

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده: شیمی

مطالعه ارتباط کمی ساختار - دانسیته ۱ - آلکانول‌ها

با استفاده از روش‌های خطی و غیرخطی

دانشجو: لیلا محمدی

استاد راهنما:

دکتر زهرا کلانتر

استاد مشاور:

دکتر حسین نیکوفرد

پایان نامه کارشناسی ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

آبان‌ماه ۱۳۹۰

باسپاس از سه وجود مقدس:

آنان که ناتوان شدند تا ما به توانایی برسیم

موباشان سپید شد تا ما رو سفید شویم

وحاشای آنکه سوختند تا ما کرامت بخش وجود ما و روسمگر راهبان باشند

پدرانمان

مادرانمان

استادانمان

به نام خداوندی که داشتن او جبران همه نداشته های من است

می ستایمش ، چون لایق ستایش است . . .

در ابتدا بر خود واجب می دانم از زحمات و تلاشهای پدر و مادر مهربانم و برادر عزیزم که همواره پشتیبان و مشوق من در تحصیل بودند تشکر کنم. از استاد راهنمایم سرکار خانم دکتر زهرا کلانتر به دلیل یاری ها و راهنمایی های بی چشمداشتشان که بسیاری از سختی ها را برایم آسان تر نمودند تشکر میکنم. از آقای دکتر نیکوفرد که در این پایان نامه نقش مشاور من را به عهده داشتند سپاسگزارم. از اساتید محترم آقای دکتر باخرد، دکتر میرزایی، دکتر عرب که همواره پاسخگوی سوالات من بودند نیز متشکرم.

از دوستان عزیزم خانم ها قلعه نوعی، آذرفر، حسنی، کاظم زاده، اسدی، فریدونی، خارکن، فتح آبادی، داوودی فرد، خیبریان و سرکار خانم جعفری که همواره همراه من بودند واقعا سپاسگزارم.

چکیده

مدل شبکه‌ی عصبی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱- آلکانول‌ها در محدوده‌ی وسیعی از فشار (MPa) ۳۰۰-۰/۱ و محدوده‌ی دمایی (K) ۲۹۸/۱۵ - ۳۸۳/۱۵ بکار گرفته شد. توصیف‌کننده‌ها از میان ۱۸ دسته‌ی مختلف از توصیف‌کننده‌ها در نرم‌افزار Dragon با استفاده از روش رگرسیون مرحله‌ای چندگانه (MLR) و تکنیک stepwise انتخاب شدند. توصیف‌کننده انتخاب شده، HGM بود. یک توصیف‌کننده محاسباتی و دو توصیف‌کننده تجربی دما و فشار برای ساخت مدل بکار گرفته شدند. داده‌های حاصل به صورت تصادفی به سه دسته‌ی آموزش، ارزیابی و تست با تعداد ۳۹۶ : ۸۶ : ۸۶ تقسیم شدند به گونه‌ای که هر سری بهترین نماینده‌ی کل داده‌ها باشد. پس از آموزش و بهینه کردن پارامترهای شبکه، کاری مدل بهینه شده با استفاده از سری تست مورد بررسی قرار گرفت. متوسط مربعات خطای (MSE)، برای سری تست با استفاده از دو روش ANN و MLR بترتیب ۰/۳۸۴ و ۰/۰۳۶ بدست آمد. نتایج به دست آمده از شبکه بهینه شده با نتایج تجربی و همچنین نتایج حاصل از روش MLR مقایسه گردید که این بررسی برتری مدل ANN را نسبت به مدل MLR نشان داد.

واژه‌های کلیدی: شبکه عصبی مصنوعی - رگرسیون خطی چندگانه - توصیف‌کننده - ۱- آلکانول -

ها

نتایج حاصل از پایان نامه در دو پوستر تحت عناوین:

"Multiple linear regression (MLR) modeling for density prediction of 1- alkanols over a wide range of temperatures and pressures using theoretically derived descriptors"

"Quantitative structure–property relationship studies of density for primary alcohols using artificial neural network"

در چهاردهمین کنفرانس شیمی فیزیک ایران در پردیس بین‌المللی کیش دانشگاه تهران ارائه شد.

فهرست مطالب

د	چکیده
و	فهرست مطالب
ف	فهرست جداول
ص	فهرست اشکال

فصل اول: مقدمه

۱	۱-۱- مقدمه
۲	۲-۱- هدف تحقیق
۳	۳-۱- روش کار
۳	۴-۱- پیشینه‌ی تحقیق

فصل دوم: کمومتریکس

۴	۱-۲- کمومتریکس
۵	۲-۲- ارتباط کمی ساختار- خاصیت (QSPR)
۷	۳-۲- ارتباط کمی ساختار- فعالیت (QSAR)
۷	۴-۲- تاریخچه تولد QSAR/QSPR
۸	۱-۲-۲- جمع آوری سری داده‌ها
۸	۲-۲-۲- بهینه‌سازی ساختار مولکول‌ها
۹	۱-۲-۲-۲- روش مکانیک مولکولی
۹	۲-۲-۲-۲- روش مکانیک کوانتومی
۱۰	۳-۲-۲- استخراج توصیف کننده‌ها

۱۱	۱-۳-۲-۲- توصیف کننده‌های صفر بعدی
۱۱	۲-۳-۲-۲- توصیف کننده‌های یک بعدی
۱۲	۳-۳-۲-۲- توصیف کننده‌های دوبعدی
۱۲	۴-۳-۲-۲- توصیف کننده‌های سه بعدی
۱۲	۴-۲-۲- انتخاب توصیف کننده‌های مناسب
۱۳	۵-۲-۲- ساختن مدل
۱۴	۶-۲-۲- رگرسیون خطی چندگانه
۱۵	۱-۶-۲-۲- روش ورود اجباری
۱۵	۲-۶-۲-۲- روش پسرو
۱۵	۳-۶-۲-۲- روش پیشرو
۱۶	۴-۶-۲-۲- روش مرحله‌ای
۱۶	۷-۲-۲- ارزیابی مدل به کمک پارامترهای آماری
۱۸	۱-۷-۲-۲- روش‌های اعتبارسنجی
۱۹	۱-۱-۷-۲-۲- اعتبارسنجی تقاطعی
۲۰	۲-۱-۷-۲-۲- تقسیم کردن مجموعه به دو دسته‌ی آموزش و ارزیابی
۲۰	۳-۱-۷-۲-۲- اعتبار سنجی بیرونی
۲۰	۸-۲- نرم‌افزارهای مورد استفاده
۲۰	۱-۸-۲- نرم‌افزار HYPERCHEM 7
۲۱	۲-۸-۲- نرم‌افزار Dragon
۲۳	۳-۸-۲- نرم‌افزار SPSS
۲۴	۴-۸-۲- نرم‌افزار MATLAB
فصل سوم: شبکه‌ی عصبی مصنوعی	
۲۵	۱-۳- شبکه عصبی
۲۶	۲-۳- تاریخچه شبکه عصبی مصنوعی

۲۷	۳-۳- ساختار شبکه‌های عصبی زیستی
۲۹	۴-۳- شباهت با مغز
۳۰	۵-۳- مدل ریاضی نرون
۳۱	۱-۵-۳- توابع انتقال
۳۱	۱-۱-۵-۳- تابع انتقال خطی (PURLIN)
۳۲	۲-۱-۵-۳- تابع انتقال لگاریتم زیگموئید (LOGSIG)
۳۲	۳-۱-۵-۳- تابع انتقال تانژانت هایپربولیک (TANSIG)
۳۲	۶-۳- انواع شبکه‌های عصبی
۳۳	۱-۶-۳- شبکه‌های تک لایه
۳۳	۲-۶-۳- شبکه‌های چند لایه
۳۵	۷-۳- انواع شبکه‌های عصبی مصنوعی از نظر برگشت‌پذیری
۳۶	۸-۳- آموزش شبکه
۳۶	۱-۸-۳- یادگیری نظارت شده یا با ناظر
۳۷	۲-۸-۳- یادگیری نظارت نشده یا بدون ناظر
۳۸	۹-۳- الگوریتم‌های آموزشی شبکه عصبی
۴۰	۱-۹-۳- الگوریتم آموزشی نزول گرادیانی
۴۱	۲-۹-۳- الگوریتم آموزشی لونیبرگ مارکوات
۴۴	۱۰-۳- بهبود تعمیم یا ارتقاء عمومیت
۴۴	۱-۱۰-۳- تنظیم
۴۵	۲-۱۰-۳- توقف زودهنگام

فصل چهارم: مطالعه ارتباط کمی ساختار- دانسیته ۱- آلکانولها با استفاده از روشهای خطی و غیرخطی

۴۷	۱-۴- مقدمه
۴۷	۲-۴- انتخاب سری داده‌ها
۶۹	۳-۴- محاسبه توصیف‌کننده‌ها

۶۹	۴-۴- انتخاب توصیف کننده‌ها با استفاده از روش ورود مرحله‌ای
۷۰	۴-۴-۱- مدل‌سازی به روش MLR
۷۲	۴-۵- مدل‌سازی به روش شبکه عصبی مصنوعی
۷۳	۴-۵-۱- انتخاب تابع انتقال، تابع آموزش، تعداد دوره‌های آموزش و تعداد گره در لایه پنهان
۷۹	۴-۵-۲- انتخاب تعداد دوره‌های آموزش
۸۱	۴-۶- ساختار شبکه عصبی مصنوعی بهینه شده
۸۱	۴-۷- ارزیابی مدل‌های خطی و غیرخطی
۸۱	۴-۷-۱- ارزیابی مدل‌های خطی و غیرخطی توسط روش رد مرحله‌ای گروهی
۱۰۳	۴-۷-۲- نمودار برگشت
۱۰۶	۴-۷-۳- نمودار خطای باقیمانده
۱۱۲	۴-۷-۴- ارزیابی شبکه با استفاده از پارامترهای آماری
۱۱۲	۴-۷-۵- ارزیابی شبکه با استفاده از دو ترکیب جدید
۱۱۷	۴-۷-۶- آزمون Y- تصادفی
۱۱۸	۴-۸- بررسی ارتباط توصیف کننده‌های ساختاری وارد شده در مدل با دانسیته
۱۱۸	۴-۸-۱- توصیف کننده‌های GETAWAY
۱۱۹	۴-۸-۲- فشار (p)
۱۲۰	۴-۸-۳- دما (T)
۱۲۰	۴-۹- بررسی میزان مشارکت توصیف کننده‌ها در مدل شبکه عصبی
۱۲۲	آینده‌نگری
۱۲۳	منابع

فهرست اشکال

۶	شکل (۱-۲) - نمایش خلاصه مراحل به کار رفته در یک فرایند QSPR
۲۸	شکل (۱-۳) - ساختار تشکیل دهنده‌ی نرون
۳۰	شکل (۲-۳) - مدل ریاضی نرون
۳۲	شکل (۳-۳) - برخی از انواع توابع انتقال در شبکه‌های عصبی
۳۳	شکل (۴-۳) - شبکه تک لایه
۳۴	شکل (۵-۳) - ساختار یک شبکه سه لایه
۳۵	شکل (۶-۳) - نمونه ای از یک شبکه پیش‌خور
۳۶	شکل (۷-۳) - نمونه ای از یک شبکه پس‌خور
۳۷	شکل (۸-۳) - یادگیری با ناظر
۳۸	شکل (۹-۳): یادگیری بدون ناظر
۴۶	شکل (۱۰-۳) - تغییرات خطای سری آموزش و سری ارزیابی
۷۵	شکل (۱-۴) - نمودار سه بعدی شبکه‌هایی با تابع تبدیل \tanh و تابع آموزش Im
۷۶	شکل (۲-۴) - نمودار سه بعدی شبکه‌هایی با تابع تبدیل $\log \text{sig}$ و تابع آموزش Im
۷۷	شکل (۳-۴) - نمودار سه بعدی شبکه‌هایی با تابع تبدیل \tanh و تابع آموزش br
۷۸	شکل (۴-۴) - نمودار سه بعدی شبکه‌هایی با تابع تبدیل $\log \text{sig}$ و تابع آموزش br
۸۰	شکل (۵-۴) - نمودار میانگین مربع خطاها بر حسب تعداد چرخه‌های آموزش
۸۱	شکل (۶-۴) - تصویر شماتیک ساختار شبکه‌ی عصبی بهینه شده
	شکل (۷-۴) - نمودار مقادیر دانسیته پیش‌بینی شده بر حسب مقادیر تجربی به روش رد مرحله ای گروهی
۸۶	برای الکل‌های اتانول، ۱-پنتانول و ۱-اکتانول (الف) با مدل MLR و (ب) با مدل ANN

- شکل (۴-۸) - نمودار مقادیر دانسیته پیش‌بینی شده بر حسب مقادیر تجربی به روش رد مرحله ای گروهی برای الکل‌های ۱- بوتانول، ۱- هپتانول و ۱- دکانول، الف) با مدل MLR و ب) با مدل ANN
- ۹۴
- شکل (۴-۹) - نمودار مقادیر دانسیته پیش‌بینی شده بر حسب مقادیر تجربی به روش رد مرحله ای گروهی برای الکل‌های اتانول، ۱- پروپانول، ۱- هگزانول، ۱- نونانول و ۱- دودکانول
- ۱۰۲ الف) با مدل MLR و ب) با مدل ANN
- شکل (۴-۱۰) - نمودار برگشت دانسیته پیش‌بینی شده توسط MLR بر حسب دانسیته تجربی
- ۱۰۴ برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست
- شکل (۴-۱۱) - نمودار برگشت دانسیته پیش‌بینی شده توسط ANN بر حسب دانسیته تجربی
- ۱۰۵ برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست
- شکل (۴-۱۲) - نمودار خطای باقیمانده نسبت به مقدار تجربی دانسیته با استفاده از روش MLR
- ۱۰۷ برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست
- شکل (۴-۱۳) - نمودار خطای باقیمانده نسبت به مقدار تجربی دانسیته با استفاده از روش ANN
- ۱۰۸ برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست
- ۱۱۳ شکل (۴-۱۴) - نمودار دانسیته پیش‌بینی بر حسب دانسیته تجربی برای مولکول ۱- تترادکانول
- ۱۱۵ شکل (۴-۱۵) - نمودار دانسیته پیش‌بینی بر حسب دانسیته تجربی برای مولکول ۱- هگزادکانول
- ۱۲۱ شکل (۴-۱۶) - مشارکت توصیف‌کننده‌ها در شبکه عصبی بهینه

فهرست جداول

۲۲	جدول (۱-۲) - انواع توصیف‌گرهای محاسبه شده توسط نرم افزار Dragon
۴۸	جدول (۱-۴) - مقادیر تجربی ρ و T برای اتانول
۵۰	جدول (۲-۴) - مقادیر تجربی ρ و T برای ۱- پروپانول
۵۴	جدول (۳-۴) - مقادیر تجربی ρ ، T و p برای ۱- بوتانول
۵۷	جدول (۴-۴) - مقادیر تجربی ρ و T برای ۱- پنتانول
۶۰	جدول (۵-۴) - مقادیر تجربی ρ و T برای ۱- هگزانول
۶۱	جدول (۶-۴) - مقادیر تجربی ρ و T برای ۱- هپتانول
۶۴	جدول (۷-۴) - مقادیر تجربی ρ و T برای ۱- اکتانول
۶۶	جدول (۸-۴) - مقادیر تجربی ρ و T برای ۱- نونانول
۶۷	جدول (۹-۴) - مقادیر مولکولی ρ و T برای ۱- دکانول
۶۸	جدول (۱۰-۴) - مقادیر مولکولی ρ و T برای ۱- دودکانول
۶۹	جدول (۱۱-۴) - ماتریس همبستگی متغیرهای مستقل وارد شده
۷۰	جدول (۱۲-۴) - مشخصات مدل منتخب توسط روش رگرسیون خطی چند گانه
۷۱	جدول (۱۳-۴) - مقادیر F ، R و خطای استاندارد برای سری ارزیابی برای مدل ۲ تا ۵
۷۲	جدول (۱۴-۴) - مقدار توصیف کننده‌ی وارد شده در مدل منتخب
۷۵	جدول (۱۵-۴) - مقادیر میانگین مربعات خطا برای شبکه‌هایی با تابع تبدیل tansig و تابع آموزش lm
۷۶	جدول (۱۶-۴) - مقادیر میانگین مربعات خطا برای شبکه‌هایی با تابع تبدیل logsig و تابع آموزش lm
۷۷	جدول (۱۷-۴) - مقادیر میانگین مربعات خطا برای شبکه‌هایی با تابع تبدیل tansig و تابع آموزش br

- جدول (۴-۱۸) - مقادیر میانگین مربعات خطا برای شبکه‌هایی با تابع تبدیل logsig و تابع آموزش br ۷۸
- جدول (۴-۱۹) - مقادیر میانگین مربع خطاهای حاصل سری ارزیابی در تعداد دوره‌های آموزش ۷۹
- جدول (۴-۲۰) - نتایج حاصل از ارزیابی مدل برتر ارائه شده توسط ANN و MLR با استفاده از رد مرحله‌ای گروهی الکل‌های اتانول، ۱-پنتانول و ۱-اکتانول ۸۲
- جدول (۴-۲۱) - نتایج حاصل از ارزیابی مدل برتر ارائه شده توسط ANN و MLR با استفاده از رد مرحله‌ای گروهی الکل‌های ۱-پنتانول، ۱-هپتانول و ۱-دکانول ۸۷
- جدول (۴-۲۲) - نتایج حاصل از ارزیابی مدل برتر ارائه شده توسط ANN و MLR با استفاده از رد مرحله‌ای گروهی ۱-پروپانول، ۱-هگزانول، ۱-نونانول و ۱-دودکانول ۹۵
- جدول (۴-۲۳) - مقادیر دانسیته تجربی و مقادیر پیش‌بینی شده توسط روش‌های ANN و MLR برای دو سری ارزیابی (V) و تست (T) ۱۰۹
- جدول (۴-۲۴) - پارامترهای آماری دو روش رگرسیون خطی چندگانه و شبکه عصبی مصنوعی ۱۱۲
- جدول (۴-۲۵) - مقادیر R^2 ، F، SE و MSE برای مولکول ۱-تترادکانول ۱۱۳
- جدول (۴-۲۶) - مقادیر دانسیته تجربی، دانسیته پیش‌بینی شده و درصد خطا برای مولکول ۱-تترادکانول ۱۱۴
- جدول (۴-۲۷) - مقادیر R^2 ، F، SE و MSE برای مولکول ۱-هگزادکانول ۱۱۵
- جدول (۴-۲۸) - مقادیر دانسیته تجربی، دانسیته پیش‌بینی شده و درصد خطا برای مولکول ۱-هگزادکانول ۱۱۶
- جدول (۴-۲۹) - مقادیر R^2 سری تست و ارزیابی پس از چندین آزمون Y-تصادفی ۱۱۷

فصل اول

مقدمه

1-1- مقدمه

توانایی حل مسائل مختلف در زمینه‌ی درک مکانیسم فرایندهای مختلف شیمیایی، کشف و توسعه‌ی مواد جدید و زمینه‌های دیگر شیمی هنوز به‌طور کامل وجود ندارد. برای عملی کردن بعضی از مسائل نیاز به سیستم‌های بسیار پیچیده‌ای می‌باشد که انجام آن‌ها مستلزم صرف هزینه‌های بسیار و مطالعات گسترده است. در جهت حل این مشکل از روش‌های کمومتریکس استفاده می‌کنند. روش‌های کمومتریکس^۱ از چند دهه‌ی پیش شناخته شده‌اند اما اخیراً با ظهور کامپیوترهای قدرتمند کمومتریکس ماهیت واقعی خود را پیدا کرده است. بنا به تعریف جامعی که انجمن بین‌المللی کمومتریکس (ICS)^۲ از این روش دارند، کمومتریکس عبارت است از کاربرد روش‌های ریاضی آماری برای برقراری ارتباط بین سنجش‌های انجام شده روی یک سیستم یا فرایند شیمیایی به منظور درک بهتر اطلاعات شیمیایی. به عبارتی دیگر کمومتریکس یک روش کارآمد برای خلاصه کردن اطلاعات مفید از یک سری داده مشخص و پیش‌بینی سری دیگر داده‌هاست. بهبود بخشیدن فرایندهای اندازه‌گیری و استخراج اطلاعات شیمیایی مفیدتر از داده‌های اندازه‌گیری شده فیزیکی و شیمیایی هدف اصلی کمومتریکس می‌باشد. علم کمومتریکس به‌وجود آمد تا در مورد مدل‌سازی‌های ریاضی، قواعد آماری و متدهای منطقی دیگر در رشته شیمی و به‌خصوص شیمی تجزیه بحث کند. یکی از شاخه‌های بسیار مهم کمومتریکس ارتباط کمی ساختار-ویژگی یا QSPR^۳ است. روش‌هایی که به منظور

¹ Chemometrics

² International Chemometrics Society

³ Quantitative Structure property Relationship(QSPR)

مطالعه ارتباط خطی ساختار- ویژگی مورد استفاده قرار می‌گیرند روش رگرسیون خطی چندگانه، رگرسیون اجزای اصلی و روش حداقل مربعات جزئی می‌باشند. در پیشرفت‌های اخیر کمومتریکس، علاوه بر ریاضی و آمار از شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)^۱، منطق فازی و الگوریتم ژنتیکی نیز استفاده شده است. این روش‌ها جزء دسته‌ای از علوم کامپیوتر به نام هوش مصنوعی (AI)^۲ قرار می‌گیرند. استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی سبب می‌شود که بتوانیم علاوه بر رابطه‌ی خطی میان ساختار و ویژگی ترکیبات روابط غیرخطی آنها را نیز مورد مطالعه قرار دهیم. همچنین مهم‌ترین خصوصیات شبکه‌ی عصبی این است که شبکه‌های عصبی، سیستمی برنامه ریزی شده با قواعد از پیش تعیین شده نمی‌باشند و می‌توانند طی فرایندی که آموزش نامیده می‌شود ساختار درونی خود را به صورت تجربی به نحوی تنظیم کنند که بهترین پاسخ ممکن را برای داده‌های ورودی جدید ایجاد کند.

۱-۲- هدف تحقیق

در مطالعه‌ی سیستم‌های شیمیایی، بیوشیمیایی و طبیعی دانستن خواص مختلف فیزیکی و شیمیایی مواد خالص و یا مخلوط‌ها تحت شرایط مختلف ترمودینامیکی لازمست. یکی از مهم‌ترین این خواص، دانسیته می‌باشد. اما همیشه یافتن مقادیر تجربی معتبر در شرایط مختلف فشار و دما، خصوصاً از منابع علمی امکان‌پذیر نیست. به علاوه اندازه‌گیری تجربی این خواص مشکل بوده و به صرف هزینه و وقت زیادی نیاز دارد. این محدودیت‌ها سبب می‌شوند که در کنار روش‌های آزمایشگاهی تجربی، روش‌های تئوری نیز برای استفاده از نتایج تجربی توسعه یابند. از جمله این روش‌ها مطالعات کمومتریکس به ویژه در زمینه‌ی QSPR می‌باشد که همان طور که قبلاً ذکر شد در آن می‌توان از تکنیک‌های مختلفی برای ایجاد روابط خطی (MLR)^۳ و یا غیر خطی (ANN) میان خواص ساختاری و دانسیته، استفاده نمود. در حقیقت هدف اصلی QSPR به دست آوردن رابطه‌ی

¹ Artificial Neural Network (ANN)

² Artificial Intelligence

³ Multiple Linear Regression (MLR)

کمی بهینه‌ای از ساختار مولکولی برای پیش‌بینی خواص می‌باشد و هنگامی که رابطه‌ی معتبری به دست آمد امکان پیش‌بینی دانسیته برای ساختارهای مشابه با ترکیبات اندازه‌گیری شده یا ساختارهای دیگر که هنوز اندازه‌گیری و یا تهیه نشده‌اند، وجود دارد. در این کار، هدف پیش‌بینی دانسیته‌ی تعدادی از ۱- آلکانول‌ها بر حسب دما و فشار با استفاده از روش نوین پردازش اطلاعات، شبکه‌ی عصبی مصنوعی می‌باشد.

۱-۳- روش کار

در این پایان‌نامه به منظور مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار- دانسیته از دو روش رگرسیون خطی چندگانه و شبکه عصبی مصنوعی استفاده شده است. در بخش اول، از رگرسیون خطی چندگانه به منظور ایجاد ارتباط خطی بین دانسیته و ساختار ۱۰ مولکول آلی از دسته‌ی الکل‌ها شامل اتانول، پروپانول، بوتانول، پنتانول، هگزانول، هپتانول، اکتانول، نونانول، دکانول، دودکانول با شرایط مختلف از نظر دما و فشار استفاده شد. در بخش دوم این پایان‌نامه، شبکه عصبی مصنوعی به منظور بررسی روابط غیر خطی بین دانسیته و ساختار این ترکیبات به کار رفته است. پس از رسم ساختار مولکول‌ها، توصیف‌کننده‌های مولکولی^۱ از ساختار ترکیبات مورد نظر توسط نرم‌افزارهای مناسب استخراج شد. سپس با استفاده از توصیف‌کننده‌های محاسبه شده توسط نرم‌افزارهای آماری، مدل مناسب به دست آمد.

۱-۴- پیشینه‌ی تحقیق

در سال ۲۰۱۱ محققان با استفاده از QSPR تعدادی از خصوصیات فیزیکی شیمیایی الکل‌های آلیفاتیک از جمله نقطه جوش، حلالیت و شاخص بازداري را محاسبه نموده‌اند [۱]. محاسبه‌ی دانسیته‌ی الکل‌ها بر حسب دما و فشار، اولین بار با استفاده از قاعده‌ی همدمای خطی اصلاح شده

¹ Molecular Descriptors

(MLIR) انجام گرفته است [۲]. این روش با تلفیقی از معادله‌ی حالت با روش سهم گروه‌ها توانسته است دانسیته‌ی الکل‌ها را با متوسط خطای نسبی کمتر از ۱/۱ درصد و ماکزیمم خطای نسبی ۱/۵ درصد پیش‌بینی کند. پس از آن در سال ۲۰۰۹، محاسبه‌ی دانسیته‌ی این ترکیبات بر حسب دما و فشار، با تلفیقی از شبکه عصبی موجک و روش سهم گروه‌ها انجام گرفته است که در آن دانسیته‌ی الکل‌ها با متوسط خطای نسبی کمتر از ۰/۵ درصد و ماکزیمم خطای نسبی کمتر از ۰/۷۲ درصد پیش‌بینی گردیده است [۳].

۲-۱- کمومتریکس

کمومتریکس شاخه‌ای از شیمی است که ابزارهای ریاضی و آمار را برای سامان بخشیدن به داده‌های شیمیایی و به‌دست آوردن اطلاعات بیشتر از آنها به‌کار می‌گیرد. در سال ۱۹۷۱۰ اسوانت ولد^۱، از دانشگاه اومئا^۲ در سوئد، کلمه کمومتریکس را پیشنهاد نموده و کمی بعد همکاری ولد با بروس آر. کووالسکی^۳ که در دانشگاه واشنگتن بر روی الگوشناسی در شیمی تجزیه کار می‌کرد، این نام را به آمریکا کشاند و منجر به تاسیس انجمن بین‌المللی کمومتریکس در سال ۱۹۷۴ گردید [۴]. از آن موقع به بعد کمومتریکس به‌سرعت توسعه یافت و اکنون در شاخه‌های مختلف شیمی مورد استفاده قرار می‌گیرد. هاری^۴ و هیرش^۵ در اوایل سال ۱۹۸۰ پیشرفت‌های کمومتریکس را در مراحل مختلف رده‌بندی کردند و پس از آنها براون^۶ این فعالیت‌ها را ادامه داد. از نظر شیمی‌دانان فعالیت‌ها و خواص یک ترکیب ناشی از ویژگی‌های ساختاری آن است. اگر مطالعات به‌صورت ارتباط بین ساختار و ویژگی باشد به آن ارتباط کمی ساختار-ویژگی (QSPR) می‌گویند که نتایج این نوع مطالعات علاوه بر شفاف‌سازی نحوه‌ی ارتباط بین خواص مولکول‌ها و ویژگی‌های ساختمانی آنها، به پژوهشگران در پیش‌بینی رفتار مولکول‌های جدید بر اساس رفتار مولکول‌های مشابه کمک می‌کند. از جمله قابلیت

¹ Svante wold

² Umea

³ Bruce R.Kowalski

⁴ Howery

⁵ Hirsch

⁶ Brown

های دیگر کمومتریکس می‌توان به کنترل فرآیندها با نگرش چند متغیره‌ای به مسائل، ساخت مدل‌ها با قابلیت پیش‌بینی و ارزیابی آنها، مقایسه نتایج به‌دست آمده از روش‌های مختلف و همچنین تعریف شاخص‌هایی که کیفیت اطلاعات استخراج شده و مدل‌های به‌دست آمده را مورد سنجش قرار دهند، اشاره نمود [۵ و ۶]. افزایش کاربرد روش‌های کمومتریکس بیشتر در مواردی است که گاهی دانشمندان با موادی سر و کار دارند که بسیار سمی و خطرناک بوده و یا به‌راحتی قابل دسترس نبوده‌اند. در نتیجه در این موارد می‌توان از روش‌های ریاضی و آمار به‌طور موثری جهت توصیف و توجیه نتایج آزمایش‌های مختلف استفاده نمود [۷]. کاربردهای عمومی روش‌های کمومتریکس شامل توسعه ارتباط کمی ساختار- فعالیت، ارتباط کمی ساختار- خاصیت و ارزیابی داده‌های شیمیایی می‌باشد. هم‌اکنون کمومتریکس ابزاری قوی و کارآمد برای شیمی‌دانان به‌شمار رفته و به عنوان یک زیرشاخه‌ی رشته شیمی در بسیاری از دانشگاه‌های جهان تدریس می‌شود. پیشرفت‌ها در علوم کامپیوتر، فناوری اطلاعات، آمار و ریاضی کاربردی، عناصر جدیدی را در کمومتریکس معرفی کرده است [۸-۱۰]. هم‌زمان با رشد سریع کمومتریکس در جهان، در ایران نیز استفاده از این روش در تحقیقات متخصصین شیمی تجزیه افزایش قابل توجهی یافت. انجمن کمومتریکس ایران به عنوان یکی از شاخه‌های فعال انجمن شیمی ایران در سال ۲۰۰۰ تأسیس شد. البته بیشترین زمینه‌هایی که تاکنون در ایران مورد توجه قرار گرفته، شامل مطالعات (QSPR/QSAR)، کالیبراسیون چندمتغیره^۱ و هوش مصنوعی می‌باشد [۱۱].

۲-۲- ارتباط کمی ساختار خاصیت (QSPR)

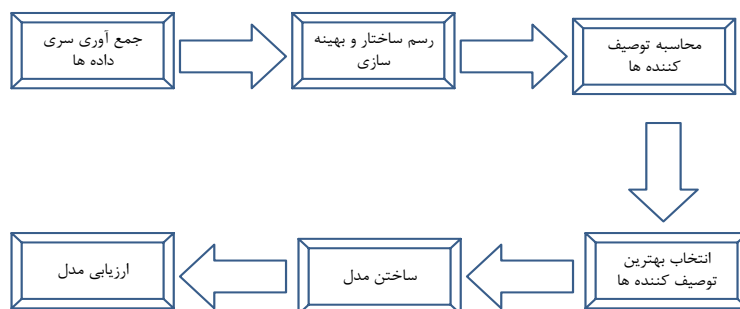
هرگاه مطالعات به‌صورت ارتباط بین ساختار مولکولی و خواص مشاهده شده مولکول انجام گیرد، به آن ارتباط کمی ساختار- خاصیت می‌گویند. در این روش خاصیت مورد نظر با پارامترهایی بر پایه‌ی خواص مولکولی که توصیف‌کننده‌های مولکولی نامیده می‌شوند ارتباط داده می‌شود [۱۲-۱۵].

^۱ Multivariate Calibration (MVC)

توصیف‌کننده‌های مولکولی پارامترهای نظری هستند که به ساختار مولکول ارتباط دارند و برای هر مولکول مقادیر خاصی را به خود اختصاص می‌دهند. این توصیف‌کننده‌ها از روی ساختارهای مولکولی و با استفاده از الگوریتم‌های شناخته شده ریاضی، نظریه گراف شیمیایی، روش مکانیک کوانتومی و غیره محاسبه می‌شوند [۱۶].

توسعه‌ی مدل در مطالعات QSPR شامل مراحل زیر می‌باشد:

- ۱- محاسبه‌ی توصیف‌کننده‌ها
- ۲- دسته‌بندی داده‌ها به سری‌های مختلف
- ۳- کاهش متغیر (فرایندی که طی آن زیر مجموعه‌ای از توصیف‌کننده‌ها به صورت مستقل از خاصیت موردنظر انتخاب می‌شود)
- ۴- یافتن مدل مناسب میان توصیف‌کننده‌های انتخاب شده و خاصیت مورد نظر
- ۵- ویژگی مدل
- ۶- اعتبارسنجی مدل



شکل (۱-۲) - نمایش خلاصه مراحل به کار رفته در یک فرایند QSPR

استفاده از QSPR چندین مزیت دارد: اولاً، تعداد توصیف‌کننده‌های مورد استفاده در این روش نسبت به روش‌های دیگر کمتر است در نتیجه باعث ایجاد مدل‌های قوی‌تر می‌شود. ثانیاً، توصیف‌کننده‌های مورد استفاده، معانی فیزیکی تعریف شده‌ای دارند که برای جستجوی اطلاعات فیزیکو-

شیمیایی که وابستگی بالایی با خواص مورد نظر دارند، مفید هستند. ثالثاً، چون توصیف‌کننده‌های تئوری از ساختار مولکولی مشتق می‌شوند، بنابراین مدل‌های QSPR حاصل شده از آنها از لحاظ نظری برای ترکیبات آلی مختلف قابل کاربرد هستند [۱۹-۱۷ و ۶]. امروزه می‌توان از QSPR به صورت موفقیت‌آمیزی برای پیش‌بینی بسیاری از خواص فیزیکی ترکیبات شیمیایی، که با استفاده از ساختار مولکولی ترکیبات تعیین می‌شوند استفاده نمود. از جمله کاربردهای QSPR می‌توان به مطالعه حلالیت، گرانی و زمان بازداری ترکیبات در ستون‌های کروماتوگرافی اشاره نمود.

۲-۳- ارتباط کمی ساختار - فعالیت (QSAR)

یکی از زمینه‌های مهم کمومتریکس، مطالعاتی است که فعالیت ترکیبات شیمیایی را به ویژگی‌های ساختاری آنها ارتباط می‌دهد. مفهوم رابطه کمی ساختار-فعالیت (QSAR) برای اولین بار در سال ۱۹۶۴ مطرح شد [۲۰]. روش QSAR که امروزه استفاده می‌شود به مطالعات و مدل‌های به چاپ رسیده از هانش^۱ و فری-ویلسون^۲ نسبت داده می‌شود [۲۱]. در حقیقت QSAR سعی در پیدا کردن رابطه‌ای متعادل و هماهنگ بین ساختارهای مولکولی و فعالیت شیمیایی، به منظور کاربرد این روابط برای ارزیابی فعالیت ترکیبات جدید دارد [۲۲ و ۲۳]. بیشتر کاربردهای QSAR در زمینه‌هایی مانند طراحی دارو و برآورد آسیب‌های محیطی ترکیبات شیمیایی می‌باشد.

۲-۴- تاریخچه تولد QSAR/QSPR

مندلیف به‌عنوان شروع‌کننده روش QSAR/QSPR شناخته می‌شود از آنجا که خصوصیات عناصر جدید را از روی عدد اتمی آنها حدس زد و جدول تناوبی را بدین ترتیب در سال ۱۸۶۹ کامل نمود [۲۴] در سال ۱۸۶۳، کراس^۳ مشاهده کرد که سمیت الکل‌ها با کاهش حلالیت آنها در آب

¹ Hansch

² Free-Wilson

³ Cros

افزایش می‌یابد [۲۵]. بعد از آن در سال ۱۹۸۶، کرام^۱ و فرایزر^۲ استنباط کردند که باید بین فعالیت فیزیولوژیکی و ساختمان شیمیایی ماده ارتباطی وجود داشته باشد [۲۶ و ۲۷]. اورتون^۳ در مورد اثرات گروه‌های عاملی روی کاهش و یا افزایش ضریب تقسیم مطالعه کرد [۲۸]. لازارر^۴ سیستمی برای پیش‌بینی ضریب تقسیم از روی ساختمان گزارش کرد [۲۹].

۲-۴-۱- جمع‌آوری سری داده‌ها

در مطالعات QSPR و همچنین توسعه آن یافتن مجموعه‌ای از مولکول‌ها که از نظر ساختاری با یکدیگر شباهت داشته باشند و همچنین دارای مقادیر اندازه‌گیری شده (تجربی) از یک ویژگی خاص مولکولی، نظیر دانسیته در شرایط یکسان باشند، در اولویت قرار دارد. به این دسته مولکولی سری داده‌ها می‌گویند که هرچه تعداد و تنوع این گونه‌ها در این سری بیشتر بوده و به‌صورتی انتخاب شوند که از نظر ساختاری به مولکول مادر شباهت بیشتری داشته باشند مدل QSPR به‌دست آمده مطلوب تر و از قدرت پیش‌بینی بالاتری برخوردار خواهد بود.

۲-۴-۲- بهینه‌سازی ساختار مولکول‌ها

ایجاد توصیف‌کننده هندسی و هیبریدی بر مبنای ساختار و هندسه دقیق مولکولی استوار است و اگر ساختارها به صورت‌بندی با حداقل انرژی نباشد، مقادیر غیرصحیحی برای این توصیف‌کننده‌ها ایجاد می‌شود. ایجاد ساختار هندسی بهینه که در آن انرژی مولکول حداقل باشد توسط شیمی محاسباتی انجام می‌شود. روش‌های مختلفی که در شیمی محاسباتی برای بهینه‌سازی ساختار مولکول مورد استفاده قرار می‌گیرند شامل موارد زیر است [۳۰]:

¹ Crum

² Fraser

³ Overton

⁴ Lazarer

۱- روش مکانیک مولکولی

۲- روش مکانیک کوانتومی

۲-۴-۱- روش مکانیک مولکولی

این روش‌ها بر مبنای روابط کلاسیک بنا شده است و به طور خیلی ساده، ساختمان مولکولی به صورت گوی و فنر در نظر گرفته می‌شود. در این روش انرژی مولکول به صورت مجموعه‌ای از انرژی‌های کششی، خمشی، الکتروستاتیکی و... بیان می‌شود. سپس با استفاده از برنامه‌های کامپیوتری مربوط به روش مکانیک مولکولی طول پیوندها، زوایای پیوندی و صورتبندی تغییر می‌کند تا ساختاری که عبارت انرژی مولکولی را مینیمم کند، پیدا شود. این روش بهینه‌سازی بیشتر برای ماکرومولکول‌ها به کار می‌رود [۳۱].

۲-۴-۲- روش مکانیک کوانتومی

در این روش‌ها از معادله شرودینگر^۱ برای محاسبه انرژی مولکول استفاده می‌شود و نسبت به روش مکانیک مولکولی دارای صحت بیشتری است زیرا اثرات الکترونی اعمال شده روی مولکول را نیز در محاسبات وارد می‌کنند در حالی که مکانیک مولکولی اثر الکترون‌ها را در نظر نمی‌گیرد. چون این محاسبات پیچیده می‌باشند، به زمان زیادی نیاز دارد. از جمله روش‌های کوانتومی می‌توان به روش‌های آغازین^۲ و روش‌های نیمه تجربی^۳ اشاره کرد [۳۰].

در روش‌های آغازین از هیچ داده‌ی تجربی استفاده شود، بلکه ثابت‌هایی مانند جرم الکترون، ثابت پلانک، ثابت سرعت نور و بار الکترون به کار گرفته می‌شوند و انرژی مولکول از حل معادله‌ی شرودینگر با استفاده از یک سری تقریب به دست می‌آید. چون در این روش کل الکترون‌ها در محاسبات وارد

¹ Schrodinger Equation

² Ab Initio

³ Semi empirical

می‌شود، بنابراین فقط برای مولکول‌های کوچک قابل استفاده خواهد بود. برای مولکول‌های بزرگتر محاسبات پیچیده‌تر شده و به ابر رایانه نیاز خواهیم داشت [۳۰ و ۳۲].

روش‌های نیمه تجربی نیز روش‌هایی هستند که در نرم‌افزارهایی نظیر MOPAC و Hyperchem وارد شده‌اند. در این روش‌ها فقط الکترون‌های لایه ظرفیت را در محاسبات وارد می‌کنند در نتیجه زمان محاسبات در این روش‌ها از روش‌های آغازین کمتر است و می‌تواند برای مولکول‌های بزرگتر به کار رود [۳۳].

۲-۴-۳- استخراج توصیف کننده‌ها

اصطلاح توصیف کننده مولکولی با پیشرفت مدل‌های ارتباط دهنده ساختار- خاصیت رایج شد. در بعضی از مراجع عدد پلات^۱ [۳۴] و شاخص وینر^۲ [۳۵] که در سال ۱۹۴۷ تعریف شدند، به‌عنوان اولین توصیف کننده‌های مولکولی در نظر گرفته می‌شوند. توصیف کننده‌های مولکولی مقادیر عددی هستند که ساختار یا شکل مولکول را توصیف می‌کنند. به‌عبارت دیگر هر توصیف کننده بیانگر خصوصیت ویژه‌ای از مولکول است که ممکن است بر خاصیت مورد نظر موثر باشد. برخی از ویژگی‌های یک توصیف کننده مولکولی مناسب عبارتند از:

* ساده بودن

* مستقل بودن

* توانایی تفسیر ساختار مولکول

* عدم همبستگی با سایر توصیف کننده‌ها

* تغییر منظم با تغییر تدریجی در ساختارها

* قابلیت تمایز بین ایزومرهای مختلف مولکول

¹ Platt number

² Wiener index

*وابستگی صحیح به اندازه مولکول

توصیف کننده‌های مولکولی به دو دسته اصلی تقسیم می‌شوند:

۱- توصیف کننده‌های حاصل از اندازه‌گیری‌های تجربی (مانند قطبش پذیری و ممان دوقطبی)

۲- توصیف کننده‌های مولکولی نظری مشتق شده از ساختار نمادین مولکول

تقسیم‌بندی دیگر برای توصیف کننده، بر اساس ابعاد توصیف کننده (صفر بعدی، یک بعدی، دوبعدی و سه بعدی) می‌باشد که در اینجا اشاره‌ای مختصر به این توصیف کننده‌ها خواهد شد.

۲-۴-۳-۱- توصیف کننده‌های صفر بعدی

ساده‌ترین نمایش مولکولی فرمول شیمیایی است. این نمایش هیچ‌گونه اطلاعاتی از شکل فضایی مولکول ارائه نمی‌کند و از این رو توصیف کننده‌های مولکولی به دست آمده از فرمول‌های شیمیایی توصیف کننده‌های صفر بعدی نامیده می‌شوند. این دسته از توصیف کننده‌ها تعداد و نوع اتم‌ها، جرم مولکولی و سایر خصوصیات اتمی را تعیین می‌کنند (مثلا مجموع حجم‌های اتمی و اندروالس). همچنین این نوع توصیف کننده‌ها، به توصیف کننده‌های ساختاری نیز معروفند که علاوه بر موارد فوق شامل توصیف کننده‌های مربوط به نوع پیوندها و حضور حلقه‌ها در مولکول نیز می‌شوند. تعداد کل اتم‌ها، تعداد یک عنصر شیمیایی خاص (C,N,O,H,F,...)، تعداد گروه‌های عاملی خاص، تعداد پیوندهای ساده، دوگانه، سه گانه، آروماتیک و...، تعداد کل حلقه‌ها بر اساس تعداد اتم‌های آنها (حلقه‌های شش تایی، پنج تایی و...) در مولکول، وزن مولکولی و متوسط وزن اتمی، مثال‌هایی از توصیف کننده‌های ساختاری می‌باشند.

