگموئید (tansig) طراحی شدند و سپس در هر یک از شبکه‌های طراحی شده پارامترهای شبکه بهینه‌سازی گردیدند. برای این منظور شبکه‌هایی با مقدار μ ثابت و تعداد ورودی‌های از ۴ تا ۱۰ توصیف‌کننده با گام ۱، تعداد گره لایه‌ی پنهان از ۵ تا ۲۰ با گام ۱ و تعداد دور آموزشی از ۶۰ تا ۶۰۰ با گام ۱۰ در نظر گرفته شدند و به ازای همه ترکیب‌های ممکن از این سه پارامتر، چهار شبکه‌ی عصبی مصنوعی طراحی شده، بهینه‌سازی گردیدند. لازم به ذکر است که توصیف‌کننده‌های توپولوژیکی انتخاب شده توسط روش GA که در جدول (۳-۹) نمایش داده شده‌اند، به روش رتبه‌بندی همبستگی، CR^1 ، به شبکه‌ی عصبی وارد شدند. در جدول (۳-۱۲) مقادیر همبستگی توصیف‌کننده‌های تئوری انتخاب شده توسط روش GA با متغیر وابسته، یعنی دانسیته، گزارش شده است.

جدول (۳-۱۲)- مقادیر همبستگی توصیف‌کننده‌های تئوری انتخابی با روش GA با دانسیته

توصیف کننده	Ss	Me	TIC5	TIC4	X2Av	E1s	X3A
مقدار همبستگی	۰/۳۷۷	۰/۳۵۴	۰/۲۷۷	۰/۲۱۱	-۰/۱۶۷	۰/۰۳۲	-۰/۰۱۷

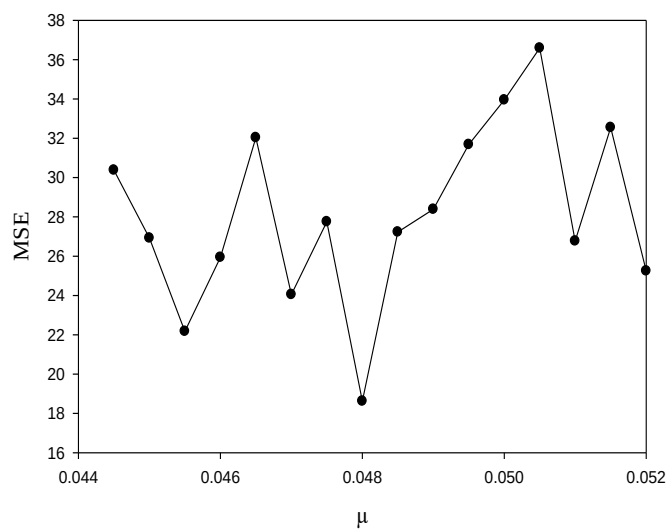
مقدار پارامترهای بهینه شده هر یک از شبکه‌های GA-ANN طراحی شده در جدول (۳-۱۳) گزارش شده است. نتایج موجود در این جدول نشان می‌دهد که از میان چهار شبکه‌ی بهینه شده، شبکه‌ای با الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوات و تابع انتقال لگاریتم سیگموئید با ۹ توصیف‌کننده در لایه‌ی

ورودی، ۱۸ گره در لایه‌ی پنهان و دور آموزشی ۴۷۰، کمترین میانگین مربع خطا را داشته و به عنوان شبکه بهینه انتخاب می‌شود. ۹ توصیف‌کننده انتخاب شده توسط شبکه عبارتند از دما، فشار، جرم مولی، Ss، Me، TIC5، X2Av، TIC4، E1s. مقدار توصیف‌کننده‌های تئوری برای این ترکیبات در پیوست آمده است.

جدول (۳-۱۳) - توابع و پارامترهای بهینه‌ی شبکه GA-ANN

تابع انتقال	تابع آموزشی	تعداد توصیف کننده	تعداد نرون لایه ی پنهان	تعداد دور آموزش	MSE
لگاریتم سیگموئید	تنظیم بایزین	۹	۱۹	۳۵۰	۲۷/۰۹
لگاریتم سیگموئید	لونبرگ-مارکوارت	۹	۱۸	۴۷۰	۲۲/۰۲
تانژانت سیگموئید	تنظیم بایزین	۱۰	۱۸	۴۷۰	۲۳/۰۰
تانژانت سیگموئید	لونبرگ-مارکوارت	۹	۱۸	۵۵۰	۲۳/۷۲

در ادامه‌ی بهینه کردن شبکه مورد بررسی، پارامتر μ نیز بایستی بهینه شود که بدین منظور، در ساختار شبکه‌ی بهینه با ۹ متغیر ورودی، ۱۸ گره در لایه‌ی پنهان، الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوارت، تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و دور آموزشی ۴۷۰، مقدار μ از ۰/۰۰۰۵ تا ۰/۱ با گام‌های ۰/۰۰۰۵ تغییر داده شد و آنگاه برای هر مورد مقدار میانگین مربع خطا برای سری ارزیابی محاسبه و ثبت گردید براساس نتایج محاسبات مقدار ۰/۰۴۸۰ به عنوان مقدار بهینه‌ی μ انتخاب شد. نمودار مقدار میانگین مربعات خطا بر حسب μ حول نقطه بهینه در شکل (۳-۴) رسم شده است.



شکل (۳-۴) - نمودار میانگین مربعات خطای حاصل از پیش‌بینی دانسیته سری ارزیابی بر حسب پارامتر μ حول نقطه‌ی بهینه

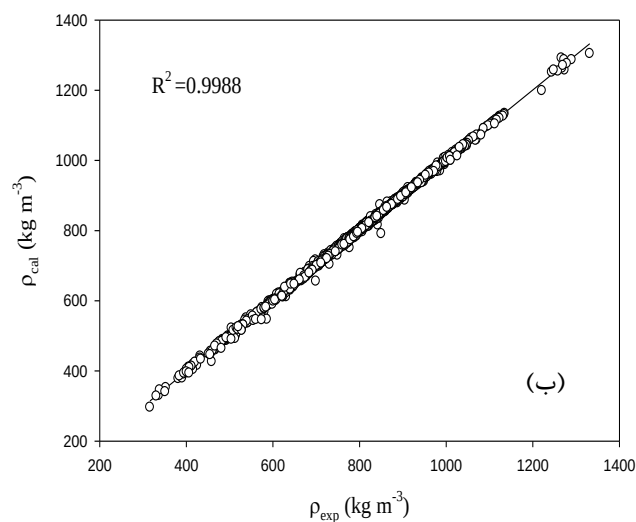
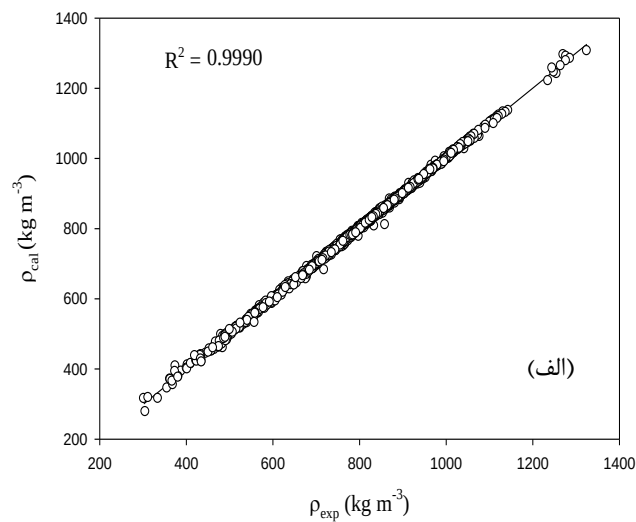
توابع و مقادیر پارامترهای شبکه‌ی عصبی بهینه شده با استفاده از توصیف‌کننده‌های منتخب الگوریتم ژنتیک (GA-ANN) در جدول (۳-۱۴) گزارش شده است.

جدول (۳-۱۴) - توابع و پارامترهای بهینه شده شبکه‌ی عصبی با استفاده از توصیف‌کننده‌های تئوری انتخابی GA

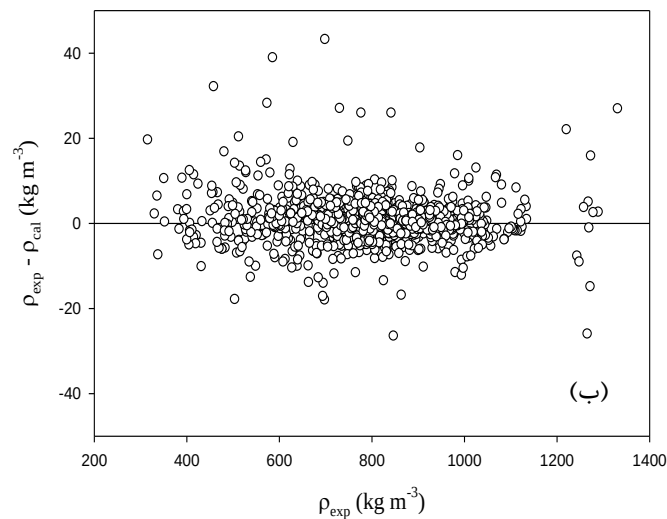
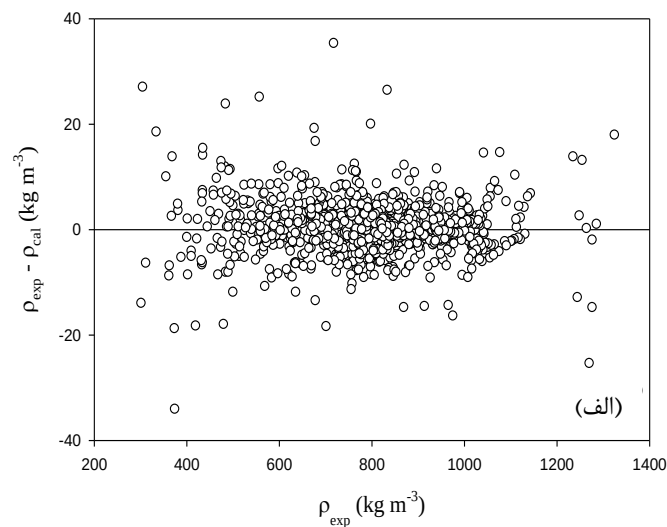
Train lm	تابع آموزش
Log sig	تابع انتقال لایه‌ی پنهان
Pure line	تابع انتقال لایه‌ی خروجی
۱۸	تعداد نرون لایه‌ی پنهان
۹	تعداد متغیرهای ورودی
۴۷۰	تعداد دوره‌های آموزش
۰/۰۴۸۰	پارامتر μ
۱۸/۶۲	مقدار MSE سری ارزیابی

۳-۲-۴- ارزیابی شبکه‌ی بهینه شده‌ی GA-ANN

برای ارزیابی شبکه‌ی بهینه شده‌ی GA-ANN، نمودارهای برگشتی و خطای باقیمانده برای دو سری ارزیابی و تست داخلی رسم شدند. این نمودارها در شکل‌های (۳-۵) و (۳-۶) نشان داده شده‌اند.



شکل (۳-۵) - نمودار برگشتی مقادیر پیش‌بینی شده‌ی دانسیته‌ی ترکیبات آلی بر حسب مقادیر تجربی برای (الف) سری ارزیابی (۱۸۰۵ نقطه) و (ب) سری تست داخلی (۱۸۰۵ نقطه) با استفاده از مدل GA-ANN بهینه شده



شکل (۶-۳)- نمودار خطای باقیمانده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات آلی بر حسب مقادیر تجربی دانسیته برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست داخلی با استفاده از مدل GA-ANN بهینه شده

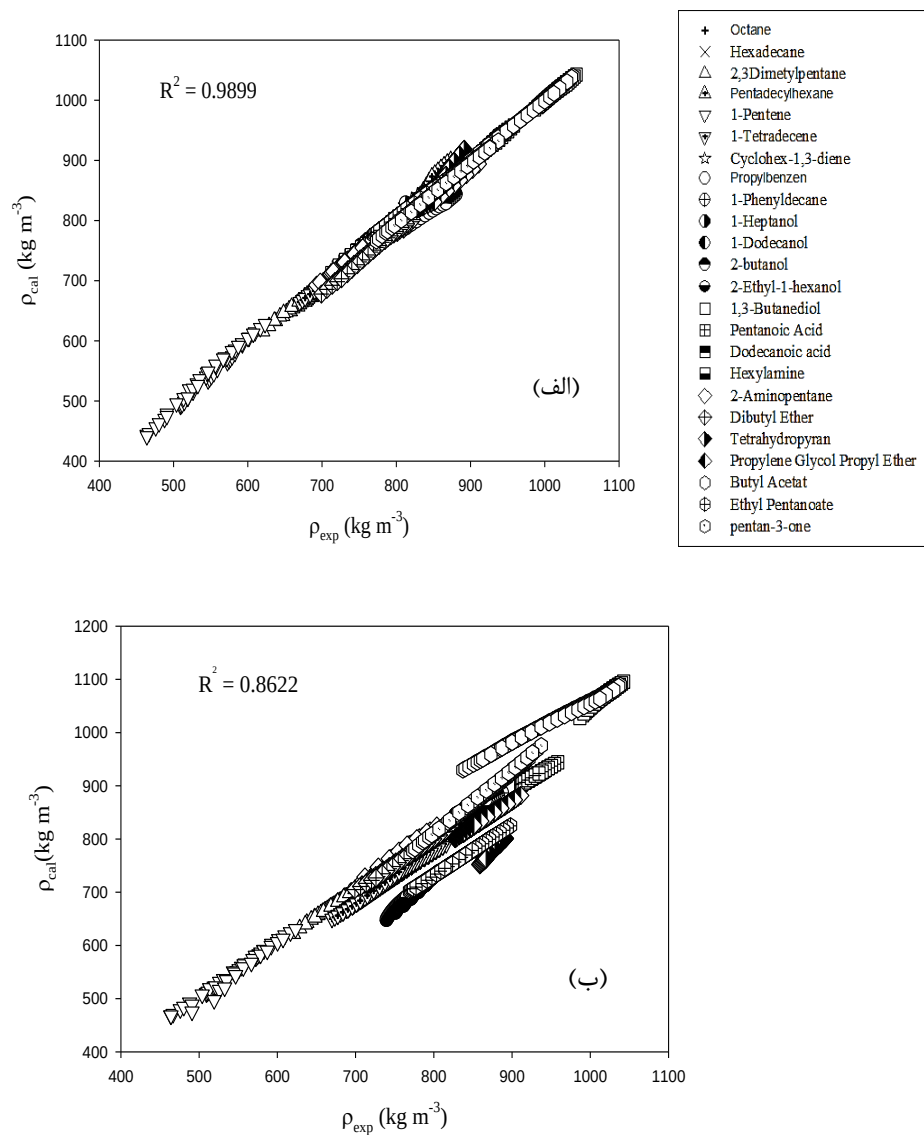
مقایسه‌ی نمودارهای برگشتی مربوط به دو روش GA-ANN و GCM-ANN برای سری‌های ارزیابی و تست داخلی در شکل‌های (۲-۳) و (۵-۳) نشان می‌دهد که چندان تفاوتی بین R^2 دو مدل مشاهده نمی‌شود و توافق بسیار خوبی بین مقادیر تجربی و مقادیر پیش‌بینی برای هر دو روش وجود دارد. همانطور که در شکل (۶-۳) ملاحظه می‌شود نقاط به صورت پراکنده حول خط صفر انتشار یافته‌اند، که این امر نشان‌دهنده‌ی عدم وجود خطای سیستماتیک در مدل GA-ANN می‌باشد. بازه‌ی خطای

مطلق در این روش $\pm 40 \text{ kg.m}^{-3}$ است در حالی که با توجه به شکل (۳-۳) در روش GCM-ANN این مقدار برابر $\pm 30 \text{ kg.m}^{-3}$ می باشد و نقاط در اطراف خط صفر به صورت متراکم تر هستند و این نشان دهنده ی پیش بینی بهتر روش GCM-ANN نسبت به روش GA-ANN است.

۳-۳- ارزیابی قدرت پیش بینی مدل های غیرخطی بهینه شده برای سری تست

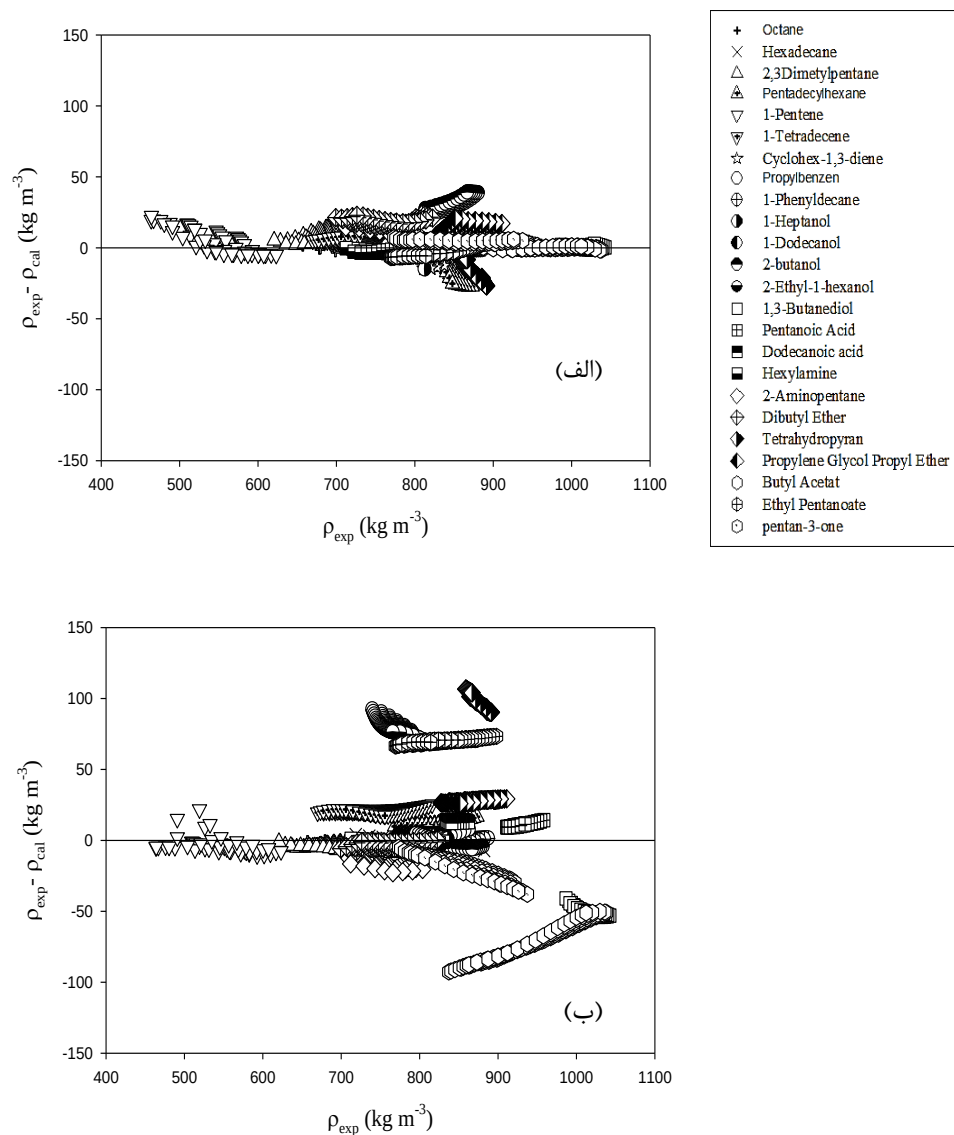
خارجی

در این مرحله قدرت پیش بینی مدل های به دست آمده از شبکه های عصبی مصنوعی که با روش های متفاوت انتخاب توصیف کننده، طراحی و بهینه سازی شده اند، برای پیش بینی سری تست خارجی مورد ارزیابی قرار گرفته است. سری تست خارجی شامل ۲۰۰۷ نقطه مربوط به ۲۴ مولکول از دسته های مختلف ترکیبات آلی است. این ترکیبات عبارتند از: اکتان، هگزادکان، ۳و۲ دی متیل پنتان، پنتا دسیل هگزان، ۱- پنتن، ۱- تترا دکن، ۳و۱ سیکلو هگزدی ان، پروپیل بنزن، ۱- فنیل دکان، ۱- هپتانول، ۱- دکانول، ۲- بوتانول، ۲- اتیل ۱- هگزانول، ۳و۱ بوتان دی اول، پنتانوئیک اسید، دودکانوئیک اسید، هگزیل آمین، ۲- آمینو پنتان، دی بوتیل اتر، تترا هیدرو پیران، پروپیلن گلایکول پروپیل اتر، بوتیل استات، اتیل پنتانوات، ۳- پنتانول. برای این منظور از نمودار برگشتی، نمودار خطای باقیمانده و محاسبه ی پارامترهای آماری استفاده شده است. در شکل (۳-۷) نمودارهای برگشتی مقادیر پیش بینی شده ی دانسیته با مدل های بهینه شده ی GCM-ANN و GA-ANN برای سری تست خارجی رسم شده اند. نتایج موجود در این شکل ها نشان می دهد که مدل GCM-ANN برای پیش بینی سری تست خارجی از کارایی بالاتر و بهتری نسبت به مدل GA-ANN برخوردار است. این موضوع در شکل (۳-۸) که خطای باقیمانده ی حاصل از دو روش فوق در مقابل مقدار تجربی دانسیته رسم شده است، بهتر نمایان می شود. مقدار خطای باقیمانده در مدل GCM-ANN بسیار کمتر از مقدار خطای باقیمانده در مدل GA-ANN بهینه شده است. داده های تجربی و پیش بینی شده توسط این روش ها در پیوست ۲ گزارش شده است.



