

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده شیمی

گروه شیمی فیزیک

عنوان :

مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار - خاصیت هدایت گرمایی برای آلکان‌ها با استفاده از

روش‌های خطی و غیر خطی

دانشجو: اعظم ایزدی یزدان آبادی

استاد راهنما:

دکتر زهرا کلانتر

استاد مشاور:

دکتر ناصر گودرزی

پایان‌نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

بهمن ماه ۱۳۹۱

تقدیم به:

پدرم به استواری کوه، مادرم به زلالی چشمه، همسرم به صمیمیت باران، خواهران و برادران عزیزم که وجودشان شادی بخش و صفایشان

مایه آرامش من است.

## شکر و قدردانی:

حال که به یاری پروردگار، این دوره از تحصیلات خود را به پایان رساندم، بر خود لازم می‌دانم از زحمات بی‌شائبه‌ی پدر و مادر دلسوز و فداکارم، برداران و خواهران مهربانم و همسر عزیزم که همواره مشوق و پشتیبان من بودند و صبورانه ادامه این راه را برایم هموار نمودند تشکر کنم.

از زحمات فراوان استاد فرهیخته و توانمند سرکار خانم دکتر کلانتر که راهنمایی‌ها و نظرات ارزنده، صبر و حوصله فراوان ایشان نقش مهمی در به ثمر رساندن این پروژه داشت، صمیمانه تشکر می‌کنم.

از استاد مشاور بزرگواریم جناب آقای دکتر گودرزی نیز نهایت قدردانی را دارم.

سلامتی و موفقیت همیشگی این بزرگواران را از درگاه یزدان پاک خواستارم.

چکیده:

هدف اصلی از کار حاضر گسترش روش رابطه‌ی کمی ساختار- خاصیت (QSPR) با استفاده از شبکه‌ی عصبی مصنوعی برای پیش‌بینی هدایت گرمایی آلکان‌های خطی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار است. مدل‌سازی برای پیش‌بینی این خاصیت با استفاده از سه روش انتخاب توصیفگر شامل رگرسیون خطی چندگانه مرحله‌ای (MLR)، اتحاد جداسازی داده و انتخاب خاصیت (CDFS) و الگوریتم ژنتیک (GA) انجام گرفت. سپس توصیفگرهای انتخابی هر روش به عنوان ورودی شبکه‌ی عصبی مصنوعی سه لایه مورد استفاده قرار گرفتند.

با استفاده از روش مولفه‌های اساسی سری داده‌ها به سه دسته آموزش (۷۹۸ نقطه داده)، ارزیابی (۲۰۱ نقطه داده) و سری تست (۲۱۶ نقطه داده) دسته‌بندی شدند.

بعد از آموزش و بهینه‌سازی پارامترهای شبکه (شامل وزن‌ها و بایاس‌ها)، مدل‌های بهینه شده برای ارزیابی داده‌های سری تست به کار گرفته شدند. میانگین مربعات خطای بدست آمده از سه روش MLR-ANN، CDFS-ANN و GA-ANN برای سری تست به ترتیب مقادیر ۱/۱۷۵۷، ۱/۰۴۱۱ و ۱/۱۰۷۹ است. نتایج نشان می‌دهند که هر سه مدل غیر خطی طراحی شده برای پیش‌بینی هدایت گرمایی آلکان‌های خطی نتایج خوبی ارائه می‌کنند اما مدل بهینه‌شده با روش CDFS-ANN تا حدی نتایج بهتری دارد.

**کلید واژه‌ها:** رابطه‌ی کمی ساختار- خاصیت (QSPR)، شبکه‌ی عصبی مصنوعی (ANN)، هدایت گرمایی (h)، رگرسیون چندگانه خطی مرحله‌ای (MLR)، اتحاد جداسازی داده و انتخاب خاصیت (CDFS)، الگوریتم ژنتیک (GA)

عنوان مقالات مستخرج از این پایان نامه که در همایش‌ها ارائه شده است:

Quantitative structure–property relationship studies of thermal conductivity for linear alkanes using artificial neural network

نهمین همایش ملی شیمی پیام‌نور، دانشگاه پیام‌نور بهشهر.