۲-۴-۳-۲- توصیف کننده‌های یک بعدی

نمایش فهرست ویژگی‌های زیر ساختاری^۱ می‌تواند به عنوان نمایشی یک بعدی از مولکول در نظر گرفته شود و شامل لیستی از اجزای ساختاری از یک مولکول (شامل اجزا، گروه‌های عاملی یا استخلافات مورد نظر در یک مولکول) است. توصیف کننده‌های گروه‌های عاملی، قطعات اتم مرکزی، توصیف کننده‌های تجربی و خصوصیات مولکولی زیر گروه‌های این دسته می‌باشند.

۲-۴-۳-۳-توصیف کننده‌های دوبعدی

نمایش دو بعدی از مولکول، چگونگی اتصال اتم‌ها در مولکول بر حسب حضور و ماهیت باندهای شیمیایی می‌باشد مانند دیدگاه بر پایه‌ی گراف مولکولی، که یک نمایش دوبعدی را ارائه می‌کند و معمولاً به عنوان نمایش توپولوژیکی شناخته می‌شود. توصیف کننده‌های مولکولی به دست آمده از الگوریتم‌های به کار گرفته برای یک نمایش توپولوژیکی، شمارش مسیرهای مولکول^۲، توصیف کننده های BCUT^۳، ضرایب بار^۴ و توصیف کننده‌های خود همبستگی دوبعدی^۵ می‌شود.

۲-۴-۳-۴-توصیف کننده‌های سه بعدی

نمایش سه بعدی، یک مولکول را معمولاً به عنوان یک شیء هندسی انعطاف ناپذیر در فضا می‌بیند و نه تنها یک نمایش از ماهیت و اتصال اتم‌ها بلکه از صورتبندی فضایی مولکول نیز فراهم می‌کند نمایش های هندسی^۶ نامیده می‌شوند. توصیف کننده‌های مولکولی مشتق شده از این نمایش‌ها، توصیف کننده‌های سه بعدی هستند. زیر گروه‌های این دسته شامل شاخص‌های آروماتیکی^۷، خصوصیات مولکولی راندیک^۸ و توصیف کننده‌های 3D-MORSE^۱ می‌باشند.

¹ Substructure List Representation

² Molecular Walk count

³ Burden-CAS-University of Texas eigenvalues

⁴ Charge indices

⁵ 2D autocorrelation

⁶ Geometrical Representation

⁷ Aromaticity indices

⁸ Randic molecular properties

۲-۴-۴- انتخاب توصیف کننده‌های مناسب

یکی از مهمترین مراحل QSAR تعیین و انتخاب توصیف کننده‌های مناسب می‌باشد. بنابراین باید توصیف کننده‌هایی انتخاب کرد که با پارامتر مورد نظر ارتباط نزدیکی داشته باشد و بتواند تغییرات آن را به خوبی توجیه نمایند. یکی از روش‌های انتخاب توصیف کننده‌ی مناسب، روش برازش مرحله‌ای می‌باشد که با محاسبه‌ی ضرایب همبستگی مشخص می‌شوند. ضریب همبستگی، میزان نزدیکی اطلاعات به دست آمده به خط رگرسیون را نشان می‌دهد. مقدار ضریب همبستگی، بین صفر و یک تغییر می‌کند. ضریب همبستگی صفر، یعنی بدین معنی است که هیچ ارتباطی بین توصیف کننده و فعالیت وجود ندارد و اگر توصیف کننده دارای ضریب همبستگی یک باشد بدین معنی است که ارتباط کامل است و می‌تواند خاصیت مورد نظر را به درستی توصیف کند. پس توصیف کننده‌هایی با ضرایب همبستگی بزرگ در برازش منحنی برای ساختن مدل جهت پیش‌گویی خواص استفاده می‌شوند. از دیگر روش‌های انتخاب توصیف کننده‌ها می‌توان به الگوریتم ژنتیک^۱ و روش جایگزینی^۲ اشاره کرد. در ادامه به برخی از روش‌های خطی انتخاب توصیف کننده‌ها اشاره می‌شود.

۲-۴-۵- ساختن مدل

یک مدل بر اساس روش‌های آماری گوناگون که از قواعد ریاضی بهره می‌برد، تشکیل شده و بیانگر ارتباط میان متغیر وابسته^۴ و متغیر(های) مستقل^۵ می‌باشد. متغیرهای مستقل، آنهایی هستند که در تابعی که برای مدل‌سازی مناسب است سهم دارند. متغیرهای وابسته نیز متغیرهایی هستند که یافتن وابستگی آماری میان آنها و تعدادی از متغیرهای مستقل مدنظر بوده و معمولاً از اندازه‌گیری

¹ 3-D Molecular Representation of Structures based on Electron diffraction

¹ Genetic Algorithm

² Replacement Method

³ Dependent Variable

⁴ Independent Variable(s)

های تجربی به دست می‌آیند. هدف از فرایند انتخاب متغیر، دستیابی به یک مدل مناسب با تعدادی متغیر مستقل (توصیف‌کننده‌ها) است تا بتوان میزان متغیر وابسته را به کمک آن تخمین زد. چندین روش متفاوت برای ساختن مدل QSPR وجود دارد که از جمله می‌توان به رگرسیون خطی چندگانه (MLR) به عنوان روش خطی و شبکه عصبی مصنوعی (ANN) به عنوان یک روش غیر خطی اشاره کرد. مدل‌های رگرسیون که شامل تعداد کمی از متغیرهای مستقل هستند بر سایر مدل‌ها برتری دارند، زیرا تفسیر این مدل‌ها به سهولت انجام می‌گیرد و قدرت پیش‌بینی بالایی دارند [۳۶]. رگرسیون به معنای رابطه‌ی ایجاد شده میان یک متغیر از طرفی و یک یا چند متغیر از طرف دیگر می‌باشد. در صورتی که تنها یک متغیر مستقل وجود داشته باشد، رگرسیون را ساده و در غیر این صورت، رگرسیون را چندگانه می‌گویند. در بسیاری موارد برای پیش‌بینی مقادیر یک متغیر، دانستن مقادیر دو یا چند متغیر دیگر لازم بوده و در این حالت از روش‌های رگرسیون چندگانه استفاده می‌شود.

۲-۴-۶- رگرسیون خطی چندگانه

رگرسیون خطی چندگانه روشی است که برای مدل‌سازی ارتباط خطی بین متغیر وابسته و یک یا چند متغیر مستقل به کار می‌رود. معادله‌ی این نوع رگرسیون به این صورت است:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \dots + \beta_p X_p \quad (1-2)$$

که در آن (X_i) ها متغیرهای مستقل (توصیف‌کننده‌های عددی) و مقادیر β_1 تا β_n ضرایب متغیرهای مستقل اند و Y نیز همان متغیر وابسته یا به عبارت دیگر خاصیت یا فعالیت مورد اندازه‌گیری است. مقدار ضریب متغیر مستقل در معادله، بیانگر میزان اهمیت آن متغیر در پیش‌بینی مقادیر متغیر وابسته است. این روش تنها زمانی به کار می‌رود که تعداد مولکول‌های مورد بررسی بیش از تعداد توصیف‌کننده‌ها باشد و متغیرها با یکدیگر همبستگی زیادی نداشته باشند. در رگرسیون خطی چندگانه چندین روش رگرسیون مختلف برای ایجاد مدل وجود دارد که به برخی از آنها اشاره می‌گردد. روش ورود اجباری، روش پس‌رو، روش پیش‌رو و روش مرحله‌ای [۳۷].

۲-۴-۶-۱- روش ورود اجباری^۱

در این روش همه‌ی متغیرهای مستقل (توصیف کننده‌ها) در مرحله مدل‌سازی به کار گرفته می‌شوند و چون اثرات مثبت و منفی متغیرهای وارد شده در مدل و میزان همبستگی آن‌ها با خاصیت مورد مطالعه (متغیر وابسته) نادیده گرفته می‌شود معمولاً از این روش، برای ساخت مدل استفاده نمی‌شود.

۲-۴-۶-۲- روش پسرو^۲

در این روش ابتدا کلیه متغیرهای مستقل به طور همزمان در رگرسیون (ساخت مدل) به کار گرفته می‌شوند. در مرحله بعد، اثر حذف تک تک متغیرها از مدل مورد بررسی قرار می‌گیرد. به این ترتیب که اگر با حذف یک متغیر مستقل آماره F و R (که بعداً در مورد آن توضیح داده می‌شود) به مقدار قابل توجهی تغییر نکرد، آن متغیر از مدل حذف می‌شود و در غیر این صورت به‌عنوان یک پارامتر موثر در ساخت مدل به کار می‌رود. این کار برای همه متغیرها تکرار می‌شود تا در نهایت متغیرهای مستقلی که بیشترین ارتباط با متغیر وابسته داشته باشند، به دست آیند.

۲-۴-۶-۳- روش پیشرو^۳ این روش عکس روش پسرو است. در اینجا ابتدا قویترین متغیرهای

مستقل شناسایی می‌شوند. یعنی متغیری که ضریب همبستگی آن با متغیر وابسته از بقیه متغیرها بیشتر باشد. سپس با توجه به ضریب همبستگی، متغیر بعدی وارد مدل می‌شود و در هر مرحله اثر ورود هر متغیر مورد بررسی قرار می‌گیرد یعنی اگر با ورود متغیر جدید تغییر در آماره F و R از نظر

¹ Stepwise Regression Methods

¹ Backward

² Forward

آماري معنادار باشد، متغير مورد نظر در مدل نگه داشته مي‌شود و در غير اين صورت آن متغير از مدل حذف مي‌شود.

۲-۴-۶-۴- روش مرحله‌اي^۱

اين روش مشابه روش‌هاي پيشرو است. بدین صورت که ابتدا متغيري که بالاترين ميزان همبستگي را با متغير وابسته دارد وارد مدل مي‌شود، ولي با ورود هر متغير جديد، کليه متغيرهاي موجود در معادله مورد برسي قرار مي‌گيرند. براي متغيرهاي وارد شده آماره F محاسبه مي‌شود و متغير با کوچکترين آماره قبل از ورود متغير جديد حذف خواهد شد و مدل مناسب به دست مي‌آيد [۳۸].

۲-۴-۷- ارزيابي مدل به کمک پارامترهاي آماری

براي اطمینان از اینکه مدل به دست آمده، مدل مناسبی است و قادر خواهد بود نمونه‌هاي مختلفی را در یک جمعیت پيش‌بینی کند، باید مدل را ارزيابی نمود. اين ارزيابی از طريق شاخص‌هاي کمی است که به وسيله آنها صحت نتایج ارائه شده توسط مدل مورد سنجش قرار مي‌گيرد. برخی از اين شاخص‌هاي کمی که پارامترهاي آماری^۲ می‌باشند، عبارتند از: آماره R ، آماره R^2 ، آماره t ، آزمون فیشر، مجموع مربعات باقی‌مانده‌ها، میانگین مربع خطاها، خطای استاندارد پيش‌بینی، خطای نسبی پيش‌بینی و خطای مطلق میانگین.

¹ Stepwise

² Statistical Indices

ضریب همبستگی یا آماره R: این فاکتور، ضریب همبستگی بین مقدار پیش‌بینی و مقدار واقعی را نشان می‌دهد. مقدار این آماره بین ۱- تا ۱ متغیر است. مقدار بزرگ‌تر آن نشان دهنده‌ی این است که ارتباط خطی بیشتری میان متغیر وابسته و متغیرهای مستقل وجود دارد.

آماره R²: به عنوان یک شاخص برای بیان دقت خط رگرسیون به کار رفته و مقدار آن بین صفر و یک تغییر می‌کند. این آماره نشان‌دهنده‌ی میزان تغییرات متغیر وابسته توسط متغیر مستقل است. از آنجا که R² بخشی از واریانس متغیر وابسته را که توسط متغیرهای مستقل به حساب آمده معین می‌کند به R² ضریب تعیین^۱ نیز می‌گویند.

آماره t: آزمون معنی داری حضور هر متغیر مستقل در معادله رگرسیون، آزمون t می‌باشد. مقدار t از تقسیم مقدار ضریب هر متغیر مستقل بر خطای استاندارد آن به دست می‌آید.

آزمون فیشر یا آماره F: آزمون F در واقع آزمون معنی دار بودن آماری در تحلیل رگرسیون ساده و چندمتغیره است و برابر با نسبت میانگین مربعات رگرسیون (MSR) به میانگین مربعات باقیمانده‌ها (MSE) است. بیان ریاضی آن عبارتست از:

$$F = \frac{MSR}{MSE} = \frac{SS_{reg}/DF_{reg}}{SS_{res}/DF_{res}} \quad (۲-۲)$$

SS_{reg}: مجموع مجذورات رگرسیون

SS_{res}: مجموع مجذورات باقیمانده‌ها

DF_{reg}: درجه آزادی رگرسیون

DF_{res}: درجه آزادی باقیمانده‌ها

^۱ Determination coefficient

مجموع مربعات باقی مانده‌ها^۱ (PRESS): برابر مجموع مجذورات تفاوت بین مقدار کمیت

مشاهده شده (y_i) و مقدار تخمین زده شده (\hat{y}_i) است.

$$PRESS = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (3-2)$$

میانگین مربع خطاها^۲ (MSE): توسط رابطه (۴-۲) تعریف می‌گردد که پارامترهای آن قبلاً

تعریف شده‌اند.

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

خطای استاندارد پیش‌بینی^۳ (SEP):

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

خطای نسبی پیش‌بینی^۴ (REP):

$$REP(\%) = \frac{100}{\bar{y}} \times SEP = \frac{100}{\bar{y}} \times \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}} \quad (6-2)$$

خطای مطلق میانگین^۵ (MAE):

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|}{n} \quad (7-2)$$

¹ Predictive Residual Sum of Squares

² Mean Square Error

³ Standard Error of Prediction

⁴ Relative Error of Prediction

⁵ Mean Absolute Error

۲-۴-۷-۱- روش‌های اعتبارسنجی^۱

این روش‌ها برای ارزیابی اعتبار مدل‌های به‌دست آمده و بررسی قدرت پیش‌بینی مدل‌ها به‌کار گرفته می‌شوند. به‌عبارت دیگر توسط این تکنیک‌ها، توانایی مدل‌ها برای انجام پیش‌بینی‌های مطمئن در موارد جدیدی که پاسخ ناشناخته دارند سنجیده می‌شود [۳۹]. یک شرط لازم برای اعتبار یک مدل رگرسیون آن است که ضریب تعیین آن (R^2)^۲ اتحاد ممکن به یک نزدیک باشد و خطای استاندارد^۳ آن کوچک باشد به‌هر حال این شرط (توانایی برازش) زمانی که مدل‌ها برازش نزدیک‌تری (SE کوچکتر و R^2 بزرگتر) را برای تعداد زیادتری از پارامترها و متغیره در مدل می‌دهند برای اعتبار مدل کافی نیست زیرا این پارامترها ارتباطی به توانایی مدل برای ایجاد پیش‌بینی‌های مطمئن بر روی داده‌های بعدی ندارند. در فرآیند اعتبارسنجی متداول، ابتدا فرایند انتخاب متغیر به‌کار گرفته شده و سپس پاسخ برای موارد کنار گذاشته پیش‌بینی می‌شود. در بهترین وضعیت، یک سری اعتبار مناسب از ترکیبات (سری اعتبار بیرونی)^۴، برای هر مقدار پاسخ پیش‌بینی شده که قابل مقایسه با مقادیر واقعی است، باید در دسترس باشد. روش‌های اعتبارسنجی عبارتند از: اعتبارسنجی تقاطعی، اعتبارسنجی بیرونی و تقسیم کردن مجموعه به دو دسته آموزش و ارزیابی.

۲-۴-۷-۱-۱- اعتبارسنجی تقاطعی

رایج‌ترین تکنیک اعتبارسنجی است که در این تکنیک، در هر بار یکی یا یک گروه کوچک از داده‌ها کنار گذاشته و سپس برای هر مجموعه داده که باقی مانده، مدلی ایجاد گردیده و پاسخ برای داده‌های کنار گذاشته شده از روی مدل پیش‌بینی می‌شود. مجذور تفاوت‌های میان پاسخ واقعی و پاسخ پیش‌بینی شده برای هر داده کنار گذاشته شده با عبارت PRESS (مجموع مربعات باقیمانده

⁴ Validation Technique

⁵ Determination Coefficient

⁶ Standard Error (SE)

¹ External Validation Set

پیش‌بینی)^۱ بیان می‌شود. از PRESS نهایی، مقادیر R^2 و SDEP (انحراف استاندارد خطای پیش‌بینی) محاسبه می‌شوند [۴۰].

۲-۴-۷-۱-۲- تقسیم کردن مجموعه به دو دسته‌ی آموزش و ارزیابی

این روش بر اساس تقسیم‌بندی مجموعه‌ی داده‌ها به یک سری آموزش و یک سری ارزیابی است. مدل از سری آموزش محاسبه می‌شود و قدرت پیش‌بینی توسط سری ارزیابی بررسی می‌شود. تقسیم بندی داده‌ها به دو سری به صورت کاملاً تصادفی انجام می‌گیرد به طوری که نتایج به میزان زیادی به تقسیم‌بندی داده‌ها وابسته‌اند [۴۱].

۲-۴-۷-۱-۳- اعتبار سنجی بیرونی

در این روش، مجموعه‌ی داده‌ها به سه سری آموزش، سری ارزیابی و سری تست تقسیم می‌شود. در این روش مدل با استفاده از سری آموزش بهینه می‌شود سپس قدرت پیش‌بینی مدل توسط سری ارزیابی، بررسی و در نهایت یک بررسی اضافی روی سری تست جهت قدرت پیش‌بینی مدل انجام می‌شود [۴۱].

۲-۵- نرم‌افزارهای مورد استفاده

در این پژوهش از نرم‌افزارهای زیر استفاده شده است که در ادامه به طور مختصر به توضیح و بررسی هر یک از آنها خواهیم پرداخت:

Hyperchem v.7
Dragon v.21
PASW statistics 18
MATLAB v.2009b

² Predictive Residual Sum of Squares

۲-۵-۱- نرم افزار 7 HYPERCHEM

این نرم افزار جهت رسم و بهینه سازی اولیه ساختار ترکیبات شیمیایی مورد استفاده قرار می گیرد. در این نرم افزار، ساختار ترکیبات می تواند با چهار روش آغازین، نیمه تجربی، مکانیک مولکولی و تابع دانسیته بهینه سازی شود. در این پروژه، بهینه سازی تا زمانی ادامه یافت که گرادیان انرژی به 0.001 کیلوکالری بر مول برسد. به کمک این برنامه می توان طول پیوند، زاویه پیوندی و زوایای پیچشی را در مولکول تعیین کرد. داده های حاصل از این نرم افزار را می توان به عنوان ورودی به سایر نرم افزارها معرفی نمود. همچنین به کمک این نرم افزار می توان تعدادی از توصیف کننده ها از جمله حجم مولی و قطبش پذیری را محاسبه کرد.

۲-۵-۲- نرم افزار 3.0 Dragon

از این نرم افزار جهت استخراج توصیف کننده های مولکولی استفاده می شود. نرم افزار Dragon توسط گروه QSPR و کمومتریکس دانشگاه میلانو طراحی شده است [۴۲]. این نرم افزار قادر به محاسبه بیش از ۱۴۰۰ توصیف کننده می باشد که به ۱۸ دسته اصلی تقسیم می شوند که در جدول (۱-۲) نام این ۱۸ دسته اصلی آورده شده است. علاوه بر محاسبه ساده ترین نوع اتمها و گروه های عاملی و شمارش اجزا می توان تعداد زیادی از توصیف کننده های توپولوژیکی و هندسی را نیز توسط این نرم افزار محاسبه نمود. برای اجرای این نرم افزار به فایل های ساختار مولکولی ایجاد شده به وسیله نرم افزارهای مدل سازی مولکولی، مانند Hyperchem نیاز می باشد. اکثر فایل های مولکولی با فرمت های معمول در این نرم افزار قابل قبول هستند. برای استفاده بهتر از محاسبات این نرم افزار باید بهینه سازی سه بعدی ساختارها با هیدروژن هایشان به کار رود. لازم به تذکر است که Dragon به عنوان یک نرم افزار QSPR/QSAR طراحی نشده است یعنی فقط توصیف کننده های مولکولی را نمایش می دهد و هیچ گونه آنالیز QSPR/QSAR را انجام نمی دهد. با این حال Dragon یک فایل خروجی کامل

را که به سادگی توسط هر نرم افزار آنالیز همبستگی قابل کاربرد است را فراهم می سازد تا به کمک آن بتوان مطالعات QSPR/QSAR را انجام داد. اطلاعات کامل در مورد توصیف کننده های به کار رفته در این نرم افزار (تعاریف، فرمول ها، مراجع و جزئیات توصیف کننده ها) را می توان از کتاب مرجع توصیف کننده های مولکولی که ۳۳۰۰ مرجع برای کل توصیف کننده ها ارائه می دهد، به دست آورد [۴۳].

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

۱- توصیف کننده های زیر ساختاری ^۱	۲- توصیف کننده های توپولوژیکی ^۲
۳- شمارنده های مولکولی مورس ^۳	۴- توصیف کننده های BCUT ^۴
۵- شاخص های بار ^۵	۶- خود ارتباطی های دو بعدی ^۶
۷- توصیف کننده های بار ^۷	۸- شاخص های آروماتیسیت ^۸
۹- پروفایل های مولکولی راندیک ^۹	۱۰- توصیف کننده های هندسی ^{۱۰}
۱۱- توصیف کننده های RDF ^{۱۱}	۱۲- توصیف کننده های سه بعدی ^{۱۲}
۱۳- توصیف کننده های WHIM ^{۱۳}	۱۴- توصیف کننده های GETAWAY ^{۱۴}

¹ Constitutional Descriptors

² Topological Descriptors

³ Molecular Walk Counts

⁴ BCUT Descriptors

⁵ Charge Indices

⁶ 2D Autocorrelations

⁷ Charge Descriptors

⁸ Aromatic Indices

⁹ Rancid Molecular Profiles

¹⁰ Geometrical Descriptors

¹¹ Radial Distribution Function Descriptors

¹² 3D Molecule Representation of Structure Backed on Electron Diffraction Descriptors

¹³ Weighted Holistic Invariant Molecular Descriptors

¹⁴ Geometry, Topology and Atom Weights Assembly

۱۵- گروه‌های عاملی ^۱	۱۶- اجزای میان اتمی ^۲
۱۷- توصیف‌کننده‌های تجربی ^۳	۱۸- خصوصیات مولکولی ^۴

۲-۵-۳- نرم‌افزار SPSS 18

SPSS یک نرم‌افزار آماری است که توانایی تحلیل کلی اطلاعات را دارا بوده و عمومی‌ترین نرم افزار آماری می‌باشد. اولین نسخه آن در سال ۱۹۷۰ توسط جمعی از فارغ التحصیلان دانشگاه استانفورد آمریکا ارائه شده است. پس از ۲۸ جولای ۲۰۰۹ که شرکت سازنده این نرم‌افزار توسط IBM خریداری شد این نرم‌افزار با نام PASW^۵ منتشر گردید [۴۴].

SPSS از جمله نرم‌افزارهایی است که برای تحلیل‌های آماری در علوم اجتماعی، به‌صورت بسیار گسترده‌ای استفاده می‌شود. افزون بر تحلیل‌های آماری، مدیریت داده‌ها و مستندسازی داده‌ها نیز از ویژگی‌های این نرم‌افزار هستند. از جمله توانایی‌های نرم افزار SPSS عبارتند از:

*تهیه خلاصه‌های آماری مانند گراف‌ها، جداول، آماره‌ها

*محاسبه انواع توابع ریاضی مانند قدر مطلق، تابع علامت، لگاریتم، توابع مثلثاتی

*تهیه انواع جداول سفارشی مانند جداول فراوانی، فراوانی تجمعی، درصد فراوانی

*انواع توزیع‌های آماری شامل توزیع‌های گسسته و پیوسته

*تهیه انواع طرح‌های آماری

*انجام آنالیز واریانس یک طرفه، دو طرفه، چند طرفه و آنالیز کوواریانس

*محاسبه میانگین ساده برای داده‌ها

*تکنیک‌های تجزیه و تحلیل سری‌های زمانی

¹ Functional Groups

² Atom-Centered Fragments

³ Empirical Descriptors

⁴ Properties

⁵ Predictive Analytics Soft Ware

*محاسبه انواع آماره‌های توصیفی

*ایجاد داده‌های تصادفی و پیوسته

*انجام رگرسیون تک متغیره و چند متغیره

از این نرم‌افزار جهت کاهش توصیف کننده‌ها و مدل‌سازی MLR استفاده گردیده است.

۲-۵-۴- نرم‌افزار MATLAB

نرم‌افزار MATLAB برنامه‌ای کامپیوتری است که برای کسانی که با محاسبات عددی و به‌ویژه غیرخطی سر و کار دارند تهیه شده است. نام این نرم‌افزار از عبارت انگلیسی MATrix LABoratory اقتباس شده و هدف اولیه آن قادر ساختن مهندسين و دانشمندان به حل مسائل، شامل عملیات ماتریسی بدون نیاز به نوشتن برنامه در زبان‌های فورترن و سی بود [۴۵]. کاربردهای نوعی آن شامل ریاضیات، الگوریتم محاسباتی، شبیه‌سازی، مدل‌سازی و آنالیز اطلاعات می‌باشد. یکی از کاربردهای مهم آن که مورد استقبال شیمی‌دانان قرار گرفته امکان استفاده از آن برای آنالیز آماری و مدل‌سازی داده‌های شیمیایی است. مدل‌سازی به‌روش شبکه‌ی عصبی مصنوعی از جمله کاربردهای مهم دیگر آن است که در تحقیق حاضر مورد استفاده قرار گرفته است. اطلاعات شیمیایی ترکیبات به‌صورت ماتریس به‌عنوان ورودی به نرم‌افزار ارائه می‌شوند. سپس در محیط MATLAB با استفاده از آرایه‌ها و فرامین موجود امکان مدل‌سازی غیرخطی فعالیت شیمیایی ترکیبات امکان‌پذیر می‌گردد. سایر روش‌های کمومتریکس شامل آنالیز (رگرسیون) اجزای اصلی، روش کمترین مربعات جزئی، الگوریتم ژنتیک و غیره نیز توسط این نرم‌افزار قابل اجرا است.

فصل سوم

شبکه‌ی عصبی مصنوعی

۳-۱- شبکه عصبی

تحقیقات و علاقه‌مندی به شبکه‌های عصبی از زمانی شروع شد که مغز به عنوان یک سیستم دینامیکی با ساختار موازی و پردازشگری کاملاً مغایر با پردازشگرهای متداول شناخته شد. شبکه‌های عصبی مصنوعی مجموعه‌ای از روش‌ها، مدل‌ها و الگوریتم‌های ریاضی برای پردازش اطلاعات به صورت تقلید شده از مغز انسان هستند. شبکه‌های عصبی سعی بر آن دارند تا با استفاده از اجزایی که شبیه سلول‌های عصبی زیستی رفتار می‌کنند، ماشین‌هایی ایجاد کند که مانند مغز انسان عمل نمایند. شبکه‌ی عصبی مصنوعی جزء دسته‌ای از سیستم‌های دینامیکی هستند که با پردازش روی مجموعه‌ای از ورودی‌ها و خروجی‌های صحیح، دانش نهفته در ورای آن‌ها را پیدا می‌کنند به همین دلیل به این سیستم‌ها هوشمند^۱ گفته می‌شود [۴۶]. شبکه‌ها بر اساس محاسبات روی داده‌های عددی یا

¹ Intelligent

مثال‌ها، قوانین کلی را یاد می‌گیرند. این سیستم‌ها از تعداد زیادی عنصر پردازش به نام نرون^۱ تشکیل شده‌اند که به صورت موازی عمل می‌کنند. پردازش موازی به معنای اجرای برنامه‌هایی است که در هر بار بیش از یک عمل را انجام می‌دهند. کامپیوترهای معمولی اعمال را یکی پس از دیگری (به صورت ترتیبی) انجام می‌دهند. که این پردازش موازی به دو دلیل مورد توجه هوش مصنوعی است: نخست این که در زمان صرفه جویی می‌شود. دوم اینکه برخی مسأله‌ها با شیوه‌های موازی بهتر حل می‌شوند [۴۷].

از کاربردهای شبکه‌ی عصبی مصنوعی در زمینه شیمی، می‌توان به تشخیص گروه‌های عاملی و تفکیک طیف‌ها [۴۸]، پیش‌بینی خصوصیات آشکارساز یونیزاسیون شعله [۴۹]، پیش‌بینی جابه‌جایی شیمیایی کربن در طیف $^{13}\text{C-NMR}$ [۴۹] و اندازه‌گیری نمونه‌های مختلف به روش اسپکتروفتومتری [۵۰ و ۵۱] اشاره کرد. در مورد خواص انتقالی سیالات نیز شبکه‌های عصبی مصنوعی به کار گرفته شده‌اند که به دو مورد پیش‌بینی گرانشی مایعات [۵۲] و پیش‌بینی گرانشی گازها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار [۴۸] می‌توان اشاره کرد. در این تحقیق هدف تعیین و پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱- آلکانول‌ها با استفاده از توصیف‌کننده‌های مولکولی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار است.

۳-۲- تاریخچه شبکه عصبی مصنوعی

از قرن نوزدهم به‌طور هم‌زمان، اما جداگانه نروفیزولوژیست‌ها سعی کردند سیستم یادگیری و تجزیه و تحلیل مغز را کشف کنند و از سویی دیگر ریاضیدانان تلاش کردند تا مدل ریاضی بسازند که قابلیت فراگیری و تجزیه و تحلیل عمومی مسائل را دارا باشد. اولین کوشش‌ها در شبیه‌سازی در سال ۱۹۴۳ با استفاده از یک مدل منطقی توسط مک کلوت^۲ و والتر پیتز^۳ انجام شد که امروزه بلوک اصلی سازنده‌ی اکثر شبکه‌های عصبی مصنوعی است. این مدل فرضیه‌هایی در مورد عملکرد نرون‌ها ارائه

¹ Neuron

² Waren Mc Culloch

³ Walter pitts

می‌کرد اما محدودیت‌های تکنولوژی در آن زمان اجازه کار بیشتر به آنها نداد. نه تنها نروفیزولوژیست‌ها بلکه روانشناسان و مهندسان نیز در پیشرفت شبیه‌سازی شبکه‌های عصبی تاثیر داشتند.

در سال ۱۹۵۸ شبکه پرسپترون^۱ توسط روزنبلات^۲ معرفی گردید. پرسپترون دارای سه لایه می‌باشد که لایه میانی به عنوان لایه‌ی پیوند شناخته می‌شود. سیستم دیگر مدل آدالاین می‌باشد که در سال ۱۹۶۰ توسط ویدرو^۳ و هاف^۴ به وجود آمد که اولین شبکه‌های عصبی به کار گرفته شده در مسائل واقعی بودند [۵۳].

در سال ۱۹۶۹ مینسکی^۵ و پاپرت^۶ کتابی نوشتند که در آن محدودیت‌های سیستم تک لایه و چند لایه پرسپترون را تشریح کردند. نتیجه‌ی این کتاب، پیش‌داوری و قطع سرمایه‌گذاری برای تحقیقات در زمینه شبیه‌سازی شبکه‌های عصبی بود. آنها با طرح این‌که پرسپترون قادر به حل هیچ مسأله‌ی جالبی نمی‌باشد، تحقیقات در این زمینه را برای چند سال متوقف کردند [۵۴].

با وجودی که اشتیاق عمومی و سرمایه‌گذاری موجود به حداقل رسیده بود، برخی محققان تحقیقات خود را برای ساخت ماشین‌هایی که توانایی حل مسائلی از قبیل تشخیص الگو را داشته باشند ادامه دادند. پیشرفت‌های شبکه‌ی عصبی تا دهه‌ی هشتاد قرن بیستم ادامه یافت. با رشد تکنولوژی میکروپروسورها در دهه‌ی هشتاد، ایده‌ی به‌کارگیری شبکه‌ها در زمینه‌های جدیدی مطرح شد. در سال ۱۹۸۲ هاپفیلد^۷ با معرفی شبکه‌های چند لایه و الگوریتم‌های یادگیری، راه حلی را برای حل مسائل غیرخطی ارائه کرد و سپس الگوریتم پس انتشار خطا در سال ۱۹۸۶ توسط دیوید راملهارت^۸ و جیمز مک‌کلند^۹ مطرح گردید. از آن زمان تاکنون، این زمینه‌ی علمی روند رشد و پیشرفت را ادامه داده

¹ Perceptron

² Frank Rosenblat

³ Bernurd Widrow

⁴ Ted hoff

⁵ Minsky

⁶ Papert

⁷ John Hopfield

⁸ David Rummelhart

⁹ James McIand

است که البته بیشتر این پیشرفت‌ها به ساختارهای نوین و روش‌های یادگیری جدید مربوط می‌شود [۵۳].

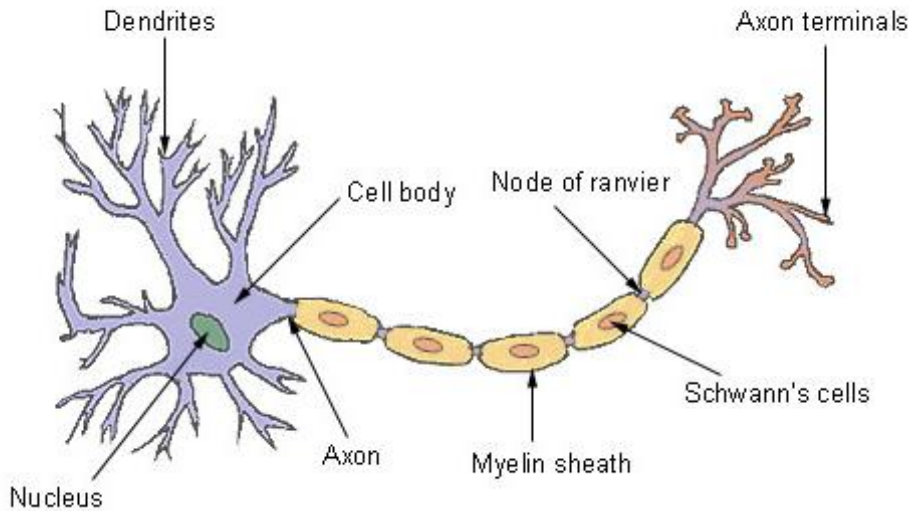
۳-۳- ساختار شبکه‌های عصبی زیستی

مغز به عنوان یک سیستم پردازشگر اطلاعات با ساختار موازی از ۱۰^{۱۱} نرون به هم مرتبط، با تعداد ۱۰^{۱۶} ارتباط تشکیل شده است. نرون‌ها ساده‌ترین واحد ساختاری سیستم‌های عصبی هستند. بافت‌هایی که عصب نامیده می‌شوند، اجتماعی از نرون‌ها هستند که اطلاعات و پیام‌ها را از یک قسمت بدن به قسمت دیگر منتقل می‌کنند. میلیون‌ها نرون در بدن انسان وجود دارد حتی ساده‌ترین کارهای روزمره انسان از قبیل پلک زدن، تنها از طریق همکاری همه جانبه این نرون‌ها میسر است. بیشترین تعداد نرون‌ها در مغز و بقیه در نخاع و سیستم‌های عصبی جانبی تمرکز یافته‌اند. اگر چه نرون‌ها کارکرد یکسانی دارند، ولی اندازه و شکل آنها بستگی به محل استقرارشان در سیستم عصبی دارد. با وجود این همه تنوع، بیشتر نرون‌ها از سه قسمت اساسی تشکیل شده‌اند: بدنه‌ی سلول، دندریت^۱ و اکسون^۲، که دو قسمت آخر عناصر ارتباطی نرون را تشکیل می‌دهند. در شکل (۳-۱) قسمت‌های اصلی یک نرون زیستی نشان داده شده است.

^۱ Dendrite

^۲ Axon

Structure of a Typical Neuron



شکل (۳-۱) - ساختار تشکیل دهنده ی نرون

نرون ها بر اساس ساختارهایی که بین آنها پیام ها هدایت می شوند به سه دسته تقسیم می شوند.

نرون های حسی: که اطلاعات را از ارگان های حسی به مغز و نخاع می فرستند.

نرون های محرک: که سیگنال فرمان را از مغز و نخاع به ماهیچه ها و غدد هدایت می کنند.

نرون های ارتباطی: که نرون ها را به هم متصل می کنند. فعالیت های دو نرون توسط نرون های ارتباطی

به هم مربوط می شوند. روابط بین نرون های ارتباطی موجب انجام کارهای پیچیده ی روزمره، از قبیل

تفکر، احساسات، ادراک و محفوظات می شوند. در انسان تعداد این نرون ها خیلی بیشتر از تعداد نرون

های حسی و محرک می باشند. دندریت ها به عنوان مناطق دریافت سیگنال های الکتریکی، شبکه هایی

تشکیل یافته از فیبرهای سلولی هستند که دارای سطح نامنظم و شاخه های انشعابی بیشمار می باشند.

به همین علت آنها را شبکه های دریافت کننده ی درخت مانند نیز می نامند. دندریت ها سیگنال های

الکتریکی را به هسته سلول که در بدنه سلول قرار دارد، منتقل می کنند. بدنه ی سلول، انرژی لازم را

برای فعالیت نرون فراهم نموده و بر روی سیگنال های دریافتی عمل می کند. اکسون ها برعکس

دندریت ها از سطحی هموارتر و تعداد شاخه های کمتری برخوردار هستند آنها طول بیشتری دارند و

سیگنال الکتروشیمیایی دریافتی از هسته ی سلول را توسط سیناپس ها به نرون های دیگر منتقل می

کنند. سیناپس‌ها واحدهای ساختاری کوچکی هستند که ارتباط بین نرون‌ها را برقرار می‌سازند. چگونگی برقراری این ارتباط به میزان مواد انتقال‌دهنده نرونی، که در انتهای اکسون‌ها ذخیره شده‌اند بستگی دارد. وقتی که پتانسیل تحریک به انتهای یک اکسون می‌رسد، موجب آزاد شدن یک ماده شیمیایی به نام انتقال‌دهنده نرونی از انتهای اکسون می‌شود و پس از نفوذ در سیناپس‌ها، گیرنده های سلول‌های مجاور را فعال می‌کند [۵۵ و ۵۶].

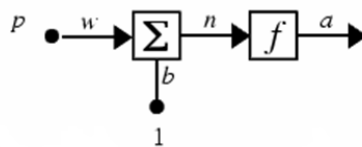
البته تحقیقات در این زمینه، نمایانگر این واقعیت هستند که نرون‌های زیستی بسیار پیچیده‌تر از مدل ساده‌ای است که در بالا تشریح شد. اما همین مدل ساده می‌تواند زیربنای مستحکمی برای دانش شبکه‌های عصبی مصنوعی تلقی گردد و متخصصان گرایش شبکه‌های عصبی یا هوش مصنوعی می‌توانند با پیگیری کارهای دانشمندان علوم زیست‌شناسی، به بنیان‌گذاری ساختارهای مناسب‌تری در آینده دست بزنند.

۳-۴- شباهت با مغز

اگرچه مکانیسم‌های دقیق کارکرد مغز انسان (یا حتی جانوران) به طور کامل شناخته شده نیست، اما با این وجود جنبه‌های شناخته شده‌ای نیز وجود دارند که الهام بخش تئوری شبکه‌های عصبی بوده‌اند. مثلاً نرون‌ها، که یکی از اجزای اصلی سازنده مغز می‌باشند قادرند تا با اتصال به یکدیگر تشکیل شبکه‌های عظیم بدهند. گفته می‌شود که هر نرون می‌تواند به هزار تا ده هزار نرون دیگر اتصال یابد. قدرت خارق‌العاده مغز انسان از تعداد بسیار زیاد نرون‌ها (10^{11} نرون) و ارتباطات بین آنها ناشی می‌شود. در واقع، شبکه‌های عصبی شبیه‌سازی شده یا کامپیوتری، فقط قادرند بخش کوچکی از خصوصیات و ویژگی‌های شبکه‌های عصبی بیولوژیک را شبیه‌سازی کنند. به عبارت دیگر، از دید یک مهندس نرم‌افزار هدف از ایجاد یک شبکه عصبی نرم‌افزاری، بیش از آنکه شبیه‌سازی مغز انسان باشد، ایجاد مکانیسم دیگری برای حل مسائل مهندسی با الهام از الگوی رفتاری شبکه‌های بیولوژیک است.

۳-۵- مدل ریاضی نرون

می‌توان به تبعیت از شبکه‌های طبیعی یک ساختار مصنوعی ساخت و با تنظیم مقادیر وزن اتصال، نحوه ارتباط میان اجزای شبکه را تعیین نمود. شکل (۳-۲)، الگویی از یک مدل نرون محاسباتی با توجه به نحوه عملکرد نرون طبیعی ارائه می‌دهد. عمل لایه‌ی ورودی، لایه‌ی میانی و لایه‌ی خروجی در یک شبکه‌ی عصبی به ترتیب شبیه عمل دندریت، جسم سلولی و آکسون در یک نرون زیستی می‌باشد.



شکل (۳-۲) - مدل ریاضی نرون [۵۷].

در این شکل از علامت p برای نشان دادن یک سیگنال ورودی استفاده شده و a نیز نشان‌دهنده ی خروجی نرون است. در واقع در این مدل یک سیگنال ورودی پس از تقویت (یا تضعیف) شدن با وزن w ، pw را به‌وجود می‌آورد. میزان تأثیر ورودی p روی خروجی a ، به وسیله‌ی w مشخص می‌شود. ورودی دیگر که یک مقدار ثابت یک است در بایاس^۱ ضرب شده و سپس حاصل آن با pw جمع می‌گردد.

$$n = pw + b \quad (۳-۱)$$

سپس تابع انتقال^۲ نرون (f) روی این مقدار یعنی n به اعمال می‌شود. بنابراین خروجی نرون طبق رابطه (۳-۲) محاسبه می‌شود:

$$a = f(pw + b) \quad (۳-۲)$$

^۱ Bias

^۲ Transfer Function

w و b دو پارامتر تنظیم شونده در نرون‌ها می‌باشند و ایده اصلی شبکه عصبی این است که با تغییر مقادیر b و w، شبکه می‌تواند یک رفتار یا تصمیم را اتخاذ کند. در جعبه ابزار مورد استفاده در MATLAB، بایاس در نظر گرفته شده اما استفاده از آن اختیاری است [۵۸].

۳-۵-۱- توابع انتقال

در این پایان نامه، سه تابع انتقال رایج در شبکه‌های عصبی، برای بهینه سازی شبکه به کار رفته است. این توابع عبارتند از: تابع انتقال خطی، تابع انتقال لگاریتم زیگموئید و تابع انتقال تانژانت هایپربولیک.