شکل (۳-۷) - نمودارهای برگشتی مقادیر پیش‌بینی شده دانسیته بر حسب مقادیر تجربی برای سری تست خارجی با

مدل‌های بهینه شده‌ی (الف) GCM-ANN و (ب) GA-ANN



شکل (۳-۸)- نمودارهای خطای باقیمانده مقادیر پیش‌بینی شده دانسیته بر حسب مقادیر تجربی برای سری تست

خارجی با مدل‌های بهینه شده‌ی (الف) GCM-ANN و (ب) GA-ANN

لازم به تذکر است که در طراحی صنعتی برای صنایع شیمیایی $\pm 10\%$ درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته قابل قبول است.

۳-۴- ارزیابی پارامترهای آماری

پارامترهای آماری مقادیر تعیین‌کننده‌ای برای ارزیابی مدل‌های بهینه شده هستند. این مقادیر برای ارزیابی مدل‌های بهینه شده‌ی غیرخطی GCM-ANN و GA-ANN محاسبه شده که نتایج این محاسبات در جدول (۳-۱۶) نشان داده شده است. اگر به اعداد جدول برای سری تست در دو مدل بهینه شده دقت کنید می‌بینید مقدار R^2 برای مدل GCM-ANN بیشتر از روش GA-ANN است. همچنین سایر پارامترهای آماری روش GCM-ANN مثل MSE کمتر از روش‌های GA-ANN است. با توجه به این مقادیر می‌توان نتیجه گرفت روش سهم‌گروه برای پیش‌بینی دانسیته‌ی سیالات خالص روش کارآمدتری است. از طرف دیگر روش سهم‌گروه یک روش ساده برای استخراج توصیف‌کننده هاست و نیاز به نرم افزارهای متعدد برای محاسبه‌ی توصیف‌کننده‌ها ندارد.

جدول (۳-۱۵) - پارامترهای آماری مدل‌های بهینه شده‌ی GCM-ANN و GA-ANN برای دو سری ارزیابی و تست

پارامتر آماری	سری داده	GCM-ANN	GA-ANN
R^2	ارزیابی	۰/۹۹۹۳	۰/۹۹۹۰
	تست داخلی	۰/۹۹۹۰	۰/۹۹۸۸
	تست خارجی	۰/۹۸۹۹	۰/۸۶۲۲
MSE	ارزیابی	۱۳/۱۲	۱۸/۶۲
	تست داخلی	۱۸/۱۵	۲۲/۹۲
	تست خارجی	۹۶/۷۴	۱۷۲۱/۷۱
MAE	ارزیابی	۱/۸۶	۲/۷۴
	تست داخلی	۲/۰۱	۲/۸۷
	تست خارجی	۶/۳۶	۲۸/۷۶
MPE	ارزیابی	۰/۰۱۴۰۳	۰/۰۳۶۹۹۲
	تست داخلی	۰/۰۰۴۲۶	۰/۰۵۱۱۹
	تست خارجی	۰/۴۳۳۸۳	۱/۴۵۱۲
MAPE	ارزیابی	۰/۲۷۰۶۱	۰/۳۸۱۳۲۳
	تست داخلی	۰/۲۹۴۰۶	۰/۳۹۳۲۵
	تست خارجی	۰/۸۰۴۶	۳/۴۲۳۸
D_{max}	ارزیابی	۹/۲۴	۹/۱۰
	تست داخلی	۱۹/۵	۱۴/۸۸
	تست خارجی	۴/۸۵	۱۲/۴۷

۳-۵- بررسی ارتباط توصیف کننده‌های انتخاب شده در مدل GA-ANN با

دانشیه ی ترکیبات

در این قسمت به طور خلاصه ارتباط بین توصیف کننده‌های تئوری انتخاب شده در مدل GA-ANN و دانشیه‌ی سیالات خالص مورد بررسی قرار خواهد گرفت. این توصیف کننده‌ها شامل Ss، Me، TIC5، TIC4، X2Av، E1s می‌باشد.

۳-۵-۱- توصیف کننده‌ی E1s

توصیف کننده‌ی E1s جزء توصیف کننده‌های WHIM^۱ است، توصیف کننده‌های WHIM از مختصات کارترین سه بعدی مولکول، با استفاده از صورتبندی با حداقل انرژی محاسبه می‌شود و شامل اطلاعاتی درباره‌ی اندازه، شکل، تقارن و توزیع اتمی ساختار سه بعدی مولکول است. این توصیف کننده‌ها از رابطه‌ی (۳-۱) به دست می‌آیند.

$$S_{jk} = \frac{\sum_{i=1}^A \omega_i (q_{ij} - \bar{q}_j)(q_{ik} - \bar{q}_k)}{\sum_{i=1}^A \omega_i} \quad (۳-۱)$$

که S_{jk} کوواریانس وزن دار شده بین کئوردینه j ام و k ام، A تعداد اتم‌ها، ω_i وزن i امین اتم، q_{ij} و q_{ik} به ترتیب j امین و k امین کئوردینه‌های اتم i ام و $\bar{q}$ مقدار میانگین متناظر است [۱۲۸]. توصیف کننده‌ی E1s توسط حالت‌های الکتروتوپولوژیک وزن دار می‌شود. در جدول (۳-۱۶) چگونگی ارتباط این توصیف کننده با دانشیه‌ی π -آلکان‌ها و الکل‌های خطی مختلف در دما و فشار ثابت به عنوان مثال آورده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود با افزایش جرم اتمی عناصر به کار رفته در ترکیبات، وزن اتمی ترکیبات افزایش یافته و طبق رابطه‌ی (۳-۱) مقدار این توصیف کننده نیز افزایش می‌یابد. از طرف دیگر دانشیه با جرم رابطه‌ی مستقیم دارد. لذا با افزایش توصیف کننده‌ی

^۱ - Weighted Holistic Invariant Molecular descriptors

E1s دانسیته نیز افزایش می‌یابد. همانطور که انتظار می‌رود این اثر افزایشی در الکل‌ها به علت وجود اتم اکسیژن نسبت به n- آلکان‌ها با تعداد کربن برابر بیشتر است.

جدول (۳-۱۶) - مقدار توصیف‌کننده‌ی E1s برای n- آلکان‌ها و الکل‌های خطی در فشار ۰/۱Mpa و دمای ۲۹۸/۱۵ K

شماره ترکیب	نام ترکیب	مقدار محاسبه شده توصیف‌کننده E1s	Density (kg m ⁻³)
۱	n-Hexane	۰/۳۷۲	۶۵۵/۰
۲	n-Heptane	۰/۳۹۹	۶۷۹/۶
۳	n-Octane	۰/۴۱۷	۶۹۸/۷
۴	n-Decane	۰/۴۴۴	۷۲۷/۲
۵	n-Dodecane	۰/۴۶۳	۷۴۶/۱
۶	n-Hexadecane	۰/۴۸۵	۷۷۰/۲
۷	Ethanol	۰/۳۶۱	۷۸۴/۸
۸	1-Propanol	۰/۵۴۱	۷۹۹/۸
۹	1-Hexanol	۰/۶۳۵	۸۱۴/۹
۱۰	1-Heptanol	۰/۶۴۷	۸۱۸/۵
۱۱	1-Octanol	۰/۶۴۹	۸۲۱/۴

۳-۵-۲- توصیف‌کننده‌های Ss و Me

توصیف‌کننده‌های Ss و Me جزء توصیف‌کننده‌های ساختاری می‌باشند. این گروه از توصیف‌کننده‌ها ساده‌ترین و معمول‌ترین توصیف‌کننده‌های استفاده شده می‌باشند، که خصوصیات مولکول را بدون داشتن اطلاعات زیادی در مورد آن منعکس می‌کنند. تعداد اتم‌ها، تعداد پیوندهای ساده، دوگانه، سه گانه و آروماتیک، تعداد مطلق و نسبی یک نوع اتم خاص در مولکول، تعداد حلقه‌ها، تعداد حلقه‌ها

بر اساس تعداد اتم‌های آن‌ها و وزن مولکولی متداول‌ترین توصیف‌کننده‌های ساختاری می‌باشد [۱۲۸].

توصیف‌کننده Ss تحت عنوان مجموع حالت‌های الکتروتوپولوژیک کی-یر-هال^۱ به شکل رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود [۱۲۹]:

$$S_s = \sum_{i=1}^A S_i \quad (2-3)$$

S_i حالت الکتروتوپولوژیک^۲ اتم i در مولکول، طبق رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$S_i = I_i + \Delta I_i \quad (3-3)$$

که در این رابطه I_i ، مقدار حالت ذاتی اتم^۳ و ΔI_i از روابط زیر به دست می‌آیند:

$$I_i = \frac{Z^v - h + 1}{\delta - h} \quad (4-3)$$

$$\Delta I_i = \sum (I_i - I_j) / r_{ij}^2 \quad (5-3)$$

در روابط بالا، Z^v تعداد الکترون‌های لایه‌ی ظرفیت اتم، δ تعداد الکترون‌های اوربیتال سیگما و r_{ij} فاصله دو اتم i و j در گراف مولکولی است [۱۲۸].

مقدار I ، δ_i ، δ_i^v و Z گروه‌های اتمی مختلف به همراه نماد Kier-Hall در پیوست آمده است.

توصیف‌کننده Me نیز تحت عنوان میانگین الکترون‌گاتیویته^۴ طبق رابطه‌ی زیر محاسبه می‌شود [۱۲۹]:

$$Me = S_e / nAT \quad (6-3)$$

که در این رابطه S_e مجموع الکترون‌گاتیویته و nAT تعداد اتم‌ها در ترکیب است. عبارت S_e بصورت زیر تعریف می‌شود:

۱ - Kier-Hall

۲- electrotopological state

۳- Intrinsic state values

۴- mean electronegativity

$$Se = \sum_{i=1}^A E_i \quad (7-3)$$

که در آن E_i الکترونگاتیویته‌ی اتم i و A تعداد اتم‌هاست.

ارتباط بین این دو توصیف‌کننده با دانسیته برای چند مولکول از سری داده‌ها در دما و فشار معین در جدول (۱۷-۳) گزارش شده است. همانطور که مشاهده می‌شود توصیف‌کننده‌ی Me دارای اثر منفی است یعنی با کاهش مقدار این توصیف‌کننده دانسیته افزایش می‌یابد و برعکس توصیف‌کننده Ss دارای اثر مثبت بوده و با افزایش مقدار این توصیف‌کننده دانسیته نیز افزایش می‌یابد.

جدول (۱۷-۳) - مقدار توصیف‌کننده‌های Ss و Me برای تعدادی از ترکیبات در فشار ۰/۱Mpa و دمای ۳۴۸/۱۵K

شماره ترکیب	نام ترکیب	مقدار محاسبه شده توصیف‌کننده Ss	مقدار محاسبه شده توصیف‌کننده Me	Density (kg m ⁻³)
۱	Ethanol	۹/۵	۱	۷۳۹/۵
۲	1-Propanol	۱۱	۰/۹۹	۷۵۷/۲
۳	1-Butanol	۱۲/۵	۰/۹۸	۷۶۵/۶
۴	1-Heptanol	۱۷	۰/۹۷	۷۸۲/۱
۵	Hexane	۱۰	۰/۹۶	۶۰۶/۱۷
۶	Octane	۱۳	۰/۹۶	۶۵۷/۱
۷	Decane	۱۶	۰/۹۶	۶۸۸/۷
۸	Hexadecane	۲۵	۰/۹۶	۸۳۰/۶

۳-۵-۳ - توصیف‌کننده‌های TIC4 ، TIC5

این توصیف‌کننده‌ها جزء شاخص‌های اطلاعاتی هستند و دربردارنده اطلاعاتی راجع به ماهیت شیمیایی، پیوند اتم‌ها در فضا، توپولوژی مولکولی و تقارن می‌باشند.

محتوای اطلاعات کلی (TIC_m) به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\text{TIC}_m = A \cdot \text{IC}_m \quad (8-3)$$

که در این رابطه A تعداد رئوس گراف^۱ (اتمها) و اندیس m مرتبه‌ی تقارن است که معمولاً مقدار آن از صفر تا ۶ می‌باشد [۱۲۸]. ارتباط بین این دو توصیف‌کننده با دانسیته برای چند مولکول از سری داده‌ها در دما و فشار معین در جدول (۳-۱۸) گزارش شده است. همانطور که مشاهده می‌کنید هر دو توصیف‌کننده‌ی TIC_4 و TIC_5 دارای اثر مثبت هستند یعنی با افزایش مقدار این توصیف‌کننده‌ها دانسیته افزایش می‌یابد.

طبق رابطه‌ی (۳-۸) با افزایش تعداد اتمها در یک دسته از مولکول‌های آلی، مقدار توصیف‌کننده‌های TIC_4 و TIC_5 افزایش می‌یابد. از طرفی افزایش تعداد اتمها موجب افزایش جرم مولکولی و در نتیجه افزایش دانسیته ($\rho = \frac{m}{v}$) می‌شود.

جدول (۳-۱۸) - مقدار توصیف‌کننده‌های TIC_4 و TIC_5 برای تعدادی از ترکیبات در فشار ۰/۱Mpa و دمای ۳۲۳/۱ K

شماره ترکیب	نام ترکیب	مقدار محاسبه شده توصیف‌کننده TIC_4	مقدار محاسبه شده توصیف‌کننده TIC_5	Density (kg m^{-3})
۱	Hexane	۴۳/۹۴۳	۴۸/۹۲۹	۶۷۸/۲
۲	decane	۱۰۲/۴۹	۹۴/۴۹	۷۰۸/۱
۳	Dodecane	۱۲۳/۹۱۲	۱۰۸/۸۹۲	۷۲۷/۵
۴	1-Tetradecene	۱۵۸/۷۰۳	۱۷۹/۷۲۲	۷۵۰/۴
۵	1-Hexadecene	۱۷۱/۷۱۴	۱۹۶/۳۰۴	۷۶۰/۶
۶	1-Amino-2-propanol	۳۹/۹۷۵	۲۰/۴۲۸	۹۳۶/۲۴۴
۷	3-Amino-1-propanol	۴۳/۱۹۱	۳۵/۰۴۶	۹۶۶/۸۸۱
۸	Diethanolamine	۵۱/۰۵۹	۴۸/۱۶۳	۱۰۷۷/۴۹
۹	Triethanolamine	۶۶/۰۵۷	۶۲/۵	۱۱۰۶/۷۸

^۱ -graph vertices

۳-۵-۴- توصیف‌کننده X2Av

X2Av توصیف‌کننده‌ای از گروه اندیس‌های ارتباط مولکولی است. این اندیس‌ها دسته‌ای از توصیف‌کننده‌های توپولوژیکی هستند که اطلاعاتی در مورد ساختمان، اندازه و میزان شاخه‌ای شدن مولکول، نحوه‌ی اتصال اتم‌ها و نوع اتم‌های موجود در یک مولکول را در اختیار قرار می‌دهند. جهت محاسبه‌ی این توصیف‌کننده‌ها ابتدا باید ساختار مولکول را با استفاده از تئوری گراف مولکولی رسم نمود.

این اندیس‌ها اولین بار به‌وسیله راندیک^۱ در سال ۱۹۷۵ ارائه شدند و سپس در سال ۱۹۷۶ توسط هال^۲ اصلاح گردیدند. این توصیف‌کننده‌ها با رابطه‌ی (۳-۹) قابل محاسبه هستند:

$${}^m\chi^v = \sum_{i=1}^{N_s} \prod_{k=1}^{m+1} \left(\frac{1}{\delta_k^v} \right)^{1/2} \quad (۳-۹)$$

که در این رابطه δ_k^v ، درجه رأس ظرفیت^۳ اتم k ام در گراف مولکولی است و مطابق رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود:

$$\delta_k^v = \frac{(Z_K^v - h_k)}{(Z - Z_k^v - 1)} \quad (۳-۱۰)$$

که در آن Z عدد اتمی اتم k ، Z_k^v تعداد الکترون‌های لایه‌ی ظرفیت اتم k و h_k تعداد اتم‌های هیدروژن متصل به اتم غیر هیدروژنی k است [۱۲۸].

در جدول (۳-۱۹) مقدار این توصیف‌کننده به همراه دانسیته‌ی تعدادی از ترکیبات در دما و فشار معین به عنوان مثال آورده شده است. بررسی اثر این توصیف‌کننده نشان می‌دهد که با افزایش مقدار توصیف‌کننده‌ی X2Av، دانسیته کاهش می‌یابد.

۱ - Randic

۲ - Hall

۳ - Valence vertex degree

جدول (۳-۱۹) - مقدار توصیف‌کننده‌ی X2Av برای تعدادی از ترکیبات در فشار ۰/۱ Mpa و دمای K ۲۹۳/۱۵

شماره ترکیب	نام ترکیب	مقدار محاسبه شده توصیف‌کننده‌ی X2Av	Density (kg m ⁻³)
۱	Acetic Acid	۰/۱۷۳	۱۰۴۸/۳
۲	Propanoic Acid	۰/۱۸۷	۹۹۳/۴
۳	Butanoic Acid	۰/۲۲۹	۹۵۷/۶
۴	Pentanoic Acid	۰/۲۵۰	۹۳۸/۳
۵	Heptanoic Acid	۰/۲۷۶	۹۱۶/۶
۶	Octanoic Acid	۰/۲۸۴	۹۱۱/۳
۷	1,2-Butanediol	۰/۲۴۹	۱۰۰۲/۱۱
۸	2-Methyl-2,4-pentanediol	۰/۲۸۷	۹۲۱/۷۱
۹	2-Ethyl-1-hexanol	۰/۳۲۵	۸۳۲/۶۱
۱۰	2-Methyl-1-butanol	۰/۳۳۹	۸۱۸/۷۳
۱۱	Butylbenzene	۰/۲۳۵	۸۶۰/۷
۱۲	Octylbenzene	۰/۲۶۷	۸۵۶/۵
۱۳	1-phenyltridecane	۰/۲۸۹	۸۵۵/۱۹

۳-۶- بررسی میزان مشارکت توصیف‌کننده‌های منتخب شبکه‌ی عصبی

مصنوعی

برای تعیین میزان مشارکت توصیف‌کننده‌های انتخاب شده توسط شبکه‌ی بهینه‌ی GA-ANN به صورت زیر عمل شده:

۱- ابتدا وزن مربوط به توصیف‌کننده‌ی مورد نظر از شبکه بهینه حذف شد.