Prediction of thermal conductivity for n-Alkanes from their structural driven descriptors

پنجمین کنفرانس بین‌المللی ریاضی در شیمی یزد

## فهرست مطالب

### فصل اول: هدایت گرمایی

- ۱-۱-۱- مقدمه: ..... ۲
- ۱-۱-۱- خواص انتقالی ..... ۲
- ۲-۱- روش‌های اندازه‌گیری هدایت گرمایی ..... ۴
- ۱-۲-۱- روش سیم داغ گذار برای اندازه‌گیری هدایت گرمایی سیالات ..... ۵
- ۳-۱- روش‌های پیش‌بینی هدایت گرمایی ..... ۶
- ۱-۳-۱- پیش‌بینی هدایت گرمایی مایعات با استفاده از توابع همبستگی ..... ۶
- ۲-۳-۱- محاسبه هدایت گرمایی با استفاده از تئوری انسکوگ توسعه یافته ..... ۸
- ۳-۳-۱- پیش‌بینی هدایت گرمایی با شبکه‌ی عصبی مصنوعی ..... ۹

### فصل دوم: بخش تئوری

- ۲-۱- مقدمه ..... ۱۲
- ۲-۲- کمومتریکس ..... ۱۲
- ۳-۲- نگاهی کوتاه به رابطه‌ی کمی ساختار- خاصیت (QSPR) ..... ۱۴
- ۱-۳-۲- انتخاب سری داده‌ها ..... ۱۵
- ۲-۳-۲- انواع توصیفگرها ..... ۱۶
- ۱-۲-۳-۲- توصیفگرهای توپولوژیکی ..... ۱۷
- ۲-۲-۳-۲- توصیفگرهای هندسی ..... ۱۹
- ۳-۲-۳-۲- توصیفگرهای الکترونی ..... ۲۰
- ۴-۲-۳-۲- توصیفگرهای فیزیکوشیمیایی ..... ۲۱

- ۲۱-۲-۳-۵- توصیفگرهای توسعه یافته.....
- ۲۲-۲-۳-۳- حذف توصیفگرهای اضافی.....
- ۲۲-۲-۳-۴- تقسیم بندی سری داده-ها به سری های آموزش، ارزیابی و تست.....
- ۲۴-۲-۳-۵- انتخاب توصیفگرهای نهایی.....
- ۲۴-۲-۳-۵-۱- رگرسیون خطی چندگانه.....
- ۲۹-۲-۳-۵-۲- روش CDFS.....
- ۳۰-۲-۳-۵-۳- الگوریتم ژنتیک.....
- ۳۱-۲-۳-۵-۳- الف: وراثت و انتخاب طبیعی.....
- ۳۲-۲-۳-۵-۳- ب: الگوریتم ژنتیک.....
- ۳۵-۲-۳-۵-۳- ج: ساختار الگوریتم ژنتیکی.....
- ۳۹-۲-۳-۵-۳- د: ارزیابی کارایی الگوریتم ژنتیکی.....
- ۴۰-۲-۳-۶- ساخت مدل.....
- ۴۱-۲-۳-۷- ارزیابی اعتبار مدل های انتخاب شده.....
- ۴۲-۲-۴-۴- شبکه های عصبی مصنوعی.....
- ۴۲-۲-۴-۱- سیستم عصبی بدن انسان.....
- ۴۳-۲-۴-۱-۱- نرون زیستی.....
- ۴۴-۲-۴-۲- تاریخچه ی شبکه های عصبی مصنوعی.....
- ۴۵-۲-۴-۳- مدل یک نرون مصنوعی.....
- ۴۶-۲-۴-۴- تابع فعال سازی.....
- ۴۷-۲-۴-۵- ساختار شبکه های عصبی مصنوعی.....
- ۴۸-۲-۴-۶- یادگیری و یادآوری در شبکه های عصبی مصنوعی.....