۳-۵-۱-۱- تابع انتقال خطی (PURLIN)

نرون‌هایی که از این تابع انتقال استفاده می‌کنند معمولاً برای تقریب خطی در فیلترهای خطی به کار می‌روند. این تابع همان مقدار ورودی را به عنوان خروجی بر می‌گرداند (شکل ۳-۳-الف).

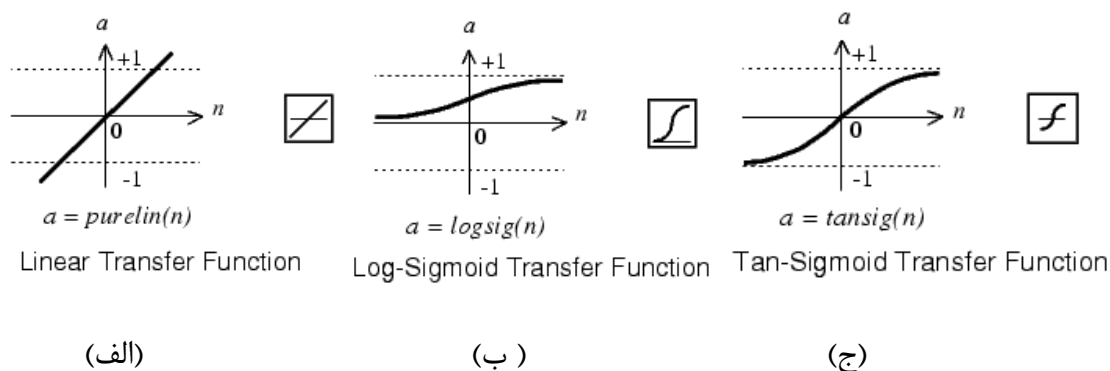
۳-۵-۱-۲- تابع انتقال لگاریتم زیگموئید (LOGSIG)

از این تابع انتقال در شبکه‌های پس انتشار استفاده می‌شود. این تابع انتقال مقادیر ورودی را در محدوده $-\infty$ و $+\infty$ دریافت کرده و خروجی بین یک و صفر تولید می‌نماید (شکل ۳-۳-ب).

۳-۵-۱-۳- تابع انتقال تانژانت هایپربولیک (TANSIG)

این تابع انتقال مقادیر ورودی را در محدوده $-\infty$ و $+\infty$ دریافت کرده و خروجی بین -۱ و ۱ تولید می‌نماید (شکل ۳-۳-ج).

شکل (۳-۳) - برخی از انواع توابع انتقال در شبکه‌های عصبی [۵۷]

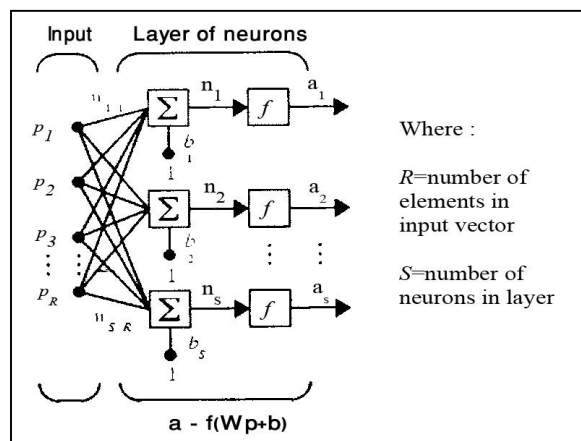


۳-۶- انواع شبکه‌های عصبی

با توجه به میزان پیچیدگی‌های سیستم مورد نظر، تعداد لایه‌های یک شبکه‌ی عصبی مصنوعی تغییر می‌کند. به‌طور مثال برای مدل‌سازی نگاشت‌هایی که دارای دو خروجی هستند به دو نرون نیاز است، که به‌طور موازی عمل کنند. هر لایه از اجتماع چند نرون تشکیل شده است و شامل ماتریس وزن، جمع‌کننده‌ها، بردار بایاس و تابع تبدیل f می‌باشد. با توجه به تعداد لایه‌های موجود در شبکه‌های عصبی مختلف می‌توان آنها را به دو دسته تقسیم نمود: شبکه‌های تک لایه و شبکه‌های چند لایه

۳-۶-۱- شبکه‌های تک لایه

شکل (۳-۵) یک شبکه تک لایه را نشان می‌دهد. کلیه نرون‌هایی که به‌صورت موازی با هم کار می‌کنند، تشکیل یک لایه را می‌دهند. در چنین ساختاری یک ماتریس ورودی، یک ماتریس وزن، یک سری جمع‌کننده، تابع انتقال و خروجی وجود دارند [۵۹].

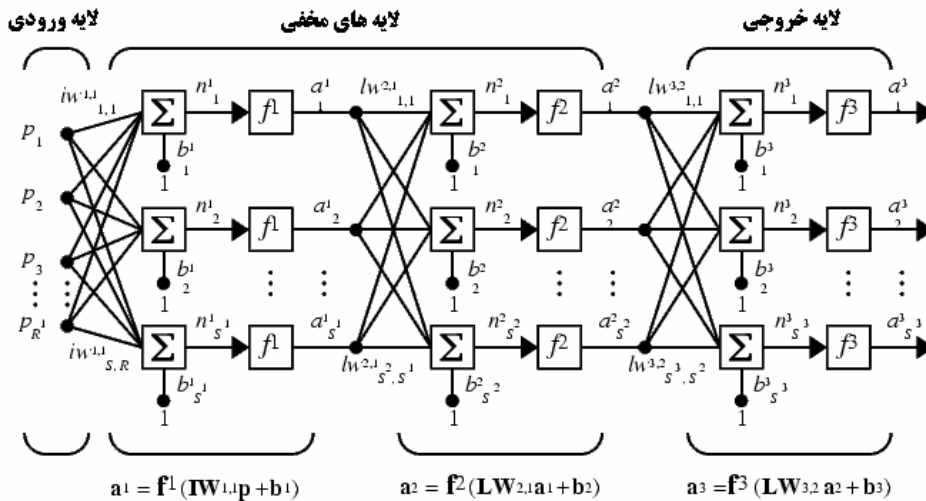


شکل (۳-۴) - شبکه تک لایه

۳-۶-۲ - شبکه های چند لایه

گاهی دینامیک و قوانین شبکه‌های عصبی آنقدر پیچیده است که به پارامترهای قابل تنظیم بیشتر نیاز است، در این موارد از شبکه‌های چند لایه استفاده می‌شود. شبکه‌های چند لایه شامل لایه ورودی، لایه خروجی و یک یا چند لایه پنهان یا لایه میانی می‌باشند. در این توپولوژی، نرون‌ها علاوه بر این که در لایه خود به شکل محدودی به یکدیگر اتصال داده شده‌اند، از طریق اتصال بین لایه‌ها نیز با یکدیگر ارتباط دارند. در این حالت گروهی از نرون‌ها از طریق ورودی‌های خود با جهان واقعی ارتباط دارند، گروهی دیگر از نرون‌ها نیز از طریق خروجی‌های خود، جهان خارج را می‌سازند که لایه خروجی نام دارند و بقیه‌ی نرون‌ها که از دید پنهان هستند لایه‌های پنهان را تشکیل می‌دهند [۶۰]. در یک شبکه‌ی چند لایه هر لایه، ماتریس وزن، بردار پیش قدر، بردار ورودی خالص و بردار خروجی مخصوص به خود را دارد، که برای مشخص کردن لایه‌های مختلف از بالانویس^۱ استفاده می‌شود. در شکل (۳-۵) یک شبکه سه لایه‌ای نشان داده شده است.

¹ Superscript



شکل (۳-۵) - ساختار یک شبکه سه لایه

در شبکه‌های تک لایه باید مقادیر W و b بهینه شوند، اما در این شبکه‌ها علاوه بر مقادیر W و b باید تعداد لایه‌های مخفی و تعداد نرون‌ها در لایه مخفی نیز توسط کاربر بهینه شوند که همین امر باعث افزایش حجم محاسبات و در نتیجه افزایش مدت زمان آموزش خواهد شد. شبکه‌های چند لایه قدرتمندتر از شبکه‌های تک لایه هستند. به عنوان مثال شبکه‌های عصبی دو لایه که در لایه اول تابع سیگموئید و در لایه دوم، تابع خطی داشته باشند، قادرند هر تابعی را با دقت دلخواه تقریب بزنند در صورتی که شبکه‌های عصبی تک لایه قادر به چنین کاری نیستند.

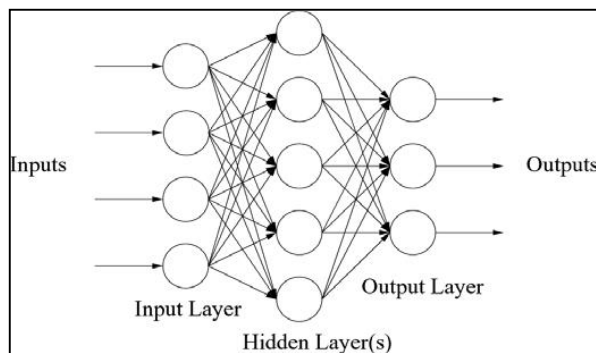
نکته‌ای را که باید در مورد تعداد نرون‌های لایه مخفی باید در نظر داشته باشیم این است که اگر تعداد نرون‌ها بسیار کم انتخاب شوند، چون تعداد پارامترهای شبکه اندک است، قدرت تجزیه و تحلیل شبکه و در نتیجه دقت پیشگویی شبکه کاهش می‌یابد و اگر تعداد نرون‌های لایه مخفی زیاد انتخاب شود، باعث می‌شود که شبکه بهترین تطبیق با سری داده‌های آموزش را به دست آورد، در حالی که باعث عدم توانایی شبکه در تطبیق مناسب با داده‌های سری پیش‌بینی می‌شود.

۳-۷ - انواع شبکه‌های عصبی از نظر برگشت پذیری

*شبکه‌های پیش‌خور^۱

*شبکه‌های پس‌خور یا برگشتی^۲

شبکه‌های پیش‌خور، شبکه‌هایی هستند که مسیر پاسخ در آن‌ها همواره رو به جلو پردازش شده و به نرون‌های همان لایه یا لایه قبل باز نمی‌گردد. در این نوع شبکه‌ها به سیگنال اجازه داده می‌شود که از مسیر یک‌طرفه، یعنی از ورودی تا خروجی عبور کند در نتیجه بازخوردی^۳ وجود نخواهد داشت و خروجی هر لایه تأثیری بر همان لایه و همچنین لایه‌های قبلی ندارد. شکل (۶-۳) نمونه‌ای از یک شبکه پیش‌خور را ارائه می‌دهد.



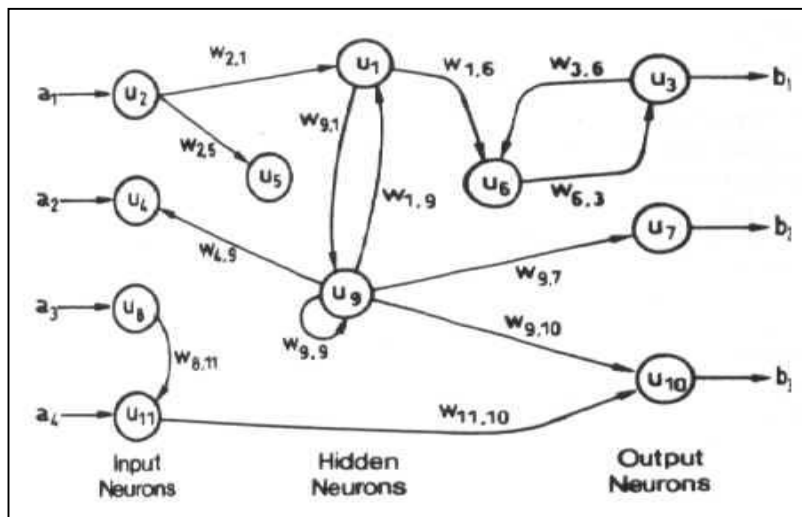
شکل (۶-۳) - نمونه‌ای از یک شبکه پیش‌خور

ولی در شبکه‌های برگشتی حداقل یک سیگنال از یک نرون به همان نرون یا نرون‌های دیگر همان لایه و یا نرون‌های لایه قبل برگشت می‌کند، یا به عبارتی در این نوع شبکه‌ها بازخورد وجود دارد. شکل (۷-۳) نمونه‌ای از یک شبکه‌ی برگشتی را نمایش می‌دهد [۵۵ و ۶۱].

¹ Feedforward

² Feedback

³ Recurrent



شکل (۳-۷) - نمونه ای از یک شبکه پسخور

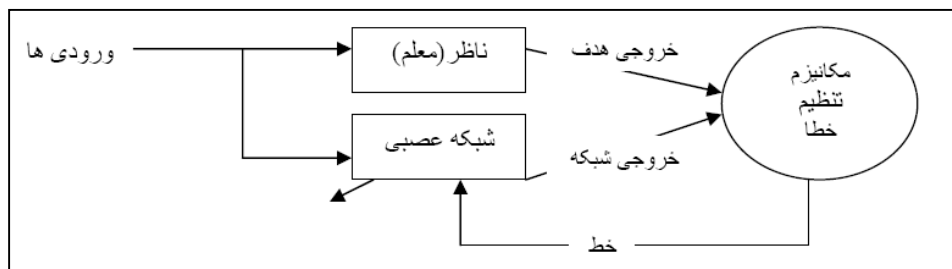
۳-۸- آموزش شبکه

الگوریتم‌های یادگیری، روندهایی هستند که توسط آنها وزن های شبکه تنظیم می گردند. هدف از آموزش شبکه این است که، شبکه قانون کار را یاد بگیرد و پس از آموزش به ازای هر ورود ، خروجی مناسب را ارائه دهد. تا کنون بیش از ۱۰۰ نوع الگوریتم یادگیری بوجود آمده است که می توان آن‌ها را به طور کلی به دو دسته یادگیری نظارت شده یا با ناظر و یادگیری نظارت نشده یا بدون ناظر تقسیم بندی کرد.

۳-۸-۱- یادگیری نظارت شده یا با ناظر

در این نوع آموزش، به الگوریتم یادگیری مجموعه‌ای از زوج داده، که به داده‌های یادگیری موسوم هستند، داده می‌شود. هر داده یادگیری شامل ورودی به شبکه و خروجی هدف است. پس از اعمال ورودی به شبکه، خروجی شبکه با خروجی هدف مقایسه می‌گردد و سپس خطای یادگیری محاسبه شده و از آن، جهت تنظیم پارامترهای شبکه (وزن‌ها)، استفاده می‌گردد به گونه‌ای که اگر

دفعه‌ی بعد به شبکه همان ورودی را دادیم، خروجی شبکه به خروجی هدف نزدیک گردد. شکل (۸-۳) یادگیری با ناظر را نشان می‌دهد [۶۱].

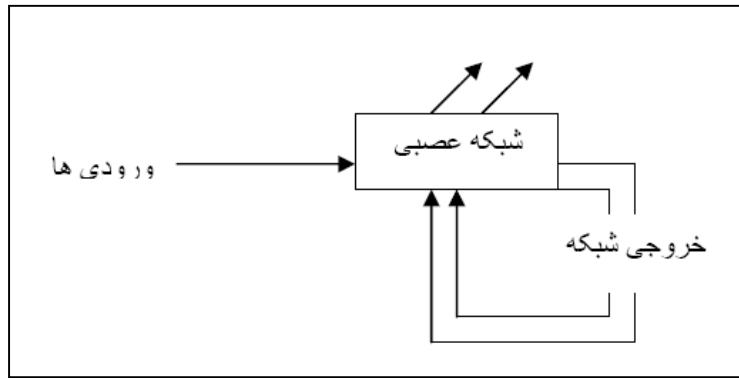


شکل (۸-۳) - یادگیری با ناظر

۳-۸-۲- یادگیری نظارت نشده یا بدون ناظر

در این نوع یادگیری، تنها سیگنالی که از محیط به شبکه اعمال می‌گردد، بردار ورودی شبکه است، بنابراین ناظری وجود نخواهد داشت تا خروجی مطلوب را برای آموزش به شبکه اعمال نماید در این حالت، شبکه با دریافت اطلاعات ورودی، باید طبقه بندی بین الگوهای ورودی، شاخص‌های موجود در ورودی‌ها و ارتباط موجود بین الگوهای ورودی را پیدا کند و در خروجی کد کند شبکه‌هایی را که از این نوع یادگیری بهره می‌برند اصطلاحاً شبکه‌های خود سازمان‌ده^۱ می‌گویند. یک مثال بسیار متداول از این نوع یادگیری، شبکه‌های خوشه‌بندی الگوهای ورودی است، بدون اینکه بدانیم کدام الگو به کدام خوشه تعلق دارد. خوشه‌ها در نهایت از روی تشابهات و عدم تشابهات بین الگوها ایجاد می‌گردند [۶۱]. شکل (۹-۳) یادگیری بدون ناظر را نشان می‌دهد.

^۱ Self organized



شکل (۳-۹): یادگیری بدون ناظر

۳-۹- الگوریتم‌های آموزشی شبکه عصبی

در شبکه‌های عصبی برای به دست آوردن ارتباط بین متغیرهای ورودی و خروجی از فرآیند یادگیری با یک الگوی آموزشی استفاده می‌شود. قدرت شبکه‌های عصبی در همین آموزش‌پذیری آنهاست که آنها را قادر می‌سازد به طور نسبی به تعمیم آموخته‌های خویش بپردازند، چرا که آنچه یادگیری را از حفظ کردن متفاوت و بالاتر می‌سازد همین قدرت تعمیم آموخته‌ها و اطلاعات اولیه است [۵۵]. برای آموزش شبکه‌های عصبی از الگوریتم‌های یادگیری متفاوتی مانند الگوریتم نزول گرادیانی^۱، الگوریتم پسانتشار گرادیان مزدوج^۲ و الگوریتم لوبنبرگ-مارکوارت^۳ استفاده می‌شود که همگی به عنوان زیرمجموعه‌ی یک تکنیک آموزشی به نام پسانتشار^۴ به‌شمار می‌روند. انتخاب هر الگوریتم بر سرعت یادگیری و دقت شبکه مؤثر است.

پسانتشار خطا یک روش متداول آموزش با ناظر برای شبکه‌های پیش‌خور است، یعنی در یادگیری، برای به دست آوردن ارتباط بین متغیرهای ورودی و خروجی به الگوی آموزشی نیاز است. این روش، در شبکه‌های عصبی با بیش از یک لایه نرونی یا به عبارتی شبکه دارای لایه پنهان استفاده می‌شود. برای هر الگوی ورودی خاص، خروجی واقعی با خروجی مورد انتظار (هدف) مقایسه گردیده

¹ Gradient Descent

² Conjugate Gradient (CG)

³ Levenberg - Marquardt (LM)

⁴ Backpropagation

سپس اختلاف بین این دو خروجی به همه اتصالاتی که اولین بار برای به دست آوردن خروجی استفاده شده بودند، بازپراکنده (باز پخش) می‌شود. اگر خروجی شبکه با هدف، همانندی مناسبی داشته باشد، اتصالات واحدهایی که در خروجی موثر بوده‌اند تقویت می‌شود، اگر چنین نباشد، اتصالات بین واحدهای مورد نظر، تضعیف شده و بار دیگر که آن واحدهای خاص برانگیخته می‌شوند، نسبت به دفعه قبل تأثیر کمتری روی واحدهای پنهان و خروجی خواهند داشت. دو روش مختلف برای ارائه‌ی الگوهای آموزشی و پیاده‌سازی الگوریتم وجود دارد:

در روش اول که آموزش گام به گام^۱ نام دارد، وزن‌ها و بایاس‌ها بعد از اعمال هر ورودی به روز^۲ می‌شوند در حالی که در روش آموزش دسته‌ای^۳، پس از اعمال تمام ورودی‌ها (اعضای مجموعه آموزشی) عملیات به روزرسانی وزن‌ها انجام می‌گیرد. بدین صورت که شیب‌های محاسبه شده برای هر ورودی با هم جمع می‌گردد تا در نهایت وزن‌ها و بایاس‌ها از طریق آن به روز شوند [۵۸]. در این تحقیق شیوه آموزش دسته‌ای مورد استفاده قرار گرفته است.

به طور کلی آموزش به کمک تکنیک پس‌انتشار بر طبق مراحل زیر انجام می‌شود [۶۲]:

(الف) - اختصاص ماتریس وزن تصادفی به هر یک از اتصالات

(ب) - انتخاب بردار ورودی و خروجی متناسب با آن و انتشار ورودی‌ها از نرون‌های ورودی به سمت

نرون‌های خروجی

(ج) - محاسبه‌ی خروجی نرون در هر لایه و در نتیجه محاسبه‌ی خروجی نرون‌ها در لایه‌ی خروجی

(د) مقایسه خروجی‌های شبکه با مقادیر واقعی (مقادیر هدف) و محاسبه‌ی خطای شبکه

(ه) - به روزسازی و اصلاح وزن‌ها به روش انتشار خطای شبکه به لایه‌های قبل که خطای یاد شده

ناشی از اختلاف بین خروجی واقعی و خروجی محاسبه شده است.

^۱ Incremental Training

^۲ Update

^۳ Batch Training

(و) - ارزیابی عملکرد شبکه آموزش دیده به کمک تابع کارایی تعریف شده مانند میانگین مجموع مربعات خطاها (MSE)

(ز) - و سرانجام برگشت به قسمت پایان آموزش.

مراحل فوق تا زمانی تکرار می شود که به حداکثر تکرار^۱ مجاز رسیده یا مقدار تابع کارایی از مقداری که تعیین شده کمتر باشد. به دلیل فرایندی که در طی این تکنیک رخ می دهد، این روش پس انتشار نامیده می شود زیرا خطای خروجی برای اصلاح وزن ها به شبکه برگشت داده می شود بدین ترتیب که ابتدا وزن های ارتباطی بین لایه خروجی و لایه پنهان و سپس وزن های ارتباطی بین لایه پنهان و لایه ورودی اصلاح می گردند. در ادامه به بررسی دو الگوریتم نزول گرادیانی و لوبنبرگ-مارکوارت می پردازیم.

۳-۹-۱- الگوریتم آموزشی نزول گرادیانی

متداول ترین الگوریتمی که در الگوی آموزشی پس انتشار به کار می رود، الگوریتم آموزشی نزول گرادیانی است. در این الگوریتم آموزشی، پارامترهای شبکه از قبیل وزن ها و بایاس ها در جهتی که تابع کارایی حداقل شود، تغییر می کنند. به روز رسانی وزن ها در گام آموزشی $n+1$ به صورت روابط (۳-۳) و (۴-۳) می باشد:

$$W_{ji,n+1} = W_{ji,n} + \alpha W_{ji} \quad (۳-۳)$$

$$\Delta W_{ji,n} = - \frac{\partial E}{\partial W_{ji,n}} \quad (۴-۳)$$

که در روابط فوق $W_{ji,n}$ وزن ارتباطی بین نرون i ام و نرون j ام در گام آموزشی n ام، α سرعت یادگیری و E نیز تابع خطاست. سرعت یادگیری، اندازه گام های برداشته شده در اصلاح وزن ها را نشان می دهد. سرعت یادگیری زیاد باعث نوسان های زیاد در حین آموزش شده در حالی که مقدار کم

^۱ Epoch

آن باعث آهستگی سرعت همگرایی می‌شود. علامت منفی در رابطه نشان می‌دهد که حرکت به سمتی است که تابع خطا حداقل شود و یا به بیان دیگر هدف از تصحیح وزن‌ها کاهش مقدار خطاست.

۳-۹-۲- الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوارت

با وجود اینکه نزول گرادیانی، الگوریتمی متداول است؛ دو ضعف عمده و اساسی دارد: اول اینکه سرعت همگرایی آن پایین است و دومین ضعف این روش متوقف شدن پارامترهای شبکه به دلیل به دام افتادن آنها در نقاط مینیمم محلی^۱ قبل از پایان یادگیری کامل شبکه می‌باشد [۶۳ و ۶۴].

الگوریتم دیگری که در الگوی آموزشی پس‌انتشار استفاده می‌شود، الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوارت است. روش آموزشی لونبرگ-مارکوارت نسبت به روش پس انتشار صدها برابر سریع‌تر است. ویژگی دیگر این روش کاهش شدید تعداد نرون‌های لایه مخفی در ساختار شبکه است. این الگوریتم آموزشی برای اولین بار توسط لونبرگ در سال ۱۹۹۴ پیشنهاد شد و در آن هم از مشتق اول تابع خطا نسبت به پارامترهای شبکه (گرادیان) و هم از مشتق دوم آن، با نام هسیان^۲ برای اصلاح وزن‌ها استفاده می‌شود. این روش در حقیقت ترکیبی از دو روش نزول گرادیان و گوس-نیوتن^۳ است که در آن از سرعت روش اول به همراه دقت بالای روش دوم در تعیین پارامترهای بهینه توابع غیرخطی استفاده می‌شود [۶۵]. در این روش آموزشی ماتریس‌های گرادیان و هسیان طبق روابط (۳-۵) و (۳-۶) تقریب‌زده می‌شوند:

$$H(x) = \nabla^2 F(x) \approx 2J^T(x)J(x) \quad (۳-۵)$$

$$g(x) = \nabla F(x) \approx 2J^T(x) E(w) \quad (۳-۶)$$

^۱ Local Minimum

^۲ Hessian

^۳ Gauss-Newton

در این معادلات، x بیان گر وزن های شبکه عصبی و H ماتریس هسیان است که به صورت معادله (۷-۳) بیان می شود:

$$H = \nabla^2 F(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} F(x) & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_2} F(x) & \dots & \frac{\partial^2}{\partial x_1 \partial x_n} F(x) \\ \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_1} F(x) & \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} F(x) & \dots & \frac{\partial^2}{\partial x_2 \partial x_n} F(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_1} F(x) & \frac{\partial^2}{\partial x_n \partial x_2} F(x) & \dots & \frac{\partial^2}{\partial x_n^2} F(x) \end{bmatrix}_{n \times n} \quad (7-3)$$

$E(w)$ نیز بردار خطای شبکه و J ماتریس ژاکوبین^۱ می باشد که شامل مشتقات مرتبه اول خطای شبکه نسبت به پارامترهای شبکه است و به صورت معادله (۸-۳) محاسبه می شود:

$$J(x) = \begin{bmatrix} \frac{\partial e_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial e_1(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial e_1(x)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial e_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial e_2(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial e_2(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial e_n(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial e_n(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial e_n(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix}_{n \times n} \quad (8-3)$$

طبق این الگوریتم، تغییر پارامترها در هر گام آموزشی برابر است با:

$$x_{k+1} = x_k - [J^T(x_k)J(x_k) + \mu_k I]^{-1} \times J^T(x_k)E(x_k) \quad (9-3)$$

این الگوریتم حالت بینابین روش نزول گرادیانی و روش گوس- نیوتن است که در آن I ماتریس یکانی و μ_k ضریب یادگیری مارکوارت و عددی غیر منفی می باشد. زمانی که مقدار عددی μ_k صفر باشد، این

¹ Jacobian Matrix

تابع تبدیل به یک روش گوس- نیوتن برای تقریب ماتریس هسیان می‌شود و زمانی که μ_k بزرگ باشد، این تابع تبدیل به روش نزول گرادیانی می‌شود. روش گوس- نیوتن نسبت به روش نزول گرادیانی، دقیق‌تر است. بنابراین μ_k بعد از هر گام موفق (کاهش در تابع کارآیی) کاهش یافته و تنها زمانی که گام آزمایشی موجب افزایش تابع کارآیی شود، افزایش پیدا می‌کند. به این ترتیب تابع کارایی همیشه در حال کاهش است [۶۴ و ۶۵].

پارامترهای آموزشی برای الگوریتم لونیبرگ- مارکوارت عبارتند از:

* دوره‌ها (epochs)

* نمایش (show)

* هدف (goal)

* زمان (time)

* مینیمم گرادیان (min-grad)

* ماکزیمم رد شدن (max-fail)

* پارامتر μ

* کاهش μ (mu-dec)

* افزایش μ (mu-inc)

* ماکزیمم μ (mu-max)

* کاهش حافظه (mem-reduc)

پارامتر μ مقدار آغازین μ می‌باشد و در هر گامی که تابع کارآیی کاهش یابد در mu-dec و هر زمان که افزایش یابد در mu-inc ضرب می‌شود. اگر μ از mu-max بزرگ‌تر شود، الگوریتم متوقف می‌گردد. پارامتر mem-reduc مقدار حافظه مورد استفاده الگوریتم را کنترل می‌کند. این روش یکی از سریعترین روش‌های ارائه شده در نرم‌افزار MATLAB می‌باشد و برای یک شبکه‌ی متوسط (با چند صد پارامتر مؤثر) دارای کارایی بسیار بالا می‌باشد [۵۸].

۳-۱۰- بهبود تعمیم یا ارتقاء عمومیت^۱

از جمله مشکلاتی که ممکن است در هنگام آموزش شبکه‌ی عصبی رخ دهد این است که شبکه، بیش از حد آموزش داده شود (بیش‌آموزی^۲ یا بیش‌برازش^۳). بدین معنی که در هنگام آموزش شبکه، خطا به مقدار قابل قبول می‌رسد ولی هنگام ارزیابی داده‌های جدید، خطای شبکه به مراتب از خطای داده‌های آموزشی بیشتر گردیده که گفته می‌شود شبکه تعمیم برای حالت‌های جدید را یاد نگرفته است. علت این امر آن است که شبکه کم‌کم داده‌ها را به خاطر سپرده و از پیدا کردن ارتباط موجود میان آنها فاصله می‌گیرد. از جمله راه‌حل‌های ارائه شده در جهت ارتقاء عمومیت شبکه، به‌کارگیری شبکه‌های بزرگ برای ایجاد یک انطباق مناسب است و اگر شبکه مورد استفاده کوچک باشد، توانایی لازم برای انطباق داده‌ها را نخواهد داشت. متأسفانه از ابتدا نمی‌توان پیش‌بینی کرد که اندازه شبکه برای یک کاربرد خاص تا چه میزان باید بزرگ باشد.

در جعبه ابزار شبکه‌ی عصبی برای بهبود تعمیم و جلوگیری از بیش‌آموزی شبکه دو راه حل تنظیم^۴ و توقف زودهنگام^۵ در نظر گرفته شده است [۶۶ و ۶۷].

۳-۱۰-۱- تنظیم

این عمل با اصلاح تابع کارایی متداول (MSE) از طریق افزایش یک عبارت که شامل میانگین مربعات وزن‌ها و بایاس‌های شبکه است، انجام می‌گیرد (رابطه ۳-۱۰).

$$F = \beta E_D + \alpha E \quad (3-10)$$

استفاده از این تابع کارایی اصلاح شده سبب می‌شود که شبکه، وزن‌ها و بایاس‌های کوچکتری داشته باشد و این امر، پاسخ شبکه را هموارتر می‌کند. در این رابطه α و β پارامترهای تابع کارایی، E_D و E_W

¹ Improving Generalization

² Over training

³ Over fitting

⁴ Regularization

⁵ Early Stopping

به ترتیب میانگین مربعات خطاها و میانگین مربعات وزن‌ها بوده و طبق روابط (۱۱-۳) و (۱۲-۳) تعریف می‌شوند.

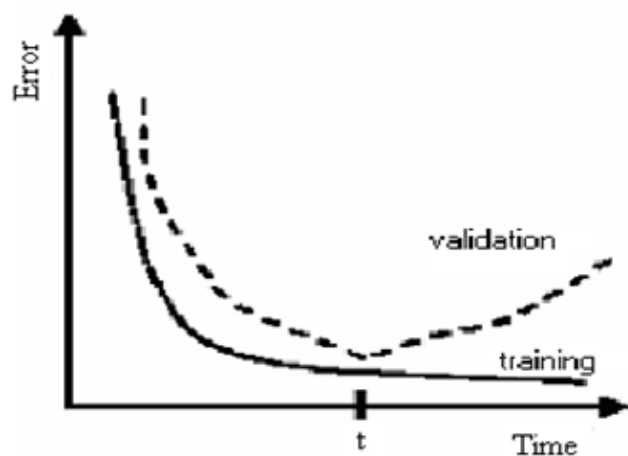
$$E_D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (e_i)^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - t_i)^2 \quad (11-3)$$

$$E_W = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (w_j)^2 \quad (12-3)$$

که e_i بیانگر خطای مطلق، t_i مقادیر پارامتر تجربی، y_i مقادیر محاسبه شده برای پارامتر تجربی مدنظر و N نشان‌دهنده‌ی تعداد مولکول‌ها می‌باشد. قابل ذکر است که در الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین، اصلاح وزن‌ها و بایاس‌ها همانند الگوریتم لونیبرگ-مارکوارت انجام می‌شود با این تفاوت که تابع خطا، همان تابع کارایی اصلاح شده است، یعنی تابع خطا ترکیبی از میانگین مربع خطاها و میانگین مربع وزن‌هاست. هدف از آموزش به روش پس انتشار در این الگوریتم نیز، کاهش این تابع کارایی اصلاح شده است [۶۸].

۳-۱۰-۲- توقف زود هنگام

در این تکنیک داده‌های در دسترس به سه زیر مجموعه تقسیم می‌شوند. اولین زیر مجموعه، سری آموزش نام دارد و برای محاسبه گرادیان و به روز کردن وزن‌ها و بایاس‌های شبکه استفاده می‌شود. دومین زیر مجموعه به نام سری اعتبار یا ارزیابی است که خطای مربوط به آن، در طی فرایند آموزش نظارت می‌شود. خطای ارزیابی به‌طور طبیعی در طول فاز اولیه آموزش کاهش می‌یابد همان‌گونه که خطای سری آموزشی کاهش می‌یابد ولی زمانی که شبکه شروع به برآزش اضافی داده‌ها بکند، خطای سری ارزیابی شروع به بالا رفتن می‌کند. زمانی که خطای سری ارزیابی برای تعداد معینی از دوره‌ها افزایش یافت، آموزش متوقف شده و وزن‌ها و بایاس‌ها در مینیمم خطای اعتبار انطباق داده می‌شوند. مطابق شکل (۳-۱۰) روند آموزش می‌بایست در زمان t متوقف گردد.



شکل (۳-۱۰) - تغییرات خطای سری آموزش و سری ارزیابی [۵۸]

زیر مجموعه سوم، سری تست یا آزمایش نام دارد که در طول فرایند آموزش کاربرد نداشته و از آن برای مقایسه مدل‌های متفاوت استفاده می‌شود.

فصل چهارم

پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱- آلکانول‌ها با استفاده

از روش‌های خطی و غیرخطی

۴-۱- مقدمه

در این تحقیق دانسیته‌ی تعدادی از ۱- آلکانول‌ها، در محدوده‌ی دمایی K ۲۷۳/۱۵-۳۸۳/۱۵ و محدوده‌ی فشار MPa ۰/۱-۳۰۰ با استفاده از روش رگرسیون خطی چندگانه و شبکه عصبی مصنوعی مورد بررسی قرار گرفته است. بخش تجربی این تحقیق شامل مراحل زیر است:

۱- انتخاب سری داده‌ها

۲- محاسبه‌ی توصیف کننده‌ها

۳- مدل‌سازی به روش رگرسیون خطی چند گانه

۴- مدل‌سازی به وسیله شبکه‌ی عصبی مصنوعی

۵- ارزیابی و مقایسه مدل‌های ارائه شده

۴-۲- انتخاب سری داده‌ها

سری داده‌ها از نتایج خواص ترمودینامیکی و اندازه‌گیری‌های دانسیته‌ی ۱۰ الکل نوع اول شامل اتانول [۶۹]، ۱- پروپانول [۷۰]، ۱- بوتانول [۷۱]، ۱- پنتانول [۷۲]، ۱- هگزانول [۷۳]، ۱- هپتانول [۷۴]، ۱- اکتانول [۷۵]، ۱- نونانول [۷۶]، ۱- دکانول [۷۵] و ۱- دودکانول [۷۵] به دست آمد.

مقادیر دانسیته تجربی را برای هر یک از این الکل‌ها در محدوده‌ی فشار MPa ۰/۱-۳۰۰ و محدوده‌ی دمایی K ۲۹۸/۱۵-۳۸۳/۱۵ گزارش نمودند. در جداول (۱-۴) تا (۴-۱۰) مقادیر دما، فشار و دانسیته‌ی تجربی برای مولکول‌های مورد مطالعه آورده شده است.

جدول (۴-۱) - مقادیر تجربی p ، T و ρ برای اتانول

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۱	۰/۱	۲۹۸/۱۵	۷۸۵/۲۴
۲	۷	۲۹۸/۱۵	۷۹۰/۵۸
۳	۱۴	۲۹۸/۱۵	۷۹۵/۸
۴	۲۰/۹	۲۹۸/۱۵	۸۰۱/۰۹
۵	۳۵/۳	۲۹۸/۱۵	۸۱۰/۹۷
۶	۴۸/۵	۲۹۸/۱۵	۸۲۰/۰۸
۷	۶۲/۲	۲۹۸/۱۵	۸۲۷/۶۰
۸	۷۶/۱	۲۹۸/۱۵	۸۳۵/۰۷
۹	۸۳/۲	۲۹۸/۱۵	۸۳۸/۶۴
۱۰	۸۹/۹	۲۹۸/۱۵	۸۴۱/۶۰
۱۱	۱۰۳/۹	۲۹۸/۱۵	۸۴۸/۴۶
۱۲	۱۱۷/۶	۲۹۸/۱۵	۸۵۴/۷۷
۱۳	۱۳۱/۴	۲۹۸/۱۵	۸۶۰/۶۶
۱۴	۱۴۱/۸	۲۹۸/۱۵	۸۶۵/۲۰
۱۵	۱۶۲/۱	۲۹۸/۱۵	۸۷۳/۲۰
۱۶	۱۷۶/۳	۲۹۸/۱۵	۸۷۷/۵۰
۱۷	۱۹۳/۲	۲۹۸/۱۵	۸۸۳/۳۱
۱۸	۲۱۰/۷	۲۹۸/۱۵	۸۸۹/۳۶
۱۹	۲۲۷/۶	۲۹۸/۱۵	۸۹۵/۱۸
۲۰	۲۴۱/۴	۲۹۸/۱۵	۸۹۸/۸۰
۲۱	۲۶۵/۶	۲۹۸/۱۵	۹۰۷/۱۱
۲۲	۰/۱	۳۲۳/۱۵	۷۶۲/۲۰
۲۳	۱۴/۲	۳۲۳/۱۵	۷۷۴/۲۱
۲۴	۲۱/۱	۳۲۳/۱۵	۷۸۰/۳۴
۲۵	۲۸/۴	۳۲۳/۱۵	۷۸۶/۱۶
۲۶	۳۴/۸	۳۲۳/۱۵	۷۹۱/۳۹
۲۷	۴۲/۱	۳۲۳/۱۵	۷۹۶/۸۸
۲۸	۴۸/۳	۳۲۳/۱۵	۸۰۰/۳۲
۲۹	۵۵/۱	۳۲۳/۱۵	۸۰۴/۵۰
۳۰	۶۲/۵	۳۲۳/۱۵	۸۰۸/۶۷
۳۱	۶۹/۴	۳۲۳/۱۵	۸۱۳/۳۴

۳۲	۷۶/۳	۳۲۳/۱۵	۸۱۷/۰۶
۳۳	۱۰۳/۹	۳۲۳/۱۵	۸۳۰/۹۰
۳۴	۱۱۷/۶	۳۲۳/۱۵	۸۳۶/۸۲
۳۵	۱۳۱/۱	۳۲۳/۱۵	۸۴۲/۶۰

ادامه جدول (۱-۴)

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۳۶	۱۵۵/۲	۳۲۳/۱۵	۸۵۳/۹۰
۳۷	۱۸۹/۷	۳۲۳/۱۵	۸۶۷/۰۰
۳۸	۲۰۷	۳۲۳/۱۵	۸۷۴/۶۶
۳۹	۲۲۴/۲	۳۲۳/۱۵	۸۷۸/۸۸
۴۰	۲۴۱/۴	۳۲۳/۱۵	۸۸۳/۰۸
۴۱	۲۵۸/۷	۳۲۳/۱۵	۸۹۰/۸۶
۴۲	۲۷۵/۹	۳۲۳/۱۵	۸۹۴/۲۱
۴۳	۲۹۳/۱	۳۲۳/۱۵	۹۰۱/۶۳
۴۴	۳۱۰/۴	۳۲۳/۱۵	۹۰۴/۷۳

جدول (۲-۴) - مقادیر تجربی p ، T و ρ برای ۱- پروپانول

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۴۵	۰/۵	۳۱۳/۱۵	۷۸۸/۲۹
۴۶	۱/۰۱	۳۱۳/۱۵	۷۸۸/۷۱
۴۷	۲/۰۱	۳۱۳/۱۵	۷۸۹/۵۷
۴۸	۳/۰۳	۳۱۳/۱۵	۷۹۰/۴۵
۴۹	۴	۳۱۳/۱۵	۷۹۱/۲۶
۵۰	۵/۰۱	۳۱۳/۱۵	۷۹۲/۱۰
۵۱	۶/۰۱	۳۱۳/۱۵	۷۹۲/۹۳
۵۲	۷	۳۱۳/۱۵	۷۹۳/۷۶
۵۳	۸/۰۱	۳۱۳/۱۵	۷۹۴/۵۸
۵۴	۹	۳۱۳/۱۵	۷۹۵/۳۹
۵۵	۱۰/۰۱	۳۱۳/۱۵	۷۹۶/۲۰
۵۶	۱۱	۳۱۳/۱۵	۷۹۶/۹۹
۵۷	۱۲	۳۱۳/۱۵	۷۹۷/۷۸
۵۸	۱۳	۳۱۳/۱۵	۷۹۸/۵۷
۵۹	۱۴/۰۱	۳۱۳/۱۵	۷۹۹/۳۴
۶۰	۱۴/۹۹	۳۱۳/۱۵	۸۰۰/۰۸
۶۱	۱۶/۰۲	۳۱۳/۱۵	۸۰۰/۸۵
۶۲	۱۶/۹۹	۳۱۳/۱۵	۸۰۱/۵۸
۶۳	۱۸/۰۱	۳۱۳/۱۵	۸۰۲/۳۲
۶۴	۱۹	۳۱۳/۱۵	۸۰۳/۰۵
۶۵	۲۰/۰۲	۳۱۳/۱۵	۸۰۳/۷۹
۶۶	۲۰/۹۹	۳۱۳/۱۵	۸۰۴/۴۹
۶۷	۲۲/۰۲	۳۱۳/۱۵	۸۰۵/۲۳
۶۸	۲۲/۹۹	۳۱۳/۱۵	۸۰۵/۹۳
۶۹	۲۴/۰۴	۳۱۳/۱۵	۸۰۶/۷۰
۷۰	۲۵	۳۱۳/۱۵	۸۰۷/۴۰
۷۱	۱۴/۰۱	۳۱۳/۱۵	۷۹۹/۲۹
۷۲	۵/۰۱	۳۱۳/۱۵	۷۹۲/۰۲
۷۳	۱/۰۱	۳۱۳/۱۵	۷۸۸/۶۷
۷۴	۰/۵	۳۱۳/۱۵	۷۸۸/۲۳
۷۵	۰/۵۱	۳۳۲/۹۹	۷۷۱/۵۴

٧٦	١/٠١	٣٣٢/٩٩	٧٧٢/٠٣
٧٧	٢/٠٢	٣٣٢/٩٩	٧٧٢/٩٩
٧٨	٣/٠١	٣٣٢/٩٩	٧٧٣/٩٦
٧٩	٤/٠٢	٣٣٢/٩٩	٧٧٤/٩٠