۲- مقدار متغیر وابسته با استفاده از توصیف‌کننده‌های باقی‌مانده برای هر یک از ترکیبات سری ارزیابی پیش‌بینی گردید.

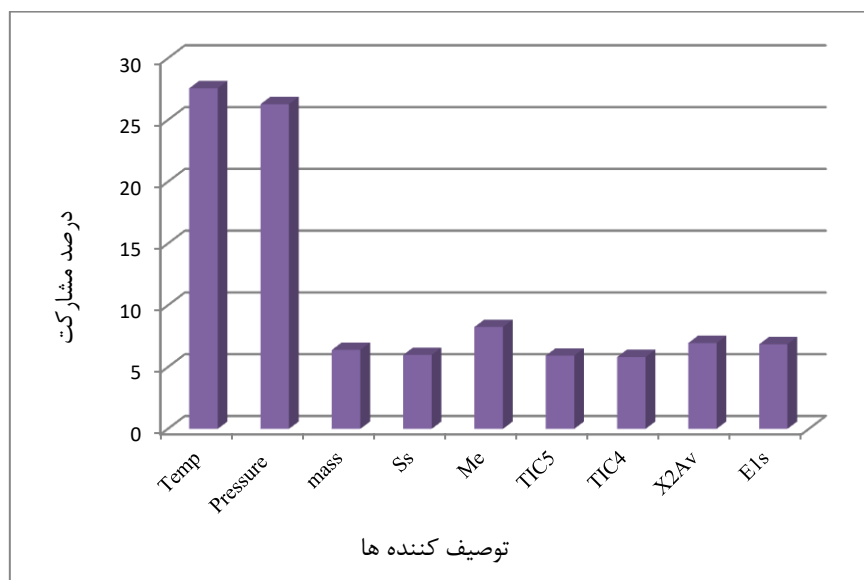
۳- میانگین خطای مطلق (MAE) حاصل از ترکیبات سری ارزیابی در غیاب توصیف‌کننده‌ی مورد نظر محاسبه شد.

۴- مراحل ۱ تا ۳ برای دیگر توصیف‌کننده‌ها نیز تکرار گردید.

۵- در نهایت درصد مشارکت هر توصیف‌کننده توسط رابطه (۳-۸) محاسبه شد:

$$C_i = 100 \frac{\Delta m_i}{\sum_{i=1}^N \Delta m_i} \quad (۳-۸)$$

در این رابطه C_i درصد مشارکت توصیف‌کننده‌ی حذف شده Δm_i ، N تعداد توصیف‌کننده‌ها در مدل و Δm_i میانگین خطای مطلق حاصل از سری ارزیابی در غیاب توصیف‌کننده‌ی Δm_i را نشان می‌دهد. طبق روش شرح داده شده درصد مشارکت توصیف‌کننده‌های منتخب در شبکه‌ی بهینه شده‌ی GA-ANN، محاسبه شد که به صورت نموداری در شکل (۳-۹) نشان داده شده است.



شکل (۳-۹)- درصد مشارکت توصیف‌کننده‌ها در مدل GA-ANN

همانطور که در این شکل مشاهده می‌شود درصد مشارکت دو توصیف‌کننده‌ی دما و فشار بیشتر از توصیف‌کننده‌های تئوری و جرم کل است که به خوبی وابستگی شدید دانسیته به دما و فشار را نشان می‌دهد.

۳-۷- مقایسه با کارهای قبلی

در این بخش توانایی پیش‌بینی دانسیته بوسیله‌ی شبکه‌ی عصبی مصنوعی جامع ارائه شده در این کار با شبکه‌های عصبی مصنوعی بهینه شده در کارهای قبلی برای دسته‌های مشخصی از ترکیبات آلی مقایسه شده است. نتایج این مقایسه را می‌توانید در جدول (۳-۲۰) مشاهده کنید. نتایج این جدول نشان می‌دهد که شبکه‌ی عصبی مصنوعی جامع ارائه شده در بعضی موارد می‌تواند دانسیته را حتی بهتر از کارهای قبلی پیش‌بینی کند. این موضوع اهمیت شبکه‌ی جامع را به خوبی نشان می‌دهد چرا که به جای استفاده از شبکه‌های مختلف برای دسته‌های گوناگون ترکیبات آلی، فقط می‌توان با استفاده از یک شبکه‌ی جامع بهینه شده، دانسیته‌ی انواع ترکیبات آلی را با خطایی حتی کمتر از شبکه‌های مجزا پیش‌بینی نمود.

جدول (۳-۲۰) - مقایسه‌ی مقادیر پیش‌بینی شده‌ی دانسیته برای چند ترکیب آلی توسط روش GCM-ANN در این پایان نامه با کارهای قبلی بر حسب kg.m^{-3}

نام ماده	مقدار تجربی دانسیته	مقدار پیش‌بینی شده‌ی دانسیته		
		این کار	کارهای قبلی	مرجع
1-nonanol	781.6	781.6	782.28	1
	796.5	795.9	796.72	1
	806.5	806.9	806.98	1
	809.8	810.5	810.25	1
	812.8	811.4	812.61	1
	816.1	816.2	816.44	1
	827.6	827.4	826.25	1
	830.2	830	830.4	1
	831.8	832.4	832.12	1
	832.7	832.9	832.88	1
	834.5	835.2	834.87	1
	839.7	838.8	840.07	1
	842.4	843	842.67	1
	847.8	847	848.25	1
	857.6	856.9	858.09	1
	862.2	861.5	862.64	1

ادامه جدول (۳-۲۰)

نام ماده	مقدار تجربی دانسیته	مقدار پیش بینی شده ی دانسیته		
		این کار	کارهای قبلی	مرجع
Dodecanoic Acid	855.7	854.2	854.05	1
	856.4	855.1	854.95	1
	857.9	857.3	856.93	1
	859.4	859.3	858.88	1
	861.2	861.9	861.26	1
	862.3	863.4	862.66	1
	848.4	846.9	846.62	1
	849.1	847.9	847.54	1
	850.7	850	849.58	1
	852.2	852.2	851.59	1
	854	854.8	854.07	1
	855.2	856.3	855.53	1
	841.2	839.5	839.24	1
	841.9	840.5	840.18	1
	843.5	842.7	842.27	1
	845.1	844.8	844.34	1
	847.1	847.5	846.88	1
	848.3	849	848.39	1
	833.5	831.9	831.96	1
	834.3	832.9	832.91	1
	836	835.2	835.03	1
	837.6	837.4	837.13	1
	839.7	840.1	839.73	1
	841	841.6	841.28	1

ادامه جدول (۳-۲۰)

نام ماده	مقدار تجربی دانسیته	مقدار پیش بینی شده ی دانسیته		
		این کار	کارهای قبلی	مرجع
n-Decane	741.6	743.4	739.3	16
	727.8	728.8	725	16
	743.5	740.5	742.6	16
	704.7	704.3	703.4	16
	689.3	688.4	688.5	16
	740.8	736.7	740.3	16
	648.5	648.1	651	16
	699.5	699.2	699.8	16
	777.1	776.7	776.4	16
	747.5	747.1	745.8	16
	731	729.2	730	16
	709.2	708.4	708.1	16
	698.3	697.2	698	16
	668	667	668.8	16
	727.7	723.8	727.4	16
	660.8	662	663.8	16
Triacontane	767.8	766.2	768.9	16
	848.8	851.9	850.8	16
	733.1	733.4	732.3	16
	864.5	863.3	859.1	16
	709.2	711.5	707.3	16
	662.6	668.4	659.2	16
	705.8	706.7	703.4	16

۳-۸- نتیجه‌گیری

با توجه به این‌که اندازه‌گیری دانسیته به صورت تجربی برحسب دما و فشار ثابت به صرف هزینه و زمان زیادی نیاز دارد لذا استفاده از روش‌های پیش‌بینی از اهمیت زیادی برخوردار است. در این پایان‌نامه نشان دادیم که می‌توان روش مدل‌سازی شبکه‌ی عصبی‌مصنوعی را برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات آلی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار استفاده نمود. برای انتخاب توصیف‌کننده‌های مناسب از دو روش استفاده شد: توصیف‌کننده‌های برمبنای روش سهم‌گروه (GCM) و توصیف‌کننده‌های تئوری که با استفاده از الگوریتم ژنتیک (GA) انتخاب شده بودند. پس از بهینه‌سازی مدل‌ها با دو گروه توصیف‌کننده‌ی متفاوت نتایج زیر به‌دست آمد.

با مقایسه‌ی پارامترهای آماری موجود در جدول (۳-۱۵) برای مدل‌های بهینه‌ی GCM-ANN و GA-ANN مشخص شد که روش مدل‌سازی GCM-ANN نتایج بهتری را نسبت به GA-ANN برای پیش‌بینی دانسیته ارائه می‌دهد زیرا مدل بهینه‌ی حاصل از روش سهم‌گروه دارای میانگین مربعات خطای کمتر و ضریب تعیین بالاتری نسبت به مدل GA-ANN بهینه شده است.

بررسی نمودارهای خطای باقیمانده نیز نشان می‌دهد که گستره‌ی باقیمانده‌های مطلق سری‌های ارزیابی و تست در مدل حاصل از روش سهم‌گروه کمتر از روش GA است. بنابراین ارزیابی مدل‌ها توسط نمودارهای خطای باقیمانده نیز تأیید می‌کند که مدل GCM-ANN نسبت به GA-ANN عملکرد بهتری دارد.

با توجه به سادگی روش سهم‌گروه برای انتخاب توصیف‌کننده‌ها این نتایج از اهمیت بالایی برخوردارند. به عبارت دیگر چون در انتخاب توصیف‌کننده‌ها به کمک روش سهم‌گروه به نرم‌افزار خاص و انجام محاسبات اضافی نیازی نیست، این موضوع اهمیت مدل بهینه‌ی GCM-ANN را دو چندان می‌کند.

۳-۹- آینده‌نگری

از روش ارائه شده می‌توان برای پیش‌بینی سایر خواص ترمودینامیکی ترکیبات آلی یا خواص انتقالی آن‌ها مانند ویسکوزیته و هدایت گرمایی و.... نیز استفاده کرد.

همچنین می‌توان به جای استفاده از روش شبکه‌ی عصبی مصنوعی از روش‌های غیرخطی دیگر مثل ماشین بردار پشتیبان (SVM) برای مدل‌سازی استفاده نمود و نتایج را با این کار مقایسه کرد.

جدول (پ-۱) - تعدادی از اتم‌های Kier-Hall

گروه اتمی	Z	δ_i^v	δ_i	I	نماد
$-CH_3$	۶	۱	۱	۲	sCH ₃
$=CH_2$	۶	۲	۱	۳	dCH ₂
$-CH_2-$	۶	۲	۲	۱/۵	ssCH ₂
$\equiv CH$	۶	۳	۲	۴	tCH
$=CH-$	۶	۳	۲	۲	dsCH
$>CH-$	۶	۳	۳	۱/۳۳	sssCH
$=CH=$	۶	۴	۲	۲/۵	ddC
$-NH_2$	۷	۳	۱	۴	sNH ₂
$=N-$	۷	۵	۲	۳	dsN
$>N-$	۷	۵	۳	۲	sssN
$-OH$	۸	۵	۱	۶	sOH
$=O$	۸	۶	۱	۷	dO
$-O-$	۸	۶	۲	۳/۵	ssO

جدول (پ-۲) - مقایسه‌ی مقادیر تجربی و مقادیر پیش‌بینی شده‌ی دانسیته برای ترکیبات سری تست خارجی بر حسب kg.m^{-3}

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
1	698.7	701.7	703.1	46	845.9	845.2	848.3
2	724.4	726.1	725.2	47	855.2	855.1	857.9
3	746.8	747.2	748.8	48	718.6	717.3	714.6
4	763.7	764.5	767.2	49	758.1	754.4	756.8
5	779.9	781	783.9	50	783.3	781.4	785.8
6	795.8	798.1	800.9	51	804.3	802.9	808.2
7	824.9	827.7	830.8	52	820.7	819.1	825
8	845.5	848.6	852.2	53	849.7	848.2	853.6
9	860.7	862	868.2	54	871.7	873.3	877.5
10	678.2	679.4	680.1	55	882.2	883.7	889.3
11	709	709.5	709.2	56	694.3	680.8	701.1
12	733.2	732.7	735.9	57	702.6	688	709
13	747.3	746.9	751.8	58	709.9	694	715.7
14	765.6	766.4	772.4	59	716.4	699.6	722
15	784.8	785.5	791.5	60	722.3	705	728
16	814.2	815.9	821.9	61	727.8	710.2	733.8
17	834.8	837.2	842.7	62	732.8	715.4	739.4
18	848.8	850.6	856.7	63	737.5	720.3	744.8
19	657.1	656.1	657	64	741.9	725.1	750
20	679.4	680.4	678.7	65	746.1	729.7	754.9
21	697.3	697.6	697	66	750.1	734.1	759.7
22	720.8	720.8	724.5	67	753.9	738.2	764.2
23	734.2	733.4	739.3	68	757.5	742.1	768.6
24	753	752.2	760.1	69	761	745.8	772.8
25	772.3	772.9	780.7	70	764.3	749.2	776.9
26	804.9	806.1	813.2	71	767.5	752.4	780.8
27	823.8	826.4	832.8	72	686.4	672.8	691.6
28	838.3	840.3	846.4	73	695.8	681	700.4
29	770.2	771.8	769.2	74	704	687.8	707.8
30	778.7	779.2	775.6	75	711.2	694	714.6
31	783.4	783.4	779.5	76	717.7	699.9	721.1
32	786.4	786.5	782.5	77	723.7	705.5	727.3
33	789	789.2	785.1	78	729.1	711	733.3
34	753	753.3	751	79	734.2	716.3	739
35	773.2	771.1	769.7	80	738.9	721.4	744.5
36	789.1	787.7	786.8	81	743.3	726.2	749.7
37	802.4	802.1	801.2	82	747.5	730.8	754.6
38	814.5	815.2	814	83	751.4	735.1	759.4
39	821.3	822.5	821.2	84	755.2	739.1	763.9
40	824.7	825.8	824.6	85	758.8	742.9	768.3
41	735.8	734.9	732.9	86	762.3	746.4	772.5
42	770.3	766.9	768.1	87	765.6	749.7	776.5
43	794.6	793.4	795.4	88	677.5	664.9	682
44	814.2	813.8	816.3	89	688	674.1	691.8
45	830.6	829.8	832.7	90	697.1	681.7	699.9

ادامه جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
91	705.1	688.5	707.2	136	647.5	641.1	652.6
92	712.2	694.9	714.2	137	661	654	665.8
93	718.7	700.9	720.9	138	672.4	664	676.1
94	724.6	706.7	727.2	139	682.4	672.5	685.1
95	730	712.3	733.2	140	691.3	680.1	693.5
96	735.1	717.6	739	141	699.4	687.2	701.4
97	739.8	722.7	744.4	142	706.7	693.9	708.9
98	744.3	727.5	749.6	143	713.5	700.3	715.9
99	748.5	732	754.6	144	719.7	706.3	722.5
100	752.4	736.1	759.3	145	725.6	711.9	728.7
101	756.2	740	763.8	146	731	717.2	734.5
102	759.8	743.6	768.1	147	736.1	722.2	740
103	763.3	747	772.2	148	741	726.8	745.3
104	667.8	657	672.3	149	745.5	731	750.2
105	679.4	667.4	683.2	150	749.9	734.9	754.9
106	689.4	675.8	691.9	151	754	738.5	759.4
107	698.1	683.1	699.9	152	637.7	632.8	642.5
108	705.9	689.9	707.3	153	651.9	647.3	657.1
109	712.9	696.3	714.4	154	663.8	658.1	668.1
110	719.3	702.5	721.1	155	674.2	667.1	677.7
111	725.2	708.3	727.4	156	683.5	675.2	686.6
112	730.6	713.9	733.5	157	691.9	682.6	694.9
113	735.7	719.2	739.2	158	699.6	689.6	702.8
114	740.5	724.1	744.6	159	706.7	696.2	710.1
115	744.9	728.8	749.7	160	713.3	702.4	717
116	749.2	733.1	754.6	161	719.4	708.2	723.4
117	753.2	737.1	759.3	162	725.2	713.7	729.5
118	757	740.8	763.7	163	730.6	718.8	735.2
119	760.7	744.2	767.9	164	735.8	723.5	740.6
120	657.7	649.1	662.5	165	740.6	727.8	745.7
121	670.3	660.7	674.5	166	745.2	731.8	750.5
122	681	669.9	684	167	749.6	735.5	755.1
123	690.5	677.8	692.5	168	628.6	624.3	632.2
124	698.9	685	700.4	169	643.3	640.4	648.4
125	706.4	691.8	707.9	170	655.6	652.2	660.1
126	713.3	698.2	715	171	666.2	661.8	670.4
127	719.7	704.3	721.7	172	675.7	670.2	679.7
128	725.5	710.1	728	173	684.3	677.9	688.5
129	731	715.6	733.9	174	692.2	685.2	696.6
130	736.1	720.7	739.5	175	699.5	692	704.3
131	740.9	725.5	744.9	176	706.3	698.4	711.5
132	745.4	730	749.9	177	712.7	704.4	718.2
133	749.7	734.1	754.7	178	718.7	710	724.5
134	753.8	737.9	759.3	179	724.4	715.2	730.4
135	757.6	741.4	763.7	180	729.8	720.1	735.9