۷-۴-۲- کاربردهای شبکه‌های عصبی مصنوعی ..... ۵۱

## فصل سوم: بخش محاسبات

۱-۳- مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار- خاصیت ..... ۵۳

۳-۱-۱- جمع‌آوری سری داده‌ها ..... ۵۳

۳-۱-۲- رسم و بهینه‌سازی ساختار مولکول‌ها ..... ۵۴

۳-۱-۳- محاسبه‌ی توصیفگرها و ارزیابی و تجزیه تحلیل آن‌ها ..... ۵۴

۳-۱-۴- تقسیم‌بندی سری داده‌ها ..... ۵۵

۳-۱-۵- انتخاب توصیفگرهای مناسب ..... ۵۶

۳-۱-۵-۱- انتخاب توصیفگرهای معتبر به روش رگرسیون مرحله‌ای ..... ۵۶

۳-۱-۵-۲- انتخاب توصیفگرهای معتبر به روش CDFS ..... ۵۸

۳-۱-۵-۳- انتخاب توصیفگرهای معتبر به روش الگوریتم ژنتیک ..... ۶۰

۳-۱-۶- مدل‌سازی غیر خطی با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی ..... ۶۲

۳-۱-۶-۱- بهینه‌سازی مدل شبکه عصبی مصنوعی با توصیفگرهای انتخابی به روش رگرسیون مرحله‌ای ..... ۶۲

۳-۱-۶-۲- بهینه‌سازی مدل با شبکه عصبی مصنوعی با توصیفگرهای CDFS ..... ۶۹

۳-۱-۶-۳- بهینه‌سازی مدل شبکه عصبی مصنوعی با توصیفگرهای الگوریتم ژنتیک ..... ۷۳

۳-۱-۷- ارزیابی مدل‌های غیر خطی ..... ۸۰

۳-۱-۷-۱- ارزیابی مدل‌های غیر خطی با استفاده از نمودار برگشتی ..... ۸۰

۳-۱-۷-۲- ارزیابی مدل‌های غیر خطی با استفاده از نمودار خطای باقیمانده ..... ۸۴

۳-۱-۷-۳- ارزیابی مدل‌های غیر خطی با استفاده از آزمون Y- تصادفی ..... ۸۸

۳-۱-۷-۴- ارزیابی مدل‌های غیر خطی با استفاده از روش حذف گروهی ..... ۸۹

۸۹.....	۳-۱-۸- بررسی ارتباط توصیفگرهای معتبر شبکه‌ی بهینه با هدایت گرمایی
۸۹.....	۳-۱-۸-۱- توصیفگرهای 3D- MORSE
۹۰.....	۳-۱-۸-۲- توصیفگرهای GETAWAY
۹۱.....	۳-۱-۸-۳- توصیفگرهای 2D- autocorrelation
۹۳.....	۳-۲- نتیجه‌گیری
۹۳.....	۳-۳- آینده‌نگری
۹۵.....	پیوست
۱۲۷.....	مراجع