ادامه جدول (٢-٤)

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
٨٠	٥/٠٢	٣٣٢/٩٩	٧٧٥/٨٥
٨١	٦/٠٣	٣٣٢/٩٩	٧٧٦/٧٩
٨٢	٧/٠٢	٣٣٢/٩٩	٧٧٧/٧٢
٨٣	٨/٠١	٣٣٢/٩٩	٧٧٨/٦١
٨٤	٩/٠٢	٣٣٢/٩٩	٧٧٩/٥٢
٨٥	١٠/٠٣	٣٣٢/٩٩	٧٨٠/٤٢
٨٦	١١/٠١	٣٣٢/٩٩	٧٨١/٣٩
٨٧	١٢/٠٣	٣٣٢/٩٩	٧٨٢/١٧
٨٨	١٣	٣٣٢/٩٩	٧٨٣/٠١
٨٩	١٤/٠٥	٣٣٢/٩٩	٧٨٣/٩٠
٩٠	١٥/٠٢	٣٣٢/٩٩	٧٨٤/٧٢
٩١	١٥/٩٩	٣٣٢/٩٩	٧٨٥/٥٣
٩٢	١٧/٠٣	٣٣٢/٩٩	٧٨٦/٣٨
٩٣	١٨/٠١	٣٣٢/٩٩	٧٨٧/١٧
٩٤	١٩/٠٢	٣٣٢/٩٩	٧٨٧/٩٩
٩٥	٢٠/٠١	٣٣٢/٩٩	٧٨٨/٧٨
٩٦	٢١/٠٣	٣٣٢/٩٩	٧٨٩/٥٩
٩٧	٢٢/٠٢	٣٣٢/٩٩	٧٩٠/٣٨
٩٨	٢٣/٠٢	٣٣٢/٩٩	٧٩١/١٧
٩٩	٢٤/٠١	٣٣٢/٩٩	٧٩١/٩٥
١٠٠	٢٥/٠٢	٣٣٢/٩٩	٧٩٢/٧٦
١٠١	٠/٥١	٣٥٢/٨٨	٧٥٣/٤٧
١٠٢	١/٠٣	٣٥٢/٨٨	٧٥٤/٢٠٥
١٠٣	٢/٠١	٣٥٢/٨٨	٧٥٥/١٤
١٠٤	٣	٣٥٢/٨٨	٧٥٦/٢٢
١٠٥	٤	٣٥٢/٨٨	٧٥٧/٣٠
١٠٦	٥	٣٥٢/٨٨	٧٥٨/٣٩
١٠٧	٦/٠١	٣٥٢/٨٨	٧٥٩/٤٤
١٠٨	٧/٠٢	٣٥٢/٨٨	٧٦٠/٤٨
١٠٩	٨	٣٥٢/٨٨	٧٦١/٥١
١١٠	٩/٠٣	٣٥٢/٨٨	٧٦٢/٥٦

۱۱۱	۱۰	۳۵۲/۸۸	۷۶۳/۵۳
۱۱۲	۱۱/۰۲	۳۵۲/۸۸	۷۶۴/۵۴
۱۱۳	۱۲	۳۵۲/۸۸	۷۶۵/۵۰

ادامه جدول (۲-۴)

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۱۱۴	۱۳/۰۲	۳۵۲/۸۸	۷۶۶/۴۹
۱۱۵	۱۴	۳۵۲/۸۸	۷۶۷/۴۲
۱۱۶	۱۵/۰۲	۳۵۲/۸۸	۷۶۸/۳۸
۱۱۷	۱۶	۳۵۲/۸۸	۷۶۹/۲۹
۱۱۸	۱۷	۳۵۲/۸۸	۷۷۰/۲۱
۱۱۹	۱۸/۰۳	۳۵۲/۸۸	۷۷۱/۱۴
۱۲۰	۱۹/۰۱	۳۵۲/۸۸	۷۷۲/۰۲
۱۲۱	۲۰/۰۳	۳۵۲/۸۸	۷۷۲/۹۴
۱۲۲	۲۱	۳۵۲/۸۸	۷۷۳/۷۹
۱۲۳	۲۲/۰۱	۳۵۲/۸۸	۷۷۴/۶۷
۱۲۴	۲۳/۰۸	۳۵۲/۸۸	۷۷۵/۶۰
۱۲۵	۲۴/۰۶	۳۵۲/۸۸	۷۷۶/۴۵
۱۲۶	۲۵/۰۳	۳۵۲/۸۸	۷۷۷/۲۹
۱۲۷	۰/۵۱	۳۶۲/۷۷	۷۴۳/۹۲
۱۲۸	۱/۰۱	۳۶۲/۷۷	۷۴۴/۵۳
۱۲۹	۲/۰۲	۳۶۲/۷۷	۷۴۵/۷۳
۱۳۰	۳/۰۱	۳۶۲/۷۷	۷۴۶/۹۰
۱۳۱	۴/۰۱	۳۶۲/۷۷	۷۴۸/۰۶
۱۳۲	۵/۰۱	۳۶۲/۷۷	۷۴۹/۲۰
۱۳۳	۶/۰۱	۳۶۲/۷۷	۷۵۰/۳۳
۱۳۴	۷/۰۲	۳۶۲/۷۷	۷۵۱/۴۶
۱۳۵	۸/۰۱	۳۶۲/۷۷	۷۵۲/۵۵
۱۳۶	۹/۰۱	۳۶۲/۷۷	۷۵۳/۶۴
۱۳۷	۱۰	۳۶۲/۷۷	۷۵۴/۷۱
۱۳۸	۱۱	۳۶۲/۷۷	۷۵۵/۷۶
۱۳۹	۱۲/۰۲	۳۶۲/۷۷	۷۵۶/۸۱
۱۴۰	۱۲/۹۹	۳۶۲/۷۷	۷۵۷/۸۲
۱۴۱	۱۴/۰۲	۳۶۲/۷۷	۷۵۸/۸۴
۱۴۲	۱۵/۰۱	۳۶۲/۷۷	۷۵۹/۸۴
۱۴۳	۱۶/۰۱	۳۶۲/۷۷	۷۶۰/۸۲
۱۴۴	۱۷/۰۳	۳۶۲/۷۷	۷۶۱/۸۱

۱۴۵	۱۸/۰۱	۳۶۲/۷۷	۷۶۲/۷۵
۱۴۶	۱۹/۰۱	۳۶۲/۷۷	۷۶۳/۷۱
۱۴۷	۲۰/۰۳	۳۶۲/۷۷	۷۶۴/۶۶
۱۴۸	۲۱/۰۵	۳۶۲/۷۷	۷۶۵/۶۱

ادامه جدول (۲-۴)

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۱۴۹	۲۱/۹۹	۳۶۲/۷۷	۷۶۶/۴۹
۱۵۰	۲۳/۰۳	۳۶۲/۷۷	۷۶۷/۴۵
۱۵۱	۲۴/۰۲	۳۶۲/۷۷	۷۶۸/۳۴
۱۵۲	۲۵/۰۱	۳۶۲/۷۷	۷۶۹/۲۴

جدول (۳-۴) - مقادیر تجربی T, p و ρ برای ۱- بوتانول

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۱۵۳	۱/۰۱	۳۱۳/۱	۷۹۴/۹۷
۱۵۴	۲/۰۱	۳۱۳/۱	۷۹۵/۷۶
۱۵۵	۳/۰۱	۳۱۳/۱	۷۹۶/۵۵
۱۵۶	۳/۹۹	۳۱۳/۱	۷۹۷/۳۳
۱۵۷	۵	۳۱۳/۱	۷۹۸/۱۱
۱۵۸	۶/۰۱	۳۱۳/۱	۷۹۸/۹۰
۱۵۹	۷/۰۱	۳۱۳/۱	۷۹۹/۶۹
۱۶۰	۸/۰۲	۳۱۳/۱	۸۰۰/۴۷
۱۶۱	۹/۰۱	۳۱۳/۱	۸۰۱/۲۳
۱۶۲	۱۰	۳۱۳/۱	۸۰۱/۹۷
۱۶۳	۱۱/۰۱	۳۱۳/۱	۸۰۲/۷۲
۱۶۴	۱۲/۰۱	۳۱۳/۱	۸۰۳/۴۸
۱۶۵	۱۳/۰۴	۳۱۳/۱	۸۰۴/۲۳
۱۶۶	۱۴/۰۱	۳۱۳/۱	۸۰۴/۹۳
۱۶۷	۱۵/۰۳	۳۱۳/۱	۸۰۵/۶۷
۱۶۸	۱۶/۰۱	۳۱۳/۱	۸۰۶/۳۶
۱۶۹	۱۷/۰۱	۳۱۳/۱	۸۰۷/۰۷
۱۷۰	۱۸/۰۱	۳۱۳/۱	۸۰۷/۷۶
۱۷۱	۱۹/۰۳	۳۱۳/۱	۸۰۸/۴۶
۱۷۲	۲۰/۰۲	۳۱۳/۱	۸۰۹/۱۴
۱۷۳	۲۱/۰۳	۳۱۳/۱	۸۰۹/۸۴
۱۷۴	۲۲/۰۶	۳۱۳/۱	۸۱۰/۵۳
۱۷۵	۲۳/۰۴	۳۱۳/۱	۸۱۱/۱۹
۱۷۶	۲۴/۰۵	۳۱۳/۱	۸۱۱/۹۰
۱۷۷	۲۵/۰۵	۳۱۳/۱	۸۱۲/۵۶
۱۷۸	۱/۱	۳۳۲/۹۵	۷۷۹/۲۸
۱۷۹	۲/۰۶	۳۳۲/۹۵	۷۸۰/۱۵
۱۸۰	۳/۰۴	۳۳۲/۹۵	۷۸۱/۰۲
۱۸۱	۴/۰۴	۳۳۲/۹۵	۷۸۱/۸۹
۱۸۲	۵/۰۱	۳۳۲/۹۵	۷۸۲/۷۶
۱۸۳	۶/۰۴	۳۳۲/۹۵	۷۸۳/۶۵

١٨٤	٧/٠٥	٣٣٢/٩٥	٧٨٤/٥٣
١٨٥	٨/٠٢	٣٣٢/٩٥	٧٨٥/٣٧
١٨٦	٩/٠٤	٣٣٢/٩٥	٧٨٦/٢٣
١٨٧	١٠/٠٣	٣٣٢/٩٥	٧٨٧/٠٦

ادامه جدول (٣-٤)

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
١٨٨	١١/٠٦	٣٣٢/٩٥	٧٨٧/٩٠
١٨٩	١٢/٠٣	٣٣٢/٩٥	٧٨٨/٧١
١٩٠	١٣/٠٤	٣٣٢/٩٥	٧٨٩/٥٤
١٩١	١٤/٠٣	٣٣٢/٩٥	٧٩٠/٣٣
١٩٢	١٥/٠٧	٣٣٢/٩٥	٧٩١/١٦
١٩٣	١٦/٠٢	٣٣٢/٩٥	٧٩١/٨٩
١٩٤	١٦/٩٦	٣٣٢/٩٥	٧٩٢/٦١
١٩٥	١٨/١	٣٣٢/٩٥	٧٩٣/٤٩
١٩٦	١٩/٠٥	٣٣٢/٩٥	٧٩٤/٢٢
١٩٧	٢٠/٠٤	٣٣٢/٩٥	٧٩٤/٩٧
١٩٨	٢١/٠٩	٣٣٢/٩٥	٧٩٥/٧٥
١٩٩	٢١/٩٧	٣٣٢/٩٥	٧٩٦/٤٠
٢٠٠	٢٢/٩٦	٣٣٢/٩٥	٧٩٧/١٣
٢٠١	٢٤/٠١	٣٣٢/٩٥	٧٩٧/٩٢
٢٠٢	٢٥/٠٥	٣٣٢/٩٥	٧٩٨/٦٧
٢٠٣	١/٠٣	٣٥٢/٧٦	٧٦٢/٧٢
٢٠٤	٢/٠٨	٣٥٢/٧٦	٧٦٣/٨٠
٢٠٥	٣/٠٤	٣٥٢/٧٦	٧٦٤/٧٥
٢٠٦	٤	٣٥٢/٧٦	٧٦٥/٧٤
٢٠٧	٥/٠٢	٣٥٢/٧٦	٧٦٦/٧٥
٢٠٨	٦/٠٤	٣٥٢/٧٦	٧٦٧/٧٥
٢٠٩	٧/٠٤	٣٥٢/٧٦	٧٦٨/٧٢
٢١٠	٨/٠٢	٣٥٢/٧٦	٧٦٩/٦٤
٢١١	٩/٠٤	٣٥٢/٧٦	٧٧٠/٦١
٢١٢	١٠/٠٤	٣٥٢/٧٦	٧٧١/٥٦
٢١٣	١١/٠٣	٣٥٢/٧٦	٧٧٢/٤٤
٢١٤	١٢/٠٧	٣٥٢/٧٦	٧٧٣/٤
٢١٥	١٣	٣٥٢/٧٦	٧٧٤/٢٥
٢١٦	١٤/٠٥	٣٥٢/٧٦	٧٧٥/١٧
٢١٧	١٥	٣٥٢/٧٦	٧٧٦/٠٣
٢١٨	١٦	٣٥٢/٧٦	٧٧٦/٨٩

٢١٩	١٧/٠١	٣٥٢/٧٦	٧٧٧/٧٦
٢٢٠	١٨/٠٧	٣٥٢/٧٦	٧٧٨/٦٥
٢٢١	١٩	٣٥٢/٧٦	٧٧٩/٤٣
٢٢٢	٢٠/٠١	٣٥٢/٧٦	٧٧٠/٢٨

ادامه جدول (٣-٤)

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
٢٢٣	٢١/٠٤	٣٥٢/٧٦	٧٨١/١٢
٢٢٤	٢٢/٠٢	٣٥٢/٧٦	٧٨١/٩٤
٢٢٥	٢٣/٠٣	٣٥٢/٧٦	٧٨٢/٧٥
٢٢٦	٢٤/٠٢	٣٥٢/٧٦	٧٨٣/٥٦
٢٢٧	٢٥/١	٣٥٢/٧٦	٧٨٤/٤٤
٢٢٨	١/٠٣	٣٦٢/٦٨	٧٥٣/١٧
٢٢٩	٢/٠٧	٣٦٢/٦٨	٧٥٤/٣٣
٢٣٠	٣/٠٤	٣٦٢/٦٨	٧٥٥/٤٠
٢٣١	٤/٠٣	٣٦٢/٦٨	٧٥٦/٤٥
٢٣٢	٥/٠٥	٣٦٢/٦٨	٧٥٧/٥٤
٢٣٣	٦/٠٢	٣٦٢/٦٨	٧٥٨/٥٥
٢٣٤	٧	٣٦٢/٦٨	٧٥٩/٥٦
٢٣٥	٨/١	٣٦٢/٦٨	٧٦٠/٧٠
٢٣٦	٩	٣٦٢/٦٨	٧٦١/٦٢
٢٣٧	١٠/٠٢	٣٦٢/٦٨	٧٦٢/٦٢
٢٣٨	١١	٣٦٢/٦٨	٧٦٣/٥٨
٢٣٩	١٢/٠٦	٣٦٢/٦٨	٧٦٤/٦٢
٢٣٩	١٢/٠٦	٣٦٢/٦٨	٧٦٤/٦٢
٢٤٠	١٣/٠٦	٣٦٢/٦٨	٧٦٥/٥٦
٢٤١	١٤/٠٣	٣٦٢/٦٨	٧٦٦/٤٧
٢٤٢	١٥/٠٢	٣٦٢/٦٨	٧٦٧/٤٢
٢٤٣	١٦/٠١	٣٦٢/٦٨	٧٦٨/٣٣
٢٤٤	١٧/٠٢	٣٦٢/٧٧	٧٦٩/٢٥
٢٤٥	١٨/٠٤	٣٦٢/٧٧	٧٧٠/١٦
٢٤٦	١٩/٠٣	٣٦٢/٧٧	٧٧١/٠٥
٢٤٧	٢٠/٠٥	٣٦٢/٧٧	٧٧١/٩٣
٢٤٨	٢١/٠٢	٣٦٢/٧٧	٧٧٢/٧٦
٢٤٩	٢٢/٠٢	٣٦٢/٧٧	٧٧٣/٦٤

جدول (۴-۴) - مقادیر تجربی T, p و ρ برای ۱- پنتانول

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۲۵۰	۰/۱	۳۱۳/۱۵	۷۹۹/۸۰
۲۵۱	۱۰	۳۱۳/۱۵	۸۰۷/۴۰
۲۵۲	۲۰	۳۱۳/۱۵	۸۱۴/۱۰
۲۵۳	۳۰	۳۱۳/۱۵	۸۲۰/۲۰
۲۵۴	۴۰	۳۱۳/۱۵	۸۲۶/۰۰
۲۵۵	۵۰	۳۱۳/۱۵	۸۳۱/۵۰
۲۵۶	۶۰	۳۱۳/۱۵	۸۳۶/۶۰
۲۵۷	۷۰	۳۱۳/۱۵	۸۴۱/۴۰
۲۵۸	۸۰	۳۱۳/۱۵	۸۴۶/۱۰
۲۵۹	۹۰	۳۱۳/۱۵	۸۵۰/۵۰
۲۶۰	۱۰۰	۳۱۳/۱۵	۸۵۴/۸۰
۲۶۱	۱۱۰	۳۱۳/۱۵	۸۵۸/۹۰
۲۶۲	۱۲۰	۳۱۳/۱۵	۸۶۲/۸۰
۲۶۳	۱۳۰	۳۱۳/۱۵	۸۶۶/۶۰
۲۶۴	۱۴۰	۳۱۳/۱۵	۸۷۰/۲۰
۲۶۵	۰/۱	۳۱۳/۱۵	۷۸۴/۴۰
۲۶۶	۱۰	۳۱۳/۱۵	۷۹۲/۷۰
۲۶۷	۲۰	۳۱۳/۱۵	۸۰۰/۱۰
۲۶۸	۳۰	۳۱۳/۱۵	۸۰۶/۸۰
۲۶۹	۴۰	۳۱۳/۱۵	۸۱۳/۱۰
۲۷۰	۵۰	۳۱۳/۱۵	۸۱۸/۹۰
۲۷۱	۶۰	۳۱۳/۱۵	۸۲۴/۴۰
۲۷۲	۷۰	۳۱۳/۱۵	۸۲۹/۷۰
۲۷۳	۸۰	۳۱۳/۱۵	۸۳۴/۶۰
۲۷۴	۹۰	۳۱۳/۱۵	۸۳۹/۲۰
۲۷۵	۱۰۰	۳۱۳/۱۵	۸۴۳/۷۰
۲۷۶	۱۱۰	۳۱۳/۱۵	۸۴۸/۰۰
۲۷۷	۱۲۰	۳۱۳/۱۵	۸۵۲/۱۰
۲۷۸	۱۳۰	۳۱۳/۱۵	۸۵۶/۰۰
۲۷۹	۱۴۰	۳۱۳/۱۵	۸۶۰/۰۰
۲۸۰	۰/۱	۳۵۳/۱۵	۷۶۸/۱۰

۲۸۱	۱۰	۳۵۳/۱۵	۷۷۷/۳۰
۲۸۲	۲۰	۳۵۳/۱۵	۷۸۵/۶۰
۲۸۳	۳۰	۳۵۳/۱۵	۷۹۲/۹۰
۲۸۴	۴۰	۳۵۳/۱۵	۷۹۹/۸۰

ادامه جدول (۴-۴)

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۲۸۵	۵۰	۳۵۳/۱۵	۸۰۶/۱۰
۲۸۶	۶۰	۳۵۳/۱۵	۸۱۲/۰۰
۲۸۷	۷۰	۳۵۳/۱۵	۸۱۷/۶۰
۲۸۸	۸۰	۳۵۳/۱۵	۸۲۲/۸۰
۲۸۴	۴۰	۳۵۳/۱۵	۷۹۹/۸۰
۲۸۵	۵۰	۳۵۳/۱۵	۸۰۶/۱۰
۲۸۶	۶۰	۳۵۳/۱۵	۸۱۲/۰۰
۲۸۷	۷۰	۳۵۳/۱۵	۸۱۷/۶۰
۲۸۸	۸۰	۳۵۳/۱۵	۸۲۲/۸۰
۲۸۹	۹۰	۳۵۳/۱۵	۸۲۷/۸۰
۲۹۰	۱۰۰	۳۵۳/۱۵	۸۳۲/۶۰
۲۹۱	۱۱۰	۳۵۳/۱۵	۸۳۷/۲۰
۲۹۲	۱۲۰	۳۵۳/۱۵	۸۴۱/۶۰
۲۹۳	۱۳۰	۳۵۳/۱۵	۸۴۵/۸۰
۲۹۴	۱۴۰	۳۵۳/۱۵	۸۴۹/۷۰
۲۹۵	۰/۱	۳۷۳/۱۵	۷۵۰/۷۰
۲۹۶	۱۰	۳۷۳/۱۵	۷۶۱/۲۰
۲۹۷	۲۰	۳۷۳/۱۵	۷۷۰/۳۰
۲۹۸	۳۰	۳۷۳/۱۵	۷۷۸/۲۰
۲۹۹	۴۰	۳۷۳/۱۵	۷۸۵/۷۰
۳۰۰	۵۰	۳۷۳/۱۵	۷۹۲/۵۰
۳۰۱	۶۰	۳۷۳/۱۵	۷۹۸/۹۰
۳۰۲	۷۰	۳۷۳/۱۵	۸۰۴/۹۰
۳۰۳	۸۰	۳۷۳/۱۵	۸۱۰/۵۰
۳۰۴	۹۰	۳۷۳/۱۵	۸۱۵/۸۰
۳۰۵	۱۰۰	۳۷۳/۱۵	۸۲۰/۹۰
۳۰۶	۱۱۰	۳۷۳/۱۵	۸۲۵/۷۰
۳۰۷	۱۲۰	۳۷۳/۱۵	۸۳۰/۳۰
۳۰۸	۱۳۰	۳۷۳/۱۵	۸۳۴/۷۰
۳۰۹	۱۴۰	۳۷۳/۱۵	۸۳۹/۰۰
۳۱۰	۰/۱	۳۸۳/۱۵	۷۴۱/۵۰

۳۱۱	۱۰	۳۸۳/۱۵	۷۵۲/۳۰
۳۱۲	۲۰	۳۸۳/۱۵	۷۶۱/۹۰
۳۱۳	۳۰	۳۸۳/۱۵	۷۷۰/۷۰
۳۱۴	۴۰	۳۸۳/۱۵	۷۷۸/۵۰

ادامه جدول (۴-۴)

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۳۱۵	۵۰	۳۸۳/۱۵	۷۸۵/۷۰
۳۱۶	۶۰	۳۸۳/۱۵	۷۹۲/۳۰
۳۱۷	۷۰	۳۸۳/۱۵	۷۹۸/۵۰
۳۱۸	۸۰	۳۸۳/۱۵	۸۰۴/۳۰
۳۱۹	۹۰	۳۸۳/۱۵	۸۰۹/۷۰
۳۲۰	۱۰۰	۳۸۳/۱۵	۸۱۵/۰۰
۳۱۵	۵۰	۳۸۳/۱۵	۷۸۵/۷۰
۳۱۶	۶۰	۳۸۳/۱۵	۷۹۲/۳۰
۳۱۷	۷۰	۳۸۳/۱۵	۷۹۸/۵۰
۳۱۸	۸۰	۳۸۳/۱۵	۸۰۴/۳۰
۳۱۹	۹۰	۳۸۳/۱۵	۸۰۹/۷۰
۳۲۰	۱۰۰	۳۸۳/۱۵	۸۱۵/۰۰
۳۱۵	۵۰	۳۸۳/۱۵	۷۸۵/۷۰
۳۱۶	۶۰	۳۸۳/۱۵	۷۹۲/۳۰
۳۲۱	۱۱۰	۳۸۳/۱۵	۸۱۹/۹۰
۳۲۲	۱۲۰	۳۸۳/۱۵	۸۲۴/۷۰
۳۲۳	۱۳۰	۳۸۳/۱۵	۸۲۹/۲۰
۳۲۴	۱۴۰	۳۸۳/۱۵	۸۳۳/۵۰

جدول (۴-۵) - مقادیر تجربی p ، T و ρ برای ۱- هگزانول

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۳۲۵	۰/۳۵	۳۰۳/۱۵	۸۱۰/۵۰
۳۲۶	۴/۹۷	۳۰۳/۱۵	۸۱۳/۰۰
۳۲۷	۹/۹۹	۳۰۳/۱۵	۸۱۶/۱۰
۳۲۸	۱۵/۰۷	۳۰۳/۱۵	۸۱۹/۷۰
۳۲۹	۲۰/۱۲	۳۰۳/۱۵	۸۲۱/۸۰
۳۳۰	۳۰/۲۴	۳۰۳/۱۵	۸۲۸/۴۰
۳۳۱	۴۰/۰۷	۳۰۳/۱۵	۸۳۶/۲۰
۳۳۲	۵۰/۲۷	۳۰۳/۱۵	۸۴۳/۰۰
۳۳۳	۰/۱۷	۳۲۳/۱۵	۷۹۷/۰۰
۳۳۴	۵/۰۳	۳۲۳/۱۵	۸۰۱/۰۰
۳۳۵	۹/۸۹	۳۲۳/۱۵	۸۰۴/۴۰
۳۳۶	۱۴/۹۷	۳۲۳/۱۵	۸۰۶/۳۰
۳۳۷	۲۰/۰۵	۳۲۳/۱۵	۸۰۹/۵۰
۳۳۸	۲۹/۹۳	۳۲۳/۱۵	۸۱۵/۷۰
۳۳۹	۳۹/۸۶	۳۲۳/۱۵	۸۱۹/۶۰
۳۴۰	۵۰/۰۱	۳۲۳/۱۵	۸۲۳/۶۰
۳۴۱	۰/۱۹	۳۵۳/۱۵	۷۷۵/۱۰
۳۴۲	۵	۳۵۳/۱۵	۷۷۹/۶۰
۳۴۳	۱۰/۱۲	۳۵۳/۱۵	۷۸۳/۵۰
۳۴۴	۱۵	۳۵۳/۱۵	۷۸۷/۲۰
۳۴۵	۱۹/۹۱	۳۵۳/۱۵	۷۹۱/۲۰
۳۴۶	۲۹/۹۷	۳۵۳/۱۵	۷۹۸/۰۰
۳۴۷	۳۹/۷۷	۳۵۳/۱۵	۸۰۴/۲۰
۳۴۸	۵۰/۲	۳۵۳/۱۵	۸۰۹/۸۰
۳۴۹	۰/۱۵	۳۸۳/۱۵	۷۴۹/۹۰
۳۵۰	۴/۹۶	۳۸۳/۱۵	۷۵۵/۱۰
۳۵۱	۱۰/۰۴	۳۸۳/۱۵	۷۶۰/۶۰
۳۵۲	۱۴/۹۸	۳۸۳/۱۵	۷۶۵/۵۰
۳۵۳	۲۰/۰۲	۳۸۳/۱۵	۷۶۹/۸۰
۳۵۴	۳۰/۰۵	۳۸۳/۱۵	۷۷۸/۴۰

۳۵۵	۴۰/۱۱	۳۸۳/۱۵	۷۸۶/۱۰
۳۵۶	۴۹/۹	۳۸۳/۱۵	۷۹۲/۶۰

جدول (۴-۶) - مقادیر تجربی p و T و ρ برای ۱- هپتانول

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۳۵۷	۱	۳۱۳/۱۳	۸۰۸/۵۰
۳۵۸	۲/۰۲	۳۱۳/۱۳	۸۰۹/۲۰
۳۵۹	۳	۳۱۳/۱۳	۸۰۹/۹۰
۳۶۰	۴	۳۱۳/۱۳	۸۱۰/۶۰
۳۶۱	۵	۳۱۳/۱۳	۸۱۱/۲۰
۳۶۲	۶	۳۱۳/۱۳	۸۱۱/۹۰
۳۶۳	۷	۳۱۳/۱۳	۸۱۲/۶۰
۳۶۴	۸	۳۱۳/۱۳	۸۱۳/۳۰
۳۶۵	۹	۳۱۳/۱۳	۸۱۳/۹۰
۳۶۶	۱۰	۳۱۳/۱۳	۸۱۴/۶۰
۳۶۷	۱۱/۰۱	۳۱۳/۱۳	۸۱۵/۲۰
۳۶۸	۱۲	۳۱۳/۱۳	۸۱۵/۹۰
۳۶۹	۱۳	۳۱۳/۱۳	۸۱۶/۵۰
۳۷۰	۱۴	۳۱۳/۱۳	۸۱۷/۲۰
۳۷۱	۱۵	۳۱۳/۱۳	۸۱۷/۸۰
۳۷۲	۱۶	۳۱۳/۱۳	۸۱۸/۴۰
۳۷۳	۱۷	۳۱۳/۱۳	۸۱۹/۱۰
۳۷۴	۱۸	۳۱۳/۱۳	۸۱۹/۷۰
۳۷۵	۱۸/۳۵	۳۱۳/۱۳	۸۱۹/۹۰
۳۷۶	۱۹	۳۱۳/۱۳	۸۲۰/۴۰
۳۷۷	۲۰/۰۱	۳۱۳/۱۳	۸۲۱/۱۰
۳۷۸	۲۰/۳۱	۳۱۳/۱۳	۸۲۱/۳۰
۳۷۹	۱/۰۳	۳۳۳/۰۱	۷۹۴/۳۰
۳۸۰	۲	۳۳۳/۰۱	۷۹۵/۱۰
۳۸۱	۳	۳۳۳/۰۱	۷۹۵/۸۰
۳۸۲	۴/۰۳	۳۳۳/۰۱	۷۹۶/۶۰
۳۸۳	۵/۰۱	۳۳۳/۰۱	۷۹۷/۳۰
۳۸۴	۶	۳۳۳/۰۱	۷۹۸/۱۰
۳۸۵	۷	۳۳۳/۰۱	۷۹۸/۸۰
۳۸۶	۸/۰۱	۳۳۳/۰۱	۷۹۹/۶۰

۳۸۷	۹	۳۳۳/۰.۱	۸۰۰/۳۰
۳۸۸	۱۰/۰.۳	۳۳۳/۰.۱	۸۰۱/۱۰
۳۸۹	۱۱	۳۳۳/۰.۱	۸۰۱/۸۰
۳۹۰	۱۲	۳۳۳/۰.۱	۸۰۲/۵۰
۳۹۱	۱۳	۳۳۳/۰.۱	۸۰۳/۲۰

ادامه جدول (۴-۶)

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۳۹۲	۱۴/۰.۱	۳۳۳/۰.۱	۸۰۳/۹۰
۳۹۳	۱۵	۳۳۳/۰.۱	۸۰۴/۶۰
۳۹۴	۱۶/۰.۳	۳۳۳/۰.۱	۸۰۵/۳۰
۳۹۵	۱۷/۰.۱	۳۳۳/۰.۱	۸۰۵/۹۰
۳۹۶	۱۸/۰.۱	۳۳۳/۰.۱	۸۰۶/۶۰
۳۹۷	۱۹	۳۳۳/۰.۱	۸۰۷/۳۰
۳۹۸	۲۰/۰.۲	۳۳۳/۰.۱	۸۰۸/۰۰
۳۹۹	۲۱	۳۳۳/۰.۱	۸۰۸/۶۰
۴۰۰	۲۱/۹۱	۳۳۳/۰.۱	۸۰۹/۲۰
۴۰۱	۱/۰.۲	۳۵۲/۸۶	۷۷۹/۵۰
۴۰۲	۲/۰.۱	۳۵۲/۸۶	۷۸۰/۴۰
۴۰۳	۳/۰.۳	۳۵۲/۸۶	۷۸۱/۳۰
۴۰۴	۴/۰.۲	۳۵۲/۸۶	۷۸۲/۱۰
۴۰۵	۵/۰.۱	۳۵۲/۸۶	۷۸۲/۹۰
۴۰۶	۶/۰.۲	۳۵۲/۸۶	۷۸۳/۸۰
۴۰۷	۷	۳۵۲/۸۶	۷۸۴/۶۰
۴۰۸	۸/۰.۱	۳۵۲/۸۶	۷۸۵/۴۰
۴۰۹	۹/۰.۱	۳۵۲/۸۶	۷۸۶/۳۰
۴۱۰	۱۰/۰.۲	۳۵۲/۸۶	۷۸۷/۰۰
۴۱۱	۱۱/۰.۱	۳۵۲/۸۶	۷۸۷/۹۰
۴۱۲	۱۲	۳۵۲/۸۶	۷۸۸/۶۰
۴۱۳	۱۳/۰.۲	۳۵۲/۸۶	۷۸۹/۴۰
۴۱۴	۱۴/۰.۱	۳۵۲/۸۶	۷۹۰/۲۰
۴۱۵	۱۵/۰.۱	۳۵۲/۸۶	۷۹۰/۹۰
۴۱۶	۱۶/۰.۳	۳۵۲/۸۶	۷۹۱/۷۰
۴۱۷	۱۷/۰.۲	۳۵۲/۸۶	۷۹۲/۵۰
۴۱۸	۱۸/۰.۱	۳۵۲/۸۶	۷۹۳/۲۰
۴۱۹	۱۹	۳۵۲/۸۶	۷۹۳/۹۰
۴۲۰	۲۰/۰.۳	۳۵۲/۸۶	۷۹۴/۷۰
۴۲۱	۲۱/۰.۱	۳۵۲/۸۶	۷۹۵/۴۰

۴۲۲	۲۲/۰.۱	۳۵۲/۸۶	۷۹۶/۱۰
۴۲۳	۱/۰.۴	۳۶۲/۷۳	۷۷۰/۹۰
۴۲۴	۲/۰.۲	۳۶۲/۷۳	۷۷۱/۹۰
۴۲۵	۳/۰.۲	۳۶۲/۷۳	۷۷۲/۸۰
۴۲۶	۴/۰.۱	۳۶۲/۷۳	۷۷۳/۷۰

ادامه جدول (۴-۶)

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۴۲۷	۴/۹۷	۳۶۲/۷۳	۷۷۴/۵۰
۴۲۸	۶/۰.۱	۳۶۲/۷۳	۷۷۵/۵۰
۴۲۹	۷/۰.۱	۳۶۲/۷۳	۷۷۶/۴۰
۴۳۰	۸/۰.۱	۳۶۲/۷۳	۷۷۷/۳۰
۴۳۱	۹/۰.۱	۳۶۲/۷۳	۷۷۸/۱۰
۴۳۲	۱۰/۰.۱	۳۶۲/۷۳	۷۷۹/۰۰
۴۳۳	۱۱/۰.۱	۳۶۲/۷۳	۷۷۹/۸۰
۴۳۴	۱۲	۳۶۲/۷۳	۷۸۰/۶۰
۴۳۵	۱۳/۰.۱	۳۶۲/۷۳	۷۸۱/۵۰
۴۳۶	۱۴/۰.۱	۳۶۲/۷۳	۷۸۲/۳۰
۴۳۷	۱۵/۰.۱	۳۶۲/۷۳	۷۸۳/۱۰
۴۳۸	۱۶	۳۶۲/۷۳	۷۸۳/۹۰
۴۳۹	۱۷	۳۶۲/۷۳	۷۸۴/۷۰
۴۴۰	۱۸	۳۶۲/۷۳	۷۸۵/۴۰
۴۴۱	۱۹	۳۶۲/۷۳	۷۸۶/۲۰
۴۴۲	۲۰/۰.۴	۳۶۲/۷۳	۷۸۷/۰۰
۴۴۳	۲۱	۳۶۲/۷۳	۷۸۷/۷۰
۴۴۴	۲۲	۳۶۲/۷۳	۷۸۸/۵۰

جدول (۴-۷) - مقادیر تجربی ρ و T برای ρ - اکتانول

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۴۴۵	۰/۱	۲۹۸/۱۵	۸۲۲/۳۰
۴۴۶	۵/۱۵	۲۹۸/۱۵	۸۲۵/۴۰
۴۴۷	۱۰/۱	۲۹۸/۱۵	۸۲۸/۴۰
۴۴۸	۱۵/۲	۲۹۸/۱۵	۸۳۱/۳۰
۴۴۹	۲۰/۳۵	۲۹۸/۱۵	۸۳۴/۲۰
۴۵۰	۲۳/۵۵	۲۹۸/۱۵	۸۳۵/۸۰
۴۵۱	۲۹/۲	۲۹۸/۱۵	۸۳۹/۰۰
۴۵۲	۳۴/۶۵	۲۹۸/۱۵	۸۴۱/۷۰
۴۵۳	۳۹/۳۵	۲۹۸/۱۵	۸۴۴/۱۰
۴۵۴	۳۰/۴	۲۹۸/۱۵	۸۳۹/۶۰
۴۵۵	۲۰/۲	۲۹۸/۱۵	۸۳۴/۱۰
۴۵۶	۱۰/۸	۲۹۸/۱۵	۸۲۸/۸۰
۴۵۷	۰/۱	۳۲۳/۱۵	۸۰۴/۶۰
۴۵۸	۴/۹۴	۳۲۳/۱۵	۸۰۸/۰۰
۴۵۹	۱۰/۱۵	۳۲۳/۱۵	۸۱۱/۵۰
۴۶۰	۱۵/۱۵	۳۲۳/۱۵	۸۱۴/۷۰
۴۶۱	۲۰/۲۵	۳۲۳/۱۵	۸۱۷/۹۰
۴۶۲	۲۳/۷	۳۲۳/۱۵	۸۱۹/۹۰
۴۶۳	۲۹/۴	۳۲۳/۱۵	۸۲۳/۳۰
۴۶۴	۳۴/۷۵	۳۲۳/۱۵	۸۲۶/۴۰
۴۶۵	۴۰/۱۸	۳۲۳/۱۵	۸۲۹/۵۰
۴۶۶	۲۹/۹۵	۳۲۳/۱۵	۸۲۳/۷۰
۴۶۷	۲۰/۱۵	۳۲۳/۱۵	۸۱۷/۹۰
۴۶۸	۱۰/۳	۳۲۳/۱۵	۸۱۱/۶۰
۴۶۹	۰/۲	۳۲۳/۱۵	۸۰۴/۶۰
۴۷۰	۰/۱	۳۴۸/۱۵	۷۸۶/۲۰
۴۷۱	۵/۳	۳۴۸/۱۵	۷۹۰/۳۰
۴۷۲	۱۴/۷۷	۳۴۸/۱۵	۷۹۷/۳۰
۴۷۳	۲۰/۲۲	۳۴۸/۱۵	۸۰۱/۲۰

۴۷۴	۲۲/۹۵	۳۴۸/۱۵	۸۰۳/۰۰
۴۷۵	۲۹/۳۵	۳۴۸/۱۵	۸۰۷/۲۰
۴۷۶	۳۴/۶۲	۳۴۸/۱۵	۸۱۰/۴۰
۴۷۷	۴۰/۰۳	۳۴۸/۱۵	۸۱۳/۹۰
۴۷۸	۳۰/۰۵	۳۴۸/۱۵	۸۰۷/۵۰

ادامه جدول (۸-۴)

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۴۷۹	۱۹/۹۷	۳۴۸/۱۵	۸۰۰/۹۰
۴۸۰	۹/۶۸	۳۴۸/۱۵	۷۹۳/۶۰

جدول (۴-۸) - مقادیر تجربی p و T برای ρ - نونانول

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۴۸۱	۰/۱۵	۳۴۸/۱۵	۷۸۶/۱
۴۸۲	۰/۱	۲۹۸/۱۵	۸۲۴/۲۴
۴۸۳	۱۰	۲۹۸/۱۵	۸۳۰/۲۰
۴۸۴	۲۰	۲۹۸/۱۵	۸۳۵/۸۱
۴۸۵	۳۰	۲۹۸/۱۵	۸۴۱/۰۷
۴۸۶	۴۰	۲۹۸/۱۵	۸۴۶/۰۴
۴۸۷	۵۰	۲۹۸/۱۵	۸۵۰/۷۵
۴۸۸	۶۰	۲۹۸/۱۵	۸۵۵/۲۳
۴۸۹	۷۰	۲۹۸/۱۵	۸۵۹/۵۲
۴۹۰	۸۰	۲۹۸/۱۵	۸۶۳/۶۳
۴۹۱	۹۰	۲۹۸/۱۵	۸۶۷/۵۷
۴۹۲	۱۰۰	۲۹۸/۱۵	۸۷۱/۳۷
۴۹۳	۰/۱	۳۰۸/۱۵	۸۱۷/۳۵
۴۹۴	۱۰	۳۰۸/۱۵	۸۲۳/۵۹
۴۹۵	۲۰	۳۰۸/۱۵	۸۲۹/۴۵
۴۹۶	۳۰	۳۰۸/۱۵	۸۳۴/۹۳
۴۹۷	۴۰	۳۰۸/۱۵	۸۴۰/۰۹
۴۹۸	۵۰	۳۰۸/۱۵	۸۴۴/۹۷
۴۹۹	۶۰	۳۰۸/۱۵	۸۴۹/۶۲
۵۰۰	۷۰	۳۰۸/۱۵	۸۵۴/۰۵
۵۰۱	۸۰	۳۰۸/۱۵	۸۵۸/۲۹
۵۰۲	۹۰	۳۰۸/۱۵	۸۶۲/۳۵
۵۰۳	۱۰۰	۳۰۸/۱۵	۸۶۶/۲۷
۵۰۴	۰/۱	۳۱۸/۱۵	۸۱۰/۳۸
۵۰۵	۱۰	۳۱۸/۱۵	۸۱۶/۹۲
۵۰۶	۲۰	۳۱۸/۱۵	۸۲۳/۰۴
۵۰۷	۳۰	۳۱۸/۱۵	۸۲۸/۷۴
۵۰۸	۴۰	۳۱۸/۱۵	۸۳۴/۰۹
۵۰۹	۵۰	۳۱۸/۱۵	۸۳۹/۱۵

۵۱۰	۶۰	۳۱۸/۱۵	۸۴۳/۹۵
۵۱۱	۷۰	۳۱۸/۱۵	۸۴۸/۵۳
۵۱۲	۸۰	۳۱۸/۱۵	۸۵۲/۹۰
۵۱۳	۹۰	۳۱۸/۱۵	۸۵۷/۰۹
۵۱۴	۱۰۰	۳۱۸/۱۵	۸۶۱/۱۱

جدول (۹-۴) - مقادیر مولکولی ρ و T برای ۱- دکانول

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۵۱۵	۰/۱	۲۹۸/۱۵	۸۲۶/۸۰
۵۱۶	۱	۲۹۸/۱۵	۸۲۷/۳۰
۵۱۷	۴/۸	۲۹۸/۱۵	۸۲۹/۶۰
۵۱۸	۱۰/۲	۲۹۸/۱۵	۸۳۲/۷۰
۵۱۹	۱۴/۸	۲۹۸/۱۵	۸۳۵/۳۰
۵۲۰	۱۹/۴۵	۲۹۸/۱۵	۸۳۷/۸۰
۵۲۱	۲۲/۹۵	۲۹۸/۱۵	۸۳۹/۶۰
۵۲۲	۲۷/۸	۲۹۸/۱۵	۸۴۲/۱۰
۵۲۳	۳۲/۸	۲۹۸/۱۵	۸۴۴/۷۰
۵۲۴	۳۷/۳	۲۹۸/۱۵	۸۴۶/۹۰
۵۲۵	۴۰/۲	۲۹۸/۱۵	۸۴۸/۳۰
۵۲۶	۰/۱	۳۲۳/۱۵	۸۰۹/۴۰
۵۲۷	۲۰/۰۲	۳۲۳/۱۵	۸۱۰/۸۰
۵۲۸	۵/۳۵	۳۲۳/۱۵	۸۱۳/۰۰
۵۲۹	۱۰	۳۲۳/۱۵	۸۱۶/۰۰
۵۳۰	۱۴/۸	۳۲۳/۱۵	۸۱۸/۹۰
۵۳۱	۱۸/۸۵	۳۲۳/۱۵	۸۲۱/۳۰
۵۳۲	۲۶/۹	۳۲۳/۱۵	۸۲۶/۰۰
۵۳۳	۳۱/۹	۳۲۳/۱۵	۸۲۸/۸۰
۵۳۴	۲۶/۱۵	۳۲۳/۱۵	۸۳۱/۲۰
۵۳۵	۴۰	۳۲۳/۱۵	۸۳۳/۲۰
۵۳۶	۰/۱	۳۴۸/۱۵	۷۹۱/۵۰
۵۳۷	۱/۲۵	۳۴۸/۱۵	۷۹۲/۴۰
۵۳۸	۵/۱	۳۴۸/۱۵	۷۹۵/۳۰
۵۳۹	۱۰/۲۳	۳۴۸/۱۵	۷۹۹/۱۰
۵۴۰	۱۴/۵۸	۳۴۸/۱۵	۸۰۲/۰۰
۵۴۱	۱۸/۹	۳۴۸/۱۵	۸۰۴/۹۰
۵۴۲	۲۴/۴	۳۴۸/۱۵	۸۰۸/۳۰
۵۴۳	۲۹/۵	۳۴۸/۱۵	۸۱۱/۶۰

۵۴۴	۳۵	۳۴۸/۱۵	۸۱۵/۰۰
۵۴۵	۴۰/۲	۳۴۸/۱۵	۸۱۸/۱۰

جدول (۴-۱۰) - مقادیر مولکولی ρ و T برای ۱- دودکانول

شماره	P/Mpa	T/K	ρ/Kgm^{-3}
۵۴۶	۰/۱	۳۲۳/۱۵	۸۱۲/۹۰
۵۴۷	۲/۴۵	۳۲۳/۱۵	۸۱۴/۴۰
۵۴۸	۵/۶	۳۲۳/۱۵	۸۱۶/۴۰
۵۴۹	۱۰/۳۵	۳۲۳/۱۵	۸۱۹/۴۰
۵۵۰	۲۳/۲۵	۳۲۳/۱۵	۸۲۶/۹۰
۵۵۱	۲۸/۴۵	۳۲۳/۱۵	۸۲۹/۹۰
۵۵۲	۲۸/۳	۳۲۳/۱۵	۸۲۹/۸۰
۵۵۳	۳۳/۸۵	۳۲۳/۱۵	۸۳۲/۸۰
۵۵۴	۳۷/۴	۳۲۳/۱۵	۸۳۴/۷۰
۵۵۵	۴۰	۳۲۳/۱۵	۸۳۶/۱۰
۵۵۶	۴/۱۵	۳۲۳/۱۵	۸۱۵/۶۰
۵۵۷	۱/۴۳	۳۲۳/۱۵	۸۱۳/۸۰
۵۵۸	۰/۱	۳۴۸/۱۵	۷۹۵/۲۰
۵۵۹	۰/۸۵	۳۴۸/۱۵	۷۹۵/۸۰
۵۶۰	۵/۴۵	۳۴۸/۱۵	۷۹۹/۲۰
۵۶۱	۱۰/۲	۳۴۸/۱۵	۸۰۲/۵۰
۵۶۲	۱۴/۸۵	۳۴۸/۱۵	۸۰۵/۶۰
۵۶۳	۲۰/۸۵	۳۴۸/۱۵	۸۰۹/۴۰
۵۶۴	۲۷/۹	۳۴۸/۱۵	۸۱۳/۸۰
۵۶۵	۲۶/۹۵	۳۴۸/۱۵	۸۱۳/۲۰
۵۶۶	۳۲/۷۵	۳۴۸/۱۵	۸۱۶/۶۰
۵۶۷	۳۷/۲۳	۳۴۸/۱۵	۸۱۹/۳۰
۵۶۸	۳۹/۷	۳۴۸/۱۵	۸۲۰/۷۰

۴-۳- محاسبه توصیف کننده‌ها

توصیف کننده‌ها مقادیر عددی هستند که بیانگر ویژگی خاصی از مولکول بوده و با دانسیته‌ی آن ارتباط دارد. برای محاسبه توصیف کننده‌ها در ابتدا ساختار مولکول‌ها با استفاده از نرم افزار Hyperchem رسم و ساختار هندسی آن‌ها با احتساب اتم‌های هیدروژن و با استفاده از روش نیمه تجربی بهینه شد. سپس ساختارهای بهینه شده توسط این نرم‌افزار به عنوان ورودی به نرم‌افزار Dragon وارد شدند. محاسبه‌ی توصیف کننده‌ها توسط این نرم‌افزار صورت گرفت که حدود ۱۴۸۰ توصیف کننده در ۱۸ گروه مختلف برای هر ترکیب بدست آمد.