ادامہ جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
181	734.9	724.5	741.2	226	855.8	869.8	841.5
182	739.8	728.6	746.1	227	859.5	876.6	844.7
183	744.4	732.4	750.8	228	863.1	883.1	847.9
184	620.6	615.5	621.7	229	866.6	889.3	850.9
185	635.7	633.4	639.5	230	870	895.1	853.7
186	648.2	646.2	652.2	231	873.2	900.5	856.5
187	658.9	656.3	663	232	801.1	804.2	791.8
188	668.4	665.2	672.8	233	807.5	810.9	797.4
189	677.1	673.2	682	234	813.6	816.3	802.9
190	685	680.6	690.5	235	819.3	821.5	808
191	692.4	687.6	698.5	236	824.6	826.8	812.9
192	699.3	694.2	705.9	237	829.6	832.4	817.6
193	705.9	700.4	712.9	238	834.3	838.4	822
194	712	706.2	719.4	239	838.7	844.7	826.1
195	717.9	711.5	725.5	240	842.9	851.3	830.1
196	723.5	716.5	731.2	241	847	858.1	833.8
197	728.8	721.1	736.6	242	851	864.9	837.3
198	733.8	725.3	741.7	243	854.8	871.6	840.7
199	738.7	729.1	746.5	244	858.4	878.2	844
200	820.6	821.7	811.9	245	862	884.4	847
201	826.2	828.1	816.3	246	865.4	890.4	850
202	831.6	833.1	820.6	247	868.7	896.1	852.9
203	836.7	837.6	824.7	248	794.6	797.7	785
204	841.4	842.3	828.7	249	801.4	804.5	791.1
205	845.9	847.3	832.6	250	807.7	810.2	797
206	814	816.2	805.2	251	813.6	815.6	802.5
207	819.8	822.7	810	252	819.1	821.1	807.7
208	825.5	827.8	814.7	253	824.2	826.9	812.6
209	830.8	832.5	819.2	254	829.1	833	817.2
210	835.7	837.4	823.5	255	833.6	839.4	821.5
211	840.3	842.6	827.6	256	838	846.1	825.7
212	844.2	848.3	831.5	257	842.2	852.8	829.6
213	849.1	854.4	835.3	258	846.3	859.6	833.2
214	853.2	860.8	838.8	259	850.1	866.3	836.7
215	857.1	867.5	842.3	260	853.9	872.9	840.1
216	807.5	810.4	798.5	261	857.5	879.3	843.2
217	813.7	816.9	803.7	262	860.9	885.5	846.3
218	819.5	822.2	808.8	263	864.3	891.5	849.2
219	824.9	827.1	813.6	264	788	790.8	778.3
220	830	832.2	818.2	265	795.2	797.8	784.8
221	835	837.7	822.6	266	801.8	803.8	791.1
222	839.6	843.5	826.7	267	807.9	809.4	796.9
223	843.8	849.7	830.7	268	813.6	815.1	802.4
224	848	856.3	834.5	269	818.9	821	807.6
225	852	863	838	270	824	827.3	812.4

ادامه جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
271	828.7	833.7	817	316	797.2	794.9	786.6
272	833.2	840.4	821.3	317	803.1	801.3	792.6
273	837.5	847.1	825.3	318	808.7	807.7	798.1
274	841.6	853.9	829.1	319	813.9	814.3	803.3
275	845.6	860.7	832.7	320	818.9	821	808.1
276	849.4	867.4	836.2	321	823.6	827.9	812.6
277	853.1	874	839.4	322	828	835	816.8
278	856.7	880.5	842.6	323	832.3	842.3	820.8
279	860.1	886.9	845.5	324	836.4	849.9	824.5
280	781.5	783.6	771.6	325	840.4	857.6	828
281	789.1	790.8	778.6	326	844.2	865.4	831.4
282	795.7	797	785.2	327	847.9	873.1	834.6
283	802.1	802.9	791.3	328	572.5	564.7	577.6
284	808	808.7	797.1	329	574.6	567.7	580.6
285	813.4	814.8	802.6	330	576.5	570.7	583.3
286	818.6	821.1	807.6	331	578.9	574.4	586.7
287	823.8	827.6	812.4	332	582.6	580	591.6
288	828.4	834.3	816.9	333	592.7	594.3	603.2
289	832.8	841.1	821.1	334	601.6	605.3	611.8
290	837.1	847.9	825	335	609.6	614.2	618.8
291	841.2	854.8	828.8	336	616.8	621.3	624.7
292	845.1	861.7	832.3	337	623.2	628.1	630.8
293	848.8	868.6	835.6	338	546.5	534.4	548.6
294	852.5	875.5	838.8	339	548.5	537.6	551.7
295	856	882.3	841.9	340	551	541.5	555.4
296	774.9	776	764.9	341	554.2	546.3	559.8
297	782.7	783.4	772.3	342	558.9	553.6	566.1
298	790	789.9	779.3	343	571.8	571.8	580.7
299	796.5	796	785.8	344	582.8	585.5	591
300	802.7	802	791.9	345	592.1	596.2	599.3
301	808.4	808.2	797.6	346	600.2	604.9	606.4
302	813.7	814.6	802.9	347	607.3	612.1	612.8
303	818.9	821.2	807.8	348	509.2	492.1	510.1
304	823.6	827.9	812.5	349	510.3	493.4	511.3
305	828.2	834.7	816.8	350	511.7	495.2	513.1
306	832.6	841.6	820.9	351	514.4	498.8	516.5
307	836.7	848.7	824.8	352	519.2	505.6	522.7
308	840.8	855.8	828.4	353	526.2	515.7	531.5
309	844.6	863.1	831.8	354	543.9	540.7	551.3
310	848.3	870.4	835.1	355	557.4	558.9	564.5
311	851.9	877.7	838.2	356	568.7	572.6	574.5
312	768	767.9	758.2	357	578.5	583.2	582.8
313	776.3	775.7	766	358	587.1	591.8	590.2
314	783.9	782.4	773.4	359	463.7	444	468.5
315	790.8	788.7	780.2	360	466.7	446.8	471.2

ادامہ جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
361	475.9	456.3	480.1	406	802.6	795.2	778.7
362	487.9	470.4	492.6	407	806.9	800	782.7
363	513.4	504.9	519.7	408	811.1	804.7	786.6
364	531.3	529.4	536.9	409	750.4	746.4	731.5
365	545.1	547.2	549.2	410	752.3	747.9	733
366	556.5	560.5	559	411	754.2	749.5	734.6
367	566.8	570.8	567.4	412	757.9	752.5	737.7
368	464	441.5	468.4	413	761.5	755.5	740.7
369	480.4	463.1	484.8	414	764.9	758.4	743.7
370	504	496.2	507.7	415	768.1	761.2	746.6
371	521	519.6	523.1	416	771.3	764	749.5
372	535	536.4	534.8	417	777.2	769.5	755
373	546.7	548.9	544.4	418	782.7	774.9	760.2
374	490.9	479.1	488.7	419	787.9	780.2	765.1
375	526	520.6	516.4	420	792.9	785.3	769.8
376	532.6	526.7	521.1	421	797.6	790.3	774.3
377	490.9	475.2	475.8	422	802	795.3	778.5
378	519.2	505.9	497.3	423	806.3	800.1	782.6
379	764.3	761.3	746.2	424	743.4	739.1	724.1
380	766	762.5	747.4	425	745.4	740.8	725.8
381	767.7	763.8	748.7	426	747.4	742.5	727.5
382	771.1	766.3	751.3	427	751.3	745.8	730.9
383	774.3	768.8	753.9	428	755.1	749	734.2
384	777.4	771.3	756.4	429	758.6	752.1	737.4
385	780.3	773.7	758.8	430	762	755.1	740.5
386	783.2	776.1	761.3	431	765.3	758.1	743.6
387	788.7	781	766	432	771.5	763.9	749.4
388	793.8	785.8	770.5	433	777.2	769.6	755
389	798.7	790.6	774.9	434	782.6	775	760.3
390	803.3	795.3	779.1	435	787.7	780.4	765.2
391	807.7	800.1	783.1	436	792.5	785.6	769.9
392	811.9	804.7	786.9	437	797.1	790.6	774.4
393	815.9	809.3	790.6	438	801.5	795.5	778.6
394	757.4	753.8	738.8	439	736.3	731.9	716.8
395	759.2	755.1	740.2	440	738.4	733.7	718.6
396	761	756.6	741.7	441	740.6	735.5	720.4
397	764.5	759.4	744.5	442	744.7	739.1	724.1
398	767.9	762.1	747.3	443	748.6	742.5	727.6
399	771.1	764.8	750	444	752.3	745.8	731
400	774.3	767.4	752.7	445	755.9	749.1	734.4
401	777.3	770	755.4	446	759.3	752.2	737.7
402	782.9	775.2	760.5	447	765.7	758.4	743.9
403	788.3	780.3	765.4	448	771.7	764.3	749.8
404	793.3	785.3	770	449	777.3	770	755.4
405	798.1	790.3	774.5	450	782.5	775.5	760.6

ادامہ جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
451	787.5	780.8	765.5	496	772.6	766.5	752.3
452	792.2	786	770.2	497	777.7	772.1	757.6
453	796.7	791	774.6	498	782.6	777.4	762.5
454	729.1	724.7	709.4	499	707.3	703.2	687.2
455	731.4	726.7	711.3	500	710	705.6	689.6
456	733.7	728.7	713.3	501	712.7	708	692
457	738	732.5	717.2	502	717.9	712.6	696.7
458	742.1	736.1	721	503	722.6	717	701.2
459	746	739.6	724.7	504	727.1	721.1	705.6
460	749.8	743.1	728.3	505	731.4	725.1	709.9
461	753.3	746.4	731.8	506	735.4	728.9	714
462	760	752.8	738.4	507	742.9	736.1	721.8
463	766.2	759	744.6	508	749.8	743	729
464	771.9	764.9	750.5	509	756.2	749.5	735.8
465	777.4	770.6	756	510	762.1	755.8	742
466	782.5	776	761.1	511	767.7	761.7	747.9
467	787.3	781.3	766	512	773	767.4	753.3
468	792	786.5	770.5	513	778	772.9	758.4
469	721.9	717.6	702	514	699.9	695.8	679.8
470	724.3	719.7	704.1	515	702.8	698.4	682.3
471	726.7	721.8	706.2	516	705.7	701	684.9
472	731.3	725.9	710.4	517	711.1	705.9	689.8
473	735.6	729.8	714.4	518	716.1	710.5	694.6
474	739.7	733.5	718.4	519	720.8	714.8	699.3
475	743.6	737.1	722.2	520	725.3	719	703.7
476	747.3	740.6	725.8	521	729.5	722.9	708.1
477	754.3	747.3	732.9	522	737.3	730.5	716.2
478	760.7	753.7	739.4	523	744.4	737.6	723.8
479	766.6	759.8	745.6	524	751	744.4	730.8
480	772.2	765.7	751.3	525	757.1	750.8	737.4
481	777.5	771.3	756.7	526	762.8	756.9	743.5
482	782.5	776.7	761.8	527	768.2	762.7	749.1
483	787.3	781.9	766.5	528	773.4	768.3	754.4
484	714.6	710.4	694.6	529	692.5	688.4	672.4
485	717.2	712.7	696.8	530	695.6	691.1	675
486	719.7	714.9	699.1	531	698.6	693.9	677.7
487	724.6	719.3	703.5	532	704.3	699.1	683
488	729.1	723.4	707.8	533	709.6	703.9	688
489	733.4	727.3	712	534	714.5	708.4	692.9
490	737.5	731.1	716	535	719.2	712.8	697.6
491	741.4	734.7	719.9	536	723.5	716.9	702.1
492	748.6	741.7	727.3	537	731.6	724.8	710.7
493	755.2	748.4	734.2	538	739	732.1	718.6
494	761.4	754.7	740.7	539	745.8	739.1	725.9
495	767.2	760.7	746.7	540	752.1	745.7	732.7

ادامہ جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
541	758	751.9	739	586	744	736.6	725.7
542	763.6	757.9	744.9	587	749.9	743	732.2
543	768.8	763.6	750.4	588	755.6	749.1	738.2
544	685	680.7	664.9	589	837.7	850.3	828.6
545	688.3	683.7	667.7	590	828.5	842.2	819.3
546	691.5	686.6	670.6	591	820.7	835.1	811.6
547	697.5	692.1	676.1	592	810.9	825.4	801.4
548	703.1	697.2	681.4	593	840.8	844.8	857.3
549	708.3	701.9	686.5	594	841	845	857.5
550	713.1	706.5	691.4	595	841.1	845.4	857.9
551	717.7	710.8	696.2	596	841.8	845.7	858.3
552	726.1	718.9	705.1	597	842.3	846.1	858.6
553	733.7	726.5	713.3	598	842.6	846.4	859
554	740.7	733.7	721	599	843.1	846.8	859.3
555	747.2	740.5	728	600	843.4	847.1	859.6
556	753.3	746.9	734.6	601	844.1	847.7	860.2
557	759	753	740.7	602	844.7	848.2	860.8
558	764.4	758.9	746.3	603	828	832.8	844.1
559	677.5	672.8	657.5	604	828.3	833	844.3
560	680.9	676	660.4	605	828.8	833.4	844.7
561	684.4	679.1	663.4	606	829.2	833.7	845.1
562	690.7	684.9	669.2	607	829.6	834.1	845.5
563	696.6	690.3	674.8	608	830.1	834.4	845.9
564	702	695.3	680.1	609	830.5	834.8	846.3
565	707.1	700	685.2	610	830.9	835.1	846.7
566	711.8	704.5	690.2	611	831.6	836.2	847.9
567	720.5	713	699.5	612	855.8	855.4	857.2
568	728.4	720.8	708.1	613	858.6	858.6	859.5
569	735.7	728.2	716	614	861.5	861.7	861.9
570	742.3	735.2	723.4	615	864.2	864.8	864.3
571	748.6	741.8	730.1	616	867	867.7	866.6
572	754.4	748.1	736.4	617	869.5	870.6	868.9
573	759.9	754	742.2	618	872	873.3	871.2
574	669.8	664.6	650.1	619	874.4	875.8	873.5
575	673.5	668	653.1	620	876.8	878.3	875.8
576	677.2	671.4	656.2	621	879	880.6	878
577	683.9	677.6	662.3	622	881.4	882.8	880.2
578	690.1	683.2	668.1	623	883.5	884.9	882.3
579	695.8	688.5	673.7	624	885.7	887	884.5
580	701.1	693.4	679.1	625	887.8	888.9	886.5
581	706	698.1	684.2	626	849.1	849.7	850
582	715.1	706.8	693.9	627	852.2	852.8	852.6
583	723.2	715	702.9	628	855.1	855.9	855.2
584	730.7	722.6	711.1	629	858.2	858.9	857.8
585	737.6	729.8	718.7	630	860.9	861.8	860.4

ادامه جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
631	863.6	864.5	862.9	676	852.8	853.1	853.8
632	866.2	867.2	865.4	677	855.5	855.7	856.6
633	868.7	869.7	867.9	678	858.1	858.3	859.4
634	871.2	872.2	870.3	679	860.8	860.8	862.2
635	873.5	874.5	872.7	680	863.2	863.3	864.8
636	875.9	876.8	875	681	865.7	865.8	867.4
637	878.2	878.9	877.3	682	821	822.8	821.1
638	880.4	881	879.6	683	824.6	825.9	824.7
639	882.6	883.1	881.8	684	828.2	829	828.3
640	842.1	843.5	842.8	685	831.6	832.1	831.9
641	845.3	846.6	845.6	686	834.9	835.1	835.3
642	848.4	849.7	848.5	687	838.1	838	838.7
643	851.3	852.6	851.3	688	841.1	840.9	841.9
644	854.1	855.5	854.1	689	844	843.8	845.1
645	856.9	858.2	856.9	690	846.8	846.6	848.3
646	859.7	860.9	859.6	691	849.8	849.4	851.3
647	862.3	863.4	862.2	692	852.4	852.1	854.2
648	864.9	865.9	864.8	693	855.1	854.8	857.1
649	867.4	868.3	867.3	694	857.6	857.5	859.9
650	869.9	870.6	869.8	695	860.1	860.2	862.6
651	872.2	872.9	872.3	696	814	815.2	813.8
652	874.6	875.1	874.7	697	817.8	818.4	817.7
653	876.8	877.3	877	698	821.5	821.6	821.6
654	835.1	837	835.6	699	825.2	824.8	825.4
655	838.3	840.1	838.7	700	828.7	827.9	829
656	841.6	843.1	841.8	701	831.9	831	832.6
657	844.6	846	844.9	702	835	834.1	836.1
658	847.7	848.9	847.9	703	838.1	837.1	839.4
659	850.8	851.7	850.8	704	841	840.1	842.7
660	853.6	854.3	853.7	705	843.9	843.1	845.9
661	856.3	857	856.5	706	846.6	846	849
662	859	859.5	859.3	707	849.4	848.9	852
663	861.5	862	862	708	852	851.7	855
664	864.1	864.4	864.6	709	854.7	854.5	857.8
665	866.6	866.8	867.2	710	832.4	829.5	829.2
666	868.9	869.2	869.8	711	833	830	829.7
667	871.2	871.5	872.2	712	835.4	832.6	831.6
668	827.8	830.1	828.3	713	838.3	835.7	834
669	831.3	833.1	831.7	714	841.2	838.8	836.4
670	834.9	836.2	835.1	715	843.9	841.7	838.7
671	838.2	839.2	838.4	716	846.4	844.6	840.9
672	841.3	842.1	841.6	717	849.2	847.3	843.2
673	844.3	844.9	844.7	718	851.7	850.1	845.4
674	847.2	847.7	847.8	719	854.2	852.8	847.5
675	850.1	850.4	850.8	720	856.6	855.4	849.7

ادامہ جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
721	859	857.9	851.7	766	804.3	803.7	799.7
722	861.3	860.4	853.8	767	805	804.4	800.4
723	863.4	862.8	855.8	768	807.9	807.4	803.5
724	825.5	823.4	821.9	769	811.4	810.9	807.2
725	826.1	824	822.4	770	814.8	814.3	810.7
726	828.6	826.6	824.6	771	818.1	817.6	814
727	831.7	829.9	827.3	772	821.2	820.8	817.3
728	834.7	833	830	773	824.2	823.9	820.4
729	837.6	836	832.5	774	827.1	826.9	823.5
730	840.4	838.9	835	775	829.9	829.9	826.5
731	843.1	841.8	837.5	776	832.7	832.8	829.4
732	845.7	844.6	839.9	777	835.4	835.6	832.2
733	848.2	847.3	842.3	778	838	838.4	834.9
734	850.7	850	844.6	779	840.4	841	837.5
735	853.1	852.6	846.9	780	797.1	796.7	792.3
736	855.5	855.2	849.1	781	797.8	797.4	793.1
737	857.8	857.7	851.2	782	800.9	800.5	796.4
738	818.5	817	814.5	783	804.6	804.2	800.4
739	819.1	817.7	815.1	784	808.1	807.7	804.2
740	821.8	820.4	817.6	785	811.5	811.1	807.8
741	824.9	823.8	820.6	786	814.7	814.3	811.3
742	828.1	827	823.5	787	817.8	817.5	814.7
743	831.1	830.1	826.4	788	820.8	820.6	818
744	833.9	833.1	829.1	789	823.8	823.7	821.2
745	836.7	836	831.8	790	826.6	826.6	824.3
746	839.5	838.9	834.4	791	829.4	829.5	827.3
747	842.1	841.7	837	792	832.1	832.3	830.2
748	844.7	844.5	839.5	793	834.5	835.1	833
749	847.2	847.2	842	794	789.7	789.4	784.8
750	849.7	849.8	844.4	795	790.4	790.2	785.7
751	852.1	852.3	846.7	796	793.7	793.4	789.4
752	811.4	810.5	807.1	797	797.5	797.2	793.7
753	812.1	811.2	807.8	798	801.2	800.8	797.7
754	814.7	814	810.6	799	804.7	804.3	801.6
755	818.3	817.5	813.9	800	808.1	807.7	805.4
756	821.5	820.8	817.1	801	811.4	810.9	809
757	824.6	824	820.2	802	814.6	814.1	812.5
758	827.6	827.1	823.2	803	817.5	817.2	815.9
759	830.5	830.1	826.1	804	820.6	820.2	819.2
760	833.3	833	829	805	823.4	823.2	822.4
761	836	835.9	831.7	806	826.2	826.1	825.4
762	838.7	838.7	834.4	807	828.7	828.9	828.4
763	841.3	841.5	837.1	808	782.1	781.8	777.3
764	843.8	844.2	839.6	809	782.9	782.6	778.2
765	846.1	846.8	842.1	810	786.3	786	782.2