## فهرست جداول

- جدول (۱-۲): مراحل مدل سازی در یک مطالعه‌ی QSPR..... ۱۵
- جدول (۲-۲): لیست اندیس‌های توپولوژیکی..... ۱۹
- جدول (۳-۲): برخی از توصیفگرهای الکترونی..... ۲۱
- جدول (۴-۲): مقایسه وراثت و الگوریتم ژنتیکی..... ۳۵
- جدول (۱-۳): سری داده‌های جمع‌آوری شده..... ۵۳
- جدول (۲-۳): نتایج تجزیه و تحلیل توصیفگرها..... ۵۴
- جدول (۳-۳): مقایسه‌ی آماره‌ی سری ارزیابی مدل‌های بدست آمده از روش MLR..... ۵۷
- جدول (۴-۳): نماد، گروه، نام کامل و اثر متوسط توصیفگرهای مستقل انتخاب شده توسط MLR..... ۵۷
- جدول (۵-۳): ماتریس همبستگی میان توصیفگرهای انتخاب شده در MLR..... ۵۷
- جدول (۶-۳): توصیفگرهای بهینه در ۱۶ گروه متفاوت..... ۵۹
- جدول (۷-۳): نماد، گروه، نام کامل و اثر متوسط توصیفگرهای مستقل انتخاب شده توسط CDFS..... ۵۹
- جدول (۸-۳): ماتریس همبستگی میان توصیفگرهای انتخاب شده در CDFS..... ۵۹
- جدول (۹-۳): توصیفگرهای انتخابی الگوریتم ژنتیک..... ۶۰
- جدول (۱۰-۳): نماد، گروه، نام کامل و اثر متوسط توصیفگرهای مستقل انتخاب شده توسط GA..... ۶۱
- جدول (۱۱-۳): ماتریس همبستگی میان توصیفگرهای انتخاب شده با روش GA..... ۶۱
- جدول (۱۲-۳): توابع و پارامترهای بهینه‌ی شبکه‌های آموزشی SR-ANN براساس MSE در مقدار  $\mu$  ثابت ۰/۰۰۰۵..... ۶۳
- جدول (۱۳-۳): توابع و مقادیر پارامترهای بهینه شده SR-ANN..... ۶۹
- جدول (۱۴-۳): مقادیر MSE حاصل از سری ارزیابی برای شبکه‌ای با تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی، الگوریتم آموزشی بایزین، تعداد ورودی ثابت ۷ و با تعداد دور آموزشی متفاوت و تعداد گره‌های متفاوت در لایه میانی..... ۷۰
- جدول (۱۵-۳): مقادیر MSE حاصل از سری ارزیابی برای شبکه‌ای با تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی، الگوریتم آموزشی لونیبرگ-مارکوات، تعداد ورودی ثابت ۷ و با تعداد دور آموزشی متفاوت و تعداد گره‌های متفاوت در لایه میانی..... ۷۰
- جدول (۱۶-۳): مقادیر MSE حاصل از سری ارزیابی برای شبکه‌ای با تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی، الگوریتم آموزشی بایزین، تعداد ورودی ثابت ۷ و با تعداد دور آموزشی متفاوت و تعداد گره‌های متفاوت در لایه میانی..... ۷۱

جدول (۳-۱۷) : مقادیر MSE حاصل از سری ارزیابی برای شبکه‌ای با تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی، الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوات، تعداد ورودی ثابت ۷ و با تعداد دور آموزشی متفاوت و تعداد گره‌های متفاوت در لایه میانی	۷۱
جدول (۳-۱۸): توابع و مقادیر پارامترهای بهینه شده CDFS-ANN	۷۳
جدول (۳-۱۹): توابع و پارامترهای بهینه‌ی شبکه‌های آموزشی براساس MSE در مقدار $\mu$ ثابت ۰/۰۰۰۵	۷۸
جدول (۳-۲۰): توابع و مقادیر پارامترهای بهینه شده‌ی GNN	۷۹
جدول (۳-۲۱): پارامترهای آماری سری‌های ارزیابی و تست	۸۰
جدول (۳-۲۲): مقادیر $R^2$ با روش آزمون $Y$ -تصادفی برای سری ارزیابی و تست سه روش SR-ANN ، CDFS-ANN و GNN	۸۸
جدول (۳-۲۳): مقادیر توصیفگرهای تئوری انتخاب‌شده با روش CDFS	۹۲
جدول (۱-پ): گزارش داده‌های تجربی و نتایج محاسباتی از روش حذف گروهی برای مولکول‌های مختلف	۹۵