۴-۴- انتخاب توصیف کننده‌ها با استفاده از روش ورود مرحله‌ای

برای ساختن مدلی که بیانگر ارتباط ساختاری ترکیبات مورد بررسی با دانسیته باشد از روش رگرسیون خطی چندگانه بر پایه‌ی ورود مرحله‌ای استفاده شد. طبیعی است که تعداد زیاد توصیف کننده‌ها باعث پیچیدگی محاسبات شده لذا تعدادی از این توصیف کننده‌ها که دارای ۹۰٪ مقادیر یکسان بودند حذف شدند. در پایان، جهت به دست آوردن توصیف کننده‌هایی که بیشترین ارتباط را با دانسیته داشتند، با استفاده از نرم‌افزار SPSS و استفاده از روش رگرسیون مرحله‌ای سه توصیف کننده‌ی (HGM)، فشار (P) و دما (T) انتخاب شدند. جدول (۴-۱۱) ماتریس همبستگی متغیرهای مستقل وارد شده را برای سری داده‌ها نمایش می‌دهد.

جدول (۴-۱۱) - ماتریس همبستگی متغیرهای مستقل وارد شده

	HGM	P	T
HGM	۱	۰/۲۷۱	-۰/۰۲۲
P	۰/۲۷۱	۱	-۰/۱۳۱
T	-۰/۰۲۲	-۰/۱۳۱	۱

جدول (۴-۱۲) نام متغیرهای مستقل، ضرایب رگرسیون و ضرایب استاندارد شده را برای مدل منتخب این سری از داده‌ها نشان می‌دهد. در این جدول N تعداد داده‌های سری آموزش، F مقدار مربوط به آماره‌ی فیشر و R ضریب همبستگی می‌باشد.

جدول (۴-۱۲) - مشخصات مدل منتخب توسط روش رگرسیون خطی چند گانه

ضریب استاندارد شده	ضریب رگرسیون	علامت	توصیف کننده
۰/۷۶۷	۰/۵۱۶	P	فشار
-۰/۵۴۵	-۰/۷۰۵	T	دما
-۰/۴۰۲	-۲/۲۳۶	HGM	ماتریس قدرت نفوذ(خودهمبستگی)

N=396

F=10377/840

R=0/991

۴-۴-۱- مدل سازی به روش MLR

در این مرحله داده‌های مربوط به ۱۰ الکل نوع اول مورد مطالعه به صورت گزینشی به سه سری آموزش، تست و ارزیابی به ترتیب به نسبت ۱۵:۱۵:۷۰ و به ترتیب با تعداد ۸۶:۸۶:۳۹۶ داده تقسیم شدند. با استفاده از سری آموزش و انتخاب روش ورود اجباری، چندین مدل مختلف به طور جداگانه به دست آمد که عبارتند از:

$$\rho = (786/925) + (0/490 \times P)$$

مدل شماره (۱)

$$\rho = (1028/953) + (0/461 \times P) + (-0/718 \times T) \quad \text{مدل شماره (۲)}$$

$$\rho = (1055/468) + (-0/515 \times P) + (-0/711 \times T) + (-2/212 \times HGM) \quad \text{مدل شماره (۳)}$$

$$\rho = (-3751/115) + (0/503 \times P) + (-0/713 \times T) + (-7/104 \times HGM) \quad \text{مدل شماره (۴)}$$

$$+ (5659/786 \times MATS1m)$$

$$\rho = (-4033/340) + (0/501 \times P) + (-0/717 \times T) + (-7/490 \times HGM) \quad \text{مدل شماره (۵)}$$

$$+ (5995/878 \times MATS1m) + (-0/393 \times GATS8e)$$

از بین این مدل‌ها، مدلی که دارای بیشترین مقدار R و F، کمترین مقدار خطای استاندارد برای سری ارزیابی و شامل توصیف کننده‌های تا حد امکان قابل توجیه باشد به عنوان بهترین مدل و مدل نهایی انتخاب گردید. مقادیر R و F و خطای استاندارد برای مدل‌های ۱ تا ۵ در جدول (۴-۱۳) آمده است.

جدول (۴-۱۳) - مقادیر R، F و خطای استاندارد برای سری ارزیابی برای مدل ۱ تا ۵

مدل	R	F	خطای استاندارد
۱	۰/۷۲۹	۶۴۷/۹۳۱	۲۰/۹۰۷۵۵
۲	۰/۹۱۲	۱۴۰۲/۴۰۴	۱۲/۵۴۸۶۷
۳	۰/۹۹۱	10377/840	۴/۰۸۹۸۰
۴	۰/۹۹۲	۸۶۱۴/۸۸۷	۳/۸۹۲۴۸
۵	۰/۹۹۲	۷۰۸۹/۱۹۷	۳/۸۳۸۸۵

با توجه به جدول (۴-۱۳)، مدل شماره ۳، با ۱ توصیف کننده‌ی ساختاری HGM و ۲ توصیف کننده‌ی T و P، به عنوان مدل نهایی انتخاب گردید. جدول (۴-۱۴) مقدار متغیر مستقل وارد شده در مدل منتخب به غیر از دما و فشار را برای مولکول‌های مورد بررسی نشان می‌دهد.

جدول (۴-۱۴) - مقدار توصیف کننده‌ی وارد شده در مدل منتخب

نام ترکیب	HGM
اتانول	۲۵/۷۰
۱- پروپانول	۲۰/۲۰
۱- بوتانول	۱۶/۰۸
۱- پنتانول	۱۳/۰۰
۱- هگزانول	۱۱/۲۸
۱- هپتانول	۹/۸۶
۱- اکتانول	۸/۷۸
۱- نونانول	۷/۸۴
۱- دکانول	۷/۲۳
۱- دودکانول	۶/۰۴

اثر این توصیف کننده بر روی دانسیته در انتهای این فصل مورد بررسی قرار می‌گیرد.

۴-۵- مدل‌سازی به روش شبکه عصبی مصنوعی

با توجه به پیچیدگی داده‌ها و احتمال وجود روابط غیرخطی بین متغیرهای مستقل (توصیف کننده‌ها) و متغیر وابسته (دانسیته) علاوه بر مدل‌سازی به روش رگرسیون خطی چندگانه، روش غیر خطی شبکه عصبی مصنوعی هم برای مدل‌سازی دانسیته ۱- آلکانول‌ها مورد استفاده قرار گرفت. در این روش تابع کارایی شبکه، میانگین مربع خطا (MSE) می‌باشد. برای ایجاد بهترین مدل و کمترین خطا، باید پارامترهای شبکه بهینه شوند که عبارتند از:

تعداد متغیرهای ورودی (تعداد توصیف‌کننده‌ها)

تعداد دوره‌های آموزش

تعداد گره‌های لایه پنهان

نوع تابع انتقال

نوع تابع آموزش

ملاک انتخاب مقدار بهینه برای هر یک از این پارامترها، زمانی است که مقدار میانگین مربع خطا

(MSE) مطابق رابطه (۴-۱) برای هر دو سری ارزیابی و آموزش مینیمم مقدار باشد.

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y - \hat{y})^2 \quad (۴-۱)$$

که در این رابطه \hat{y} خروجی شبکه در n امین تکرار، y مقدار تجربی دانسیته و n تعداد ترکیبات مورد استفاده در سری آموزش می‌باشد.

۴-۵-۱- انتخاب تعداد ورودی‌های شبکه، نوع تابع انتقال، نوع تابع آموزش، تعداد دوره

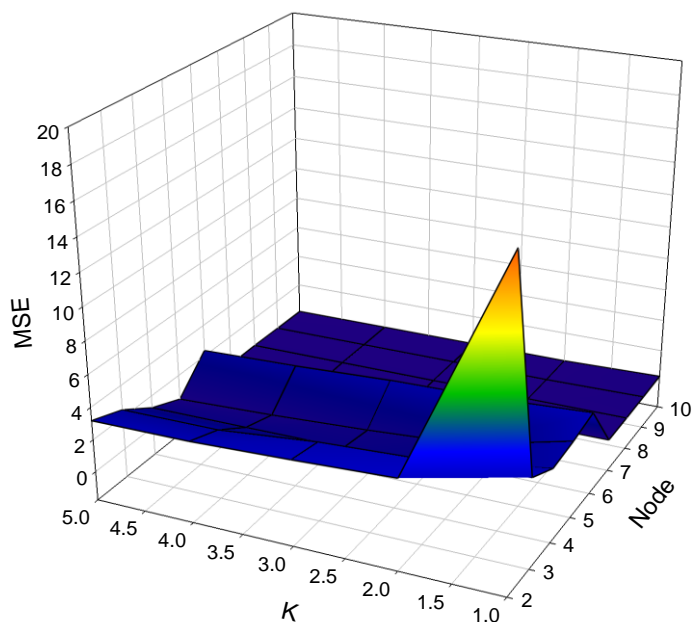
های آموزش و تعداد گره در لایه پنهان

برای بهینه‌سازی تعداد ورودی‌های شبکه، نوع تابع آموزش، نوع تابع انتقال و تعداد گره‌های لایه پنهان، شبکه با ورودی‌های از ۱ تا ۵ توصیفگر ایجاد شد و با الگوریتم‌های تنظیم بایزین و لونیبرگ-مارکواردت با تعداد متفاوت گره‌های لایه پنهان (۲ تا ۱۰ گره) آموزش داده شد. مرحله‌ی بعد انتخاب تابع انتقال مناسب برای لایه پنهان شبکه می‌باشد. برای این منظور دو تابع انتقال تانژانت سیگموئید (tansig)، لگاریتم سیگموئید (logsig) در برنامه استفاده شدند. سپس چهار شبکه‌ی طراحی شده با دو الگوریتم آموزشی لونیبرگ-مارکواردت و تنظیم بایزین و دو تابع انتقال مختلف، به ازای همه‌ی ترکیب‌های ممکن از مقادیر مختلف پارامتر دیگر شبکه، یعنی تعداد دور آموزش، آموزش داده شد.

نتایج حاصله برای سری تأیید در جداول (۱۵-۴)، (۱۶-۴)، (۱۷-۴)، (۱۸-۴) و (۱۹-۴)، (۲۰-۴)، (۲۱-۴)، (۲۲-۴) و شکل‌های (۱-۴)، (۲-۴)، (۳-۴) و (۴-۴) نشان داده شده است. با توجه به نتایج به دست آمده، شبکه عصبی با تعداد متغیر ورودی ۳، تابع تبدیل تانژانت سیگموئید (tansig) و الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکواردت (trainlm) و تعداد دور آموزشی ۱۰۰ و تعداد ۱۰ گره در لایه پنهان کمترین مقدار میانگین مربعات خطا را ایجاد می‌کند. لذا شبکه‌ای با این مشخصات برای مطالعات بعدی انتخاب گردید.

جدول (۴-۱۵) - مقادیر میانگین مربعات خطا برای شبکه هایی با تابع تبدیل tansig و تابع آموزش lm

تعداد متغیرهای ورودی شبکه (تعداد توصیف کننده‌ها)					
تعداد گره‌های لایه پنهان	1	2	3	4	5
	۲	۲	۳	۴	۵
۳	۱۷/۵۰۱۱	۳/۷۱۹۷	۲/۷۶۳۰	۲/۹۶۲۵	۳/۲۹۸۲
۴	۳/۷۷۹۰	۳/۴۱۶۰	۱/۶۷۷۱	۱/۴۲۹۷	۲/۹۶۱۱
۶	۳/۴۸۲۸	۳/۱۰۲۷	۱/۳۲۱۱	۱/۰۰۰۲	۲/۸۲۵۹
۷	۳/۲۴۰۳	۲/۵۲۱۳	۱/۲۷۰۲	۰/۶۷۳۵	۲/۵۳۶۷
۸	۳/۱۹۰۰	۲/۴۷۹۴	۱/۲۳۸۹	۰/۴۴۰۰	۲/۳۴۸۹
۹	۳/۱۶۷۸	۲/۳۶۶۹	۱/۲۳۴۶	۰/۳۴۵۲	۲/۱۲۲۰
۱۰	2/۱۵۲۶	1/۳۳۲۹	0/1335	۰/۲۹۳۹	۲/۰۴۷۹

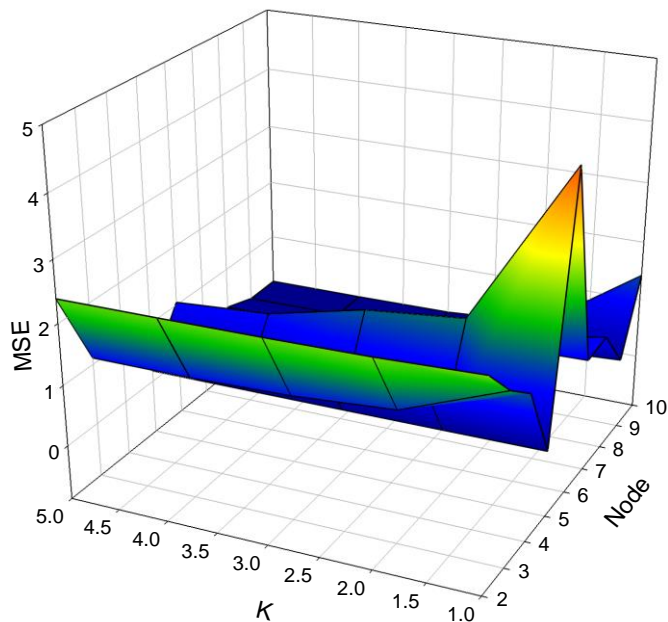


شکل (۴-۱) - نمودار سه بعدی شبکه‌هایی

با تابع تبدیل tansig و تابع آموزش lm

جدول (۴-۱۶) - مقادیر میانگین مربعات خطا برای شبکه‌هایی با تابع تبدیل tansig و تابع آموزش lm

تعداد متغیرهای ورودی شبکه (تعداد توصیف کننده‌ها)						
تعداد گره‌های لایه پنهان		1	2	3	4	5
	۲	۲/۵۰۱۴	۱/۹۱۵۲	۳/۳۶۸۱	۱/۵۹۰۳	۴/۳۴۶۵
	۳	۲/۴۴۲۰	۱/۲۷۴۴	۲/۹۸۶۰	۱/۶۸۱۶	۱/۶۸۶۸
	۴	۲/۴۱۵۳	۱/۱۵۴۰	۲/۹۵۵۸	۰/۳۱۸۷	۱/۵۲۲۸
	۶	۲/۴۰۰۵	۱/۱۰۸۲	۲/۳۲۰۶	۰/۲۳۸۶	۱/۱۵۰۷
	۷	۲/۳۹۱۲	۱/۱۰۵۲	۲/۹۲۳۴	۰/۲۱۱۱	۱/۰۴۴۸
	۸	۲/۳۸۵۱	۱/۰۰۲۴	۱/۵۰۲۶	۰/۱۹۷۲	0/700
	۹	۲/۳۸۰۸	۰/۸۵۰۱	۱/۴۰۶۰	۰/۱۸۹۳	۰/۹۳۲۲
	۱۰	۲/۳۷۷۸	۰/۵۴۷۶	۱/۴۰۱۸	۰/۱۸۴۹	۰/۷۹۹۲

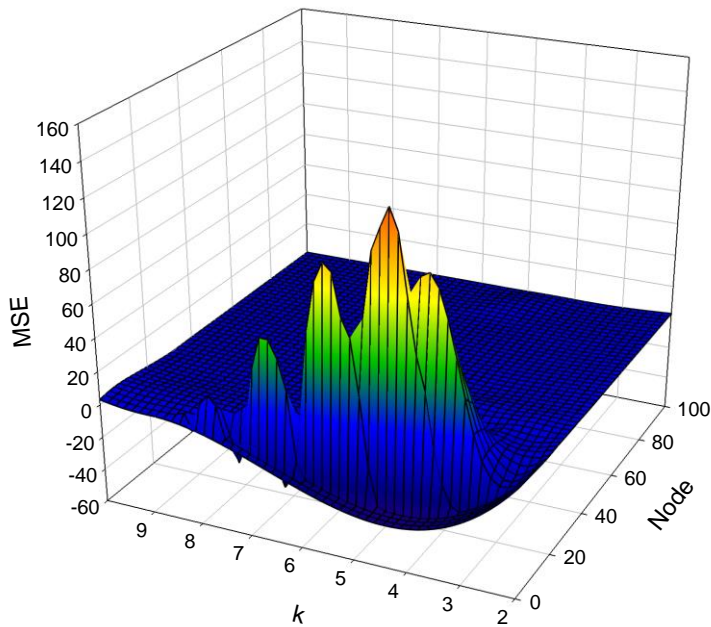


شکل (۲-۴) - نمودار سه بعدی شبکه‌هایی

با تابع تبدیل tansig و تابع آموزش br

جدول (۱۷-۴) - مقادیر میانگین مربعات خطا برای شبکه‌هایی با تابع تبدیل logsig و تابع آموزش lm

تعداد متغیرهای ورودی شبکه (تعداد توصیف کننده‌ها)						
تعداد گره‌های لایه پنهان		1	2	3	4	5
	۲	۲	۲	۳	۴	۵
۳	۳/۳۰۷۶	۲/۴۳۸۶	۱۰۴/۱۳۵۲	۰/۷۶۳۵	۷/۳۴۷۱	
۴	۲/۶۷۳۹	۲/۱۳۸۸	۲/۱۱۴۲	۱/۳۳۳۴	۰/۳۲۲۰	
۶	۲/۵۹۱۶	۲/۰۵۲۲	۰/۶۶۳۹	۰/۲۲۰۰	۰/۱۶۷۹	
۷	۲/۴۵۵	۱/۲۶۱۵	۰/۲۳۴۵	۰/۶۹۰۰	۰/۱۴۴۲	
۸	۲/۴۲۳۹	۰/۸۸۸۴	۰/۲۲۶۸	۰/۳۹۰۰	۰/۱۴۶۴	
۹	۲/۴۰۹۴	۰/۴۶۶۲	۰/۲۲۴۵	۰/۲۸۵۷	۰/۱۴۸۱	
۱۰	۲/۴۰۱۵	۰/۴۶۱۶	۰/۲۲۳۰	۰/۲۳۴۹	۰/۱۴۹۱	

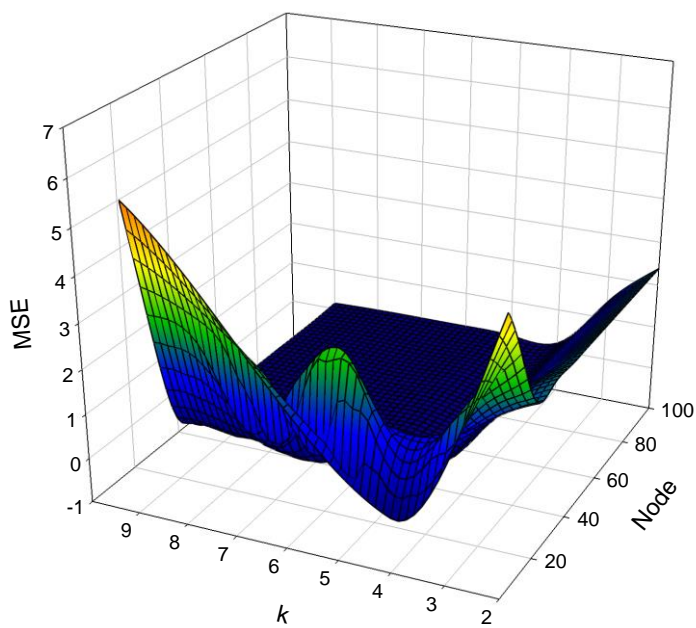


شکل (۳-۴) - نمودار سه بعدی شبکه‌هایی

با تابع تبدیل logsig و تابع آموزش lm

جدول (۴-۱۸) - مقادیر میانگین مربعات خطا برای شبکه‌هایی با تابع تبدیل logsig و تابع آموزش br

		تعداد متغیرهای ورودی شبکه (تعداد توصیف کننده‌ها)				
		1	2	3	4	5
تعداد گره‌های لایه پنهان	۲	۳/۷۹۰۰	۲/۴۲۱۵	۲/۴۳۹۰	۱/۳۵۳۶	۲/۹۲۷۰
	۳	۲/۳۹۸۰	۲/۴۰۳۴	۰/۹۹۱۷	۰/۲۰۹۲	۰/۸۴۰۵
	۴	۲/۳۹۰۸	۲/۳۸۹۹	۰/۸۳۳۴	۰/۱۹۲۲	۰/۲۰۳۱
	۶	۲/۳۸۶۵	۲/۳۷۹۳	۰/۶۵۸۳	۰/۱۸۳۰	۰/۱۸۰۵
	۷	۲/۳۸۶۵	۲/۳۷۰۵	۰/۳۵۶۸	۰/۱۷۶۴	۰/۱۷۶۱
	۸	۲/۳۸۶۵	۲/۳۶۳۲	۰/۳۱۴۸	۰/۱۷۱۰	۰/۱۷۴۸
	۹	۲/۳۸۶۵	۲/۳۵۶۹	۰/۳۰۱۹	۰/۱۷۹۳	۰/۱۷۵۱
	۱۰	۲/۳۸۶۵	۲/۳۳۱۲	۰/۲۹۵۵	۰/۱۸۰۰	۰/۱۷۴۰



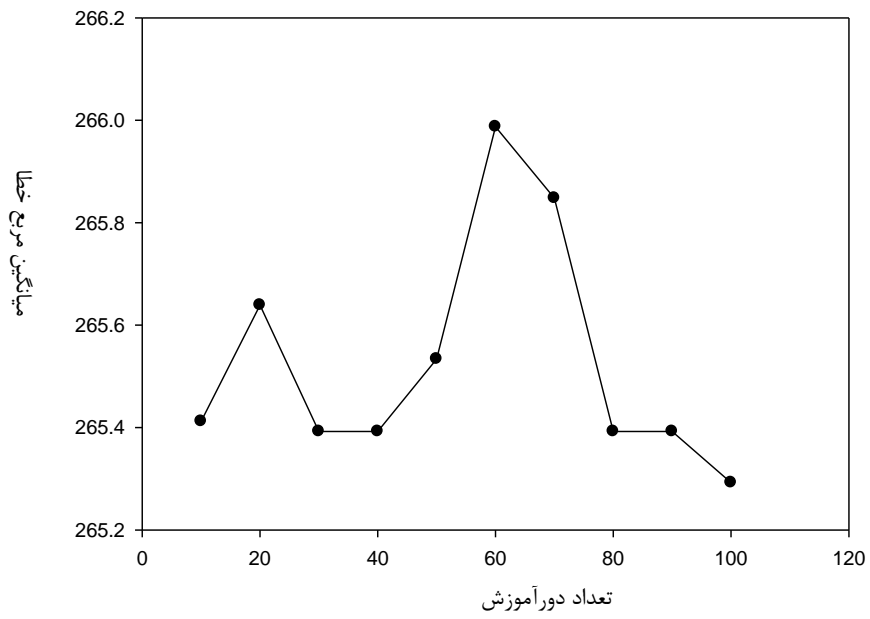
شکل (۴-۴) - نمودار سه بعدی شبکه‌هایی

۴-۵-۲- انتخاب تعداد دوره‌های آموزش

با توجه به اینکه اگر دفعات تکرار کم باشد خطای زیادی داریم و اگر تعداد تکرار زیاد باشد، آموزش بیش از حد رخ می‌دهد بنابراین باید تعداد چرخه‌هایی که طی آن زوج ورودی- هدف در شبکه وارد می‌شوند، بهینه شود. به این منظور شبکه با ۳ توصیفگر منتخب، تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و قرار دادن ۱۰ گره در لایه پنهان، تعداد چرخه‌های آموزش تغییر داده شد و برای هر چرخه میانگین مربع خطاهای سری ارزیابی برآورد شد. (جدول (۴-۱۹)). سپس منحنی تعداد چرخه‌های آموزش بر حسب میانگین مربع خطاها بر طبق شکل (۴-۵) ترسیم شد. مقدار بهینه جایی است که میزان این خطا حداقل باشد. همانطور که ملاحظه می‌شود در دور آموزش ۱۰۰ مقدار خطا حداقل است.

جدول (۴-۱۹)- مقادیر میانگین مربع خطاهای حاصل سری ارزیابی در تعداد دوره‌های آموزش

تعداد دوره های آموزشی	میانگین مربع خطا
۱۰	265/412
۲۰	265/6391
۳۰	265/3924
۴۰	265/3924
۵۰	265/5337
۶۰	265/9872
۷۰	265/8478
۸۰	265/3924
۹۰	265/3924
۱۰۰	265/2924

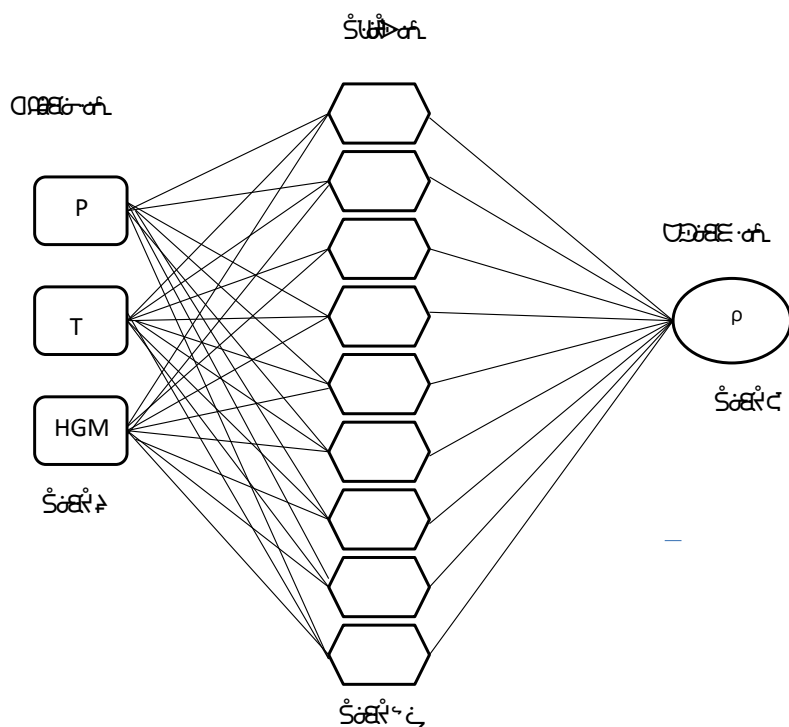


شکل (۴-۵) - نمودار میانگین مربع خطاها بر حسب تعداد چرخه‌های آموزش

۴-۶- ساختار شبکه عصبی مصنوعی بهینه شده

با توجه به نتایج به دست آمده در بهینه‌سازی شبکه، توپولوژی یا معماری شبکه بهینه شده در

شکل (۴-۶) نشان داده شده است.



شکل (۴-۶) - تصویر شماتیک ساختار شبکه‌ی عصبی بهینه شده

۴-۷- ارزیابی مدل‌های خطی و غیرخطی

۴-۷-۱- ارزیابی مدل‌های خطی و غیرخطی توسط روش رد مرحله‌ای گروهی

به منظور بررسی بیشتر قدرت پیشگویی مدل‌های خطی و غیرخطی، روش رد مرحله‌ای گروهی مورد استفاده قرار گرفت. این روش در سه مرحله انجام گرفت که در هر مرحله، هر بار تعدادی از الکل‌های نوع اول را حذف کردیم و سپس با استفاده از مدل ساخته شده توسط بقیه ترکیبات، دانسیته‌ی

ترکیبات حذف شده، پیش‌بینی شد. در سری اول اتانول، ۱-پنتانول و ۱-اکتانول حذف شدند. در سری دوم ۱- بوتانول، ۱- دکانول و ۱- هپتانول حذف شدند و در سری سوم ۱- پروپانول، ۱- هگزانول، ۱- نونانول و ۱- دودکانول حذف شدند. نتایج حاصل از رد مرحله‌ای گروهی سه سری در جدول‌های (۲۰-۴) و (۲۱-۴) و (۲۲-۴) ارائه شده است. این نتایج تعمیم‌پذیری بالای مدل خطی و غیرخطی را نشان می‌دهد. ضریب تعیین مشاهده شده بین مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده و مقادیر تجربی در شکل‌های (۴-۶) و (۴-۷) و (۴-۸) نشان دهنده‌ی میزان نزدیکی دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط مدل‌ها نسبت به مقدار تجربی آن است.

جدول (۴-۲۰)- نتایج حاصل از ارزیابی مدل برتر ارائه شده توسط MLR و ANN با استفاده از رد مرحله‌ای گروهی الکل‌های اتانول، ۱-پنتانول و ۱-اکتانول

شماره	دانسیته تجربی	دانسیته پیش‌بینی شده		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۱	۷۸۵/۲۴	783/5800	784/36	1/66	0/88
۲	۷۹۰/۵۸	78۷/40	790/40	3/18	0/18
۳	۷۹۵/۸	792/40	794/58	3/40	1/23
۴	۸۰۱/۰۹	79۹/34	800/25	2/75	1/65
۵	۸۱۰/۹۷	80۷/50	809/12	2/63	0/85
۶	۸۲۰/۰۸	819/82	819/75	1/8	0/7
۷	۸۲۷/۶۰	824/86	827/34	2/52	0/26
۸	۸۳۵/۰۷	832/17	834/99	2/16	0/88
۹	۸۳۸/۶۴	835/46	838/10	2/18	0/54
۱۰	۸۴۱/۶۰	839/91	840/89	1/69	0/19
۱۱	۸۴۸/۴۶	846/71	846/35	1/39	0/11
۱۲	۸۵۴/۷۷	851/17	856/37	2/60	1/47
۱۳	۸۶۰/۶۶	856/36	862/62	2/30	2/4
۱۴	۸۶۵/۲۰	861/37	864/87	1/72	3/50
۱۵	۸۷۳/۲۰	871/88	872/43	1/23	0/54
۱۷	۸۸۳/۳۱	781/95	884/40	2/3	1/10
۱۸	۸۸۹/۳۶	887/20	888/98	۲/۱۶	0/49
۱۹	۸۹۵/۱۸	791/14	894/78	۳/۶	0/11

ادامه جدول (۴-۲۰)

شماره	دانشیته تجربی	دانشیته پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۲۰	۸۹۸/۸۰	896/94	898/85	2/16	0/05
۲۱	۹۰۷/۱۱	901/36	906/16	5/75	0/96
۲۲	۷۶۲/۲۰	760/82	761/14	1/05	0/62
۲۳	۷۷۴/۲۱	77۲/7600	775/66	۲/۸	0/14
۲۴	۷۸۰/۳۴	785/15	780/63	۴/۲۹	0/42
۲۵	۷۸۶/۱۶	788/46	785/44	۱/۷۰	0/45
۲۶	۷۹۱/۳۹	787/02	792/24	۳/۳۹	0/51
۲۷	۷۹۶/۸۸	794/71	797/01	۲/۵	0/61
۲۸	۸۰۰/۳۲	803/75	800/76	۲/۸	0/76
۲۹	۸۰۴/۵۰	800/80	803/19	۴/۳۰	1/64
۳۰	۸۰۸/۶۷	805/64	808/55	۲/۳۰	0/29
۳۱	۸۱۳/۳۴	811/65	814/48	۳/۳۱	0/69
۳۲	۸۱۷/۰۶	815/45	817/80	۲/۵	0/10
۳۳	۸۳۰/۹۰	729/58	830/84	۲/۸	0/14
۳۴	۸۳۶/۸۲	834/16	836/24	2/72	0/3
۳۵	۸۴۲/۶۰	839/40	842/56	3/20	۰/2۴
۳۶	۸۵۳/۹۰	849/10	853/80	۳/۸	۰/۴
۳۷	۸۶۷/۰۰	865/10	868/12	۱/۹	۱/۹
۳۸	۸۷۴/۶۶	876/60	872/27	2/۸	2/56
۳۹	۸۷۸/۸۸	877/30	879/83	1/۷	۱/۹
۴۰	۸۸۳/۰۸	882/60	883/58	۱/۴	۵/۱
۴۱	۸۹۰/۸۶	789/20	890/76	۲/2	۴/۷
۴۲	۸۹۴/۲۱	892/90	894/54	2/69	۰/۹
۴۳	۹۰۱/۶۳	900/30	901/17	۱/۸	0/62
۴۴	۹۰۴/۷۳	903/30	905/88	۳/۷	0/14
۲۵۰	۷۹۹/۰	797/70	798/55	1/30	0/45
۲۵۱	۸۰۷/۴۰	806/00	807/81	۱/۶۰	0/41
۲۵۲	۸۱۴/۱۰	812/20	814/99	1/90	0/51
۲۵۳	۸۲۰/۲۰	718/80	820/41	1/40	0/61
۲۵۴	۸۲۶/۰۰	824/20	826/98	1/25	0/75
۲۵۵	۸۳۱/۵۰	829/60	831/11	1/46	۰/2۴
۲۵۶	۸۳۶/۶۰	839/90	835/55	2/96	۰/۴
۲۵۷	۸۴۱/۴۰	843/10	840/46	2/83	۱/۹
۲۵۸	۸۴۶/۱۰	۸۴۵/60	8۴۶/15	0/74	0/10

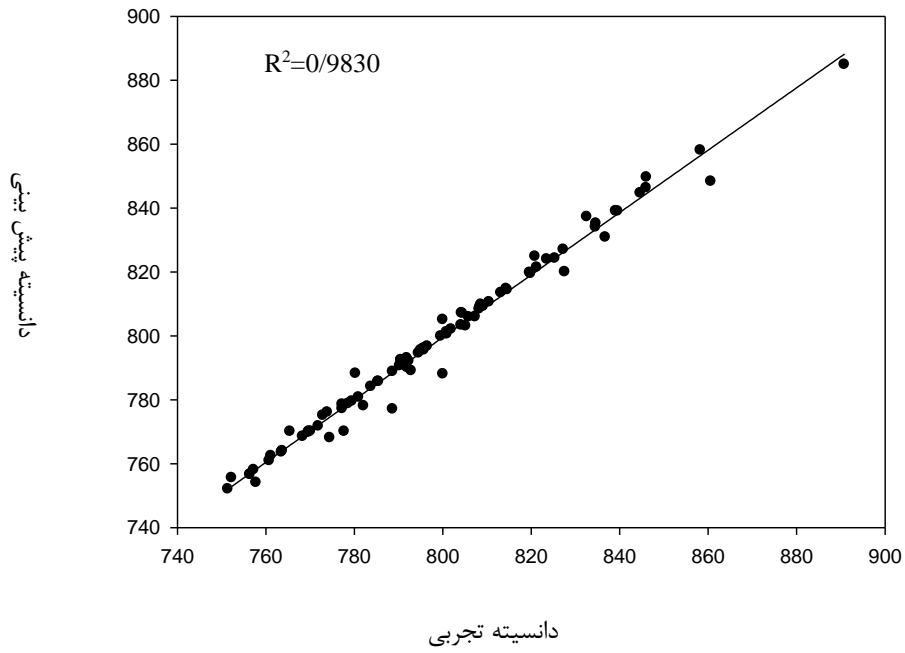
ادامه جدول (۴-۲۰)

شماره	دانشیته تجربی	دانشیته پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۲۵۹	۸۵۰/۵۰	853/90	851/11	2/63	0/97
۲۶۰	۸۵۴/۸۰	753/80	854/10	1/0	0/70
۲۶۱	۸۵۸/۹۰	756/90	858/19	2/80	0/88
۲۶۲	۸۶۲/۸۰	861/90	862/33	1/10	0/47
۲۶۳	۸۶۶/۶۰	865/30	866/10	1/30	0/07
۲۶۴	۸۷۰/۲۰	868/40	871/33	2/20	1/13
۲۶۵	۷۸۴/۴۰	781/40	783/20	2/20	1/11
۲۶۶	۷۹۲/۷۰	790/60	792/48	2/10	0/22
۲۶۷	۸۰۰/۱۰	798/90	800/74	1/20	0/64
۲۶۸	۸۰۶/۸۰	805/30	806/33	1/50	0/47
۲۶۹	۸۱۳/۱۰	811/90	812/96	2/80	0/14
۲۷۰	۸۱۸/۹۰	816/04	818/02	2/85	0/75
۲۷۱	۸۲۴/۴۰	823/59	824/39	1/79	0/01
۲۷۲	۸۲۹/۷۰	82۶/29	829/42	۲/۳۰	0/61
۲۷۳	۸۳۴/۶۰	832/15	834/90	2/45	0/30
۲۷۴	۸۳۹/۲۰	838/30	839/88	۱/۴۰	0/64
۲۷۵	۸۴۳/۷۰	844/70	843/59	۲/۰۲	0/29
۲۷۶	۸۴۸/۵۴	84۶/8۰	849/06	۳/۳۲	0/69
۲۷۷	۸۵۲/۱۰	850/40	852/56	۱/۸	0/10
۲۷۸	۸۵۶/۰۰	854/30	855/50	۳/۷	0/40
۲۷۹	۸۶۰/۰۰	862/40	859/43	1/30	0/14
۲۸۰	۷۶۸/۱۰	76۵/70	768/24	۲/60	0/14
۲۸۱	۷۷۷/۳۰	775/80	777/48	1/90	0/18
۲۸۲	۷۸۵/۶۰	۷۸۴/20	786/17	1/40	0/43
۲۸۳	۷۹۲/۹۰	808/67	791/50	1/25	1/25
۲۸۴	۷۹۹/۸۰	798/93	799/08	1/72	0/18
۲۸۵	۸۰۶/۱۰	805/17	806/18	1/23	0/80
۲۸۶	۸۱۲/۰۰	811/38	812/12	2/3۰	0/12
۲۸۷	۸۱۷/۶۰	816/82	817/20	1/16	0/40
۲۸۸	۸۲۲/۸۰	821/88	822/36	1/2	0/44
۲۸۴	۷۹۹/۸۰	797/53	898/40	2/16	0/40
۲۸۵	۸۰۶/۱۰	805/89	806/11	1/75	0/1
۲۸۶	۸۱۲/۰۰	810/760	812/18	1/72	0/18
۲۸۷	۸۱۷/۶۰	816/20	817/8	1/23	0/2