ادامه جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
811	790.4	790	786.9	856	816.6	817.4	815.8
812	794.2	793.7	791.3	857	819.3	819.8	818.9
813	797.9	797.3	795.4	858	820.7	821.1	820.6
814	801.4	800.8	799.4	859	789.6	785.1	712.6
815	804.8	804.1	803.3	860	790.5	786.1	714.4
816	808.1	807.4	807	861	791.3	787.1	716
817	811.3	810.5	810.6	862	792.1	788	717.5
818	814.3	813.6	814.1	863	793	788.9	718.9
819	817.3	816.7	817.4	864	793.8	789.9	720.3
820	820.2	819.7	820.7	865	794.6	790.8	721.5
821	822.8	822.6	823.8	866	795.5	791.7	722.8
822	774.2	774	769.8	867	796.3	792.6	723.9
823	775.1	774.8	770.8	868	797.1	793.4	725
824	778.7	778.4	775.1	869	797.9	794.3	726.1
825	783	782.5	780.1	870	798.6	795.1	727.1
826	787.1	786.4	784.8	871	799.4	796	728.1
827	790.9	790.1	789.2	872	800.2	796.8	729.1
828	794.6	793.6	793.5	873	801	797.7	730
829	798.2	797.1	797.6	874	801.7	798.5	730.9
830	801.5	800.4	801.5	875	802.4	799.3	731.8
831	804.9	803.7	805.3	876	803.2	800.1	732.7
832	808.1	806.8	809	877	803.9	800.9	733.5
833	811.1	810	812.5	878	804.6	801.6	734.4
834	814.1	813	815.9	879	805.3	802.5	735.3
835	816.9	816	819.2	880	806	803.2	736
836	812.9	828.1	809.9	881	806.7	804	736.9
837	813.8	815.2	810.8	882	807.5	804.8	737.7
838	814.4	815.9	811.5	883	808.2	805.5	738.5
839	815.6	816.9	812.6	884	780.7	775.8	700.2
840	816.4	817.8	813.6	885	781.6	776.9	702.1
841	819.4	820.6	816.8	886	782.5	777.9	704
842	826.9	827.7	825.2	887	783.5	779	705.7
843	829.8	830.3	828.3	888	784.3	779.9	707.3
844	829.9	830.4	828.4	889	785.2	780.9	708.8
845	832.8	833.1	831.7	890	786	781.9	710.2
846	834.7	834.8	833.8	891	786.9	782.8	711.6
847	836.1	836	835.3	892	787.8	783.8	712.9
848	795.2	797.3	790.8	893	788.7	784.7	714.1
849	795.8	797.8	791.4	894	789.5	785.7	715.3
850	799.2	801	795.2	895	790.3	786.5	716.4
851	802.5	804	799.1	896	791.2	787.5	717.5
852	805.6	807	802.7	897	792	788.3	718.5
853	809.4	810.6	807.3	898	792.8	789.2	719.6
854	813.2	814.2	811.7	899	793.6	790.1	720.6
855	813.8	814.7	812.4	900	794.3	790.9	721.5

ادامہ جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
901	795.2	791.8	722.5	946	773.7	770.3	696.2
902	795.9	792.6	723.4	947	774.6	771.3	697.5
903	796.6	793.4	724.3	948	775.5	772.2	698.7
904	797.4	794.2	725.3	949	776.4	773.2	699.9
905	798.2	795	726.1	950	777.3	774.1	701.1
906	798.9	795.8	727	951	778.1	775.1	702.2
907	799.7	796.7	727.9	952	778.9	776	703.2
908	800.4	797.4	728.7	953	779.8	776.9	704.3
909	771.4	766.6	687.6	954	780.6	777.8	705.3
910	772.4	767.7	689.9	955	781.4	778.7	706.4
911	773.3	768.8	691.9	956	782.2	779.5	707.4
912	774.3	769.9	693.8	957	783	780.4	708.3
913	775.3	771	695.7	958	783.8	781.3	709.3
914	776.2	772.1	697.4	959	751.6	747.7	661.5
915	777.1	773	698.9	960	752.7	749	664.4
916	778.1	774.1	700.4	961	753.9	750.3	667.1
917	779	775.1	701.9	962	755	751.5	669.5
918	779.9	776	703.2	963	756.2	752.8	671.8
919	780.8	777	704.5	964	757.3	754	673.9
920	781.7	777.9	705.7	965	758.3	755.1	675.9
921	782.6	778.9	706.9	966	759.4	756.2	677.7
922	783.4	779.8	708	967	760.5	757.4	679.4
923	784.3	780.7	709.2	968	761.5	758.5	681.1
924	785.1	781.6	710.3	969	762.5	759.5	682.6
925	785.9	782.5	711.3	970	763.5	760.6	684.1
926	786.8	783.5	712.4	971	764.5	761.6	685.6
927	787.6	784.3	713.4	972	765.5	762.6	686.9
928	788.4	785.2	714.3	973	766.5	763.7	688.2
929	789.2	786	715.3	974	767.5	764.6	689.5
930	790	786.9	716.3	975	768.4	765.7	690.8
931	790.8	787.7	717.2	976	769.4	766.6	692
932	791.6	788.6	718.1	977	770.3	767.6	693.1
933	792.4	789.4	719	978	771.2	768.5	694.3
934	761.8	757.2	674.7	979	772.1	769.4	695.4
935	763	758.5	677.4	980	773	770.3	696.4
936	763.9	759.6	679.6	981	773.9	771.3	697.5
937	765	760.8	681.8	982	774.8	772.2	698.6
938	766	761.9	683.8	983	775.6	773.1	699.6
939	767	763	685.6	984	740.1	738.1	647.8
940	768	764.1	687.5	985	741.4	739.4	651
941	769	765.2	689.1	986	742.7	740.8	654.1
942	770	766.2	690.7	987	743.9	742.1	656.8
943	771	767.3	692.2	988	745.1	743.5	659.5
944	771.9	768.3	693.6	989	746.3	744.7	661.9
945	772.8	769.3	694.9	990	747.5	745.9	664

ادامه جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
991	748.7	747.1	666.1	1036	853.9	822.9	859
992	749.8	748.3	668.1	1037	858.7	826.4	863.9
993	751	749.5	669.9	1038	863.2	829.5	868.5
994	752	750.6	671.5	1039	867.5	832.3	872.8
995	753.1	751.7	673.2	1040	871.6	834.8	877
996	754.2	752.8	674.7	1041	875.6	837	880.9
997	755.2	753.9	676.2	1042	821.6	795.2	826.9
998	756.3	754.9	677.7	1043	828.3	801.1	833.4
999	757.3	756	679	1044	834.5	806.3	839.4
1000	758.4	757	680.4	1045	840.3	811.1	845.2
1001	759.4	758	681.7	1046	845.7	815.5	850.8
1002	760.3	759	682.9	1047	850.8	819.5	856
1003	761.3	760	684.1	1048	855.7	823.1	861
1004	762.3	760.9	685.3	1049	860.3	826.3	865.8
1005	763.2	761.9	686.5	1050	864.7	829.3	870.3
1006	764.2	762.8	687.6	1051	868.9	831.8	874.5
1007	765.1	763.8	688.7	1052	872.9	834.1	878.6
1008	766.1	764.7	689.9	1053	817.9	791.1	822.7
1009	832.6	807.6	839.6	1054	824.7	797.1	829.5
1010	838.8	812.9	845	1055	831.1	802.5	835.8
1011	844.7	817.7	850.3	1056	837	807.4	841.9
1012	850.1	822.1	855.4	1057	842.5	811.9	847.6
1013	855.2	826.1	860.3	1058	847.7	816	853
1014	860	829.7	865	1059	852.7	819.8	858.2
1015	864.6	833	869.5	1060	857.4	823.1	863.1
1016	869	835.9	873.9	1061	861.8	826.2	867.7
1017	873.2	838.5	878	1062	866.1	828.9	872.1
1018	877.2	840.8	881.9	1063	870.2	831.2	876.2
1019	881.1	842.7	885.6	1064	814.1	786.9	818.5
1020	829	803.5	835.4	1065	821.1	793.1	825.6
1021	835.4	809	841.2	1066	827.7	798.6	832.2
1022	841.3	813.9	846.7	1067	833.7	803.7	838.5
1023	846.8	818.5	852	1068	839.4	808.3	844.4
1024	852	822.6	857.1	1069	844.7	812.6	850
1025	857	826.3	862	1070	849.7	816.4	855.4
1026	861.6	829.7	866.7	1071	854.4	820	860.4
1027	866.1	832.7	871.2	1072	858.9	823.1	865.1
1028	870.3	835.4	875.4	1073	863.3	825.9	869.6
1029	874.4	837.8	879.4	1074	867.4	828.4	873.8
1030	878.3	839.8	883.3	1075	1003.5	1003.1	1052.7
1031	825.3	799.4	831.2	1076	1008.1	1008.3	1059.2
1032	831.8	805	837.3	1077	1012.6	1013.1	1064.7
1033	837.9	810.1	843.1	1078	1016.8	1017.7	1069.6
1034	843.6	814.8	848.6	1079	1020.9	1022	1074.2
1035	848.9	819	854	1080	1024.8	1026	1078.5

ادامہ جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
1081	1028.6	1029.7	1082.5	1126	1020.9	1020.1	1072.3
1082	1032.3	1033.2	1086.2	1127	1024.6	1023.5	1076.1
1083	1035.8	1036.5	1089.6	1128	1028.3	1026.6	1079.7
1084	1039.3	1039.5	1092.8	1129	1031.8	1029.6	1083
1085	1042.7	1042.4	1095.7	1130	986.7	984.7	1027.6
1086	1000.2	999.5	1047.7	1131	991.7	990.3	1036.1
1087	1004.9	1004.7	1054.6	1132	996.6	995.5	1043
1088	1009.4	1009.7	1060.3	1133	1001.2	1000.3	1049.1
1089	1013.7	1014.3	1065.5	1134	1005.6	1004.9	1054.6
1090	1017.9	1018.6	1070.3	1135	1009.9	1009.1	1059.8
1091	1021.9	1022.6	1074.8	1136	1014	1013.1	1064.5
1092	1025.7	1026.4	1078.9	1137	1017.9	1016.7	1068.8
1093	1029.5	1029.9	1082.7	1138	1021.8	1020.2	1072.8
1094	1033.1	1033.3	1086.2	1139	1025.5	1023.4	1076.4
1095	1036.6	1036.3	1089.5	1140	1029.1	1026.3	1079.8
1096	1040	1039.2	1092.5	1141	938.3	939.5	926.3
1097	996.9	995.8	1042.7	1142	938.4	939.6	926.4
1098	1001.7	1001.2	1050	1143	938.6	939.8	926.6
1099	1006.3	1006.2	1056	1144	939	940.2	927
1100	1010.7	1010.8	1061.4	1145	939.8	941	927.8
1101	1014.9	1015.2	1066.4	1146	942.1	943.3	930
1102	1018.9	1019.3	1071	1147	946	947.1	933.7
1103	1022.9	1023.1	1075.3	1148	949.8	950.8	937.2
1104	1026.6	1026.7	1079.2	1149	954	954.4	940.7
1105	1030.3	1030	1082.9	1150	958.4	958	944.1
1106	1033.8	1033.1	1086.2	1151	933.9	934.1	922.2
1107	1037.3	1036	1089.3	1152	934	934.2	922.3
1108	993.5	992.1	1037.7	1153	934.2	934.4	922.5
1109	998.4	997.6	1045.4	1154	934.6	934.9	922.9
1110	1003.1	1002.6	1051.7	1155	935.5	935.7	923.7
1111	1007.5	1007.4	1057.3	1156	937.8	938.1	926.1
1112	1011.8	1011.8	1062.5	1157	941.8	942	929.9
1113	1016	1015.9	1067.2	1158	945.8	945.8	933.5
1114	1019.9	1019.8	1071.7	1159	950	949.5	937.1
1115	1023.8	1023.4	1075.7	1160	954.5	953.2	940.6
1116	1027.5	1026.8	1079.5	1161	929.4	928.8	918.1
1117	1031.1	1029.9	1083	1162	929.5	928.9	918.2
1118	1034.6	1032.8	1086.2	1163	929.7	929.1	918.4
1119	990.1	988.5	1032.7	1164	930.1	929.6	918.9
1120	995.1	993.9	1040.8	1165	931	930.4	919.7
1121	999.8	999.1	1047.3	1166	933.5	933	922.1
1122	1004.4	1003.9	1053.2	1167	937.5	937.1	926
1123	1008.8	1008.3	1058.6	1168	941.6	941	929.8
1124	1012.9	1012.5	1063.5	1169	945.9	944.7	933.5
1125	1017	1016.4	1068.1	1170	950.5	948.4	937.1

ادامه جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
1171	924.7	923.5	914	1216	862.3	863.4	849.5
1172	924.9	923.6	914.1	1217	848.4	846.9	834.2
1173	925.1	923.9	914.4	1218	849.1	847.9	835
1174	925.6	924.4	914.8	1219	850.7	850	837
1175	926.5	925.3	915.7	1220	852.2	852.2	838.9
1176	929	927.9	918.2	1221	854	854.8	841.2
1177	933.2	932.1	922.2	1222	855.2	856.3	842.6
1178	937.3	936.1	926.1	1223	844.8	843.2	830.5
1179	941.8	940	929.9	1224	845.5	844.2	831.4
1180	946.5	943.7	933.6	1225	847.2	846.4	833.4
1181	920.2	918.3	909.9	1226	848.8	848.5	835.3
1182	920.3	918.4	910	1227	850.6	851.1	837.7
1183	920.6	918.7	910.3	1228	851.7	852.7	839.2
1184	921	919.2	910.7	1229	841.2	839.5	826.8
1185	922	920.2	911.6	1230	841.9	840.5	827.8
1186	924.6	922.9	914.2	1231	843.5	842.7	829.8
1187	928.9	927.3	918.4	1232	845.1	844.8	831.8
1188	933.1	931.4	922.4	1233	847.1	847.5	834.3
1189	937.7	935.3	926.3	1234	848.3	849	835.7
1190	942.4	939	930.1	1235	837.3	835.7	823.2
1191	915.7	913.2	905.8	1236	838.1	836.7	824.1
1192	915.8	913.3	905.9	1237	839.8	839	826.2
1193	916	913.6	906.2	1238	841.5	841.1	828.2
1194	916.5	914.1	906.7	1239	843.5	843.8	830.8
1195	917.4	915.1	907.6	1240	844.6	845.3	832.3
1196	920.1	918	910.3	1241	833.5	831.9	819.5
1197	924.5	922.5	914.6	1242	834.3	832.9	820.5
1198	928.9	926.6	918.7	1243	836	835.2	822.6
1199	933.6	930.6	922.7	1244	837.6	837.4	824.7
1200	938.5	934.3	926.6	1245	839.7	840.1	827.3
1201	911.1	908.2	901.7	1246	841	841.6	828.8
1202	911.2	908.3	901.8	1247	765.1	768.8	765.7
1203	911.4	908.6	902.1	1248	771.5	775.7	772.6
1204	911.9	909.1	902.6	1249	777.6	781.5	778.7
1205	912.9	910.2	903.6	1250	783.4	786.7	784.4
1206	915.6	913.1	906.3	1251	788.8	791.5	789.8
1207	920.2	917.7	910.8	1252	793.8	796.2	794.9
1208	924.7	921.9	915	1253	798.8	800.7	799.9
1209	929.5	925.9	919.1	1254	803.3	805.2	804.6
1210	934.4	929.7	923.1	1255	807.7	809.5	809
1211	855.7	854.2	841.5	1256	811.9	813.7	813.3
1212	856.4	855.1	842.3	1257	815.9	817.8	817.3
1213	857.9	857.3	844.1	1258	819.8	821.8	821.1
1214	859.4	859.3	845.9	1259	823.5	825.5	824.8
1215	861.2	861.9	848.2	1260	827.1	829.1	828.2

ادامہ جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
1261	830.5	832.5	831.5	1306	813.5	815.9	818.4
1262	756.2	759.3	756.8	1307	730.2	731.4	729.7
1263	763.5	767	764.5	1308	738.7	741.7	740
1264	770.2	773.3	771.1	1309	746.3	749.7	748.4
1265	776.3	778.9	777.3	1310	753.4	756.6	756.1
1266	781.9	784.1	783.1	1311	759.9	762.8	763.2
1267	787.2	789	788.7	1312	765.9	768.6	769.9
1268	792.2	793.8	794	1313	771.6	774	776.2
1269	796.9	798.5	798.9	1314	776.9	779.1	782
1270	801.5	803	803.7	1315	781.9	783.9	787.5
1271	805.8	807.3	808.1	1316	786.7	788.5	792.7
1272	810	811.5	812.3	1317	791.2	793	797.5
1273	814	815.5	816.3	1318	795.7	797.4	802
1274	817.9	819.4	820.1	1319	799.9	801.8	806.3
1275	821.6	823.1	823.7	1320	803.8	806.3	810.3
1276	825.1	826.7	827.2	1321	807.6	811	814
1277	748.2	750	747.8	1322	721.3	722.1	720.5
1278	755.4	758.4	756.3	1323	730.6	733.4	731.8
1279	762.3	765.3	763.6	1324	738.8	742.1	740.9
1280	768.6	771.3	770.2	1325	746.4	749.4	749
1281	774.6	776.8	776.5	1326	753.2	755.9	756.6
1282	780.2	782.1	782.4	1327	759.6	761.9	763.7
1283	785.3	787.1	788	1328	765.6	767.5	770.2
1284	790.3	791.9	793.3	1329	771	772.7	776.4
1285	794.9	796.5	798.3	1330	776.2	777.7	782.1
1286	799.4	801	803	1331	781.1	782.4	787.5
1287	803.7	805.3	807.4	1332	785.9	787	792.5
1288	807.8	809.4	811.6	1333	790.3	791.6	797.2
1289	811.7	813.3	815.5	1334	794.6	796.3	801.6
1290	815.5	817.3	819.2	1335	798.8	801.3	805.8
1291	819.1	821.2	822.8	1336	802.7	806.5	809.6
1292	738.9	740.7	738.8	1337	712.4	712.6	711.3
1293	746.9	750	748.1	1338	722.3	725.1	723.5
1294	754.2	757.4	756	1339	731.1	734.5	733.3
1295	761	763.9	763.2	1340	739	742.3	742
1296	767.2	769.8	769.9	1341	746	749.1	750
1297	772.9	775.3	776.2	1342	752.5	755.3	757.4
1298	778.4	780.5	782.1	1343	759	761	764.3
1299	783.5	785.4	787.7	1344	764.6	766.4	770.8
1300	788.4	790.2	792.9	1345	770	771.4	776.8
1301	792.9	794.7	797.8	1346	775.1	776.3	782.4
1302	797.3	799.1	802.4	1347	780	781.1	787.6
1303	801.7	803.3	806.8	1348	784.6	786	792.4
1304	805.8	807.5	810.9	1349	789.1	791.1	797
1305	809.7	811.6	814.7	1350	793.2	796.6	801.3