## فهرست شکل‌ها

- شکل (۱-۲): شمای یک کروموزوم ۶ بیتی..... ۳۳
- شکل (۲-۲): شمایی از چرخ گردان..... ۳۷
- شکل (۳-۲): تقسیم بازه ۰ و ۱ متناسب با  $C_i$  هر کروموزوم..... ۳۷
- شکل (۴-۲): همبندی تک نقطه‌ای بین دو والد..... ۳۸
- شکل (۵-۲): شمایی از نرون زیستی..... ۴۳
- شکل (۶-۲): شمای نرون مصنوعی ژام..... ۴۶
- شکل (۷-۲): شمایی از یک شبکه عصبی سه لایه..... ۴۸
- شکل (۱-۳): پراکندگی داده‌ها بر روی نمودار PC..... ۵۵
- شکل (۲-۳): نمودارهای (الف) تعداد توصیفگر، (ب) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ج) دور آموزش، (د) MSE سری ارزیابی و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان می‌دهد، برای تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین..... ۶۴
- شکل (۳-۳): نمودارهای (الف) تعداد توصیفگر، (ب) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ج) دور آموزش، (د) MSE سری ارزیابی و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان می‌دهد، برای تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی لونیگ-مارکوارت..... ۶۵
- شکل (۴-۳): نمودارهای (الف) تعداد توصیفگر، (ب) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ج) دور آموزش، (د) MSE سری ارزیابی و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان می‌دهد، برای تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین..... ۶۶
- شکل (۵-۳): نمودارهای (الف) تعداد توصیفگر، (ب) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ج) دور آموزش، (د) MSE سری ارزیابی و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان می‌دهد، برای تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی لونیگ-مارکوارت..... ۶۷
- شکل (۶-۳): نمودار میانگین مربعات خطا برای سری ارزیابی بر حسب تعداد دوره‌های آموزش متفاوت الف) برای گام ۱۰ و ب) برای گام ۲..... ۶۸
- شکل (۷-۳): نمودار میانگین مربع خطای حاصل از سری ارزیابی بر حسب پارامتر  $\mu$ ..... ۶۹

- شکل (۳-۸): نمودار میانگین مربعات خطا برای سری ارزیابی بر حسب تعداد دوره‌های آموزش متفاوت الف) برای گام ۱۰ و ب) برای گام ۲..... ۷۲
- شکل (۳-۹): نمودار میانگین مربع خطای حاصل از سری ارزیابی بر حسب پارامتر  $\mu$ ..... ۷۳
- شکل (۳-۱۰): نمودارهای الف) تعداد توصیفگر، ب) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، ج) دور آموزش، د) MSE سری ارزیابی و ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان میدهد، برای تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین..... ۷۴
- شکل (۳-۱۱): نمودارهای الف) تعداد توصیفگر، ب) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، ج) دور آموزش، د) MSE سری ارزیابی و ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان میدهد، برای تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی لونیبرگ-مارکوارت..... ۷۵
- شکل (۳-۱۲): نمودارهای الف) تعداد توصیفگر، ب) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، ج) دور آموزش، د) MSE سری ارزیابی و ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان میدهد، برای تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین..... ۷۶
- شکل (۳-۱۳): نمودارهای الف) تعداد توصیفگر، ب) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، ج) دور آموزش، د) MSE سری ارزیابی و ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان میدهد، برای تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی لونیبرگ-مارکوارت..... ۷۷
- شکل (۳-۱۴): نمودار میانگین مربعات خطا برای سری ارزیابی بر حسب تعداد دوره‌های آموزش متفاوت با گام ۲..... ۷۸
- شکل (۳-۱۵): نمودار میانگین مربع خطای حاصل از سری ارزیابی بر حسب پارامتر  $\mu$ ..... ۷۹
- شکل (۳-۱۶): نمودار برگشتی حاصل از SR-ANN برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست..... ۸۱
- شکل (۳-۱۷): نمودار برگشتی حاصل از CDFS-ANN برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست..... ۸۲
- شکل (۳-۱۸): نمودار برگشتی حاصل از GNN برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست..... ۸۳
- شکل (۳-۱۹): نمودار خطای باقیمانده حاصل از SR-ANN برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست..... ۸۵
- شکل (۳-۲۰): نمودار خطای باقیمانده حاصل از CDFS-ANN برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست..... ۸۶
- شکل (۳-۲۱): نمودار خطای باقیمانده حاصل از GNN برای الف) سری ارزیابی و ب) سری تست..... ۸۷