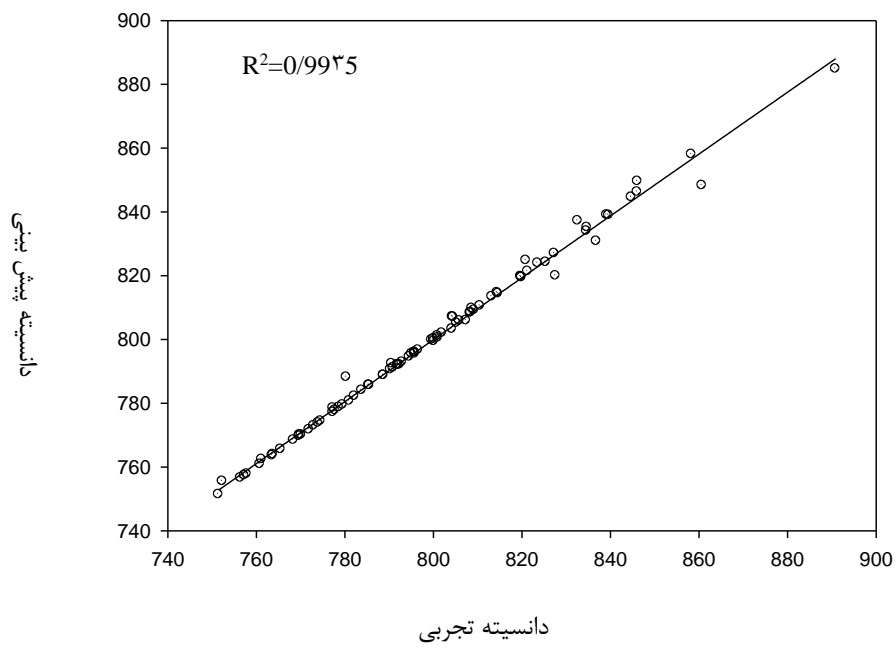
ادامه جدول (۴-۲۰)

شماره	دانشیته تجربی	دانشیته پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۲۸۸	۸۲۲/۰	820/58	822/38	2/3	0/38
۲۸۹	۸۲۷/۸۰	826/60	827/67	1/16	1/14
۲۹۰	۸۳۲/۶۰	838/66	832/91	6/۶	0/31
۲۹۱	۸۳۷/۲۰	836/3	837/15	2/16	0/05
۲۹۲	۸۴۱/۶۰	840/50	841/53	5/75	0/70
۲۹۳	۸۴۵/۸۰	843/82	845/65	1/72	0/25
۲۹۴	۸۴۹/۷۰	847/86	848/38	1/23	0/32
۲۹۵	۷۵۰/۷۰	748/71	749/89	2/3	0/19
۲۹۶	۷۶۱/۲۰	760/58	761/31	1/42	0/11
۲۹۷	۷۷۰/۳۰	769/08	770/70	1/29	0/40
۲۹۸	۷۷۸/۲۰	777/23	778/38	۱/۹۰	0/18
۲۹۹	۷۸۵/۷۰	786/02	885/22	2/۸۰	0/48
۳۰۰	۷۹۲/۵۰	790/96	792/31	1/۷	0/06
۳۰۱	۷۹۸/۹۰	7۹9/52	798/43	۱/0۴	0/46
۳۰۲	۸۰۴/۹۰	805/53	804/56	۲/20	0/۴۵
۳۰۳	۸۱۰/۵۰	811/95	810/53	۱/۴۵	0/30
۳۰۴	۸۱۵/۸۰	814/30	815/82	۱/0۸	0/33
۳۰۵	۸۲۰/۹۰	819/50	820/75	۳/0۷	0/28
۳۰۶	۸۲۵/۷۰	823/94	825/38	1/30	0/47
۳۰۷	۸۳۰/۳۰	83۲/46	830/44	۱/60	0/14
۳۰۸	۸۳۴/۷۰	832/82	834/03	۲/۱۲	۰/۶۹
۳۰۹	۸۳۹/۰۰	837/76	838/22	۲/۷۶	0/88
۳۱۰	۷۴۱/۵۰	739/97	840/85	۲/۴۴	0/35
۳۱۱	۷۵۲/۳۰	۷۵۱/46	۷۵۲/73	۱/۱۶	0/43
۳۱۲	۷۶۱/۹۰	761/02	۷۶۱/90	۲/۱۰	0/00
۳۱۳	۷۷۰/۷۰	7۶۸/71	۷۶۹/75	۲/۱۰	۰/۹۵
۳۱۴	۷۷۸/۵۰	777/75	779/10	۲/۲۵	0/40
۳۱۵	۷۸۵/۷۰	784/80	785/06	0/90	۰/۶۹
۳۱۶	۷۹۲/۳۰	790/30	791/19	2/00	0/11
۳۱۷	۷۹۸/۵۰	797/65	798/32	0/85	0/18
۳۱۸	۸۰۴/۳۰	803/70	804/32	0/60	0/02

(الف)



(ب)



شکل (۴-۷) - نمودار مقادیر دانسیته پیش‌بینی شده بر حسب مقادیر تجربی به روش رد مرحله ای گروهی برای الکل

های اتانول، ۱-پنتانول و ۱-اکتانول (الف) با مدل MLR و (ب) با مدل ANN

جدول (۴-۲۱) - نتایج حاصل از ارزیابی مدل برتر ارائه شده توسط MLR و ANN با استفاده از رد مرحله‌ای گروهی

الکل‌های ۱- بوتانول، ۱- هپتانول و ۱- دکانول

شماره	دانسیتة تجربی	دانسیتة پیش بینی		درصد خطا	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۵۱۵	۸۲۶/۸۰	825/58	826/58	1/22	1/00
۵۱۶	۸۲۷/۳۰	828/15	827/10	1/15	0/20
۵۱۷	۸۲۹/۶۰	828/52	829/51	1/12	0/90
۵۱۸	۸۳۲/۷۰	831/65	832/75	0/15	0/50
۵۱۹	۸۳۵/۳۰	833/17	835/39	2/14	0/39
۵۲۰	۸۳۷/۸۰	837/01	837/96	۱/۹۰	0/16
۵۲۱	۸۳۹/۶۰	839/10	839/86	2/۸	0/26
۵۲۲	۸۴۲/۱۰	840/39	842/36	1/۷۰	0/26
۵۲۳	۸۴۴/۷۰	843/91	844/80	۱/۴۰	0/10
۵۲۴	۸۴۶/۹۰	845/22	847/04	۲/۰۲	0/86
۵۲۵	۸۴۸/۳۰	846/89	848/42	1/59	۰/۱۲
۵۲۶	۸۰۹/۴۰	810/45	809/36	1/05	0/40
۵۲۷	۸۱۰/۸۰	809/64	810/85	1/16	۰/۷۰
۵۲۸	۸۱۳/۰۰	812/14	812/83	1/86	۰/۵۰
۵۲۹	۸۱۶/۰۰	815/23	815/79	2/14	0/79
۵۳۰	۸۱۸/۹۰	819/84	818/75	1/22	۰/۱۵
۵۳۱	۸۲۱/۳۰	819/36	821/17	1/64	۰/۱۴
۵۳۲	۸۲۶/۰۰	824/86	825/81	2/64	0/81
۵۳۳	۸۲۸/۸۰	۸۲۶/05	828/58	۲/۶۶	۰/۲۲
۵۳۴	۸۳۱/۲۰	82۹/12	830/39	۲/۸۰	0/19
۵۳۵	۸۳۳/۲۰	83۰/84	832/91	۲/۱۶	0/29
۵۳۶	۷۹۱/۵۰	۷۸۹/36	791/23	2/64	0/33
۵۳۷	۸۸۴/۸۴	۷۸۵/۷۰	786/02	5/22	0/52
۵۳۸	۷۹۵/۳۰	792/04	795/02	۳/۲۶	0/49
۵۳۹	۷۹۹/۱۰	797/49	798/74	۲/۳۹	0/64
۵۴۰	۸۰۲/۰۰	800/35	801/79	۱/۶۵	0/21
۵۴۱	۸۰۴/۹۰	806/65	804/70	۲/۲۵	0/20
۵۴۲	۸۰۸/۳۰	812/84	809/35	3/54	0/50
۵۴۳	۸۱۱/۶۰	815/79	810/64	3/49	0/40
۵۴۴	۸۱۵/۰۰	813/84	812/83	1/16	3/83
۵۴۵	۸۱۸/۱۰	815/36	815/79	2/64	3/13
۳۵۷	۸۰۸/۵۰	804/86	808/74	3/66	0/24

ادامه جدول (21-4)

شماره	دانسیتة تجربی	دانسیتة پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۳۵۸	۸۰۹/۲۰	807/04	811/17	2/16	0/30
۳۵۹	۸۰۹/۹۰	806/41	809/81	1/59	0/11
۳۶۰	۸۱۰/۶۰	809/36	810/58	1/15	0/18
۳۶۱	۸۱۱/۲۰	809/64	810/38	1/18	0/18
۳۶۲	۸۱۱/۹۰	812/83	811/91	1/15	0/10
۳۶۳	۸۱۲/۶۰	815/79	813/23	2/79	0/19
۳۶۴	۸۱۳/۳۰	810/84	812/99	1/16	0/31
۳۶۵	۸۱۳/۹۰	8۱۱/36	۸۱۳/۸2	2/64	0/80
۳۶۶	۸۱۴/۶۰	812/86	814/75	3/66	۰/2۴
۳۶۷	۸۱۵/۲۰	812/04	815/79	2/16	۰/۴۰
۳۶۸	۸۱۵/۹۰	818/41	815/36	1/16	۱/۹۰
۳۶۹	۸۱۶/۵۰	819/36	816/64	2/64	2/56
۳۷۰	۸۱۷/۲۰	815/64	816/83	3/66	۱/۹
۳۷۱	۸۱۷/۸۰	814/83	815/79	2/16	۵/۱
۳۷۲	۸۱۸/۴۰	816/79	818/74	2/39	۴/۷
۳۷۳	۸۱۹/۱۰	817/88	819/17	1/22	۰/۹۰
۳۷۴	۸۱۹/۷۰	822/36	820/81	1/15	0/62
۳۷۵	۸۱۹/۹۰	817/86	818/58	1/18	۰/2۴
۳۷۶	۸۲۰/۴۰	818/04	820/38	1/15	0/30
۳۷۷	۸۲۱/۱۰	818/41	822/91	2/14	0/11
۳۷۸	۸۲۱/۳۰	819/36	820/23	0/87	0/18
۳۷۹	۷۹۴/۳۰	792/85	794/12	1/75	0/18
۳۸۰	۷۹۵/۱۰	794/14	795/02	1/12	0/10
۳۸۱	۷۹۵/۸۰	897/86	795/75	1/86	0/19
۳۸۲	۷۹۶/۶۰	795/04	795/97	0/77	0/31
۳۸۳	۷۹۷/۳۰	795/30	798/07	1/22	0/10
۳۸۴	۷۹۸/۱۰	797/36	798/39	1/15	0/30
۳۸۵	۷۹۸/۸۰	796/85	798/70	1/12	0/56
۳۸۶	۷۹۹/۶۰	798/86	799/27	1/15	0/14
۳۸۷	۸۰۰/۳۰	799/04	800/44	2/14	0/10
۳۸۸	۸۰۱/۱۰	800/41	801/43	1/86	0/30
۳۸۹	۸۰۱/۸۰	802/56	801/74	۰/۷۷	0/22
۳۹۰	۸۰۲/۵۰	803/06	801/97	0/50	0/37
۳۹۱	۸۰۳/۲۰	801/58	803/75	2/38	0/55
۳۹۲	۸۰۳/۹۰	804/17	801/70	1/15	2/20

ادامه جدول (4-21)

شماره	دانسیتہ تجربی	دانسیتہ پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۳۹۳	۸۰۴/۶۰	804/61	804/70	1/18	0/10
۳۹۴	۸۰۵/۳۰	808/14	805/27	2/16	0/30
۳۹۵	۸۰۵/۹۰	802/64	805/44	3/26	0/56
۳۹۶	۸۰۶/۶۰	802/16	806/74	4/44	0/14
۳۹۷	۸۰۷/۳۰	805/67	807/24	1/86	0/06
۳۹۸	۸۰۸/۰۰	806/19	807/92	0/77	0/41
۳۹۹	۸۰۸/۶۰	804/70	808/64	۲/۷۵	0/0۴
۴۰۰	۸۰۹/۲۰	806/17	809/39	2/40	0/30
۴۰۱	۷۷۹/۵۰	777/29	779/58	2/40	0/11
۴۰۲	۷۸۰/۴۰	783/80	780/27	1/15	0/18
۴۰۳	۷۸۱/۳۰	784/33	781/44	2/97	0/18
۴۰۴	۷۸۲/۱۰	784/84	781/74	1/22	0/10
۴۰۵	۷۸۲/۹۰	785/35	782/74	2/70	0/19
۴۰۶	۷۸۳/۸۰	785/87	782/82	1/12	0/31
۴۰۷	۷۸۴/۶۰	786/37	785/75	1/86	0/80
۴۰۸	۷۸۵/۴۰	786/89	785/79	0/77	0/30
۴۰۹	۷۸۶/۳۰	788/44	786/70	1/16	۰/۱۳
۴۱۰	۷۸۷/۰۰	788/95	787/07	2/64	0/18
۴۱۱	۷۸۷/۹۰	789/47	787/44	3/66	۰/۴۶
۴۱۲	۷۸۸/۶۰	789/98	888/74	2/16	0/10
۴۱۳	۷۸۹/۴۰	790/50	789/74	1/16	0/06
۴۱۴	۷۹۰/۲۰	791/02	790/02	2/64	0/81
۴۱۵	۷۹۰/۹۰	791/53	790/75	3/66	0/94
۴۱۶	۷۹۱/۷۰	792/04	791/73	2/16	0/34
۴۱۷	۷۹۲/۵۰	791/55	792/70	1/50	0/82
۴۱۸	۷۹۳/۲۰	792/08	793/27	1/80	0/61
۴۱۹	۷۹۳/۹۰	793/59	811/40	1/18	0/062
۴۲۰	۷۹۴/۷۰	794/10	894/74	2/16	0/81
۴۲۱	۷۹۵/۴۰	793/29	794/54	3/26	0/95
۴۲۲	۷۹۶/۱۰	793/7	795/02	۳/4۴	0/84
۴۲۳	۷۷۰/۹۰	768/3	770/64	1/18	0/82
۴۲۴	۷۷۱/۹۰	770/82	۷۷۱/79	۱/۱۶	0/16
۴۲۵	۷۷۲/۸۰	778/31	771/17	۵/۴۹	0/85
۴۲۶	۷۷۳/۷۰	778/85	773/06	۵/۳۵	0/72
۴۲۷	۷۷۴/۵۰	779/36	774/96	4/44	0/46

ادامه جدول (21-4)

شماره	دانسیتة تجریبی	دانسیتة پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۴۲۸	۷۷۵/۵۰	779/88	776/82	3//33	1/32
۴۲۹	۷۷۶/۴۰	780/39	776/67	3/10	0/27
۴۳۰	۷۷۷/۳۰	780/91	777/50	2/61	0/20
۴۳۱	۷۷۸/۱۰	781/42	777/28	1/86	0/18
۴۳۲	۷۷۹/۰۰	781/93	778/07	0/77	0/07
۴۳۳	۷۷۹/۸۰	782/45	779/79	3/85	0/19
۴۳۴	۷۸۰/۶۰	782/97	787/55	2/40	0/15
۴۳۵	۷۸۱/۵۰	783/48	781/47	0/30	0/17
۴۳۶	۷۸۲/۳۰	783/99	781/56	2/48	0/26
۴۳۷	۷۸۳/۱۰	784/51	783/65	1/86	0/55
۴۳۸	۷۸۳/۹۰	785/02	7۸2/80	۲/۸۹	0/10
۴۳۹	۷۸۴/۷۰	785/54	784/11	1/15	0/59
۴۴۰	۷۸۵/۴۰	786/07	785/06	1/18	۰/۳۹
۴۴۱	۷۸۶/۲۰	784/57	785/96	1/15	0/76
۴۴۲	۷۸۷/۰۰	78۵/08	787/82	2/14	0/82
۴۴۳	۷۸۷/۷۰	824/11	787/67	3/59	0/30
۴۴۴	۷۸۸/۵۰	783/48	78۸/50	4/95	0/00
۱۵۳	۷۹۴/۹۷	797/80	794/28	1/12	0/69
۱۵۴	۷۹۵/۷۶	798/32	794/07	2/65	۱/۷۵
۱۵۵	۷۹۶/۵۵	790/02	796/79	3/45	0/34
۱۵۶	۷۹۷/۳۳	798/83	797/55	1/52	0/27
۱۵۷	۷۹۸/۱۱	798/33	799/47	2/14	0/20
۱۵۸	۷۹۸/۹۰	79۷/85	798/56	1/50	0/18
۱۵۹	۷۹۹/۶۹	۷۹۵/38	799/65	۴/۲۷	0/40
۱۶۰	۸۰۰/۴۷	۷۹۸/89	800/80	1/86	۰/۳۲
۱۶۱	۸۰۱/۲۳	800/41	801/11	0/77	۰/۱۲
۱۶۲	۸۰۱/۹۷	۷۹۹/92	801/06	۲/۷۵	0/27
۱۶۳	۸۰۲/۷۲	801/43	802/96	2/40	0/20
۱۶۴	۸۰۳/۴۸	801/95	802/82	۲/۳۴	0/18
۱۶۵	۸۰۴/۲۳	803/47	804/67	2/48	0/07
۱۶۶	۸۰۴/۹۳	80۰/00	804/50	۲/۹۳	۰/۴۳
۱۶۷	۸۰۵/۶۷	80۰/50	805/70	۲/۱۷	۰/۰۳
۱۶۸	۸۰۶/۳۶	80۰/02	805/24	۲/۴۶	۰/۴۴
۱۶۹	۸۰۷/۰۷	805/53	806/91	۱/۴۷	۰/۸۵
۱۷۰	۸۰۷/۷۶	806/04	807/68	۰/۲۴	۰/۸۰

ادامه جدول (21-4)

شماره	دانسیتة تجربی	دانسیتة پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۱۷۱	۸۰۸/۴۶	806/56	808/47	۲/۱۹	0/10
۱۷۲	۸۰۹/۱۴	807/08	809/23	1/86	0/90
۱۷۳	۸۰۹/۸۴	808/11	810/157	0/77	0/34
۱۷۴	۸۱۰/۵۳	808/64	81۰/43	3/85	0/10
۱۷۵	۸۱۱/۱۹	809/15	81۱/12	2/40	0/70
۱۷۶	۸۱۱/۹۰	809/67	811/73	۲/۲۳	0/23
۱۷۷	۸۱۲/۵۶	810/18	812/33	2/48	0/23
۱۷۸	۷۷۹/۲۸	783/73	779/55	۵/۴۲	0/27
۱۷۹	۷۸۰/۱۵	784/23	780/64	۴/۴۹	0/20
۱۸۰	۷۸۱/۰۲	784/73	781/86	1/86	0/18
۱۸۱	۷۸۱/۸۹	780/11	781/84	0/77	0/07
۱۸۲	۷۸۲/۷۶	780/64	782/34	۲/۷۵	0/19
۱۸۳	۷۸۳/۶۵	780/15	782/85	2/40	0/15
۱۸۴	۷۸۴/۵۳	783/67	784/46	۲/۲۳	0/17
۱۸۵	۷۸۵/۳۷	783/18	785/08	۲/۷۷	0/26
۱۸۶	۷۸۶/۲۳	783/73	786/17	۲/۷۵	0/55
۱۸۷	۷۸۷/۰۶	784/23	786/28	2/40	0/72
۱۸۸	۷۸۷/۹۰	784/73	787/51	1/15	0/30
۱۸۹	۷۸۸/۷۱	785/25	787/52	3/46	0/33
۱۹۰	۷۸۹/۵۴	786/75	788/02	1/15	0/28
۱۹۱	۷۹۰/۳۳	788/28	788/63	2/13	0/47
۱۹۲	۷۹۱/۱۶	789/80	791/15	1/65	0/88
۱۹۳	۷۹۱/۸۹	787/30	791/68	2/50	0/9۹
۱۹۴	۷۹۲/۶۱	788/82	792/86	1/12	0/84
۱۹۵	۷۹۳/۴۹	791/33	793/15	2/16	0/18
۱۹۶	۷۹۴/۲۲	788/86	793/53	5/18	0/56
۱۹۷	۷۹۴/۹۷	790/36	794/12	1/15	0/73
۱۹۸	۷۹۵/۷۵	789/88	795/73	2/14	0/22
۱۹۹	۷۹۶/۴۰	790/39	796/33	1/22	0/94
۲۰۰	۷۹۷/۱۳	790/93	797/55	2/11	0/18
۲۰۱	۷۹۷/۹۲	791/42	796/62	6/50	0/07
۲۰۲	۷۹۸/۶۷	791/90	798/82	1/15	0/19
۲۰۳	۷۶۲/۷۲	7۶۰/49	76۲/84	۲/۲۳	۰/۱۲
۲۰۴	۷۶۳/۸۰	7۶۰/98	763/34	۲/۸۸	۰/۴۶
۲۰۵	۷۶۴/۷۵	7۶۱/49	763/85	۳/۲۴	۰/۹۹

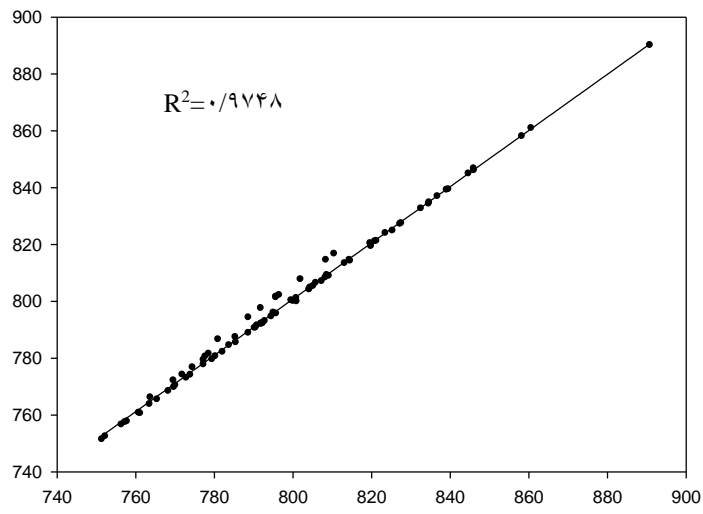
ادامه جدول (4-21)

شماره	دانسیته تجربی	دانسیته پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۲۰۶	۷۶۵/۷۴	7۶۰/03	765/46	۵/۷۳	0/28
۲۰۷	۷۶۶/۷۵	761/48	766/08	۵/۲۷	۰/۷۴
۲۰۸	۷۶۷/۷۵	762/99	767/19	۴/۲۴	۰/۵۹
۲۰۹	۷۶۸/۷۲	764/53	768/28	1/18	0/44
۲۱۰	۷۶۹/۶۴	765/07	768/51	۳/۶۳	0/13
۲۱۱	۷۷۰/۶۱	768/61	770/52	1/00	0/90
۲۱۲	۷۷۱/۵۶	770/15	772/00	1/55	0/44
۲۱۳	۷۷۲/۴۴	770/65	772/63	1/18	0/19
۲۱۴	۷۷۳/۴	771/14	7۷۲/152	2/12	0/06
۲۱۵	۷۷۴/۲۵	771/67	7۷۴/68	2/14	0/86
۲۱۶	۷۷۵/۱۷	772/19	7۷۴/86	1/22	۰/۸۵
۲۱۷	۷۷۶/۰۳	77۴/71	776/15	۲/۱۵	0/84
۲۱۸	۷۷۶/۸۹	773/21	776/53	3/68	0/13
۲۱۹	۷۷۷/۷۶	773/73	777/12	4/30	0/72
۲۲۰	۷۷۸/۶۵	774/25	788/73	4/45	0/30
۲۲۱	۷۷۹/۴۳	774/71	779/33	1/12	0/33
۲۲۲	۷۷۰/۲۸	77۴/30	771/55	۴/۱۸	0/28
۲۲۳	۷۸۱/۱۲	77۷/78	781/61	2/14	0/47
۲۲۴	۷۸۱/۹۴	77۷/32	780/86	۳/۶۲	0/88
۲۲۵	۷۸۲/۷۵	77۹/81	782/84	2/61	0/9۹
۲۲۶	۷۸۳/۵۶	7۸۰/32	783/34	2/34	0/84
۲۲۷	۷۸۴/۴۴	7۸۰/84	783/85	1/15	0/18
۲۲۸	۷۵۳/۱۷	772/71	753/46	3/40	0/56
۲۲۹	۷۵۴/۳۳	7۵8/87	754/08	۴/۲۲	0/73
۲۳۰	۷۵۵/۴۰	7۵۳/39	755/17	۴/۱۹	0/22
۲۳۱	۷۵۶/۴۵	7۵۴/92	756/28	1/18	0/94
۲۳۲	۷۵۷/۵۴	780/42	757/54	1/15	0/72
۲۳۳	۷۵۸/۵۵	7۵۶/94	758/52	2/14	۰/۳۰
۲۳۴	۷۵۹/۵۶	781/45	759/00	1/22	0/72
۲۳۵	۷۶۰/۷۰	756/01	760/63	4/62	0/30
۲۳۶	۷۶۱/۶۲	762/56	761/152	1/12	0/33
۲۳۷	۷۶۲/۶۲	763/09	762/68	1/61	0/28
۲۳۸	۷۶۳/۵۸	76۰/59	76۳/86	2/10	۰/۲۸
۲۳۹	۷۶۴/۶۲	76۷/11	764/15	3/55	۳/۵۱
۲۳۹	۷۶۴/۶۲	76۶/63	764/53	2/10	۲/۱۰

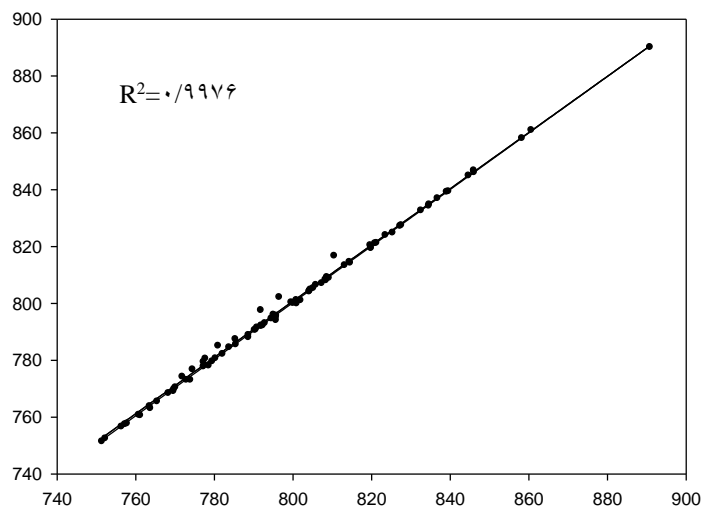
ادامه جدول (4-21)

شماره	دانسیتة تجربی	دانسیتة پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۲۴۰	۷۶۵/۵۶	76۲/13	765/12	3/43	۰/۴۴
۲۴۱	۷۶۶/۴۷	76۴/63	766/73	1/46	۰/۳۵
۲۴۲	۷۶۷/۴۲	766/20	768/33	1/22	۰/۷۳
۲۴۳	۷۶۸/۳۳	766/66	768/55	2/33	۰/۲۲
۲۴۴	۷۶۹/۲۵	767/19	769/61	2/16	0/46
۲۴۵	۷۷۰/۱۶	767/69	771/86	6/77	1/70
۲۴۶	۷۷۱/۰۵	768/24	770/84	2/75	0/83
۲۴۷	۷۷۱/۹۳	768/75	770/3	2/16	0/63
۲۴۸	۷۷۲/۷۶	769/25	772/85	2/55	0/90
۲۴۹	۷۷۳/۶۴	769/76	772/46	1/20	0/18

(الف)



(ب)



شکل (۴-۸) - نمودار مقادیر دانسیته پیش‌بینی شده بر حسب مقادیر تجربی به روش رد مرحله ای گروهی برای الکهای ۱-

بوتانول، ۱-هپتانول و ۱-دکانول، الف) با مدل MLR و ب) با مدل ANN

جدول (۴-۲۲) - نتایج حاصل از ارزیابی مدل برتر ارائه شده توسط MLR و ANN با استفاده از رد

مرحله‌ای گروهی ۱- پروپانول، ۱-هگزانول، ۱-نونانول و ۱-دودکانول

شماره	دانسیته تجربی	دانسیته پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۴۵	۷۸۸/۲۹	788/39	788/35	0/10	0/60
۴۶	۷۸۸/۷۱	788/65	788/79	0/60	0/80
۴۷	۷۸۹/۵۷	789/17	789/63	0/40	0/60
۴۸	۷۹۰/۴۵	789/69	790/49	0/84	0/50
۴۹	۷۹۱/۲۶	790/19	791/29	0/33	0/30
۵۰	۷۹۲/۱۰	790/71	792/13	0/28	0/03
۵۱	۷۹۲/۹۳	791/21	792/95	0/47	0/02
۵۲	۷۹۳/۷۶	791/41	793/75	0/88	0/10
۵۳	۷۹۴/۵۸	792/2۴	794/57	0/99	0/01
۵۴	۷۹۵/۳۹	792/77	795/36	۳/۵۲	0/30
۵۵	۷۹۶/۲۰	793/29	796/16	۲/۹۶	0/40
۵۶	۷۹۶/۹۹	793/80	796/94	۳/۱۹	0/50
۵۷	۷۹۷/۷۸	794/31	797/73	۳/۴۷	0/50
۵۸	۷۹۸/۵۷	794/83	798/50	۲۶/۲	0/72
۵۹	۷۹۹/۳۴	795/35	799/28	3/45	0/30
۶۰	۸۰۰/۰۸	795/85	800/03	1/52	0/33
۶۱	۸۰۰/۸۵	796/38	800/81	2/14	0/28
۶۲	۸۰۱/۵۸	796/88	801/55	1/50	0/47
۶۳	۸۰۲/۳۲	797/41	802/31	۴/۲۷	0/88
۶۴	۸۰۳/۰۵	797/92	803/05	۵/۸۰	۰/۰۰
۶۵	۸۰۳/۷۹	798/44	803/80	2/35	0/20
۶۶	۸۰۴/۴۹	798/94	804/51	5/49	۰/۰۲
۶۷	۸۰۵/۲۳	799/47	805/26	5/53	۰/۳۰
۶۸	۸۰۵/۹۳	799/97	805/96	1/15	0/30
۶۹	۸۰۶/۷۰	800/51	806/72	5/19	0/72
۷۰	۸۰۷/۴۰	801/01	807/40	6/39	0/30
۷۱	۷۹۹/۲۹	795/35	799/28	3/94	0/33
۷۲	۷۹۲/۰۲	790/71	792/13	1/70	0/28
۷۳	۷۸۸/۶۷	788/65	788/79	2/14	0/47
۷۴	۷۸۸/۲۳	788/39	788/35	۳/۳۶	0/88
۷۵	۷۷۱/۵۴	774/29	771/67	3/36	0/9۹
۷۶	۷۷۲/۰۳	774/54	772/15	۲/۵۴	0/84
۷۷	۷۷۲/۹۹	775/07	773/10	2/10	0/18
۷۸	۷۷۳/۹۶	775/57	774/03	2/44	0/56
۷۹	۷۷۴/۹۰	776/1	774/97	۱/80	۰/۷۰
۸۰	۷۷۵/۸۵	776/61	775/88	۱/۲۴	۰/۳۳

ادامه جدول (4-22)

شماره	دانسیتة تجربی	دانسیتة پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۸۱	۷۷۶/۷۹	777/13	776/80	0/34	0/10
۸۲	۷۷۷/۷۲	77۵/64	777/70	۲/۱۲	0/20
۸۳	۷۷۸/۶۱	77۶/15	778/50	۲/۴۶	0/11
۸۴	۷۷۹/۵۲	۸۸۷/۶۷	779/48	۲/۷۲	0/40
۸۵	۷۸۰/۴۲	779/19	780/37	1/38	0/50
۸۶	۷۸۱/۲۹	779/69	781/22	2/90	0/90
۸۷	۷۸۲/۱۷	780/22	782/11	1/50	0/60
۸۸	۷۸۳/۰۱	780/72	782/94	2/71	0/93
۸۹	۷۸۳/۹۰	781/26	783/83	۲/۶۴	0/13
۹۰	۷۸۴/۷۲	781/76	784/65	۳/۴۴	0/54
۹۱	۷۸۵/۵۳	782/26	785/46	۳/۲۷	0/31
۹۲	۷۸۶/۳۸	78۴/80	786/31	۲/۴۲	0/67
۹۳	۷۸۷/۱۷	783/30	787/13	4/83	۰/۴۰
۹۴	۷۸۷/۹۹	783/82	787/96	5/77	0/30
۹۵	۷۸۸/۷۸	784/34	788/76	4/44	0/40
۹۶	۷۸۹/۵۹	784/86	789/58	4/75	0/50
۹۷	۷۹۰/۳۸	785/37	790/37	۴/۱۰	0/50
۹۸	۷۹۱/۱۷	78۸/88	791/17	۳/۶۸	0/54
۹۹	۷۹۱/۹۵	78۲/39	791/94	۲/۸۴	0/36
۱۰۰	۷۹۲/۷۶	78۸/91	792/73	۳/۶۶	0/22
۱۰۱	۷۵۳/۴۷	760/15	753/68	۶/۳۲	0/533
۱۰۲	۷۵۴/۲۰	7۵0/41	754/24	۳/۵۹	0/31
۱۰۳	۷۵۵/۱۴	760/92	755/28	5/78	0/6۷
۱۰۴	۷۵۶/۲۲	761/43	756/31	4/29	0/34
۱۰۵	۷۵۷/۳۰	761/94	757/36	3/64	0/31
۱۰۶	۷۵۸/۳۹	762/46	758/39	2/14	0/۴۸
۱۰۷	۷۵۹/۴۴	762/98	759/43	3/54	0/34
۱۰۸	۷۶۰/۴۸	763/50	760/45	2/20	0/72
۱۰۹	۷۶۱/۵۱	764/00	761/44	2/49	0/81
۱۱۰	۷۶۲/۵۶	764/53	762/48	1/89	0/9۸
۱۱۱	۷۶۳/۵۳	765/09	763/44	1/49	0/8۷
۱۱۲	۷۶۴/۵۴	765/56	764/44	1/15	0/12
۱۱۳	۷۶۵/۵۰	766/06	765/40	1/50	0/66
۱۱۴	۷۶۶/۴۹	766/59	766/39	1/22	۰/۱۰
۱۱۵	۷۶۷/۴۲	767/09	767/34	1/42	۰/۱۴

ادامه جدول (22-4)

شماره	دانسیتہ تجربی	دانسیتہ پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۱۱۶	۷۶۸/۳۸	767/62	768/31	1/94	۰/۷۰
۱۱۷	۷۶۹/۲۹	768/12	769/24	1/17	۰/۵۰
۱۱۸	۷۷۰/۲۱	768/64	770/19	2/43	۰/۲۰
۱۱۹	۷۷۱/۱۴	769/17	771/15	2/۹۱	0/01
۱۲۰	۷۷۲/۰۲	769/67	772/06	۲/۳۳	0/04
۱۲۱	۷۷۲/۹۴	770/20	773/00	2/74	0/06
۱۲۲	۷۷۳/۷۹	770/70	773/89	2/9	0/10
۱۲۳	۷۷۴/۶۷	771/22	774/81	2/52	0/22
۱۲۴	۷۷۵/۶۰	771/77	775/75	1/22	0/15
۱۲۵	۷۷۶/۴۵	77۴/27	776/65	۲/۲۲	0/25
۱۲۶	۷۷۷/۲۹	772/77	777/51	1/12	0/53
۱۲۷	۷۴۳/۹۲	788/39	744/11	4/76	0/36
۱۲۸	۷۴۴/۵۳	756/00	744/68	1/47	0/06
۱۲۹	۷۴۵/۷۳	740/49	745/82	5/34	0/53
۱۳۰	۷۴۶/۹۰	742/00	746/93	4/90	0/36
۱۳۱	۷۴۸/۰۶	75۰/52	748/04	1/22	0/06
۱۳۲	۷۴۹/۲۰	75۲/04	749/14	۲/۱۵	0/53
۱۳۳	۷۵۰/۳۳	75۴/98	750/24	1/18	0/11
۱۳۴	۷۵۱/۴۶	7۵۶/49	751/33	۵/۹۷	۰/۱۳
۱۳۵	۷۵۲/۵۵	7۵۴/00	752/40	2/14/	0/15
۱۳۶	۷۵۳/۶۴	75۵/52	753/47	۲/۲۰	0/06
۱۳۷	۷۵۴/۷۱	759/04	754/51	۴/۷۰	0/88
۱۳۸	۷۵۵/۷۶	75۷/54	755/56	2/22	0/94
۱۳۹	۷۵۶/۸۱	760/07	756/61	4/80	0/85
۱۴۰	۷۵۷/۸۲	760/07	757/63	3/82	0/13
۱۴۱	۷۵۸/۸۴	760/58	758/69	2/26	0/61
۱۴۲	۷۵۹/۸۴	761/10	759/69	2/14	0/06
۱۴۳	۷۶۰/۸۲	761/62	760/70	1/22	0/12
۱۴۴	۷۶۱/۸۱	762/13	761/72	1/15	۰/۹۰
۱۴۵	۷۶۲/۷۵	761/64	762/70	1/۳۱	0/50
۱۴۶	۷۶۳/۷۱	76۰/17	763/68	۳/۶۶	0/30
۱۴۷	۷۶۴/۶۶	763/69	764/68	۰/۹۷	۰/۲۰
۱۴۸	۷۶۵/۶۱	764/18	765/67	۱/۴۳	0/70
۱۴۹	۷۶۶/۴۹	764/71	766/57	۱/۲۲	۰/۶۰
۱۵۰	۷۶۷/۴۵	765/22	767/56	۲/۲۳	۰/۱۱

ادامه جدول (22-4)

شماره	دانسیتة تجربی	دانسیتة پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۱۵۱	۷۶۸/۳۴	765/73	768/50	۲/۲۹	0/16
۱۵۲	۷۶۹/۲۴	76۶/07	769/43	۳/۲۳	۰/۲۹
۳۲۵	۸۱۰/۵۰	815/15	810/88	۵/۳۵	0/38
۳۲۶	۸۱۳/۰۰	817/53	817/26	۴/۵۳	0/26
۳۲۷	۸۱۶/۱۰	8۱۴/12	8۱۶/24	۱/۹۸	0/14
۳۲۸	۸۱۹/۷۰	822/73	819/84	۲/۳۰	0/14
۳۲۹	۸۲۱/۸۰	825/33	821/12	۳/۴۷	0/68
۳۳۰	۸۲۸/۴۰	830/55	828/15	۲/۴۵	0/25
۳۳۱	۸۳۶/۲۰	835/61	836/94	۱/۵۹	0/74
۳۳۲	۸۴۳/۰۰	840/86	843/52	1/22	0/52
۳۳۳	۷۹۷/۰۰	800/84	796/91	2/16	۰/۹۰
۳۳۴	۸۰۱/۰۰	803/34	801/13	2/22	0/13
۳۳۵	۸۰۴/۴۰	805/85	804/19	1/15	۰/۲۱
۳۳۶	۸۰۶/۳۰	808/46	806/95	2/12	0/65
۳۳۷	۸۰۹/۵۰	811/08	809/49	2/50	0/10
۳۳۸	۸۱۵/۷۰	816/1709	815/50	2/14	۰/۲۰
۳۳۹	۸۱۹/۶۰	821/28	819/88	۲/۴۲	0/28
۳۴۰	۸۲۳/۶۰	826/51	822/26	3/22	0/34
۳۴۱	۷۷۵/۱۰	778/52	775/24	2/90	۰/۱۴
۳۴۲	۷۷۹/۶۰	780/02	778/84	0/40	0/24
۳۴۳	۷۸۳/۵۰	781/63	782/12	2/77	۱/۳۸
۳۴۴	۷۸۷/۲۰	786/15	787/15	2/14	0/50
۳۴۵	۷۹۱/۲۰	789/68	791/94	۱/۲۴	0/74
۳۴۶	۷۹۸/۰۰	794/86	797/52	1/22	۰/۴۸
۳۴۷	۸۰۴/۲۰	802/90	804/91	۸۵/۱	0/71
۳۴۸	۸۰۹/۸۰	805/28	808/13	۱/۹۸	۱/۶۷
۳۴۹	۷۴۹/۹۰	758/12	749/19	۲/۳۰	0/8۴
۳۵۰	۷۵۵/۱۰	849/53	755/95	۳/۴۷	0/94
۳۵۱	۷۶۰/۶۰	850/12	759/49	۲/۴۵	0/11
۳۵۲	۷۶۵/۵۰	763/730	764/50	۱/۹۸	۱/۰۰
۳۵۳	۷۶۹/۸۰	768/38	769/15	۲/۳۰	۰/۶۵
۳۵۴	۷۷۸/۴۰	770/55	778/53	2/15	۰/۱۳
۳۵۵	۷۸۶/۱۰	784/61	786/12	2/54	0/20
۳۵۶	۷۹۲/۶۰	790/86	792/73	۱/۸۲	۰/۴۲
۴۸۱	۷۸۶/0۱	784/84	786/33	۱/۱۶	۰/۳۳

ادامه جدول (22-4)

شماره	دانسیته تجربی	دانسیته پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۴۸۲	۸۲۴/۲۴	822/34	824/55	۱/۸۰	0/31
۴۸۳	۸۳۰/۲۰	835/85	830/61	۵/۳۵	0/41
۴۸۴	۸۳۵/۸۱	831/46	834/866	۱/۹۸	1/45
۴۸۵	۸۴۱/۰۷	838/15	840/15	۲/۳۰	1/9
۴۸۶	۸۴۶/۰۴	842/53	845/53	۳/۴۷	1/47
۴۸۷	۸۵۰/۷۵	848/12	850/12	۲/۴۵	0/58
۴۸۸	۸۵۵/۲۳	850/73	854/73	۱/۹۸	0/50
۴۸۹	۸۵۹/۵۲	854/33	858/33	۲/۳۰	0/19
۴۹۰	۸۶۳/۶۳	860/55	863/55	۳/۴۷	0/80
۴۹۱	۸۶۷/۵۷	864/17	866/61	۲/۴۵	0/40
۴۹۲	۸۷۱/۳۷	869/75	870/86	۱/۹۸	0/49
۴۹۳	۸۱۷/۳۵	815/52	816/84	۲/۳۰	0/49
۴۹۴	۸۲۳/۵۹	822/25	8۲3/34	۳/۴۷	0/24
۴۹۵	۸۲۹/۴۵	827/99	829/15	۱/۹۸	0/30
۴۹۶	۸۳۴/۹۳	830/15	834/53	۲/۳۰	0/40
۴۹۷	۸۴۰/۰۹	838/47	840/12	۳/۴۷	0/06
۴۹۸	۸۴۴/۹۷	840/84	843/73	2/30	0/81
۴۹۹	۸۴۹/۶۲	845/36	849/33	5/43	0/94
۵۰۰	۸۵۴/۰۵	852/86	854/55	1/28	0/8۷
۵۰۱	۸۵۸/۲۹	857/04	858/61	3/11	0/12
۵۰۲	۸۶۲/۳۵	858/41	861/86	2/48	0/61
۵۰۳	۸۶۶/۲۷	864/36	866/84	1/14	۰/۶۷
۵۰۴	۸۱۰/۳۸	809/64	810/34	3/10	0/40
۵۰۵	۸۱۶/۹۲	813/83	816/85	۱/۹۸	0/70
۵۰۶	۸۲۳/۰۴	820/79	822/46	2/14	۰/۷۰
۵۰۷	۸۲۸/۷۴	826/84	827/08	2/10	۰/۵۰
۵۰۸	۸۳۴/۰۹	832/36	834/17	2/36	۰/۲۰
۵۰۹	۸۳۹/۱۵	836/86	838/28	2/79	0/01
۵۱۰	۸۴۳/۹۵	840/04	842/51	1/15	0/04
۵۱۱	۸۴۸/۵۳	845/41	847/52	2/22	0/06
۵۱۲	۸۵۲/۹۰	849/36	۸52/00	3/60	0/90
۵۱۳	۸۵۷/۰۹	8۵3/64	757/63	2/45	۰/۵۳
۵۱۴	۸۶۱/۱۱	859/83	860/85	2/72	0/74
۵۱۵	۸۲۶/۸۰	824/79	827/68	4/10	۰/۲۲
۵۱۶	۸۲۷/۳۰	825/84	826/86	2/50	۱/۵۳