ادامه جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
1351	797.3	802.4	805.3	1396	780.1	764	784.7
1352	747.8	730.1	765.1	1397	784.4	767.8	787.5
1353	762.5	744.6	780.9	1398	788.4	771.3	790.3
1354	774.8	757.2	793.4	1399	792.2	774.5	793
1355	785.5	770	804.6	1400	767.9	752.7	773.7
1356	795.1	782.8	814.9	1401	772.1	756.4	776.5
1357	803.8	794.3	824.3	1402	776.6	760.4	779.7
1358	729.3	711.4	744	1403	780.6	763.8	782.7
1359	745.7	728.8	763.5	1404	784.6	766.9	785.7
1360	759.4	743.2	777.9	1405	759.9	744.6	765.2
1361	771.2	757.1	790.7	1406	764	748.3	768.2
1362	781.6	770.1	802.2	1407	768.5	752.1	771.4
1363	790.9	781.1	812.4	1408	772.6	755.4	774.6
1364	709.9	692.5	722.5	1409	776.7	758.6	777.7
1365	729	713.2	746.1	1410	751.4	736.2	756.7
1366	744.3	729.3	762.5	1411	755.8	740.1	759.9
1367	757.1	743.9	776.8	1412	760.6	744	763.6
1368	768.5	757	789.4	1413	765.1	747.5	767
1369	778.4	767.8	800.5	1414	769.3	750.7	770.3
1370	712	697.5	728.6	1415	743.1	727.3	748.1
1371	729	715.2	747.1	1416	747.7	731.5	751.7
1372	743	730.4	762.9	1417	752.9	735.7	755.6
1373	755.2	743.6	776.7	1418	757.6	739.4	759.4
1374	765.9	754.7	788.7	1419	761.9	742.7	763
1375	809.8	785.8	816	1420	734.5	718.1	739.6
1376	812.7	789.6	817.4	1421	739.4	722.6	743.5
1377	816.3	793.9	819	1422	744.9	727.1	747.7
1378	819.5	797.9	820.6	1423	749.9	731.1	751.8
1379	822.6	801.6	822.2	1424	754.5	734.6	755.6
1380	801.3	780.1	807.6	1425	725.9	708.5	731
1381	804.5	783.7	809.1	1426	731.4	713.7	735.4
1382	807.7	787.6	810.9	1427	737.1	718.5	739.9
1383	811.1	791.2	812.7	1428	742.5	722.8	744.2
1384	814.1	794.5	814.4	1429	747.4	726.6	748.3
1385	739.1	774	739.1	1430	717.1	698.6	722.4
1386	796.5	777.6	801	1431	722.9	704.2	727
1387	800.2	781.5	803.2	1432	729.1	709.6	731.9
1388	803.6	785.2	805.3	1433	734.8	714.3	736.5
1389	807.1	788.5	807.4	1434	740	718.5	740.9
1390	784.5	767.3	790.6	1435	708.2	688.4	713.7
1391	788.3	771.1	792.9	1436	714.4	694.7	718.7
1392	792.3	775	795.4	1437	721.2	700.9	724.1
1393	796.1	778.5	797.9	1438	727.7	706.5	729.5
1394	799.7	781.7	800.3	1439	734	711.6	734.8
1395	776.3	760.2	782.2	1440	699.1	677.8	705

ادامہ جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
1441	706.4	685.5	710.8	1486	859.2	867.2	752.7
1442	713.7	692.4	716.6	1487	859.8	867.8	753.5
1443	720.4	698.4	722.2	1488	860.9	869	755
1444	726.1	703.2	727	1489	862	870.1	756.4
1445	885.4	906.2	793.6	1490	862.9	871.2	757.8
1446	885.6	906.9	794	1491	864	872.2	759.1
1447	885.7	907.8	794.5	1492	864.9	873.2	760.4
1448	886.6	909.6	795.5	1493	865.9	874.2	761.6
1449	887.4	911.2	796.5	1494	866.8	875.1	762.8
1450	888.3	912.8	797.5	1495	895.1	885.4	866.9
1451	889	914.3	798.4	1496	895.7	885.8	867.5
1452	889.8	915.7	799.3	1497	896.7	886.4	868.5
1453	890.6	917	800.2	1498	898.5	887.4	870.1
1454	891.4	918.3	801.1	1499	900.1	888.4	871.6
1455	878.5	897.8	783.3	1500	901.8	889.3	873.1
1456	878.9	898.4	783.8	1501	905	891	876.1
1457	879.5	899.2	784.4	1502	908.1	892.6	879
1458	880.1	900.8	785.5	1503	911.1	894	881.8
1459	881	902.3	786.6	1504	886	876.1	857.5
1460	881.8	903.7	787.6	1505	886.6	876.5	858.2
1461	882.7	905	788.6	1506	887.7	877.1	859.2
1462	883.3	906.2	789.6	1507	889.6	878.2	861
1463	884.3	907.4	790.6	1508	891.3	879.1	862.6
1464	885.1	908.6	791.5	1509	893.1	880.1	864.3
1465	871.2	888.2	773	1510	896.5	881.9	867.5
1466	871.5	888.8	773.5	1511	899.8	883.5	870.7
1467	872	889.5	774.1	1512	902.9	885.1	873.7
1468	873	890.9	775.4	1513	876.4	866.7	848.1
1469	874	892.3	776.6	1514	877.2	867.1	848.8
1470	874.9	893.5	777.7	1515	878.4	867.7	850
1471	875.7	894.7	778.8	1516	880.3	868.8	851.9
1472	876.6	895.8	779.9	1517	882.2	869.8	853.7
1473	877.4	896.9	781	1518	884	870.8	855.5
1474	878.2	898	782	1519	887.6	872.7	859
1475	864	877.8	762.6	1520	891.1	874.5	862.4
1476	864.4	878.3	763.1	1521	894.4	876.1	865.6
1477	864.9	879	763.8	1522	866.9	857.2	838.7
1478	866	880.3	765.2	1523	867.6	857.6	839.5
1479	866.9	881.5	766.5	1524	868.9	858.3	840.7
1480	867.9	882.6	767.8	1525	871	859.4	842.8
1481	868.9	883.7	769	1526	873	860.5	844.8
1482	869.8	884.8	770.2	1527	875	861.5	846.7
1483	870.7	885.8	771.3	1528	878.8	863.5	850.4
1484	871.6	886.8	772.4	1529	882.4	865.4	854.1
1485	858.7	866.8	752	1530	885.9	867.2	857.6

ادامه جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
1531	857.2	847.6	829.3	1576	946.3	943.6	1019.5
1532	858	848	830.1	1577	956	954.3	1027.1
1533	859.3	848.8	831.5	1578	966.9	966.4	1035.5
1534	861.4	850	833.7	1579	977	977.1	1043.1
1535	863.5	851.1	835.8	1580	986.5	986.8	1050.1
1536	865.6	852.2	837.9	1581	994.9	995.3	1056.4
1537	869.6	854.3	841.9	1582	1003.3	1003.5	1062.6
1538	873.5	856.3	845.8	1583	1010.8	1010.8	1068.2
1539	877.2	858.1	849.5	1584	1018.2	1017.9	1073.7
1540	847.1	838	819.8	1585	1025.1	1024.7	1079
1541	847.9	838.5	820.7	1586	1031.2	1031	1083.8
1542	849.3	839.2	822.2	1587	1034.4	1034.7	1086.5
1543	851.7	840.5	824.6	1588	888.3	887	973.5
1544	853.9	841.7	826.9	1589	890.4	888.8	975
1545	856.1	842.9	829.1	1590	894.3	892.4	978.1
1546	860.3	845.1	833.4	1591	898.2	895.9	981
1547	864.3	847.1	837.5	1592	902	899.2	983.9
1548	868.1	849.1	841.5	1593	905	901.9	986.3
1549	837.5	828.4	810.4	1594	908.3	905	988.9
1550	838.4	828.9	811.4	1595	915.2	911.6	994.4
1551	840	829.7	813	1596	927.6	924.4	1004.4
1552	842.4	831	815.5	1597	938.1	935.9	1012.9
1553	844.9	832.3	818	1598	947.9	946.9	1020.7
1554	847.2	833.5	820.4	1599	959.4	959.4	1029.7
1555	851.8	835.8	824.9	1600	969.7	970.2	1037.4
1556	856	837.9	829.3	1601	979.3	979.9	1044.4
1557	860.1	839.9	833.4	1602	988.4	988.8	1051
1558	827.3	818.7	800.9	1603	996.7	996.9	1057
1559	828.3	819.3	802	1604	1004.7	1004.6	1062.9
1560	829.9	820.1	803.7	1605	1012	1011.8	1068.4
1561	832.6	821.5	806.4	1606	1019.3	1019.1	1074
1562	835.2	822.8	809.1	1607	1025.7	1025.5	1078.8
1563	837.7	824.1	811.6	1608	1032.6	1033	1084.3
1564	842.5	826.4	816.4	1609	1038.3	1039.8	1089.1
1565	847	828.6	821	1610	878.3	877.2	964.7
1566	851.3	830.7	825.4	1611	880.4	879.2	966.4
1567	898.4	896.4	982.2	1612	884.3	882.8	969.5
1568	900.3	898.2	983.6	1613	888.5	886.5	972.8
1569	903.7	901.3	986.1	1614	892.7	890.3	976
1570	907.8	905	989.3	1615	896.3	893.6	978.9
1571	911.4	908.2	991.9	1616	900.7	897.7	982.5
1572	914.5	911	994.3	1617	906.8	903.6	987.4
1573	917.5	913.8	996.7	1618	919	916.4	997.4
1574	924.5	920.5	1002.2	1619	930	928.4	1006.3
1575	935.9	932.1	1011.2	1620	940.9	940.5	1015.1

ادامہ جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
1621	952.5	953	1024.1	1666	947.1	947.8	1018.6
1622	963.3	963.9	1032.2	1667	957.8	958	1026.2
1623	973	973.7	1039.3	1668	967.2	967.2	1033
1624	982.2	982.6	1045.8	1669	976.1	975.8	1039.2
1625	990.6	990.8	1051.9	1670	984.7	984	1045.2
1626	998.7	998.6	1057.7	1671	992.7	991.7	1050.7
1627	1006	1005.8	1063.2	1672	1000.4	999.2	1056.1
1628	1013.6	1013.2	1068.8	1673	1008	1006.7	1061.7
1629	1020.8	1020.5	1074.2	1674	1014.5	1013.5	1066.6
1630	1027.3	1027.5	1079.3	1675	1020.4	1019.9	1071.2
1631	1036.2	1037.9	1086.7	1676	837.1	835.9	929.8
1632	863	862.1	951.6	1677	839.9	838.6	932
1633	865.3	864.4	953.5	1678	845	843.7	936.1
1634	869.8	868.5	957	1679	850.8	849.2	940.7
1635	874.2	872.5	960.5	1680	855.5	853.7	944.4
1636	878.5	876.5	964	1681	859.5	857.7	947.7
1637	882.5	880.2	967.2	1682	862.6	860.8	950.2
1638	886.9	884.5	970.8	1683	873	871.5	958.9
1639	894	891.6	976.7	1684	887.3	887	971
1640	907.2	905.5	987.6	1685	900	900.7	981.6
1641	919	918.5	997.3	1686	912.1	913.4	991.4
1642	929.8	930.2	1006.1	1687	924.6	925.9	1001.1
1643	942	942.8	1015.5	1688	937.1	937.9	1010.3
1644	953.1	954	1023.8	1689	947.7	948	1018
1645	963.4	963.8	1031.2	1690	957.7	957.5	1025
1646	973	973.1	1038	1691	967.1	966.5	1031.4
1647	981.9	981.7	1044.2	1692	976	975.1	1037.5
1648	990.3	989.9	1050.2	1693	984.3	983.2	1043.2
1649	998.1	997.6	1055.9	1694	992	990.8	1048.6
1650	1005.6	1005	1061.3	1695	999.8	998.4	1054.1
1651	1013.1	1012.3	1066.8	1696	1006.4	1005.2	1059
1652	1020.2	1019.5	1072.1	1697	1012.3	1011.3	1063.4
1653	1029.9	1030.8	1080	1698	870.7	870.5	799.6
1654	852.8	851.8	942.9	1699	871.5	871.1	800.3
1655	855.4	854.2	944.9	1700	872.4	871.9	801.1
1656	860	858.5	948.5	1701	873	872.5	801.7
1657	865.1	863.2	952.6	1702	873.2	872.6	801.9
1658	869.4	867.3	956	1703	875.1	874.1	803.4
1659	873.4	871.2	959.3	1704	879.4	877.5	807.2
1660	877.6	875.2	962.7	1705	883.4	880.9	810.9
1661	885.3	883.2	969.3	1706	887.3	884.1	814.5
1662	899.6	898.6	981.3	1707	891	887.3	818
1663	911.7	912	991.5	1708	894.6	890.5	821.4
1664	922.7	923.6	1000.2	1709	898.1	893.6	824.8
1665	935.7	936.7	1010.2	1710	865.5	865.9	794.5

ادامه جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
1711	866.4	866.6	795.2	1756	876.3	874.9	804.1
1712	867.4	867.4	796	1757	880.1	878.5	807.9
1713	868.1	868	796.7	1758	844.4	847	774.1
1714	868.3	868.1	796.9	1759	845.3	847.8	774.9
1715	870.1	869.6	798.5	1760	846.4	848.7	775.9
1716	874.5	873.2	802.4	1761	847.2	849.4	776.6
1717	878.7	876.6	806.2	1762	847.4	849.6	776.8
1718	882.6	880	809.9	1763	849.4	851.4	778.7
1719	886.5	883.3	813.6	1764	854.3	855.6	783.2
1720	890.2	886.6	817.1	1765	859	859.6	787.5
1721	893.8	889.8	820.6	1766	863.4	863.5	791.7
1722	860.3	861.3	789.4	1767	867.6	867.3	795.8
1723	861.2	862	790.2	1768	871.7	871	799.8
1724	862.1	862.8	791	1769	875.5	874.7	803.7
1725	862.9	863.4	791.7	1770	839.1	842.2	769
1726	863.1	863.6	791.9	1771	840	843	769.9
1727	865	865.1	793.5	1772	841.1	844	770.9
1728	869.5	868.8	797.6	1773	842	844.7	771.6
1729	873.8	872.4	801.5	1774	842.3	844.9	771.8
1730	877.8	875.9	805.4	1775	844.4	846.7	773.7
1731	881.8	879.3	809.1	1776	849.4	851.1	778.4
1732	885.6	882.7	812.8	1777	854.2	855.3	782.9
1733	889.2	886	816.4	1778	858.7	859.3	787.2
1734	855	856.6	784.3	1779	863	863.3	791.4
1735	855.9	857.3	785.1	1780	867.1	867.1	795.5
1736	856.9	858.2	786	1781	871.1	870.9	799.5
1737	857.7	858.8	786.7	1782	833.7	837.3	763.9
1738	857.9	859	786.8	1783	834.7	838.2	764.8
1739	859.9	860.6	788.6	1784	836	839.2	765.8
1740	864.5	864.4	792.8	1785	836.9	839.9	766.6
1741	868.9	868.1	796.9	1786	837.1	840.1	766.8
1742	873	871.7	800.8	1787	839.3	842	768.8
1743	877	875.3	804.7	1788	844.5	846.6	773.6
1744	880.9	878.8	808.5	1789	849.5	851	778.2
1745	884.6	882.2	812.1	1790	854.1	855.2	782.7
1746	849.8	851.8	779.2	1791	858.6	859.3	787
1747	850.6	852.6	780	1792	862.9	863.3	791.2
1748	851.7	853.5	780.9	1793	867	867.2	795.3
1749	852.4	854.1	781.6	1794	828.4	832.3	758.8
1750	852.7	854.3	781.8	1795	829.5	833.3	759.7
1751	854.6	856	783.6	1796	830.7	834.3	760.8
1752	859.4	860	788	1797	831.5	835.1	761.6
1753	863.9	863.9	792.2	1798	831.8	835.3	761.8
1754	868.2	867.6	796.3	1799	834	837.3	763.9
1755	872.3	871.3	800.3	1800	839.4	842.1	768.8

ادامہ جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
1801	844.5	846.6	773.5	1846	805.5	810.8	736.8
1802	849.3	851	778.1	1847	808.1	813.3	739.2
1803	853.9	855.2	782.6	1848	814.6	819.2	744.9
1804	858.2	859.4	786.9	1849	820.5	824.7	750.3
1805	862.4	863.4	791.1	1850	826	829.9	755.5
1806	823	827.3	753.7	1851	831.2	834.8	760.5
1807	824.1	828.3	754.7	1852	836	839.6	765.3
1808	825.3	829.4	755.7	1853	840.8	844.2	770
1809	826.2	830.3	756.6	1854	790.7	796.7	723
1810	826.5	830.5	756.8	1855	792	798	724.2
1811	828.8	832.6	758.9	1856	793.5	799.5	725.5
1812	834.4	837.6	764	1857	794.7	800.6	726.5
1813	839.6	842.3	768.9	1858	795	800.9	726.8
1814	844.5	846.8	773.6	1859	797.9	803.6	729.3
1815	849.2	851.2	778.1	1860	804.8	809.9	735.3
1816	853.7	855.5	782.6	1861	810.9	815.7	741
1817	858	859.6	786.8	1862	816.7	821.2	746.4
1818	817.7	822.3	748.6	1863	822.2	826.4	751.7
1819	818.7	823.4	749.6	1864	827.3	831.5	756.8
1820	820	824.5	750.7	1865	832.3	836.3	761.6
1821	821	825.4	751.6	1866	779.9	786.3	712.7
1822	821.3	825.6	751.8	1867	781.3	787.7	714
1823	823.7	827.8	754	1868	783	789.3	715.4
1824	829.4	833	759.2	1869	784.2	790.4	716.4
1825	834.8	837.9	764.2	1870	784.5	790.8	716.7
1826	839.9	842.6	769.1	1871	787.6	793.7	719.4
1827	844.7	847.1	773.7	1872	795	800.4	725.7
1828	849.3	851.5	778.3	1873	801.5	806.6	731.7
1829	853.6	855.8	782.6	1874	807.6	812.4	737.4
1830	812.2	817.3	743.5	1875	813.4	817.9	742.9
1831	813.3	818.4	744.5	1876	818.9	823.1	748.2
1832	814.6	819.6	745.7	1877	824	828.1	753.3
1833	815.6	820.5	746.6	1878	769	775.8	702.4
1834	815.9	820.7	746.8	1879	770.5	777.3	703.8
1835	818.4	823	749	1880	772.3	779	705.3
1836	824.3	828.4	754.4	1881	773.6	780.3	706.4
1837	829.9	833.5	759.6	1882	774.1	780.6	706.7
1838	835.1	838.4	764.5	1883	777.4	783.7	709.5
1839	840	843.1	769.3	1884	785.1	790.9	716.2
1840	844.7	847.6	773.9	1885	791.6	797.4	722.4
1841	849.1	852	778.4	1886	797.7	803.4	728.4
1842	801.2	807	733.2	1887	803.5	809.1	734.1
1843	802.5	808.3	734.4	1888	809	814.5	739.6
1844	803.9	809.6	735.6	1889	814	819.7	744.9
1845	805	810.6	736.5	1890	830.7	824.9	844.1