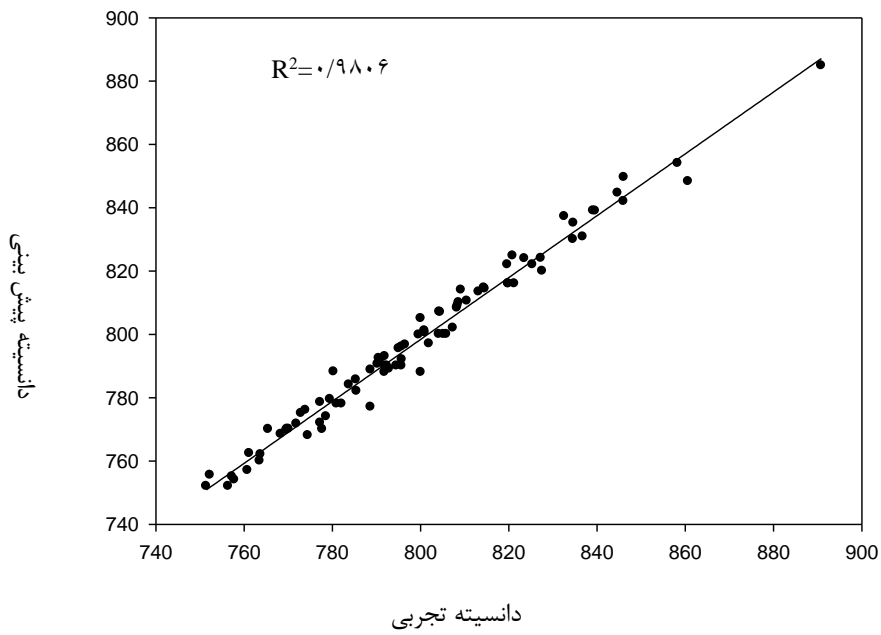
ادامه جدول (22-4)

شماره	دانسیته تجربی	دانسیته پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۵۱۷	۸۲۹/۶۰	827/36	829/95	1/15	۰/۳۵
۵۱۸	۸۳۲/۷۰	835/86	832/28	۳/۱۶	۰/۴۲
۵۱۹	۸۳۵/۳۰	837/04	835/84	۲/۲۹	0/54
۵۲۰	۸۳۷/۸۰	835/41	837/40	۲/۳۹	0/40
۵۲۱	۸۳۹/۶۰	835/36	839/15	۴/۲۴	0/06
۵۲۲	۸۴۲/۱۰	839/64	843/40	۲/۵۴	0/81
۵۲۳	۸۴۴/۷۰	840/83	844/52	۱/۹۸	0/18
۵۲۴	۸۴۶/۹۰	815/79	8۴۶/91	۲/۳۰	0/10
۵۲۵	۸۴۸/۳۰	846/84	847/13	۳/۴۷	0/17
۵۲۶	۸۰۹/۴۰	807/36	810/19	2/30	0/21
۵۲۷	۸۱۰/۸۰	807/86	811/95	5/43	0/15
۵۲۸	۸۱۳/۰۰	811/04	814/49	1/28	1/49
۵۲۹	۸۱۶/۰۰	815/41	816/50	3/11	0/50
۵۳۰	۸۱۸/۹۰	817/36	819/46	2/48	0/43
۵۳۱	۸۲۱/۳۰	819/85	821/03	1/15	0/29
۵۳۲	۸۲۶/۰۰	825/83	826/08	1/18	0/08
۵۳۳	۸۲۸/۸۰	825/15	829/41	1/15	0/39
۵۳۴	۸۳۱/۲۰	827/53	830/99	3/46	0/06
۵۳۵	۸۳۳/۲۰	8۳0/12	833/02	3/47	0/88
۵۳۶	۷۹۱/۵۰	788/73	791/10	3/45	0/94
۵۳۷	۷۹۲/۴۰	790/33	792/04	1/52	0/85
۵۳۸	۷۹۵/۳۰	791/55	794/89	2/14	0/12
۵۳۹	۷۹۹/۱۰	795/61	798/67	1/50	0/57
۵۴۰	۸۰۲/۰۰	800/86	802/24	۴/۲۷	۰/۸۶
۵۴۱	۸۰۴/۹۰	800/84	804/84	1/86	0/14
۵۴۲	۸۰۸/۳۰	805/34	808/12	۳/۷۷	۰/۷۰
۵۴۳	۸۱۱/۶۰	815/15	810/15	۲/۷۵	۰/۵۰
۵۴۴	۸۱۵/۰۰	817/53	814/94	۲/۵۳	0/94
۵۴۵	۸۱۸/۱۰	820/12	818/52	2/۹۸	۰/۷۰
۵۴۶	۸۱۲/۹۰	810/77	812/91	۲/۳۰	۰/۳۵
۵۴۷	۸۱۴/۴۰	815/33	۸۱3/75	۳/۴۷	۰/۷۰
۵۴۸	۸۱۶/۴۰	814/55	۸۱۵/57	۲/۴۵	0/17
۵۴۹	۸۱۹/۴۰	816/61	۸۱۸/36	۱/۹۸	۱/۱۴
۵۵۰	۸۲۶/۹۰	824/00	۸۲۵/16	۲/۳۰	۱/۷۴
۵۵۱	۸۲۹/۹۰	825/11	829/93	۴/۷۹	۰/۳۰

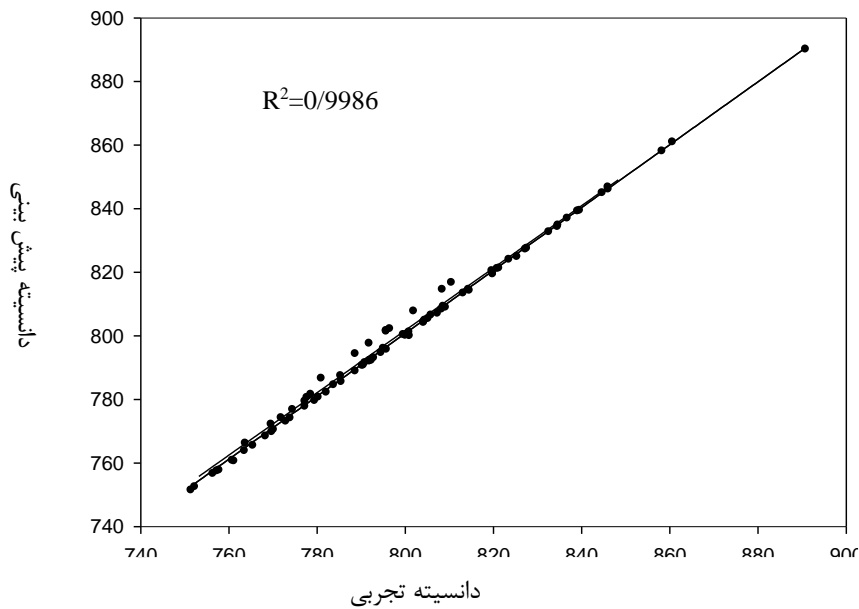
ادامه جدول (4-22)

شماره	دانشیته تجربی	دانشیته پیش بینی		MAE%	
		MLR	ANN	MLR	ANN
۵۵۲	۸۲۹/۸۰	826/66	829/84	۳/۱۴	۰/۴۰
۵۵۳	۸۳۲/۸۰	829/96	832/84	۳/۱۶	۰/۴۰
۵۵۴	۸۳۴/۷۰	830/10	834/71	۱/۹۸	0/06
۵۵۵	۸۳۶/۱۰	831/022	836/05	۲/۳۰	0/8۹
۵۵۶	۸۱۵/۶۰	811/75	815/58	۳/۴۷	0/18
۵۵۷	۸۱۳/۸۰	811/52	813/82	۲/۴۵	0/20
۵۵۸	۷۹۵/۲۰	790/25	795/04	۱/۹۸	0/19
۵۵۹	۷۹۵/۸۰	790/99	795/60	۲/۳۰	0/20
۵۶۰	۷۹۹/۲۰	795/72	799/00	۳/۴۷	0/20
۵۶۱	۸۰۲/۵۰	799/47	802/51	2/30	0/10
۵۶۲	۸۰۵/۶۰	800/17	805/55	5/43	0/50
۵۶۳	۸۰۹/۴۰	808/12	809/48	1/28	0/80
۵۶۴	۸۱۳/۸۰	816/91	813/88	3/11	0/80
۵۶۵	۸۱۳/۲۰	810/68	813/30	2/48	0/10
۵۶۶	۸۱۶/۶۰	8۱۵/46	816/78	1/14	0/18
۵۶۷	۸۱۹/۳۰	815/28	819/38	3/10	0/80
۵۶۸	۸۲۰/۷۰	817/22	820/77	3/55	0/70

(الف)



(ب)



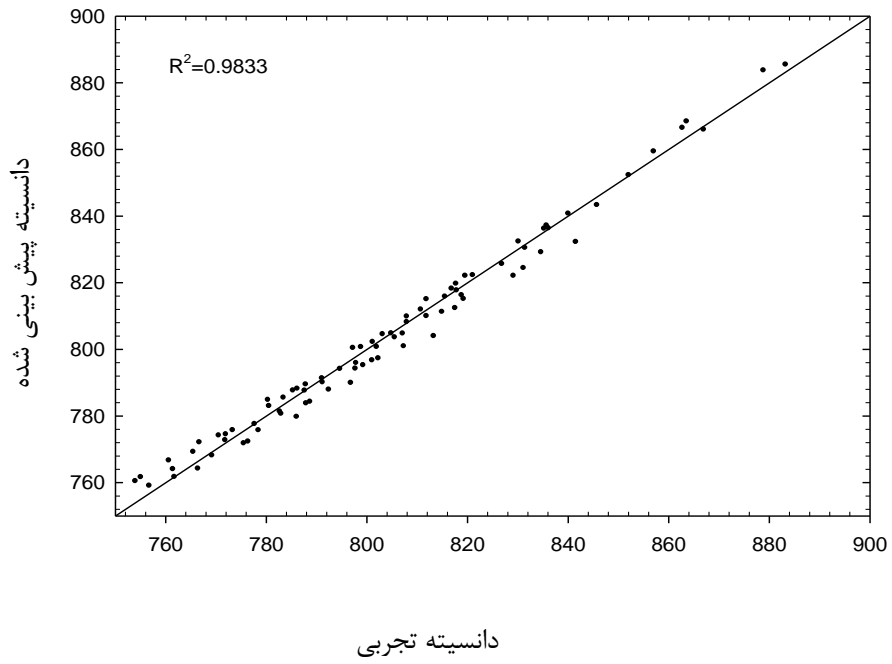
شکل (۴-۹) - نمودار مقادیر دانسیته پیش بینی شده بر حسب مقادیر تجربی به روش رد مرحله ای گروهی برای الکل

های اتانول، ۱- پروپانول، ۱- هگزانول، ۱- نونانول و ۱- دودکانول (الف) با مدل MLR و (ب) با مدل ANN

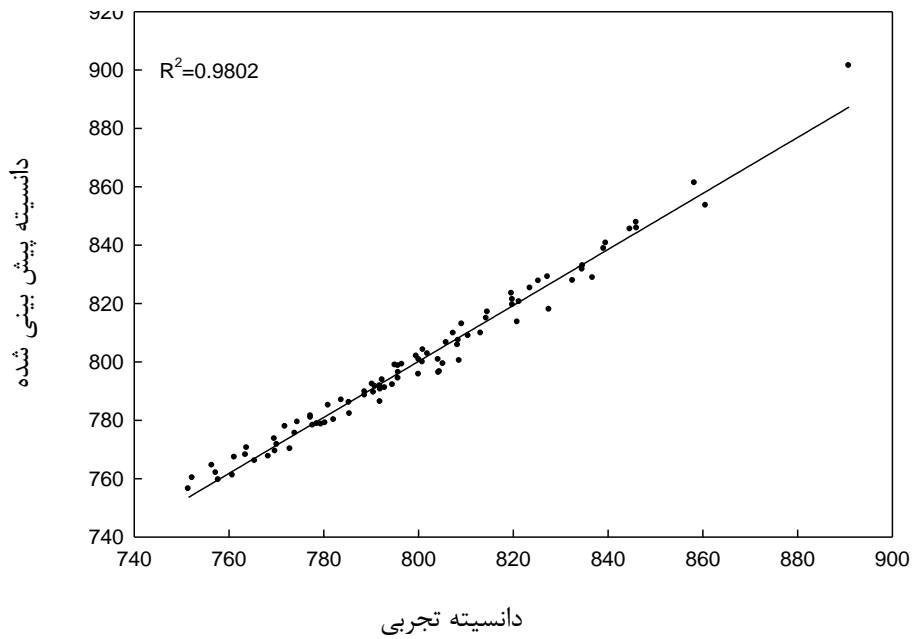
۴-۷-۲ - نمودار برگشت

در این نمودار مقادیر پیش‌بینی دانسیته بر حسب مقادیر تجربی دانسیته رسم می‌شود و به کمک مقدار مربع ضریب همبستگی (R^2) به دست آمده از نمودار، پراکندگی نقاط در اطراف خط برگشت تعیین می‌شود. محدوده‌ی تغییرات R^2 بین صفر و یک است. اگر $R^2=1$ باشد همبستگی کاملی بین داده‌ها وجود دارد و اگر $R^2=0$ باشد، داده‌ها هیچ‌گونه همبستگی با هم ندارند. بنابراین هر چه مقدار R^2 به دست آمده در نمودار مربوط به مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده بر حسب دانسیته‌ی تجربی، به ۱ نزدیک‌تر باشد، می‌توان گفت که نتایج پیش‌بینی شده به واقعیت نزدیک‌ترند. در شکل‌های (۴-۱۰) و (۴-۱۱) بترتیب نمودار برگشت دانسیته پیش‌بینی شده بر حسب دانسیته‌ی تجربی با استفاده از روش آنالیز رگرسیون چندگانه و مدل ANN بهینه شده برای دو سری تست و ارزیابی، نشان می‌دهد. در نمودارهای شکل (۴-۱۱)، نسبت به نمودارهای شکل (۴-۱۰) نقاط در اطراف خط افقی متراکم‌تر هستند و این نشان‌دهنده‌ی پیش‌بینی بهتر شبکه‌ی عصبی مصنوعی نسبت به روش رگرسیون خطی چندگانه است.

الف) سری ارزیابی



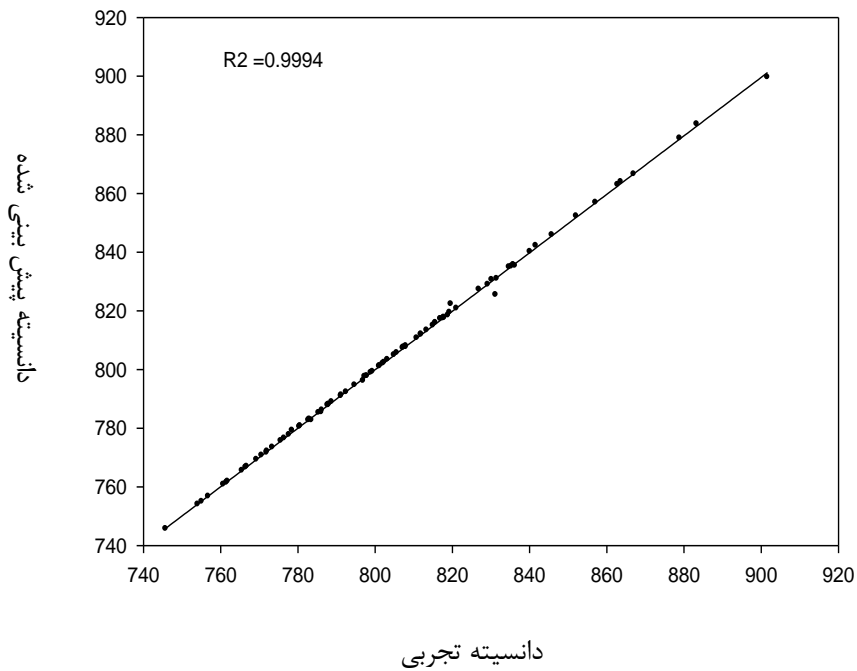
ب) سری تست



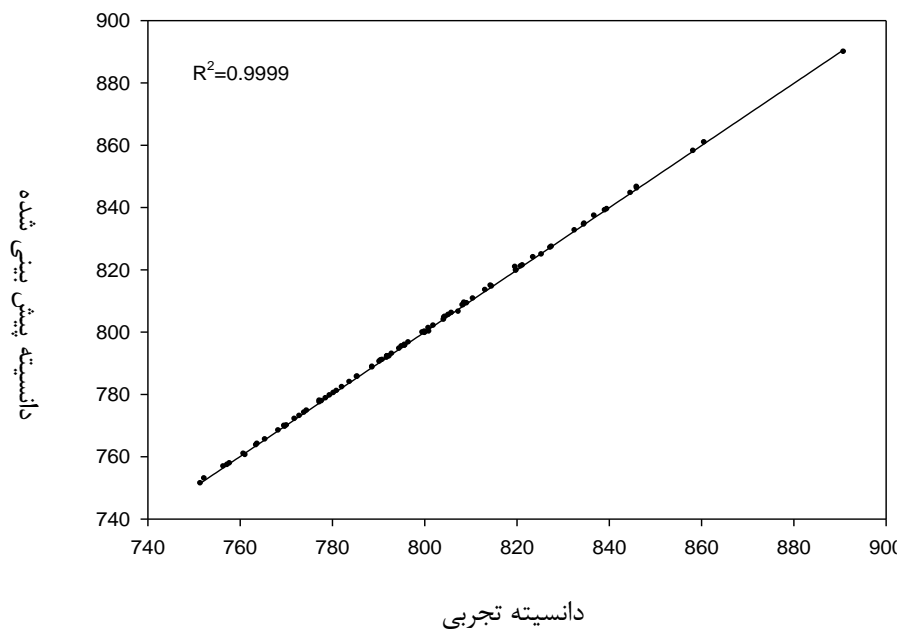
شکل (۴-۱۰) - نمودار برگشت دانسیته پیش بینی شده توسط MLR بر حسب دانسیته تجربی

برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست

الف) سری ارزیابی



ب) سری تست



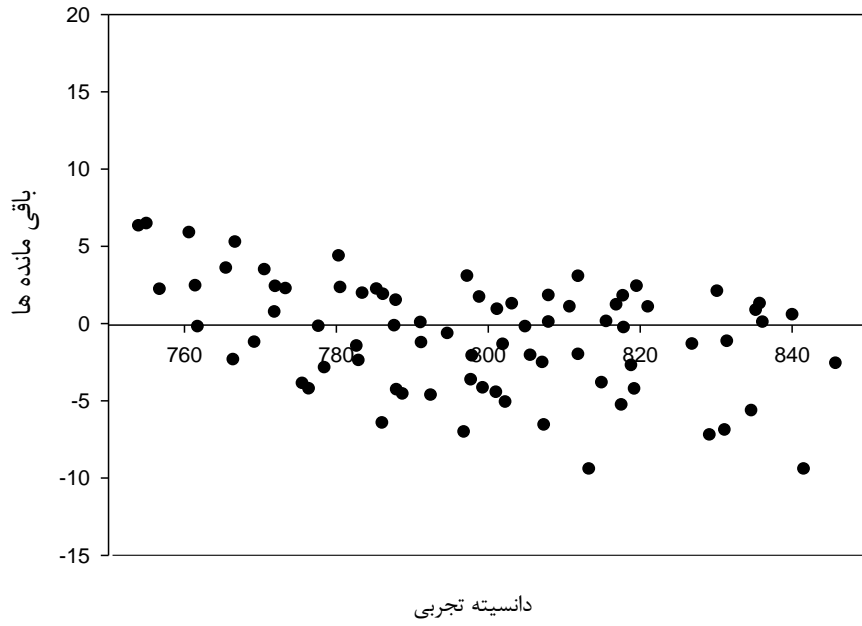
شکل (۴-۱۱) - نمودار برگشت دانسیته پیش بینی شده توسط ANN بر حسب دانسیته تجربی

برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست

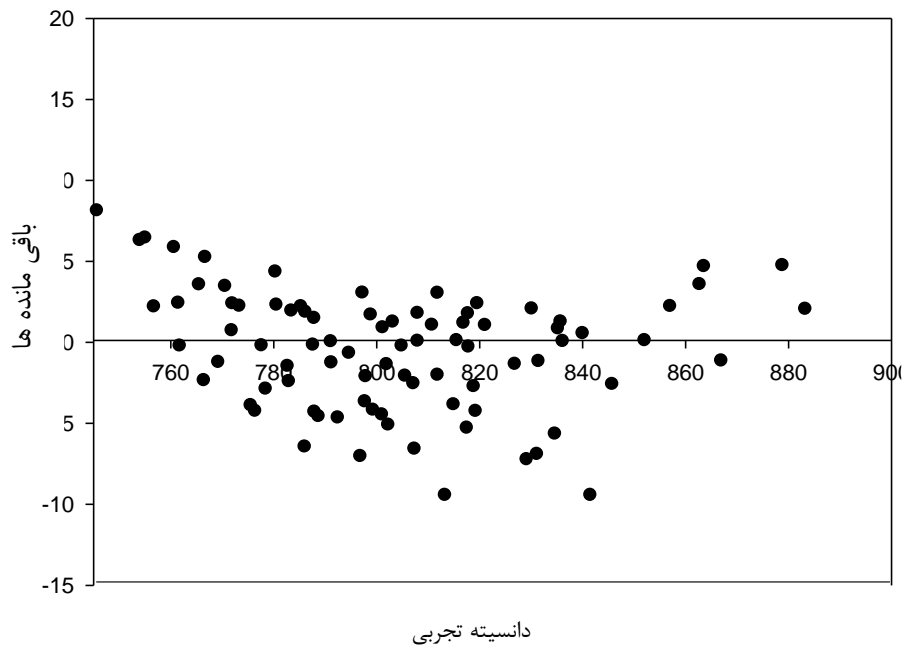
۴-۷-۳- نمودار خطای باقیمانده

نمودار باقیمانده، معیاری برای شایستگی مدل به دست آمده می‌باشد. منظور از عبارت خطای باقیمانده تفاوت بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط مدل و مقادیر تجربی کمیت موردنظر است. اگر پراکندگی مقادیر در دو طرف نمودار یکنواخت باشد، این امر نشان‌دهنده‌ی تصادفی بودن خطاها و عدم وجود خطای سیستماتیک است. ولی اگر بیشتر نقاط، در یک طرف نمودار باشد و پراکندگی مقادیر غیر یکنواخت باشد، این بدان معناست که خطای جهت‌دار رخ داده است و خطای سیستماتیک رخ داده است. در شکل‌های (۴-۱۲) و (۴-۱۳) بترتیب نمودار خطای باقیمانده با استفاده از روش MLR و ANN نشان داده شده است. همان‌گونه که در شکل (۴-۱۳) ملاحظه می‌شود، در مدل شبکه‌ی عصبی مصنوعی، نقاط نسبت به نتایج مدل رگرسیون خطی چندگانه (شکل (۴-۱۲)، به صورت متقارن‌تری حول خط افقی انتشار یافته‌اند، که این امر نشان‌دهنده‌ی عدم وجود خطای سیستماتیک در مدل شبکه‌ی عصبی مصنوعی می‌باشد. بنابراین فرضیه‌ی وجود رابطه‌ی غیر خطی بین دانسیته و توصیف‌کننده‌های وارد شده در مدل، تا حدود زیادی ثابت می‌شود.

الف) سری ارزیابی



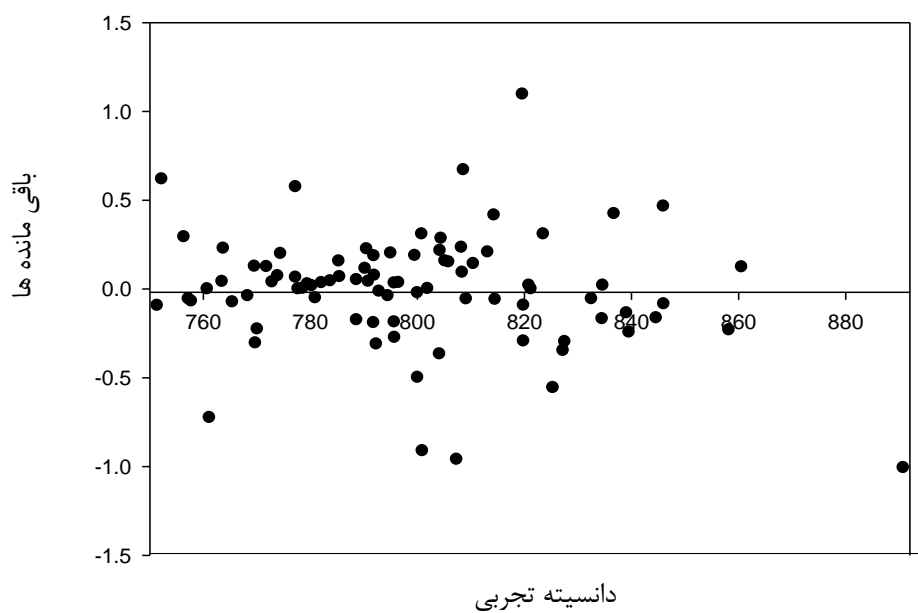
ب) سری تست



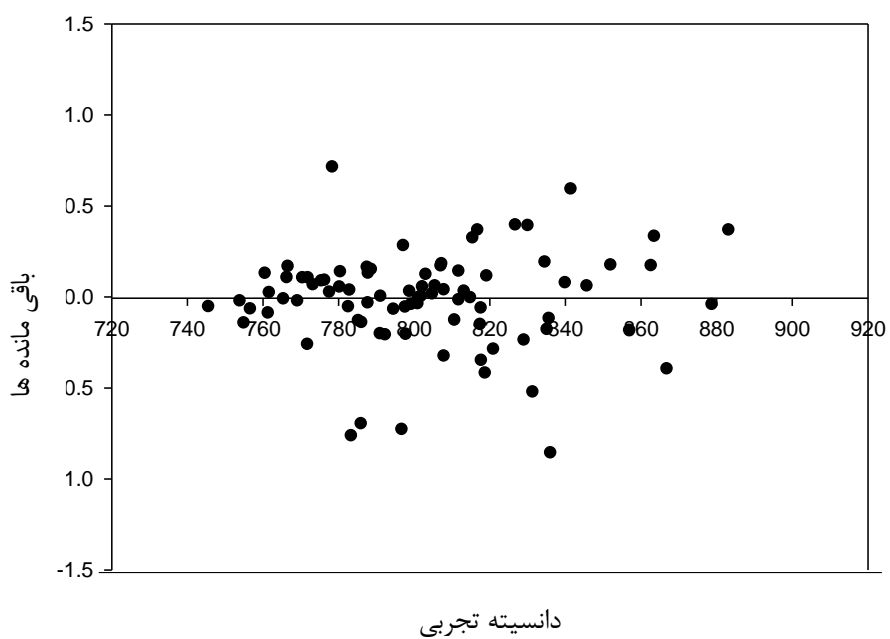
شکل (۴-۱۲) - نمودار خطای باقیمانده نسبت به مقدار تجربی دانسیته با استفاده از روش MLR

برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست

الف) سری ارزیابی



(ب) سری تست



شکل (۴-۱۳) - نمودار خطای باقیمانده نسبت به مقدار تجربی دانسیته با استفاده از روش ANN

برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست

جدول (۴-۲۳) - مقادیر دانسیته تجربی و مقادیر پیش‌بینی شده توسط روش‌های ANN و MLR

برای دو سری ارزیابی (V) و تست (T)

شماره	دانسیته تجربی	دانسیته پیش بینی شده	
		MLR	ANN
۲ V	۷۹۰/۵۸	۷۸۹/۴۶	۷۹۰/۸۰
۴ T	۸۰۱/۰۹	۷۹۶/۶۲	۸۰۱/۲۵
۷ v	۸۲۷/۶۰	۸۱۷/۸۸	۸۲۷/۳۰
۱۰ T	۸۴۱/۶۰	۸۳۲/۱۵	۸۴۱/۹۹
۱۳ V	۸۶۰/۶۶	۸۵۳/۵۰	۸۶۰/۷۸
۱۷ T	۸۸۳/۳۱	۸۸۵/۳۵	۸۸۳/۹۶
۲۴ v	۷۸۰/۳۴	۷۷۹/۰۲	۷۸۰/۳۵
۲۷ T	۷۹۶/۸۸	۷۸۹/۸۴	۷۹۶/۱۱
۲۹ v	۸۰۴/۵۰	۷۹۶/۵۳	۸۰۴/۷۸
۳ V	۸۳۶/۸۲	۸۲۸/۷۲	۸۳۷/۲۴
۳۱ T	۸۱۳/۳۴	۸۰۳/۹۰	۸۱۳/۲۵
۳۴ V	۸۹۰/۸۶	۹۰۱/۳۹	۸۸۹/۸۵
۳۷ T	۸۶۷/۰۰	۸۶۵/۸۵	۸۶۶/۳۶
۳۹ T	۹۰۱/۶۳	۹۱۹/۱۰	۸۹۹/۷۵
۴۱ V	۷۸۸/۷۱	۷۸۸/۴۶	۷۸۸/۷۶
۴۳ T	۷۹۱/۲۶	۷۸۹/۱۰	۷۹۱/۳۰
۴۶ V	۷۹۴/۵۸	۷۹۲/۰۶	۷۹۴/۵۴
۴۹ T	۷۹۷/۷۸	۷۹۴/۱۲	۷۹۷/۷۷
۵۱ V	۸۰۰/۰۸	۷۹۵/۶۶	۸۰۰/۰۶
۵۳ V	۸۰۵/۲۳	۷۹۹/۲۸	۸۰۵/۲۴
۵۷ T	۸۰۲/۳۲	۷۹۷/۲۲	۸۰۲/۴۰
۵۹ T	۸۰۷/۴۰	۸۰۰/۸۱	۸۰۷/۵۸
۶۰ V	۷۹۲/۰۲	۷۹۰/۵۲	۷۹۲/۰۹
۶۳ T	۷۷۲/۰۳	۷۷۴/۴۱	۷۷۲/۱۹
۶۷ V	۷۷۳/۹۶	۷۷۵/۴۴	۷۷۴/۰۳
۷۰ T	۷۷۷/۷۲	۷۷۷/۵۰	۷۷۷/۷۷
۷۲ V	۷۷۹/۵۲	۷۷۸/۵۳	۷۷۹/۵۵
۷۶ T	۷۸۳/۰۱	۷۸۰/۵۹	۷۸۳/۰۶
۷۸ V	۷۸۵/۵۳	۷۸۲/۱۳	۷۸۵/۵۹
۸۲ T	۷۸۸/۷۸	۷۸۴/۱۹	۷۸۸/۱۳
۸۴ V	۷۹۱/۹۵	۷۸۶/۲۶	۷۹۲/۱۴
۸۷ V	۷۵۷/۳۰	۷۶۱/۸۷	۷۵۷/۲۴

شماره	دانسیته تجربی	دانسیته پیش بینی شده	
		MLR	ANN
۸۸ T	۷۵۴/۰۵	۷۶۰/۳۴	۷۸۸/۹۵
۹۱ V	۷۶۵/۵	۷۶۵/۹۹	۷۶۵/۴۲
۹۴ T	۷۶۱/۵۱	۷۶۳/۹۳	۷۶۱/۴۳
۹۵ T	۷۶۹/۲۹	۷۶۸/۰۵	۷۶۹/۲۳
۹۹ V	۷۷۲/۹۴	۷۷۰/۱۳	۷۷۲/۹۸
۱۰۲ T	۷۷۶/۴۵	۷۷۲/۲۰	۷۷۶/۵۵
۱۰۵ V	۷۵۱/۴۶	۷۵۶/۴۲	۷۵۱/۳۶
۱۰۹ T	۷۴۵/۷۳	۷۵۳/۸۵	۷۴۵/۷۹
۱۱۳ V	۷۶۰/۸۲	۷۶۱/۰۵۴	۷۶۰/۸۲
۱۱۶ V	۷۹۵/۷۶	۷۹۸/۵۳	۷۹۵/۷۹
۱۱۷ T	۷۵۶/۸۱	۷۵۸/۹۹	۷۵۶/۷۰
۱۲۱ V	۸۰۱/۹۷	۸۰۲/۶۴	۸۰۱/۹۷
۱۲۴ T	۷۶۶/۴۹	۷۶۴/۱۳	۷۶۶/۶۲
۱۲۵ T	۷۹۸/۹۰	۸۰۰/۶۰	۷۹۸/۹۰
۱۲۹ T	۸۰۴/۹۳	۸۰۱/۲۵	۸۰۴/۷۰
۱۳۴ V	۸۰۸/۴۶	۸۰۷/۲۹	۸۰۸/۵۵
۱۳۹ T	۸۱۱/۹۰	۸۰۹/۹۰	۸۱۲/۱۰
۱۴۰ V	۷۸۱/۰۲	۷۸۵/۰۰	۷۸۰/۹۷
۱۴۳ V	۷۸۸/۷۱	۷۹۸/۶۳	۷۸۸/۵۳
۱۴۴ T	۸۰۴/۹۳	۷۸۷/۵۷	۸۰۴/۹۹
۱۴۹ T	۸۱۱/۹۰	۷۹۱/۲۰	۸۱۱/۸۰
۱۵۴ V	۷۹۵/۷۵	۷۹۴/۳۰	۷۹۵/۶۲
۱۵۵ V	۷۶۳/۸۰	۷۷۰/۵۰	۷۶۴/۰۰
۱۵۸ T	۷۸۵/۳۷	۷۹۵/۸۰	۷۸۵/۲۹
۱۶۱ T	۷۹۱/۱۶	۷۷۱/۹۹	۷۹۱/۰۶
۱۶۲ V	۷۶۹/۶۴	۷۷۳/۵۴	۷۶۹/۷۶
۱۶۶ T	۷۹۷/۹۲	۷۷۵/۶۳	۷۹۷/۹۲
۱۷۱ V	۷۷۸/۶۵	۷۷۸/۷۲	۷۷۸/۶۵
۱۷۴ V	۷۵۶/۴۵	۷۶۴/۴۶	۷۵۶/۷۴
۱۷۶ T	۷۸۲/۷۵	۷۸۱/۲۷	۷۸۲/۷۵
۱۸۰ V	۷۶۳/۵۸	۷۶۸/۰۵	۷۶۳/۶۲
۱۸۵ T	۷۶۰/۷۰	۷۶۶/۵۶	۷۶۰/۷۸

شماره	دانسیته	دانسیته پیش بینی شده
-------	---------	----------------------

		MLR	ANN
۱۸۶ T	۷۶۵/۵۶	۷۶۹/۱۲	۷۶۵/۵۵
۱۸۹ V	۷۷۰/۱۶	۷۷۱/۶۲	۷۶۹/۹۳
۱۹۲ T	۷۷۱/۹۳	۷۷۲/۶۵	۷۷۱/۸۰
۱۹۳ V	۸۰۷/۴۰	۸۰۹/۷۲	۸۰۶/۴۴
۱۹۸ V	۸۴۶/۱۰	۸۴۵/۷۷	۸۴۶/۰۱
۲۰۱ T	۸۳۱/۵۰	۸۳۰/۳۲	۸۳۰/۸۹
۲۰۴ V	۸۰۰/۱۰	۸۰۰/۷۱	۷۹۹/۶۰
۲۰۷ T	۸۶۲/۸۰	۸۶۶/۳۷	۸۶۳/۰۲
۲۱۰ V	۸۳۴/۶۰	۸۳۱/۶۱	۸۳۴/۴۳
۲۱۱ T	۸۱۸/۹۰	۸۱۶/۱۶	۸۱۸/۵۸
۲۱۴ T	۸۵۲/۱۰	۸۵۲/۲۱	۸۵۲/۱۱
۲۱۹ V	۷۷۷/۳۰	۷۸۱/۴۰	۷۷۷/۸۷
۲۲۰ V	۸۳۲/۶۰	۸۲۷/۷۵	۸۳۲/۵۴
۲۲۵ T	۸۱۷/۶۰	۸۱۲/۳۰	۸۱۷/۶۰
۲۳۱ V	۷۶۱/۲۰	۷۶۲/۲۴	۷۶۰/۴۷
۲۳۵ T	۸۴۵/۸۰	۸۴۳/۲۰	۸۴۶/۱۲
۲۳۸ V	۸۲۰/۹۰	۸۱۳/۵۹	۸۲۰/۹۲
۲۴۰ T	۷۹۲/۵۰	۷۸۷/۸۴	۷۹۲/۳۹
۲۴۵ V	۷۵۲/۳۰	۷۶۰/۱۶	۷۵۲/۹۲
۲۴۷ T	۸۳۴/۷۰	۸۲۹/۰۴	۸۳۴/۷۰
۲۵۱ V	۸۰۴/۳۰	۷۹۶/۲۱	۸۰۴/۱۴
۲۵۵ T	۷۷۸/۵۰	۷۷۵/۶۱	۷۷۹/۳۰
۲۵۸ V	۸۱۹/۷۰	۸۲۳/۴۰	۸۲۰/۸۰
۲۶۲ T	۸۲۹/۲۰	۸۲۱/۹۶	۸۲۹/۰۰
۲۶۷ V	۸۰۱/۰۰	۸۰۱/۰۵	۸۰۰/۰۶
۲۷۰ T	۸۳۶/۲۰	۸۳۶/۲۶	۸۳۵/۲۳
۲۷۳ V	۸۰۴/۲۰	۸۰۰/۷۰	۸۰۳/۸۳
۲۷۷ T	۸۱۹/۶۰	۸۲۲/۰۰	۸۲۲/۴۴
۲۸۱ V	۷۶۹/۸۰	۷۶۹/۳۰	۷۶۹/۵۰
۲۸۷ T	۷۸۳/۵۰	۷۸۵/۴۴	۷۸۲/۷۵
۲۹۰ V	۸۰۹/۲۰	۸۱۲/۹۰	۸۰۹/۱۴
۲۹۳ T	۷۵۵/۱۰	۷۶۱/۵۴	۷۵۴/۹۵
۲۹۶ V	۸۱۴/۶۰	۸۱۶/۹۰	۸۱۴/۵۴

شماره	دانسیته تجربی	دانسیته پیش بینی شده	
		MLR	ANN
۳۰۰ T	۷۸۶/۱۰	۷۷۱/۶۴	۷۸۵/۴۰
۳۰۵ V	۸۱۹/۹۰	۸۲۱/۲۹	۸۱۹/۸۰
۳۰۸ T	۸۱۱/۹۰	۸۱۴/۹۲	۸۱۲/۰۴
۳۱۱ V	۷۹۵/۱۰	۷۹۸/۷۸	۷۹۵/۳۰
۳۱۴ T	۸۱۷/۸۰	۸۱۹/۵۶	۸۱۷/۷۴
۳۱۸ V	۷۹۹/۶۰	۸۰۱/۸۹	۷۹۹/۸۰
۳۲۳ T	۸۲۱/۱۰	۸۲۲/۱۴	۸۲۰/۸۱
۳۲۸ V	۸۰۵/۹۰	۸۰۶/۵۲	۸۰۶/۰۵
۳۳۱ T	۷۹۳/۳۰	۸۰۰/۳۴	۷۹۳/۱۴
۳۳۴ V	۷۸۳/۸۰	۷۸۶/۸۱	۷۸۳/۸۴
۳۳۹ T	۸۰۳/۲۰	۸۰۴/۴۶	۸۰۳/۳۲
۳۴۳ T	۸۰۸/۰۰	۸۰۸/۰۷	۸۰۷/۶۷
۳۴۷ V	۷۹۰/۹۰	۷۹۱/۴۴	۷۹۰/۹۴
۳۵۰ T	۷۸۰/۴۰	۷۸۴/۷۵	۷۸۰/۴۵
۳۵۳ V	۷۷۱/۹۰	۷۷۷/۷۶	۷۷۲/۰۲
۳۵۵ T	۷۸۷/۹۰	۷۹۴/۰۲	۷۸۷/۸۶
۳۵۸ V	۷۷۷/۳۰	۷۸۰/۸۵	۷۷۷/۳۶
۳۶۲ T	۷۹۴/۷۰	۷۸۲/۹۰	۷۹۴/۶۳
۳۶۶ V	۷۸۵/۴۰	۷۸۵/۹۹	۷۸۵/۵۵
۳۷۱ T	۷۸۰/۶۰	۷۸۷/۵۴	۷۸۰/۶۵
۳۷۵ V	۸۲۵/۴۰	۸۲۷/۵۹	۸۲۴/۸۴
۳۸۰ V	۸۳۹/۶۰	۸۴۰/۶۰	۸۳۹/۳۵
۳۸۳ T	۸۳۵/۸۰	۸۰۹/۷۹	۸۳۵/۶۸
۳۸۶ V	۸۱۹/۹۰	۸۱۹/۴۵	۸۱۹/۶۰
۳۹۱ T	۸۰۸/۰۰	۸۱۷/۶۲	۸۰۷/۶۷
۳۹۵ V	۷۹۰/۳۰	۷۹۲/۲۷	۷۹۰/۴۱
۳۹۸ T	۸۱۷/۹۰	۸۰۴/۶۰	۸۱۷/۸۰
۴۰۲ T	۸۰۷/۲۰	۸۳۲/۳۰	۸۰۲/۴۰
۴۰۶ V	۸۰۰/۹۰	۷۹۲/۸۰	۸۰۱/۲۰
۴۱۱ T	۸۶۳/۶۳	۸۶۸/۳۱	۸۶۳/۹۶
۴۱۵ V	۸۴۶/۰۴	۸۴۷/۷۱	۸۴۶/۵۰
۴۲۰ T	۸۴۰/۰۹	۸۴۰/۶۳	۸۶۳/۹۶
۴۲۴ V	۸۲۳/۵۹	۸۲۵/۱۸	۸۲۳/۸۹

ادامه جدول (۴-۲۳)

شماره	دانسیتة تجربی	دانسیتة پیش بینی شده	
		MLR	ANN
		۴۲۷ V	۸۵۸/۲۹
۴۳۰ V	۸۳۹/۱۵	۸۳۸/۷۰	۸۳۹/۰۱
۴۳۴ T	۸۴۰/۰۹	۸۱۸/۱۰	۸۴۰/۱۶
۴۴۰ V	۸۲۷/۳۰	۸۲۹/۰۰	۸۲۶/۹
۴۴۳ T	۸۱۶/۹۲	۸۵۹/۳۰	۸۱۷/۲۱
۴۴۶ V	۸۴۴/۷	۸۴۵/۴۱	۸۴۴/۵۴
۴۵۰ T	۸۴۰/۰۹	۸۳۶/۱۴	۸۴۰/۲۹
۴۵۴ V	۸۲۱/۳۰	۸۲۰/۵۳	۸۲۱/۳۰
۴۵۸ T	۸۳۵/۳۰	۸۱۱/۸۷	۸۳۵/۱۸
۴۶۱ T	۸۱۰/۸۰	۸۲۴/۲۹	۸۱۰/۵۴
۴۶۲ V	۷۹۲/۴۰	۷۹۳/۷۷	۷۹۲/۰۸
۴۷۱ V	۸۰۸/۳۰	۸۰۵/۶۹	۸۰۸/۵۳
۴۷۵ T	۸۳۱/۲۰	۸۰۰/۶۳	۸۳۵/۱۸
۴۷۹ V	۸۱۴/۴۰	۸۱۴/۸۳	۸۱۴/۸۱
۴۸۳ T	۸۰۲/۰۰	۸۱۱/۱۵	۸۱۰/۵۴
۴۸۶ V	۸۳۴/۷۰	۸۳۲/۸۳	۸۳۴/۷۱
۴۹۰ T	۸۱۵/۰۰	۸۲۵/۵۴	۸۱۴/۹۴
۴۹۴ V	۷۹۵/۸۰	۷۹۶/۳۰	۷۹۵/۵۳
۵۰۱ V	۸۱۳/۲۰	۸۰۹/۷۵	۸۱۳/۴۰
۵۰۵ T	۸۱۵/۶۰	۸۰۳/۵۱	۸۱۵/۷۷
۵۰۹ V	۸۰۸/۶۷	۸۰۰/۳۴	۸۰۹/۳۴
۵۰۱ V	۸۱۳/۲۰	۸۰۹/۷۵	۸۱۳/۴۰
۵۰۵ T	۸۱۵/۶۰	۸۰۳/۵۱	۸۱۵/۷۷
۵۱۳ T	۸۰۵/۶	۸۰۳/۵۲	۶۲۲۷/۸۰
۵۱۶ V	۷۹۲/۹۳۰	۷۹۱/۰۴	۷۹۲/۹۲
۵۱۹ T	۸۱۹/۳۰	۸۱۵/۰۴	۸۱۹/۳۰
۵۲۳ V	۷۸۲/۱۷	۷۸۰/۰۸	۷۸۰/۲۰
۵۲۷ T	۸۷۸/۸۸	۸۸۳/۶۲	۸۷۸/۹۵
۵۳۱ V	۷۶۸/۳۸	۷۶۷/۵۵	۷۶۸/۳۴
۵۳۴ T	۷۹۹/۳۴	۷۹۵/۱۶	۷۹۹/۳۰
۵۳۷ V	۷۵۷/۸۲	۷۵۹/۵۰	۷۵۷/۷۵
۵۴۰ T	۷۸۷/۹۹	۷۸۳/۶۹	۷۸۸/۱۱

شماره	دانسیتة تجربی	دانسیتة پیش بینی شده	
		MLR	ANN
		۵۴۲۷	۷۹۶/۵۵
۵۴۴T	۷۷۵/۶۰	۷۷۱/۷۰	۷۷۵/۶۹
۵۴۷۷	۸۱۰/۵۳	۸۰۸/۸۵	۸۱۰/۶۷
۵۵۰T	۷۶۱/۸۱	۷۶۱/۵۸	۷۶۱/۸۳
۵۵۴۷	۷۹۱/۸۹	۷۹۱/۶۹	۷۹۱/۷۰
۵۵۶T	۸۰۱/۲۳	۸۰۲/۱۳	۸۰۱/۲۲
۵۵۶T	۸۰۱/۲۳	۸۰۲/۱۳	۸۰۱/۲۲
۵۵۹۷	۷۷۷/۷۶	۷۷۸/۱۷	۷۷۷/۷۶
۵۶۲T	۷۸۶/۲۳	۷۸۸/۰۹	۷۸۶/۰۹
۵۶۵ V	۷۷۴/۵۰	۷۷۹/۳۰	۷۷۴/۷۰
۵۶۷ T	۷۷۰/۶۰	۷۷۴/۰۰	۷۷۰/۷۰
۵۵۶ T	۸۰۱/۲۳	۸۰۲/۱۳	۸۰۱/۲۲
۵۵۹ V	۷۷۷/۷۶	۷۷۸/۱۷	۷۷۷/۷۶
۵۶۲T	۷۸۶/۲۳	۷۸۸/۰۹	۷۸۶/۰۹
۵۶۵۷	۷۷۴/۵۰	۷۷۹/۳۰	۷۷۴/۷۰
۵۶۷T	۷۷۰/۶۰	۷۷۴/۰۰	۷۷۰/۷۰

۴-۷-۴- ارزیابی شبکه با استفاده از پارامترهای آماری

در جدول (4-24) پارامترهای آماری دو روش رگرسیون خطی چندگانه و شبکه عصبی مصنوعی به منظور مقایسه‌ی دو روش آورده شده است. آنچه از این جدول استنباط می‌شود، با توجه به ضرایب همبستگی بزرگ‌تر و خطای استاندارد کوچک‌تر برای شبکه‌ی عصبی مصنوعی، برتری این روش بر روش MLR در پیش‌بینی مقدار دانسیته می‌باشد.

جدول (4-24) - پارامترهای آماری دو روش رگرسیون خطی چندگانه و شبکه عصبی مصنوعی

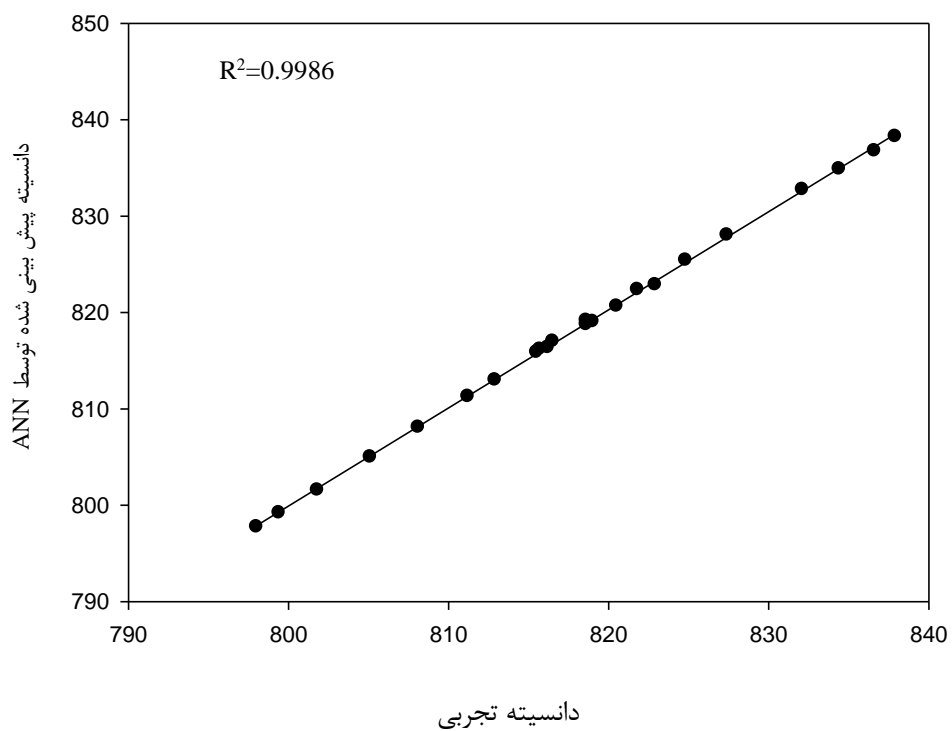
پارامتر آماری	روش	
	MLR	ANN
R_v	۰/۹۹۰۱	۰/۹۹۹۹
R_t	۰/۹۹۱۶	۰/۹۹۹۷
F_v	۴۱۶۶/۲۸۰۸	۶۲۳۴۳۴/۱۵۶۵
F_t	۴۹۵۲/۵۱۰۴	۱۴۵۹۲۷/۸۶۹۰
SE_v	۳/۷۶۰۹	۰/۳۲۰۰
SE_t	۴/۱۵۳۸	۰/۷۶۱۸

۴-۷-۵ - ارزیابی شبکه با استفاده از دو ترکیب جدید

در این مرحله، برای ارزیابی بیشتر شبکه از شبکه‌ی آموزش داده شده، برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیب‌های ۱-تترادکانول، ۱-هگزادکانول استفاده گردید که داده‌های آنها در هیچ یک از سری داده‌های قبلی استفاده نشده بود. توصیف‌کننده‌های این الکل‌ها نیز بر مبنای روش توضیح داده شده در قبل استخراج گردید. نتایج به دست آمده در جدول (4-24) نشان دهنده‌ی کارایی مدل بهینه شده می‌باشد.

جدول (4-25) - مقادیر R ، R^2 ، F ، SE و MSE برای مولکول ۱-تترادکانول

R	۰/۹۹۹۸
R ²	۰/۹۹۸۶
F	۶۰۰۱۸/۰۷۸
MSE	۰/۱۵۶۰
SE	۸/۰۰۴



شکل (۴-۱۴) - نمودار دانسیته پیش بینی بر حسب دانسیته تجربی برای مولکول ۱ - تترادکانول

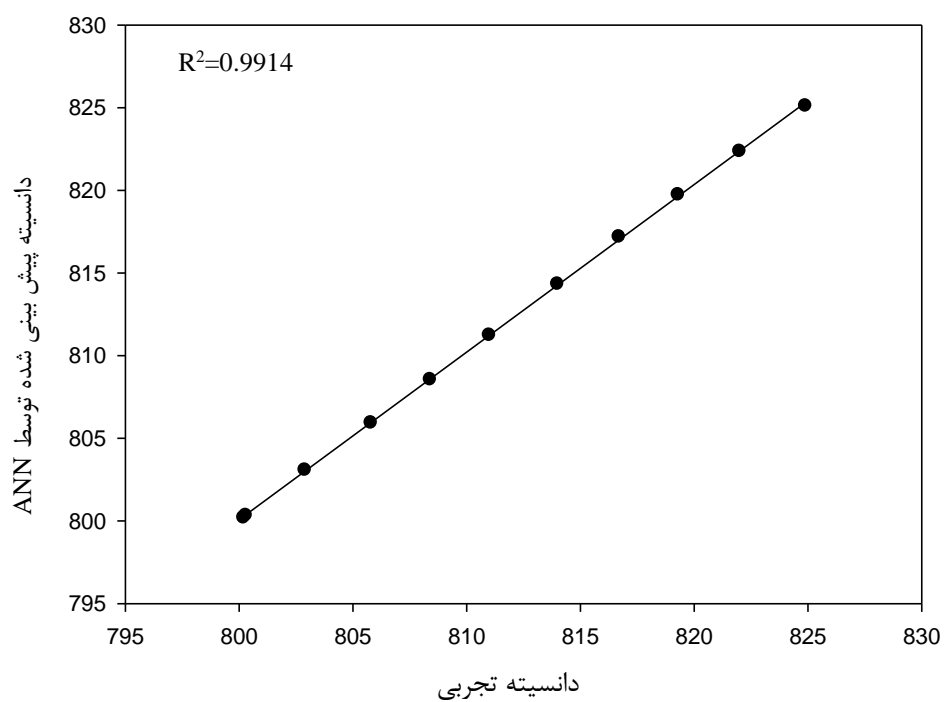
جدول (۴-۲۶) - مقادیر دانسیته تجربی، دانسیته پیش بینی شده و درصد خطا توسط شبکه عصبی

برای مولکول ۱- تترادکانول

شماره	دانسیته تجربی	دانسیته پیش بینی	درصد خطا
۱	۸۱۵/۵۰	۸۱۵/۹۰	۰/۳۹
۲	۸۱۵/۷۰	۸۱۶/۲۰	۰/۴۹
۳	۸۱۶/۵۰	۸۱۷/۰۱	۰/۵۲
۴	۸۱۸/۶۰	۸۱۹/۱۸	۰/۵۸
۵	۸۲۱/۸۰	۸۲۲/۴۰	۰/۵۹
۶	۸۲۴/۸۰	۸۲۵/۴۲	۰/۶۳
۷	۸۲۷/۴۰	۸۲۸/۰۴	۰/۶۴
۸	۸۳۲/۱۰	۸۳۲/۸۰	۰/۶۷
۹	۸۳۴/۴۰	۸۳۴/۹۰	۰/۵۰
۱۰	۸۳۶/۶۰	۸۳۶/۸۰	۰/۱۹۰
۱۱	۸۳۷/۹۰	۸۳۸/۲۸	۰/۳۸
۱۲	۷۹۸/۰۰	۷۹۷/۷۷	۰/۲۳
۱۳	۸۰۱/۸۰	۸۰۱/۵۹	۰/۲۲
۱۴	۸۰۵/۱۰	۸۰۵/۰۰	۰/۰۹
۱۵	۸۰۸/۱۰	۸۰۸/۰۸	0/۰۱
۱۶	۸۱۱/۲۰	۸۱۱/۳۰	۰/۱۰
۱۷	۸۱۲/۹۰	۸۱۳/۰۱	۰/۱۱
۱۸	۸۱۶/۲۰	۸۱۶/۳۸	۰/۱۸
۱۹	۸۱۹/۰۰	۸۱۹/۰۷	۰/۰۷
۲۰	۸۱۸/۶۰	۸۱۸/۸۰	۰/۱۶
۲۱	۸۲۰/۵۰	۸۲۰/۶۵	۰/۱۵
۲۲	۸۲۲/۹۰	۸۲۳/۰۰	۰/۰۲
۲۳	۷۹۹/۴۰	۷۹۹/۲۲	۰/۱۸

جدول (۴-۲۷) - مقادیر R^2 ، R ، F ، SE و MSE با روش ANN برای مولکول ۱- هگزادکانول

R	۰/۹۹۹۴
R ²	۰/۹۹۱۴
F	۶۶۰۳۱/۰۶۱
MSE	۰/۱۰۹۸
SE	۰/۲۱۸۰۶



شکل (۴-۱۵) - نمودار دانسیته پیش بینی بر حسب دانسیته تجربی برای مولکول ۱- هگزادکانول

جدول (۴-۲۸) - مقادیر دانسیته تجربی، دانسیته پیش بینی شده و درصد خطا توسط شبکه‌ی عصبی

برای مولکول ۱- هگزادکانول

شماره	دانسیتة تجربی	دانسیتة پیش بینی	درصد خطا
۱	۸۰۰/۲۰	۸۰۰/۱۹	۰/۰۱
۲	۸۰۰/۳۰	۸۰۰/۳۳	۰/۰۳۴
۳	۸۰۲/۹۰	۸۰۳/۰۷	۰/۱۸
۴	۸۰۵/۸۰	۸۰۶/۰۰	۰/۱۳
۵	۸۰۸/۴۰	۸۰۸/۶۰	۰/۱۵
۶	۸۱۱/۰۰	۸۱۱/۲۴	۰/۲۴
۷	۸۱۴/۰۰	۸۱۴/۳۳	۰/۳۳
۸	۸۱۶/۷۰	۸۱۷/۲۰	۰/۴۸
۹	۸۱۹/۳۰	۸۱۹/۷۳	۰/۴۳
۱۰	۸۲۲/۰۰	۸۲۲/۳۶	۰/۳۷
۱۱	۸۲۴/۹۰	۸۲۵/۱۰	۰/۲۰۱

۴-۷-۶-آزمون Y-تصادفی

برای اثبات قدرت مدل ایجادشده و اینکه نتایج به دست آمده شانسی نبوده است، آزمون Y -تصادفی انجام گرفت. در این راستا متغیر وابسته به صورت تصادفی ایجاد شد. شبکه عصبی بهینه شده با استفاده از ماتریس متغیرهای مستقل اصلی و مقادیر تصادفی از متغیر وابسته توسعه یافت. نتایج حاصل از چندین بار اجرای این آزمون در جدول آورده شده که مقادیر ضریب تعیین کوچک، نشان دهنده‌ی عدم وابستگی در مدل توسعه یافته توسط شبکه‌ی عصبی مصنوعی است.

جدول (۴-۲۹) - مقادیر R^2 سری تست و ارزیابی پس از چندین آزمون Y -تصادفی

تعداد دفعات تکرار آزمون	R^2 سری ارزیابی	R^2 سری تست
۱	۰/۰۰۱۶	۰/۰۰۸۰
۲	۰/۰۰۹۰	۰/۰۱۴۲
۳	۰/۰۰۱۸	۰/۰۱۱۰
۴	۰/۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰
۵	۰/۰۰۰۴	۰/۰۱۸۰
۶	۰/۰۰۲۰	۰/۰۰۱۴
۷	۰/۰۰۰۱۴	۰/۰۰۰۷
۸	۰/۰۵۶۰	۰/۰۳۸۴۹
۹	۰/۰۰۴۱	۰/۰۰۱۰
۱۰	۰/۰۰۱۰	۰/۰۰۲۰

۴-۸- بررسی ارتباط توصیف کننده‌های ساختاری وارد شده در مدل با دانسیته

در این قسمت با توجه به توصیف کننده‌های وارد شده در مدل‌های ANN و MLR یک بررسی
 اجمالی روی اثرات مختلف موجود در دانسیته‌ی ترکیبات مورد مطالعه صورت خواهد گرفت. بهترین
 مدل انتخاب شده شامل ۳ توصیف کننده است که هر کدام بیان‌گر خصوصیات متفاوتی از مولکول‌های
 مورد بررسی است. این توصیف کننده‌ها عبارتند از: HGM، T، P که در ادامه به بررسی مختصر این
 توصیف کننده‌ها می‌پردازیم.

۴-۸-۱- توصیف کننده‌های GETAWAY

این توصیف کننده‌ها که بیان‌کننده ویژگی‌های توپولوژیکی و هندسی مولکول هستند، از ماتریس
 تأثیر مولکولی (MIM) محاسبه می‌شوند. این ماتریس به آسانی از مختصات فضایی اتم‌های مولکول در
 یک صورتبندی مشخص به دست می‌آید که با رابطه (۲-۴) بیان می‌گردد:

$$H=M(MIM)^{-1}.M^T \quad (۲-۴)$$

که M ماتریس مختصات اتمی، بالانویس T به معنای ماتریس ترانهاده و H ماتریس تأثیر مولکولی
 است. عناصر قطری (h_{ij}) ماتریس H لوریج نام دارند که هر یک بیانگر اثر یک اتم در ایجاد شکل کلی
 یک مولکول است. به عنوان مثال اتم‌های دورتر نسبت به اتم‌های نزدیک‌تر به مرکز اتم، دارای h_{ii}
 بزرگتر هستند.

اولین سری از این توصیف کننده‌های مولکولی، H-GETAWAY نامیده می‌شوند که تنها توسط
 اطلاعات به دست آمده توسط ماتریس نفوذ مولکولی محاسبه می‌شوند. HGM از دسته‌ی این گره
 می‌باشد این توصیف کننده از رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$HGM=[\prod_{i=1}^A h_{ii}]^{1/A} \quad (۳-۴)$$

که A تعداد اتم‌ها می‌باشد هرچه تعداد اتم‌ها زیاد می‌شود HGM کم می‌شود ولی دانسیته زیاد می
 شود یعنی توصیف کننده HGM به جرم وابسته است این توصیف کننده دارای علامت منفی در مدل

است و نشان می‌دهد با کاهش این توصیف کننده مقدار دانسیته افزایش می‌یابد. در حالی که سری R-GETAWAY ترکیبی از اطلاعات ماتریس تاثیر-فاصله است که به صورت رابطه (۴-۳) تعریف می‌شود:

$$[R]_{ij} = x = \frac{\pm \sqrt{h_{jj}h_{ii}}}{r_{ij}} \quad (4-4)$$

که h_{ij} و h_{ji} لوریج (قدرت نفوذ) دو اتم i و j و r_{ij} فاصله آن دو اتم است. این توصیف کننده‌ها از آن جهت مهم هستند که به ساختار سه بعدی مولکول حساس هستند و معمولاً برای مقایسه مولکول‌ها و حتی صورتبندی‌ها از نظر شکل، تقارن و اندازه اتم به کار می‌روند.

۴-۸-۲- فشار (P)

فشار عبارتست از نیروی وارده بر سطح، این کمیت در گازها نقش عمده را ایفا می‌کند زیرا یکی از کمیت‌های مشخصه گاز می‌باشد، از این رو بیشتر قوانین فشار در گازها نهفته شده است.

عوامل موثر بر فشار عبارتند از مقدار نیرو و مساحت سطح

مقدار نیرو: فشار با نیروی وارده بر سطح رابطه مستقیم دارد یعنی هر چه نیرو بیشتر باشد فشار بیشتر است. منشا نیروی وارد شده توسط یک گاز برخوردی‌های پی در پی مولکولها بر دیواره ظرف است.

مساحت سطح: مقدار فشار با مساحت سطح رابطه عکس دارد یعنی هر چه سطح بزرگتر باشد، مقدار فشار کمتر است و بر عکس. برای محاسبه ی فشار از رابطه (۴-۵) استفاده می‌شود:

$$P = F/A \quad (5-4)$$

واحد فشار در دستگاه SI پاسکال (Pa) است. یک پاسکال یک نیوتن بر متر مربع است:

$$1\text{Pa} = 1\text{Nm}^{-2}$$

فشار با دانسیته رابطه‌ی مستقیم دارد، یعنی هر چه فشار بیشتر باشد دانسیته‌ی آن نیز بیشتر است. در مدل خطی حاصله، این توصیف کننده دارای علامت مثبت است و نشان می‌دهد با افزایش فشار، دانسیته افزایش می‌یابد.

۴-۸-۳- دما (T)

دما معیاری از سردی و گرمی مواد را مشخص می‌کند. در حقیقت دما خاصیتی است که جهت جریان انرژی را مشخص می‌کند. اگر جریان انرژی از A به B باشد، دمای A بیشتر از دمای B است. نتیجه اینکه انرژی به صورت گرما از ناحیه‌ای با دمای بیشتر به ناحیه‌ای با دمای کمتر جریان می‌یابد. با افزایش دما فاصله مولکول‌ها از یکدیگر افزایش یافته در نتیجه، حجم مواد زیاد می‌شود، اما جرم آن‌ها ثابت می‌ماند، پس با افزایش دما حجم افزایش و دانسیته کاهش می‌یابد.

در مدل خطی حاصل شده نیز، دما دارای علامت منفی است و رابطه‌ی معکوس با دانسیته را نشان می‌دهد. یعنی با افزایش دما، میزان دانسیته کاهش می‌یابد.

۴-۹- بررسی میزان مشارکت توصیف کننده‌ها در مدل شبکه عصبی

به منظور بررسی بیشتر اثر توصیف کننده‌های به کار گرفته شده در مدل شبکه عصبی مصنوعی درصد مشارکت هر یک از توصیف کننده‌ها به صورت زیر تعیین شد:

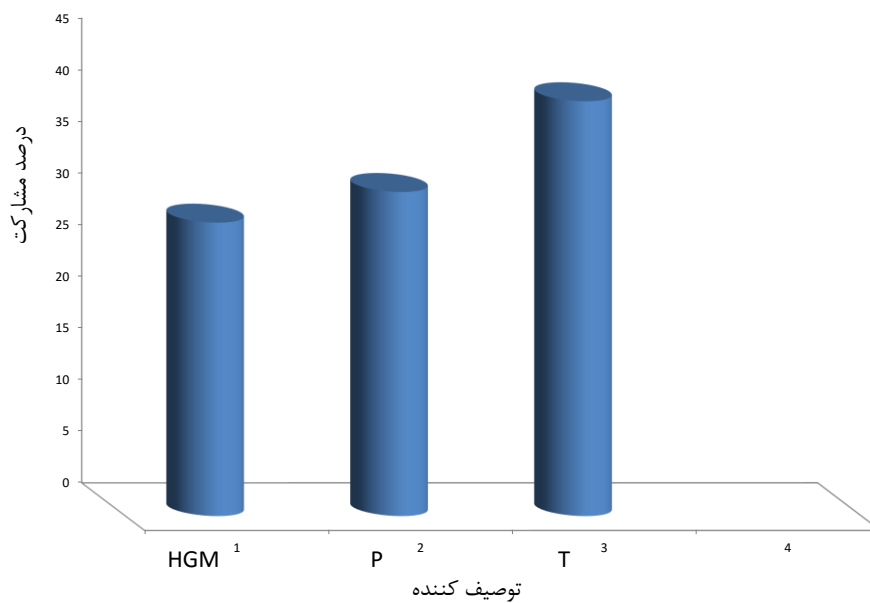
- ۱- توصیف کننده موردنظر از سری توصیف کننده‌های ارائه شده به شبکه بهینه حذف شد.
- ۲- با استفاده از توصیف کننده‌های باقیمانده مقادیر پاسخ برای داده‌های سری ارزیابی محاسبه گردید.
- ۳- با استفاده از مقادیر پاسخ محاسبه شده و مقادیر پاسخ تجربی، میانگین خطای مطلق در غیاب توصیف کننده‌ی موردنظر محاسبه شد.

۴- مراحل ۱ تا ۳ برای دیگر توصیف کننده‌های منتخب نیز تکرار شد.

۵- در پایان درصد مشارکت هر یک از توصیف کننده‌ها به کمک رابطه (۴-۶) برآورد شد.

$$C_i = 100 \frac{MAE_i}{\sum_{i=1}^N MAE_i} \quad (6-4)$$

در این رابطه C_i درصد مشارکت توصیف کننده حذف شده i ام، N تعداد توصیف کننده‌های به کار گرفته شده در مدل شبکه عصبی، MAE_i خطای مطلق حاصل از سری ارزیابی در غیاب توصیف کننده i ام می‌باشند.



شکل (۴-۱۶) - مشارکت توصیف کننده‌ها در شبکه عصبی بهینه

آینده نگری

* با توجه به توانایی شبکه‌ی عصبی (ANN) در پیش‌بینی دانسیته ی ۱- آلکانول‌ها، که در این پایان نامه نشان داده شد، می‌توان پیش‌بینی نمود که نه تنها در مورد الکل‌ها، بلکه در مورد ترکیبات مختلف دیگر نیز از این روش استفاده نمود. همچنین علاوه بر پیش‌بینی دانسیته، در پیش‌بینی سایر خواص انتقالی مانند ویسکوزیته و خواص ترمودینامیکی دیگر نیز، می‌توان از این روش استفاده نمود.

* از آنجایی که در این تحقیق، توصیف‌کننده‌های به‌دست آمده از روش رگرسیون خطی چندگانه به عنوان ورودی شبکه عصبی قرار گرفته است و چون در روش‌های رگرسیون خطی چندگانه تنها برهم‌کنش‌های خطی بین پارامترها لحاظ می‌شود، لذا می‌توان از روش‌هایی همچون ژنتیک الگوریتم، طرح ریزی متوالی^۱ برای انتخاب توصیف‌کننده‌های مهم استفاده کرد و می‌توان روش‌هایی مانند SVM^۲ و LS-SVM^۳ را به‌جای شبکه‌ی عصبی به‌کار برد.

* می‌توان روش‌های خطی دیگری همچون حداقل مربعات جزئی و آنالیز اجزای اصلی را جایگزین روش رگرسیون خطی چندگانه کرد و نتایج به‌دست آمده را با هم مقایسه کرد.

¹ Successive Projection Algorithm

² Supported Vector Machine

³ Least Square Supported Vector Machine

فهرست منابع

- [1]- Fengping L., Chenzhong C., Bin Ch.,(2011), "A *Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) Study of Aliphatic Alcohols by the Method of Dividing the Molecular Structure into Substructure*",_Int J Mol Sci., 12(4): 2448–2462.
- [2]- Parsafar G.A., Kalantar Z., (2005), "Extension of linear isotherm regularity to long chain primary, secondly and tertiary alcohols, ketones and 1-carboxylic acids by group contribution method", Fluid phase Equilibria, Vol. 234, pp 11-21.
- [۳]- کلانتر، ز & نصر اصفهانی، ح، (۱۳۸۶)، "پیش‌بینی دانسیته‌ی /- آلکانول‌ها با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار"، پنجمین همایش شیمی دانشگاه پیام نور ایران، ص ۷۵، تهران.
- [4]- Wold S.,(1995), "*Chemometrics; what do we mean with it and what do we want from it*", J.Chemolab.,30, pp 109-115.
- [5]- Brereton R.G., (1990), "*Chemometrics*", Ellis Horwood, Chichester, pp 308.
- [6]- Todeschini R. and Consonni V., (2000), "*Handbook of Molecular Descriptors*", John Wiley-VCH, New York, pp 59.
- [7]- Manssant D.L., Vandeginste B.G., Deming S. N. and kaufman L., (1998) "*Chemometrics, A Text Book*", Elsevier, Amesterdom.
- [8]- Wold S., (1995), "*Chemometrics; What Do We Mean with It and What Do We Want from It*", J. Chemolab., 30, pp 109-115.
- [9]- Howery D.G., Hirsch R.F., (1983), "*Chemometrics in the Chemistry Curriculum*", J. Chem. Ed. 60, pp 656-659.
- [10]- Brown S. D., "*Has the 'Chemometricsrevolution' Ended? Some Views on the Past, Present and Future of Chemometrics*", papers on Chemometrics: Philosophy, History and Directions of InCINC⁹<http://www.emsl.pnl.gov:2080/docs/hncinic/homepage.html>
- [11]- Hemmatinejad B., (2005), "*Chemometrics in Iran*" Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 81, pp 202-208.
- [12]- Mendeleev, D.I., (1891), Principle Of Chemistry. London: Longmans. 5 th ed.
- [13]- Borman, s., (1990). "*New QSAR techniques eyed for environmental assess ments*". Chem. Eng.News,68:20-23.

- [14]- Crum, B.A. and fraser, T.R., (1869),"on the connection between chemical constitution physical action.Part I. On the physiological action of the ammonium based, derived from strychnia, Brucia, Thebabi, codeia, Morphia and Nicotia."trans. Roy.Soc, 25:151-203.
- [15]-. Crum, B.A. and fraser, T.R., (1869),"On the connection between chemical constitution physical action.Part II. On the physiological action of the ammonium based, derived from strychnia, Brucia, Thebabi, codeia, Morphia and Nicotia."trans. Roy.Soc, 25:693-739.
- [16]- Lipnick, R.L. and overton, E., (1986)."Narcosis studies and a contribution to general pharmacology."trends pharmacol.sci.,7:161-164.
- [17]- Freguson, J., (1939),"the use of chemical potentials as indices of toticity."Proc.Roy.Soc., 127:387-404.
- [18]. Free,J.S.and Wilson, J.W., (1964),"A mathematical Contribution to structure-activity studies." J.Med.chem, 7, pp 395-399.
- [19]- Karelson M., (2000),"molecular Descriptors in QSAR/QSPR", Jphn Weily& Sons, New York.
- [20]- Devillers J., Balaban A.T., (2000),"Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR", Taylor & Francis.
- [21]- Karelson M., Lobanov V.S., Katrizky A.R., (1996),"Quantum-chemical descriptors in QSAR/QSPR studies", Chem. Rev., 96,pp 1027-1043.
- [22]-.Todeschini R., Consonni V., (2000), "*Hadbook of molecular descriptors*", in: Mannhold R., Kubinyi H., Timmerman H.(Eds.), *Methods and Principle in Medicinal Chemistry*, Wwiley-VCH, Weinheim.
- [23]- Trinajstic N., (1992), "*Chemical Graph Theory*", CRC Press, Boca Raton,FL.
- [24]- Katrizky A.R., Lobanov V.S., Karelson mk., (1995),"QSPR: the correlation and quantitative prediction of chemical and physical properties from structure", Chem. Soc. Rev. 24, pp 279-287.
- [25]- Katritzky A. R., Maran U., Lobanov V. S., Karelson M., (2000), "*Structurally Diverse Quantitative Structure-Property Relationship Correlations of Technologically Relevant Physical Properties*", J. Chem. Inf. Comp. Soc., 40, pp 1-18.
- [26]- Yaff D.L.(2001)"*A Neyral Network Approach for Estimating Physicochemical Properties using Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR)*", University of California, Los Angeles.

- [27]- Taskinen, J., Yliruusi, J., (2003), "*Prediction of physicochemical properties based on neural network modeling*". Adv. Drug Deliv. Rev. 55, pp 1163-1183.
- [28]- Heravi M., Asadollahi-Baboli, (2008), "*QSAR analysis of platelet-derived growth inhibitors using GA-ANN and shuffling cross validation*", J. QSAR. Comb. Sci., 6, pp 750-757
- [29]- Selassie C.D., Mekapati S.B., Verma R.P., (2002), "*QSAR: then and now*". Curr. Top. Med. Chem. 2, pp 1357-1379.
- [30]- Schneider G., (2004), "*Modeling Structure-Activity Relationship*", Schneider G.; Sung-san So, Landes Bioscience.
- [31]- Introduction to molecular descriptors, <http://WWW.qsar.pe.kr/descriptors>.
- [32]- Guidance Document on the Validation of (Quantitative) Structure-Activity Relationships. (QSAR) Models, Organisation for Economic Cooperation and Development, (2007).
- [33]- HYPERCHEM7.0 Toronto T Canada: HyperCube Inc, <http://www.hyper.com>.
- [34]- Platt J.R., (1947), "Influence of Neighbor Bond properties in Paraffins", J. chem. Phys., pp 419-420.
- [35]- Wiener H., (1947), "*Structural Determination of Paraffin Boiling Points*". J. Am. Chem. Soc., 69, pp 17-20.
- [36]- Topliss J. G. and Edward R. P., (1979), "*Chance Fraction in Studies of Quantitative Structure-Activity Relationships*", J. Med. Chem., 22, pp 1224-1238.
- [37]- مرکز انفورماتیک و توسعه، (۱۳۷۳)، "*راهنمای نرم افزار SPSS/C +*"، چاپ اول، انتشارات راهبرد.
- [38]- فرشادفر ع (۱۳۸۰)، "*اصول و روش‌های پیشرفته آماری (تجزیه رگرسیون)*"، چاپ دوم، انتشارات طاق بستان.
- [39]- Tropsha A., Gramatica P., Gombar V.K., (2003), The importance of being earnest: validation is the absolute essential for successful application and interpretation of QSPR models "QSPR Comb. Sci. 22(1), pp 69-77.
- [40]- Cruciani G., Baroni M., Clementi S., Constantino G., Riganelli D., and Skagerberg B., (1992), "Predictive Ability of Regression Models. Part I: Standard Deviation of Prediction Errors (SDPE)", J. Chemom., 6, pp 335-346.

- [۴۱]- غفاری راد ح.، (۱۳۸۸)، پایان نامه کارشناسی ارشد: "مدل سازی QSPR فاکتور بازداری ترکیبات آلی بر روی فازهای ثابت تری فلئوروپروپیل"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود.
- [42]-Todeschini R, Milano Chemometrics and QSAR Group., <http://www.disat.unimib.it>.
- [43]- Todeschini, R., Consonni, V., Mauri, A., Pavan, M., V. 13-2012, Milano, Italy, Dragon Software version 3.0.
- [44]- SPSS for windows., (Aug. 23, 2008), Statistical Package for IBM PC., SPSS Inc., <http://www.SPSS.com>.
- [45]- MATLAB 7.7(2009B)., The Math works., Inc., Natick., MA, USA.
- [۴۶]- منهاج، م، ب، (۱۳۷۹)، هوش محاسباتی، جلد اول، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (واحد تفرش)، چاپ اول.
- [۴۷]- جنی ر. بینزو. "هوش مصنوعی از الف تا ی" (۱۳۷۶)، بیگدلی قمی س. محسنی م. بدیع ک.، دفتر تحقیقات یاسین، ص ۲۲۴-۲۲۸.
- [۴۸]- حبشی نژاد، م، (۱۳۸۲)، پایان نامه ارشد: "پیش بینی گرانشی گازها در محدوده وسیعی از دما و فشار با استفاده از شبکه های عصبی مصنوعی"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان.
- [49]- Jalali-Heravi M., fatemi M.H.,(1998), "*prediction of flame ionization detector response factors using artificial neural network*", Journal of chromatography A., No. 825,pp 161-169.
- [۵۰]- حقیقی، س، (۱۳۸۰)، پایان نامه ارشد: "اندازه گیری پریدات به روش اسپکتروفلوریمتری و آهن به روش اسپکتروفوتومتری"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان.
- [۵۱]- شاندیزی، ف، (۱۳۷۹)، پایان نامه ارشد: "اندازه گیری دازه گیری اسپکتروفوتومتری منگنز و اندازه گیری همزمان نیکل و کبالت به روش استخراج"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان.
- [52]- Homer J., Sotos G. and Robson., J. H., (1999), "*Artificial neural networks for the prediction of liquid viscosity, density, heat of vaporization, boling point and pitzer's acentric factor*", Phys. Chem. Chem. Phys. Vol. 1, No. 17,pp 4075-4082.

[53]- Marini F., Bucci R., Magri A. L., Magri A.d., "artificial neural network in chemometrics History, example and perspectives" MICROCHEMICAL JOURNAL, Vol.88,pp. 178-185,2008.

[54]- [http:// www. Daneshnameh.roshd.ir/mavara](http://www.Daneshnameh.roshd.ir/mavara).

[۵۵]- منہاج م.، (۱۳۸۷)، "مبانی شبکه های عصبی (هوش محاسباتی)"، جلد اول، چاپ پنجم، مرکز نشر دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران.

[۵۶]- هاگان ت. ه.، دیموث ه.، بیل م.، (۱۳۸۵)، "طراحی شبکه های مصنوعی"، کیا م.، انتشارات کیان رایانه سبز.

[57]- MATLAB, (The Language of Technical Computing), Version 7.6.0.324, (R2008a), The Math Works Inc., February 10, 2008.

[۵۸]- کیا م. (۱۳۷۸)، "شبکه های عصبی در MATLAB"، چاپ اول، انتشارات کیان رایانه، ص ۲۹-

۵۱

[59]- Hegan M.T., Demuth B., Beal M., (1995), Neural network design,PWS.

[۶۰]- سعیدی، مسعود، (۱۳۸۳)، عملیات شبکه های عصبی، جلد دوم، ماهنامه شبکه، شماره ۵۲.

[61]- <http://foram.takdownload.ir/threads/25029>؟-شبکه های مصنوعی-چیست

[۶۲]- فردوسی م. ع.، (۱۳۸۹)، پایان نامه کارشناسی ارشد: "پیش بینی ثابت های هنری بعضی از ترکیبات آلی با استفاده از روش های خطی و غیر خطی QSPR"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

[63]- Kermani B. G., Schiffman S. S., Troy Nagle H., (2005),"Performance of the Levenberg-Marquardt Neural Network Training Method in Electronic Nose Applications", sensors and Actuators B, 110, pp 13-22.

[64]- Wang X. G., Tang Z., Tamura H., Ishii M., (2004), "A Modified Error Function for the Back Propagation Algorithm", Neurocomputing, 57, pp 477- 484.

[65]- Hagan M. T., Menhaj M., (1994),"Training Feed forward Networks with the Marquardt Algorithm", IEEE Trans. Neural Networks, 5, No. 6, pp 989-993

[66]- Jalali-Heravi M., Mani-Varnosfaderani A., (2009), "QSAR Modeling of 1-(3,3-diphenylpropyl)-Piperidinylamides as CCR₅ Modulators Using Multivariate Adaptive

Regression Spline and Bayesian Regularization Genetic Neural Networks", J. QSAR Comb. Sci., 9, pp 946-958.

[67]- Caballero J., Fernandez M., (2006), "*Linear and Nonlinear Modeling of Antifungal Activity of Some Heterocyclic Ring Derivatives Using Multiple Linear Regression and Bayesian-Regularized Neural Networks*"; J. Mol. Model, 12, pp 168-181.

[68]- Caballero J., Fernandez L., Abreu J.I., Fernandez M., (2006), "*Aminoacid Sequence Autocorrelation Vectors and Ensembles of Bayesian-Regularized Genetic Neural Networks for Prediction of Conformational Stability of Human Lysozyme Mutant*", J. Chem. Inf. Model, 46, pp 1255-1268.

[69]- H. Kubata., Y.Tanaka., T.Makita., (1987) , "*Volometric Behavior of Pure Alcohols and Their Water Mixtures Under High Pressure*". Int. J. Thermophys, 8, pp 47-55.

[70]- A. Zuniga-Moreno., L. A. Galicia-Luna., (2002), "*Density measurements of liquid 1-propanol at temperatures between (280 and 393 K) and at pressures up to 10 MPa*", J. Chem. Eng. Data, 47, pp 155-.156.

[71]- A. Zuniga-Moreno., (2007), "*Compressed Liquid densities of 1- butanol and 2- butanol at temperatures from 313 K to 363K and pressures up to 25Mpa*", J. Chem. Thermodynamics, 39, pp 256.-261.

[72]- C. Boned, A. Baylaucq, J. P. Bazile., (2008), "*Liquid density of 1-pentanol at pressures up to 140 MPa and from 293.15 to 403.15 K*", *Fluid Phase Equilibria*, 69., pp 69-74.

[73]- F. Audonnet., A. A. H. Padua., (2002), "*Density and viscosity of Mixtures of n-Hexan and 1- Hexanol from 303 to 423 K*", J. Chem. Eng. Data, 23, pp 1530-1537.

[74]- A. Zuniga-Moreno., J.Chem., (2008), "*Densities and derived Thermodynamic properties of 1-heptanol and 2- heptano at temperatures from 313 to 363 K and pressures up to 22 MPa*", Thermodynamics, 40, 96-106.

[75]- S. Matsuo., T.Makita., (1989), "*Volumetric properties of 1- Alkanols at Temperatures in the range 298-348 K and Pressures up to 40 MPa*", Int. J. Thermophys., 10, pp 885-891.

[76]- M. Dzida, J. Chem. Eng. Data., (2007), "*Calculated Densities of Alcohols at Pressures up to 100 Mpa and within the Temprature Limits of 293 and 318*" , 52, pp 521-524.

Abstract

An artificial neural network (ANN) model in quantitative structure property relationship (QSPR) was developed for density prediction of 10 alcohols over a wide range of pressure molecular (0.1-300 MPa) and temperatures (273.15-338.15K). A large number of descriptors were calculated by Dragon software and a subset of calculated descriptors was selected from 18 class of Dragon descriptors with a stepwise multiple linear regression (MLR) as a feature selection technique. The selected descriptor that appear in multiple linear regression models is: HGM (Geometric mean on the leverage magnitude). Two calculated and two experimental descriptors contain: pressure and temperature, were selected as the most feasible descriptors in the construction of artificial neural network (ANN) models. The data set was randomly divided into three subset: training (396 point), validation (86) and test set (86). After training and optimization of the ANN parameters, the performance of the model was investigated by the test set. The mean squares error (MSE) were 0.3835 and 0.036 respectively, for the test data set in MLR and ANN methods. The results obtained using ANN were compared with the experimental values as well as with those obtained using regression models and showed the superiority of ANN over linear multiple regression model.

Keywords: Artificial neural network (ANN) – multiple linear regression (MLR) – descriptors - alcohols



Shahrood University of Technology

Faculty of Chemistry

**The Quantitative Study Structure- Density Of Alkanols
Using Linear And Nonlinear Methods**

Leila Mohammadi

Supervisor:

Dr. Z. Kalantar

Advisor:

Dr. H. Nikoofard

Date: oct – 2011