ادامه جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN	شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
1891	832.5	826.9	846.2	1936	844.4	840.2	860.1
1892	835.1	829.6	849	1937	849.9	845.7	866.6
1893	838.4	833	852.6	1938	855.4	851.3	873.1
1894	843	837.6	857.4	1939	860.8	856.7	879.5
1895	845	839.5	859.6	1940	865.5	861.4	885.1
1896	848.1	842.6	862.9	1941	870.5	866.6	891.1
1897	854.7	849.1	870.2	1942	879.4	875.6	901.7
1898	859.9	854.2	876.1	1943	887.6	883.9	911.6
1899	865.4	859.8	882.4	1944	894.3	890.6	919.6
1900	870.1	864.5	887.9	1945	902	898.3	928.9
1901	875	869.6	893.7	1946	909	905.1	937.4
1902	879.7	874.3	899.2	1947	915.8	911.6	945.8
1903	884.4	879	904.8	1948	797.3	791.7	805.8
1904	892.6	887.4	914.7	1949	799.6	794.4	808.9
1905	900.3	895.4	924.2	1950	804	799.4	814.2
1906	907.9	902.9	933.5	1951	808.4	803.9	819.2
1907	914.7	909.6	941.9	1952	812.7	808.3	824.1
1908	917.1	912	944.9	1953	815.4	811	827.2
1909	821.2	815.8	833.2	1954	819.4	814.9	831.8
1910	823.3	818	835.6	1955	826.6	822.3	840.4
1911	826.8	821.9	839.7	1956	839.8	835.8	856.5
1912	830.4	825.4	843.5	1957	849.2	845.6	868
1913	833.8	828.9	847.2	1958	859.8	856.4	880.7
1914	836.2	831.4	849.9	1959	871.3	868	894.4
1915	839.2	834.4	853.2	1960	881.8	878.6	906.8
1916	852	847.3	868	1961	891.3	888.1	918.1
1917	857.5	852.8	874.4	1962	900.3	897	928.9
1918	862.7	858.2	880.7	1963	908.9	905.1	939
1919	867.4	862.9	886.2	1964	916.9	912.9	949.1
1920	872.5	868	892.1	1965	924.3	919.9	958.3
1921	877.5	873.1	898.1	1966	931.6	926.8	967.7
1922	886.1	881.8	908.3	1967	937.4	932.3	975.4
1923	894.1	889.8	917.9	1968	787.6	781.6	794.8
1924	901.5	897.2	926.9	1969	790	784.6	798.1
1925	908.6	904.2	935.5	1970	794.6	789.9	804
1926	915.2	910.5	943.6	1971	799.3	794.9	809.6
1927	921.6	916.6	951.5	1972	803.1	798.7	813.9
1928	811.7	806.5	822.5	1973	806.9	802.4	818.3
1929	813.7	808.8	825	1974	809.8	805.3	821.7
1930	817.5	813.1	829.5	1975	818.1	813.6	831.5
1931	821.3	817.1	833.8	1976	821.2	816.7	835.2
1932	824.8	820.7	837.7	1977	830.6	826.3	846.7
1933	828.4	824.3	841.7	1978	841.9	837.9	860.5
1934	830.9	826.8	844.6	1979	852.6	849	873.6
1935	838	833.8	852.7	1980	864.3	860.8	887.3

ادامہ جدول (پ-۲)

شماره	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GA-ANN
1981	875.3	871.9	900.2
1982	885.5	882.1	912.2
1983	894.5	891	922.9
1984	902.3	899.4	933.1
1985	911.2	907.3	943.1
1986	918.9	914.6	952.5
1987	926.3	921.5	961.8
1988	773.1	766	778
1989	775.8	769.3	781.8
1990	780.7	774.9	788.4
1991	785.6	780.1	794.3
1992	788.2	782.6	797.3
1993	793.7	788.2	803.8
1994	797.2	791.5	807.8
1995	806.6	800.6	818.9
1996	820	814.1	835.2
1997	832.1	826.5	850
1998	843.5	838.4	864
1999	855.7	850.9	878.5
2000	867	862.3	891.6
2001	877.3	872.6	903.5
2002	886.6	881.8	914.2
2003	895.3	890.4	924.5
2004	903.9	898.8	934.8
2005	911.6	906.2	944.1
2006	919.1	913.4	953.2
2007	926.1	920.1	961.9

منابع

[۱] آزمون فر ن، (۱۳۹۲)، پایان نامه کاشناسی ارشد: "مدل سازی شبکه‌ی عصبی مصنوعی برای پیش بینی دانسیته‌ی سیالات تجمعی با استفاده از توصیف‌کننده‌های مولکولی"، دانشکده‌ی شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

[2] Parsafar, G. and Mason, E. A. (1993) "Linear isotherms for dense fluids: a new regularity", *J. Phys. Chem.*, 97(35), pp. 9048–9053.

[3] Parsafar, G. and Kalantar, Z. (2003) "Extension of Linear Isotherm Regularity to Long Chain Alkanes", *Iran. J. Chem. Chem. Eng.*, 22(2), pp. 1–8.

[4] Parsafar, G. A. and Kalantar, Z. (2005) "Extension of linear isotherm regularity to long chain primary, secondary and tertiary alcohols, ketones and 1-carboxylic acids by group contribution method", *Fluid Phase Equilibri.*, 234(1–2), pp. 11–21.

[5] Kalantar, Z., Nikoofard, H. and Javadi, F. (2013) "Extension of LIR equation of state to alkylamines using group contribution method", *ISRN Phys. Chem.*, vol. 2, pp. 1–9.

[۶] مرتضوی فر آ، (۱۳۹۰)، پایان‌نامه کارشناسی ارشد: "پیش‌بینی خواص حجمی استرها با استفاده از معادله‌ی حالت MLIR و روش سهم‌گروه"، دانشکده شیمی، دانشگاه شاهرود.

[7] Goharshadi, E. K., Morsali, A. and Abbaspour, M. (2005) "New regularities and an equation of state for liquids", *Fluid Phase Equilibri.*, 230(1–2), pp. 170–175.

[8] Goharshadi, E. K. and Moosavi, F. (2005) "Prediction of thermodynamic properties of some hydrofluoroether refrigerants using a new equation of state", *Fluid Phase Equilibri.*, 238(1), pp. 112–119.

[9] Goharshadi, E. K. and Berenji, A. R. (2006) "A new equation of state for predicting the thermodynamic properties of liquid alkali metals", *J. Nucl. Mater.*, 348(1–2), pp. 40–44.

[10] Goharshadi, E. K. and Abareshi, M. (2008) "Prediction of volumetric and thermodynamic properties of two aromatic-alcohol mixtures using GMA equation of state", *Fluid Phase Equilibri.*, 268(1–2), pp. 61–67.

[11] Goharshadi, E. K. and Moosavi, M. (2006) "Application of a new equation of state to liquid refrigerant mixtures", *Thermochim Acta.*, 447(1), pp. 64–68.

[12] Moosavi, M. (2011) "Extension of GCM-GMA equation to long chain primary, secondary and tertiary alcohols, primary and secondary amines, and ketones using group contribution method", *Fluid Phase Equilibri*. Elsevier B.V., 310(1-2), pp. 63-73.

[۱۳] نامجو ن. خ، (۱۳۸۸)، پایان نامه کاشناسی ارشد: "مدل سازی شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از روش سهم گروه‌ها برای پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار"، دانشکده‌ی شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

[۱۴] شعبانی س، (۱۳۸۸)، پایان نامه کاشناسی ارشد: "مدل سازی شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از روش سهم گروه‌ها برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌ها و سیکلوآلکان‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار"، دانشکده‌ی شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

[۱۵] صبوری م، (۱۳۸۹)، پایان نامه کاشناسی ارشد: "مدل سازی QSPR خواص ترمودینامیکی کتون‌ها"، دانشکده‌ی شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

[۱۶] متولی م، (۱۳۹۶)، پایان نامه کاشناسی ارشد: "مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار- خاصیت برای دانسیته‌ی هیدروکربن‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار"، دانشکده‌ی شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

[17] Wold, S. (1995) "Chemometrics; what do we mean with it, and what do we want from it?". *Chemometrics Intelligent Laboratory Systems*, 30(1), pp.109-115.

[18] Massart, D.L. (1997) "Handbook of chemometrics and qualimetrics. Part A". *Data handling in science and technology*; 204.

[19] Jaeckle, C. (2000) "Chemometrics, Matthias Otto, Wiley-VCH, New York, 1999, 314 pp. ISBN 3-527-29628-X", *J. Chem: A Journal of the Chemometrics Society*, 14(4), pp.375-377.

[۲۰] کریمی م، (۱۳۹۰)، پایان‌نامه کارشناسی ارشد: "شناسایی ترکیبات اسانس‌های هل سبز و سیاه با استفاده از روش‌های GC-MS تلفیق شده با روش‌های تفکیک منحنی و تعیین کمی و گونه Taxus با استفاده از تکنیک کروماتوگرافی مایع سریع و تلفیق آن با روش‌های تفکیک منحنی"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شریف.

[21] Jalali-Heravi, M. and Asadollahi-Baboli, M. (2008) "QSAR analysis of platelet-derived growth inhibitors using GA-ANN and shuffling crossvalidation", *J. QSAR. Comb. Sci.*, 27(6), pp.750-757.

[۲۲] کیانی آ، (۱۳۸۲)، پایان نامه کارشناسی ارشد: "مدل سازی کامپیوتری زمان بازداری (TR) ترکیبات آلی فرار با استفاده از روش های کمومتری کس"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شریف.

[23] Jurs P. C. (2005) "Assessing the reliability of a QSAR model's predictions", *J. Mol. Graph. Model*, 23(6), pp. 503-523.

[۲۴] محسنی ب، (۱۳۸۷)، پایان نامه کارشناسی ارشد، "مدل سازی تمایل اتصال بنزودیازپین ها به گیرنده گابا-A به روش QSPR با استفاده از تکنیک های الگوریتم ژنتیکی و شبکه های عصبی مصنوعی"، دانشکده علوم، دانشگاه شهید باهنر کرمان.

[25] Arab Chamjangali, M. (2009) "Modelling of cytotoxicity data (CC₅₀) of anti-HIV 1-[5-chlorophenyl] sulfonyl-1H-pyrrole derivatives using calculated molecular descriptors and levenberg-marquardt artificial neural network", *J. Chem. Bio. Drug. Des.*, 73(4), pp. 456-465.

[26] HyperChem8.0 Toronto, Canada: HyperCube Inc, [http:// www.hyper.com](http://www.hyper.com).

[۲۷] لواین ای. ان (۱۳۸۷)، " شیمی کوانتومی"، اسلامپور غ، پارسافر غ، مقاری ع، نجفی ب، جلد سوم چاپ اول، موسسه انتشارات فاطمی.

[28] Atkins P.W., Friedman R.S. (1996) "Molecular Quantum Mechanics", 3rd Ed, oxford University press, New York, p 307.

[۲۹] کریمی س، (۱۳۸۵)، کارشناسی ارشد، "مدل سازی کمومتری کس اثرات مهارکنندگی مشتقات هارمان بعنوان ترکیبات ضد ایدز با استفاده از روش هیبریدی آنالیز اجزای اصلی، رگرسیون خطی چندگانه و شبکه عصبی مصنوعی"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شریف.

[30] www.iasbs.ac.ir/chemistry/chemometrics/.../8th/qsar_introduction.ppt

[31] Habibi A., Danandeh M. (2007) "Prediction of acidity constant for substituted acetic acids in water using artificial neural networks" *Indian. J. Chem., Sect B.*, 46, pp 478- 487.

[32] Zhuo, L., Zheng, J., Li, X., Wang, F., Ai, B., Qian, J. (2008) "A genetic algorithm based wrapper feature selection method for classification of hyperspectral images using

support vector machine”, *Proceedings of SPIE - The International Society for Optical Eng*, 7147, p. 71471J.

[33] Melanie, M. (1999), “An introduction to genetic algorithms”, Vol. 3, Cambridge, Massachusetts London, England.

[۳۴] باهر ا، (۱۳۸۸)، پایان نامه دکتری: "پیش بینی و مطالعه QSPR بازداری ترکیبات آلی، دارویی و آلاینده ها با استفاده از رگرسیون بردارهای پشتیبان"، دانشکده شیمی، دانشگاه مازندران.

[۳۵] کلانتر ز، (۱۳۸۵)، پایان نامه دکتری: "پیش بینی خواص ترمودینامیکی و انتقال سیالات آلی چگال با استفاده از روش سهم گروه ها و شبکه ی عصبی موجک"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان.

[36] Pan, Y., Jiang, J. and Wang, Z. (2007) “Quantitative structure-property relationship studies for predicting flash points of alkanes using group bond contribution method with back-propagation neural network”, *J. Hazard. Mater.*, 147(1–2), pp. 424–430.

[37] Valderrama, J. O., Reátegui, A. and Rojas, R. E. (2009) “Density of Ionic Liquids Using Group Contribution and Artificial Neural Networks”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, 48(6), pp. 3254–3259.

[38] Gharagheizi, F., Eslamimanesh, A., Mohammadi, H. A. (2011) “Determination of critical properties and acentric factors of pure compounds using the artificial neural network group contribution algorithm”, *J. Chem. Eng. Data.*, 56(5), pp. 2460–2476.

[39] Matsuda, H., Yamamoto, H., Kurihara, K., Tochigi, K. (2007) “Computer-aided reverse design for ionic liquids by QSPR using descriptors of group contribution type for ionic conductivities and viscosities”, *Fluid Phase Equilibri.*, 261(1–2), pp. 434–443.

[40] Moosavi, M., Soltani, N. (2013) “Prediction of hydrocarbon densities using an artificial neural network–group contribution method up to high temperatures and pressures”, *Thermochim. Acta.*, 556, pp. 89–96.

[۴۱] حسین کوچک م، (۱۳۸۴)، پایان نامه کارشناسی ارشد، "بهبود متدولوژی سطح پاسخ با استفاده از شبکه های عصبی و الگوریتم ژنتیک"، دانشکده مهندسی صنایع، دانشگاه صنعتی شریف.

[۴۲] طاهرزاده م، (۱۳۹۳)، پایان نامه کارشناسی ارشد: "مطالعه کمی ساختار- خاصیت ضریب فعالیت در رقت بی نهایت ترکیبات آلی و آب در محیط مایع یونی ۱- بوتیل ۱- متیل پیرولیدینیوم

تریسیانومتانید"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

[43] McCulloch, W.W. and Pitts W. (1943) "A Logical Calculus of the Ideas Imminent in Nervous Activity", *Bull. Math. Biophys.*, 5, pp 115-133.

[44] Rosenblatt, F. (1958) "The Perceptron: A Probabilistic Model for Information Storage and Organization in the Brain", *Psychol. Rev.*, 65, 6, pp 386-408.

[۴۵] منهاج م، " مبانی شبکه‌های عصبی (هوش محاسباتی) " جلد اول، چاپ پنجم، مرکز نشر

دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران.

[46] Rumelhart, D. E. and McClelland J. L. (1986) "Parallel Distributed Processing: Exploration in the Microstructure of Cognition", vol. 1, MA:MIT Press, Chapter 1.

[47] Stamations, V. K. (1996) "Understanding neural networks and fuzzy logic", IEEE Press.

[۴۸] کیانی آ، (۱۳۸۲)، پایان نامه کارشناسی ارشد: "مدل‌سازی کامپیوتری زمان بازداری ترکیبات

آلی فرار با استفاده از روش‌های کمومتریکس"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شریف.

[49] Iglesias-silva, G. A, Estrada-baltazar, A. and Hall, K. R. (1999) "Experimental Liquid Viscosity of Pentane + Octane + Decane Mixtures from 298 . 15 to 373 . 15 K up to 25 MPa", *J. Chem. Eng. Data.*, 9568(97), pp. 1304–1309.

[50] Dymond, J. H., Young, K. J. and Isdale, J. D. (1979) "Behaviour for n-hexane + n-hexadecane in the range 298 to 373 K and 0.1 to 500 MPa", *J. Chem. Thermodyn.*, 11(2), pp. 887–895.

[51] Doolittle, A. K. (1964) "Specific Volumes of n -Alkanes", *J. Chem. Eng. Data.*, 9(2), pp. 275–279.

[52] Caudwell, D.R., Trusler, J.M., Vesovic, V. and Wakeham, W.A. (2009) "Viscosity and Density of Five Hydrocarbon Liquids at Pressures up to 200 MPa and Temperatures up to 473 K Viscosity and Density of Five Hydrocarbon Liquids at Pressures up to 200 MPa and Temperatures up to 473 K ", *J. Chem. Eng. Data.*, 54, pp. 359–366.

[53] Caudwell, D.R., Trusler, J.P.M., Vesovic, V. and Wakeham, W.A. (2004) "The viscosity and density of n-dodecane and n-octadecane at pressures up to 200 MPa and temperatures up to 473 K", *Int. J. Thermophys.*, 25(5), pp. 1339–1352.

[54] Khasanshin, T. S. and Shchemelev, A. P. (2002) "The thermodynamic properties of n-tetradecane in liquid state", *High Temp. High Press.*, 40(2), pp. 207–211.

- [55] Daridon, J. L., Carrier, H. and Lagourette, B. (2002) “Pressure Dependence of the Thermophysical Properties of n-Pentadecane and n-Heptadecane”, *Int. J. Thermophys.*, 23(3), pp. 697–708.
- [56] Dutour, S., Daridon, J. L. and Lagourette, B. (2000) “Pressure and temperature dependence of the speed of sound and related properties in normal octadecane and nonadecane”, *Int. J. Thermophys.*, 21(1), pp. 173–184.
- [57] Dutour, S., Lagourette, B. and Daridon, J. L. (2002) “High-pressure speed of sound, density and compressibility of heavy normal paraffins: C₂₈H₅₈ and C₃₆H₇₄”, *J. Chem. Thermodyn.*, 34, pp. 475–484.
- [58] <https://www.nist.gov/chemistry/webbook>.
- [59] Dawson, P. P., Silberberg, I. H. and McKetta, J. J. (1973) “Volumetric Behavior, Vapor Pressures, and Critical Properties of Neopentane”, *J. Chem. Eng. Data.*, 18(1), pp. 7–15.
- [60] Walter, T., Bardelmeier, U. and Würflinger, A. (1992) “Ultrasonic Studies of Rotational Isomerism and P, V, T Data of 2-Methylbutane at Elevated Pressures”, *Ber. Bunsenges. phys.Chem.*, 96(5), pp. 717-721.
- [61] Kelso, E.A., and Felsing, W.A. (1942) “PVT relations and derived quantities for hexanes”. *Ind. Eng. Chem.*, 34(2), pp. 161-163.
- [62] Plantier, F. and Daridon, J.L. (2005) “Speed of Sound of 2-Methylpentane, 2, 3-Dimethylpentane, and 2, 2, 4-Trimethylpentane from (293.15 to 373.15) K and up to 150 MPa”, *J. Chem. Eng. Data.*, 50(6), pp. 2077-2081.
- [63] Takagi, T., Sakura, T. and Guedes, H. J. R. (2002) “Speed of sound in liquid cyclic alkanes at temperatures between (283 and 343) K and pressures up to 20 MPa”, *J. Chem. Thermodyn.*, 34(12), pp. 1943–1957.
- [64] Voss, S.F. and Sloan, E.D. (1989) “Thermal conductivity and heat capacity of synthetic fuel components”, *Int. J. Thermophys.*, 10(5), pp. 1029-1040.
- [65] Tapriyal, D., Enick, R., McHugh, M., Gamwo, I. and Morreale, B. (2012) “ High Temperature, high pressure equation of state density correlations and viscosity correlations”, National Energy Technology Lab (NETL), Pittsburgh, PA, and Morgantown, WV (United States) , (July), pp. 1–98.
- [66] Baylaucq, A., Zeberg-Mikkelsen, C.K., Daugé, P. and Boned, C. (2002) “Dynamic viscosity and density of heptylbenzene and heptylcyclohexane up to 100 MPa”, *J.*

Chem. Eng. Data., 47(4), pp. 997–1002.

[67] Dutour, S., Carrier, H. and Daridon, J. L. (2003) “Compressibilities of liquid pentadecylcyclohexane and nonadecylcyclohexane from high pressure speed of sound and density measurements”, *J. Chem. Thermodyn.*, 35(10), pp. 1613–1622.

[68] Jahangiri, M., Jacobsen, R.T., Stewart, R.B. and McCarty, R.D. (1986) “Thermodynamic properties of ethylene from the freezeline to 450K at pressures to 260 MPa”, *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, 15(2), pp. 593–734.

[69] Ihmels, E. C., Fischer, K. and Gmehling, J. (2005) “Thermodynamic properties of the butenes: Part I. Experimental densities, vapor pressures, and critical points”, *Fluid Phase Equilibri.*, 228–229, pp. 155–171.

[70] Vargaftik, N.B. (1975) “Handbook of Physical Properties of Liquids and Gases”, Second Edition, Hemisphere Publication Corporation, New York, pp 323.

[71] Sagdeev, D.I., Fomina, M.G., Mukhamedzyanov, G.K. and Abdulagatov, I.M. (2014) “Experimental study and correlation models of the density and viscosity of 1-hexene and 1-heptene at temperatures from (298 to 473) K and pressures up to 245 MPa”, *J. Chem. Eng. Data.*, 59(4), pp. 1105–1119.

[72] Dymond, J.H., Malhotra, R., Isdale, J.D. and Glen, N.F. (1988) “(p, ρ , T) of n-heptane, toluene, and oct-1-ene in the range 298 to 373 K and 0.1 to 400 MPa and representation by the Tait equation”, *J. Chem. Thermodyn.*, 20(5), pp. 603–614.

[73] Khasanshin, T.S., Poddubskij, O.G., Shchamialiou, A.P. and Samuilov, V.S. (2006) “Thermodynamic properties of 1-alkenes in the liquid state: 1-tetradecene”, *Int. J. Thermophys.*, 27(6), pp.1746-1759.

[74] Khasanshin, T.S., Poddubskij, O.G., Shchamialiou, A.P. and Samuilov, V.S. (2006) “The thermodynamic properties of 1-alkenes in the liquid state: 1-Hexadecene”, *Fluid Phase Equilibri*, 245(1), pp. 26–31.

[75] Letcher, T. M. and Marsicano, F. (1974) “Vapour pressures and densities of some unsaturated C6 acyclic and cyclic hydrocarbons between 300 and 320 K”, *J. Chem. Thermodyn.*, 6(5), pp. 509–514.

[76] Deul, R., Rosenzweig, S. and Franck, E. U. (1991) “The Dielectric Constant and Density of Benzene to 400 °C and 3000 bar”, *Ber. Bunsenges. phys. Chem.*, 95(4), pp. 515–519.

- [77] Segovia, J.J., Fandiño, O., López, E.R., Lugo, L., Martín, M.C. and Fernández, J. (2009) “Automated densimetric system: Measurements and uncertainties for compressed fluids”, *J. Chem. Thermodyn.*, Elsevier Ltd, 41(5), pp. 632–638.
- [78] Garg, S.K., Banipal, T.S. and Ahluwalia, J.C. (1993) “Heat capacities and densities of liquid o-xylene, m-xylene, p-xylene, and ethylbenzene, at temperatures from 318.15 K to 373.15 K and at pressures up to 10 MPa”, *J. Chem. Thermodyn.*, 25(1), pp. 57-62.
- [79] Akhundov, T.S., Imanov, Sh.Yu. (1969) “Experimental observation of specific volumes of p-xylene at temperatures 50-400°C and pressures up to 500 bar”, *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved., Neft. Gaz.*, 12, pp. 66-68.
- [80] Zhou, H., Lagourette, B., Alliez, J., Xans, P. and Montel, F. (1990) “Extension of the application of the Simha equation of state to the calculation of the density of n-alkanes-benzene and alkylbenzenes mixtures”, *Fluid Phase Equilibri.*, 59(3), pp. 309–328.
- [81] Chyliński, K. and Gregorowicz, J. (1991) “Liquid-phase PVT data of alkylbenzenes”, *Fluid Phase Equilibri.*, 64(C), pp. 237–249.
- [82] Chang, J. S., Lee, M. J. and Lin, H. (1996) “Densities of m-Xylene+ Quinoline and m-Xylene+ Tetralin from (333 to 413) K and up to 30 MPa”, *J. Chem. Eng. Data.*, 41(5), pp. 1117–1120.
- [83] Milhet, M., Baylaucq, A. and Boned, C. (2005) “Volumetric properties of 1-phenyldecane and 1-phenylundecane at pressures to 65 MPa and temperature between 293.15 and 353.15 K”, *J. Chem. Eng. Data.*, 50(4), pp. 1430-1433.
- [84] Dutour, S., Carrier, H., Daridon, J.L., Lagourette, B. and Gao, G.H. (2002) “Speed of sound, density, and compressibility of alkylbenzenes as a function of pressure and temperature: tridecylbenzene and pentadecylbenzene”, *J. Chem. Eng. Data.*, 47(6), pp. 1532-1536.
- [85] Dutour, S., Carrier, H., Lagourette, B., Gao, G.H. and Daridon, J.L. (2004) “Speed of sound, density, and compressibility of alkyl-benzenes as a function of pressure and temperature: Heptadecylbenzene and octadecylbenzene”, *J. Chem. Eng. Data.*, 49(4), pp. 983–987.
- [86] Russell, F. R. and Hottel, H. C. (1938) “Compressibility of Liquid Naphthalene”, *Ind. Eng. Chem.*, 30(3), pp. 343–345.
- [87] Dávila, M.J., Alcalde, R., Atilhan, M. and Aparicio S. (2012) “PpT measurements and derived properties of liquid 1-alkanols”, *J. Chem. Thermodyn.*, 47, pp. 241-259.

- [88] Wappmann, S., Karger, N. and Lüdemann, H.D. (1995) “pVT Data of Liquid 1-, 2- and 3-Pentanol from 10 to 200 MPa and from 233 to 433 K”, *J. Chem. Eng. Data.*, 40(1), pp. 233-236.
- [89] Matsuo, S. and Makita, T. (1989) “Volumetric properties of 1-alkanols at temperatures in the range 298–348 K and pressures up to 40 MPa ”, *Int. J. thermophys.*, 10(4), pp. 885-897.
- [90] Zúñiga-Moreno, A. and Galicia-Luna, L.A. (2002) “Densities of 1-Propanol and 2-Propanol via a Vibrating Tube Densimeter from 313 to 363 K and up to 25 MPa”, *J. Chem. Eng. Data.*, 47(2), pp. 155-160.
- [91] Zúñiga-Moreno, A., Galicia-Luna, L.A. and Camacho-Camacho, L.E. (2007) “Compressed liquid densities of 1-butanol and 2-butanol at temperatures from 313K to 363K and pressures up to 25MPa”, *J. Chem. Thermodyn.*, 39(2), pp. 254-260.
- [92] Zúñiga-Moreno, A. and Galicia-Luna, L.A. (2007) “Densities, Isothermal Compressibilities, and Isobaric Thermal Expansivities of Hexan-2-ol, Octan-1-ol, and Decan-1-ol from (313 to 363) K and Pressures up to 22 MPa”, *J. Chem. Eng. Data.*, 52(5), pp. 1773-1783.
- [93] Zúñiga-Moreno, A., Galicia-Luna, L.A. and Betancourt-Cárdenas, F.F. (2008) “Densities and derived thermodynamic properties of 1-heptanol and 2-heptanol at temperatures from 313K to 363K and pressures up to 22MPa”, *J. Chem. Thermodyn.*, 40(1), pp. 96-106.
- [94] Dzida, M. (2010) “Study of the Effects of Temperature and Pressure on the Thermodynamic and Acoustic Properties of 2-Methyl-1-butanol at Temperatures from 293K to 318K and Pressures up to 100MPa”, *Int. J. Thermophys.*, 31(1), pp. 55-69.
- [95] González-Salgado, D., Troncoso, J., Plantier, F., Daridon, J.L. and Bessi res, D. (2006) “Study of the volumetric properties of weakly associated alcohols by means of high-pressure speed of sound measurements”, *J. Chem. Thermodyn.*, 38(7), pp. 893-899.
- [96] Zor bski, E., Dzida, M. and Wysocka, E. (2011) “Acoustic and thermodynamic properties of 2-ethyl-1-hexanol by means of high-pressure speed of sound measurements at temperatures from (293 to 318) K and pressures up to 101 MPa”, *J. Chem. Eng. Data.*, 56(5), pp. 2680-2686.
- [97] Atilhan, M. and Aparicio, S. (2013) “PpT measurements and derived properties of liquid 1, 2-alkanediols”, *J. Chem. Thermodyn.*, 57, pp. 137-144.

- [98] Zorebski, E. and Dzida, M. (2007) "Study of the acoustic and thermodynamic properties of 1,2-and 1, 3-butanediol by means of high-pressure speed of sound measurements at temperatures from (293 to 318) K and pressures up to 101 MPa", *J. Chem. Eng. Data.*, 52(3), pp. 1010-1017.
- [99] McDuffie, G.E., Forbes, J.W., Madigosky, W.M. and Von Bretzel, J.J. (1969) "Density and compressibility of four higher alcohols for pressures to 2800 kg./sq. cm", *J. Chem. Eng. Data.*, 14(2), pp. 176-180.
- [100] Zorębski, E., Dzida, M. and Cempa, M. (2008) "Study of the effects of temperature and pressure on the acoustic and thermodynamic properties of 2-methyl-2, 4-pentanediol", *J. Chem. Eng. Data.*, 53(8), pp. 1950-1955.
- [101] Álvarez, E., Cerdeira, F., Gómez-Díaz, D. and Navaza, J.M. (2010) "Density, speed of sound, isentropic compressibility, and excess volume of binary mixtures of 1-amino-2-propanol or 3-amino-1-propanol with 2-amino-2-methyl-1-propanol, diethanolamine, or triethanolamine from (293.15 to 323.15) K", *J. Chem. Eng. Data.*, 55(7), pp. 2567-2575.
- [102] Vong, W.T. and Tsai, F.N. (1997) "Densities, molar volumes, thermal expansion coefficients, and isothermal compressibilities of organic acids from 293.15 K to 323.15 K and at pressures up to 25 MPa", *J. Chem. Eng. Data.*, 42(6), pp. 1116-1120.
- [103] Banipal, T.S., Garg, S.K. and Ahluwalia, J.C. (1992) "Densities of some higher alkan-1-oic acids at temperatures from 343.15 K to 373.15 K and at pressures up to 9 MPa", *J. Chem. Thermodyn.*, 24(7), pp. 729-735.
- [104] Miyake, Y., Baylaucq, A., Plantier, F., Bessi res, D., Ushiki, H. and Boned, C. (2008) "High-pressure (up to 140MPa) density and derivative properties of some (pentyl-, hexyl-, and heptyl-) amines between (293.15 and 353.15) K", *J. Chem. Thermodyn.*, 40(5), pp. 836-845.
- [105] Yoshimura, M., Baylaucq, A., Bazile, J.P., Ushiki, H. and Boned, C. (2009) "Volumetric properties of 2-alkylamines (2-aminobutane and 2-aminooctane) at pressures up to 140 MPa and temperatures between (293.15 and 403.15) K", *J. Chem. Eng. Data.*, 54(6), pp. 1702-1709.
- [106] Yoshimura, M., Boned, C., Galli ro, G., Bazile, J.P., Baylaucq, A. and Ushiki, H. (2010) "Influence of the chain length on the dynamic viscosity at high pressure of some 2-alkylamines: Measurements and comparative study of some models", *J. Phys. chem.*, 369(2-3), pp. 126-137.

- [107] Chen, L., Groß, T. and Lüdemann, H.D. (1999) "The density dependence of self-diffusion in some simple amines", *J. Phys. chem.*, 1(15), pp. 3503-3508.
- [108] Ihmels, E.C. and Lemmon, E.W. (2007) "Experimental densities, vapor pressures, and critical point, and a fundamental equation of state for dimethyl ether", *Fluid Phase Equilibri.*, 260(1), pp. 36-48.
- [109] Meng, X., Zheng, P., Wu, J. and Liu, Z. (2008) "Density and viscosity measurements of diethyl ether from 243 to 373K and up to 20MPa", *Fluid Phase Equilibri.*, 271(1), pp. 1-5.
- [110] Ihmels, E.C. and Gmehling, J. (2002) "Compressed liquid densities of methyl tert-butyl ether (MTBE), ethyl tert-butyl ether (ETBE), and diisopropyl ether (DIPE)", *J. Chem. Eng. Data.*, 47(5), pp. 1307-1313.
- [111] Meng, X., Wu, J. and Liu, Z. (2008) "Viscosity and density measurements of diisopropyl ether and dibutyl ether at different temperatures and pressures", *J. Chem. Eng. Data.*, 54(9), pp. 2353-2358.
- [112] Safarov, M.M. and Asoev, R.S. (1993) "Density of diheptyl ether in the liquid phase", *J. Eng. Phys. Thermophys.*, 64(4), pp. 352-354.
- [113] Govender, U.P., Letcher, T.M., Garg, S.K. and Ahluwalia, J.C. (1996) "Effect of temperature and pressure on the volumetric properties of branched and cyclic ethers", *J. Chem. Eng. Data.*, 41(1), pp. 147-150.
- [114] Lugo, L., López, E.R., Comuñas, M.J., García, J. and Fernández, J. (2004) "p ρ T Measurements and EoS Predictions of Glycol Ethers from (283.15 to 353.15) K at Pressures up to 25 MPa", *J. Chem. Eng. Data.*, 49(5), pp. 1400-1405.
- [115] Comuñas, M.J., Baylaucq, A., Boned, C. and Fernández, J. (2003) "Volumetric properties of monoethylene glycol dimethyl ether and diethylene glycol dimethyl ether up to 60 MPa", *J. Chem. Eng. Data.*, 48(4), pp. 1044-1049.
- [116] López, E.R., Lugo, L., Comuñas, M.J., García, J. and Fernández, J. (2004) "Liquid density measurements of diethylene glycol monoalkyl ethers as a function of temperature and pressure", *J. Chem. Eng. Data.*, 49(2), pp. 376-379.
- [117] Comuñas, M.J.P., Baylaucq, A., Boned, C. and Fernández, J. (2001) "High-pressure measurements of the viscosity and density of two polyethers and two dialkyl carbonates", *Int. J. thermophys.*, 22(3), pp. 749-768.

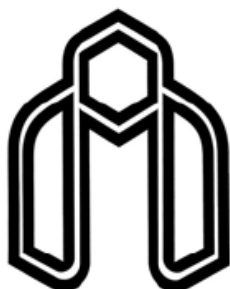
- [118] Gardas, R.L., Johnson, I., Vaz, D.M., Fonseca, I.M. and Ferreira, A.G. (2007) "PVT Property Measurements for Some Aliphatic Esters from (298 to 393) K and up to 35 MPa", *J. Chem. Eng. Data.*, 52(3), pp. 737-751.
- [119] Malhotra, R. and Woolf, L.A. (1996) "PVT property measurements for the liquids propyl acetate, butyl acetate, and 1-methylethyl acetate from (278 to 338) K and (0.1 to 380) MPa", *J. Chem. Eng. Data.*, 41(6), pp. 1366-1370.
- [120] Costa, H.F., Gardas, R.L., Johnson, I., Fonseca, I.M. and Ferreira, A.G. (2008) "PVT property measurements for ethyl propionate, ethyl butyrate, and ethyl pentanoate esters from (298 to 393) K and up to 35 MPa", *J. Chem. Eng. Data.*, 54(2), pp. 256-262.
- [121] Malhotra, R. and Woolf, L.A. (1996) "PVT property measurements for the liquids ethyl propionate and ethyl butyrate from (278 to 338) K and (0.1 to 380) MPa", *J. Chem. Eng. Data.*, 41(6), pp. 1371-1374.
- [122] Meng, X., Zheng, P., Wu, J. and Liu, Z. (2008) "Density and Viscosity Measurements of Diethyl Adipate from (303 to 373) K and up to 20 MPa", *J. Chem. Eng. Data.*, 53(7), pp. 1474-1478.
- [123] Peleties, F., Segovia, J.J., Trusler, J.P.M. and Vega-Maza, D. (2010) "Thermodynamic properties and equation of state of liquid di-isodecyl phthalate at temperature between (273 and 423) K and at pressures up to 140MPa", *J. Chem. Thermodyn.*, 42(5), pp. 631-639.
- [124] Malhotra, R. and Woolf, L.A. (1991) "Thermodynamic properties of propanone (acetone) at temperatures from 278 K to 323 K and pressures up to 400 MPa", *J. Chem. Thermodyn.*, 23(9), pp. 867-876.
- [125] Malhotra, R. and Woolf, L.A. (1992) "Thermodynamic properties of butan-2-one at temperatures from 278 K to 338 K and pressures from 0.1 MPa to 280 MPa; predictions for higher ketones", *J. Chem. Thermodyn.*, 24(11), pp. 1207-1217.
- [126] Malhotra, R. and Woolf, L.A. (1996) "Volumetric measurements of liquid pentan-2-one, hexan-2-one, and 4-methylpentan-2-one at temperatures from 278.15 K to 338.13 K and pressures in the range from 0.1 MPa to 386 MPa", *J. Chem. Thermodyn.*, 28(12), pp. 1411-1421.
- [127] Malhotra, R., Price, W.E. and Woolf, L.A. (1993) "Thermodynamic properties of pentan-3-one at temperatures from 278 K to 338 K and pressures from 0.1 MPa to 380 MPa", *J. Chem. Thermodyn.*, 25(3), pp. 361-366.

- [128] Todeschini, R., and Consonni, V. (2009) ‘Molecular descriptors for chemoinformatics’: volume I: alphabetical listing/volume II: appendices, references (Vol. 41). ISBN: 978-3-527-31852-0. John Wiley & Sons., pp. 1257
- [129] <https://www.epa.gov/sites/production/files/2015.../moleculardescriptorsguide>
v102

Abstract

In this work, a quantitative structure-property relationship (QSPR) study was employed to predict the density of a diverse set of organic compounds including aliphatic and aromatic hydrocarbons, alcohols, amines, esters, ethers, carboxylic acids, as well as ketones over a wide range of temperatures and pressures. Two types of descriptor selection method have been used in this study. In the first selection method, after analyzing the chemical structure of all studied compounds in this work, 24 functional groups were recognized based on group contribution method (GCM). In the second method, the 3224 descriptors were calculated using Dragon software for each of the studied organic compounds. Then, a subset of calculated descriptors were selected from 22 classes of Dragon descriptors with a genetic algorithm based on partial least square (GA-PLS) method as a feature selection technique. Only 7 descriptors were obtained by genetic algorithm (GA) as the most feasible descriptors. The selected descriptors with two feature selection methods and 2 experimental variables (temperature and pressure) as well as molecular weight of compounds were used as input nodes for constructing different artificial neural networks (ANNs). 4 feed-forward artificial neural network models were designed by combination of two training algorithms namely, Levenberg-Marquardt (LM) and Bayesian regularized (BR), with two transfer functions (logarithm-sigmoid and tangent-sigmoid). After training each of these models, the ANNs parameters such as, the number of the neurons in input and hidden layers, and the number of the iteration (epoch) have been optimized based on the minimum value of the mean square error (MSE) for prediction of validation data set. Then, the performance of the selected optimized models was investigated by the internal and external test sets. The MSE and the determination coefficient (R^2) for the internal test set using optimized GCM-ANN model were 18.15 and 0.9990, and those for optimized GA-ANN model were 22.92 and 0.9988, respectively. Similarly, the values of these parameters for external test set were obtained 96.74 and 0.9899 using GCM-ANN, and 1721.71 and 0.8622 using GA-ANN, respectively. The results showed that the optimized GCM-ANN model may be simulated the relationship between the structural descriptors and density of organic compounds more accurate than the optimized GA-ANN model.

Keywords: Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR), Artificial Neural Network (ANN), Organic Compounds, Density, Group Contribution Method (GCM), Genetic Algorithm (GA).



Shahrood University of Technology

Faculty of Chemistry

M.Sc. Thesis in Physical Chemistry

**A non-linear quantitative structure-property relationship for the
prediction of density of a diverse set of organic compounds**

by

Maryam Maghsoodi

Supervisors:

Dr. Zahra. Kalantar

Dr. Hossein. Nikoofard

January 2019