# فصل اول

## هدایت گرمایی

## ۱-۱- مقدمه:

در ترمودینامیک، گرما شکلی از اشکال انتقال انرژی است که از مرز سیستم ترمودینامیکی به واسطه اختلاف دمایی که بین سیستم و محیط اطرافش وجود دارد عبور می‌نماید. مسیر حرکت گرما به سمت گرادیان منفی درجه حرارت است بدین معنی که گرما از ناحیه‌ای با دمای بالاتر به ناحیه‌ای با دمای پایین‌تر جریان می‌یابد. در انتقال حرارت به مطالعه‌ی تبادل انرژی ناشی از اختلاف دما در اجسام پرداخته می‌شود [۱]. قانون هدایت حرارتی فوریه<sup>۱</sup> که جزء قوانین اساسی و اصلی انتقال حرارت می‌باشد و بر مبنای مفهوم پیوستگی پایه‌ریزی شده است و زیر بیان می‌شود:

$$\frac{dq}{dt} = \lambda A \frac{dT}{dx} \quad (1-1)$$

که در این رابطه ثابت تناسب  $\lambda$ ، هدایت گرمایی جسم نام دارد و واحد آن در سیستم بین‌المللی SI،  $(W/m.K)$  می‌باشد. این ثابت یک خاصیت شدتی است که مقدار آن به دما، فشار و ساختار ماده بستگی دارد.  $dq$  مقدار انرژی گرمایی‌ای است که در زمان  $dt$  از صفحه‌ای با سطح  $A$  و عمود بر محور  $x$  می‌گذرد. هدایت گرمایی مایعات یکی از خواص انتقالی مهم مورد نیاز در مهندسی طراحی هر فرآیند حرارتی مانند طراحی دیگ‌های بخار، چگالنده‌ها<sup>۲</sup> و مبدل‌های حرارتی، رادیاتورها و ... است [۲].

## ۱-۱-۱- خواص انتقالی

سه زمینه از موضوعات مهندسی تحت عنوان پدیده‌های انتقال شناخته شده و مطالعه می‌شود.

این سه زمینه عبارتند از :

### ۱- انتقال حرارت

---

1- Fourier's law

2- Condenser



۲- انتقال جرم یا نفوذ

۳- انتقال اندازه حرکت یا دینامیک سیالات

به علت شباهتی که این فرایندها دارند، درک یک فرایند انتقال می‌تواند منجر به درک سایر فرایندهای انتقال شود. فرایندهای انتقال در سیستم‌های غیر تعادلی رخ می‌دهند، یعنی اگر ماده یا انرژی یا هر دو بین سیستم و محیط آن و یا بین قسمتی از سیستم و قسمت دیگر مبادله شوند، این سیستم در تعادل نیست و فرایندهای انتقال در آن در حال انجام هستند. شاخه‌ای از علم سینتیک که سرعت و نحوه‌ی عمل فرایندهای انتقال در این مورد را بررسی می‌کند، سینتیک فیزیکی نام دارد. ممکن است ماده یا انرژی مبادله نشوند ولی باز هم سیستم در تعادل نباشد، چون بعضی از گونه‌های شیمیایی دورن سیستم ترکیب شده و گونه‌های دیگری را تولید می‌کنند. بررسی سرعت و نحوه‌ی عمل واکنش‌های شیمیایی در شاخه‌ی دیگری از سینتیک به نام سینتیک شیمیایی یا سینتیک واکنش انجام می‌گیرد. پس در اینجا فقط به بحث در محدوده‌ی سینتیک فیزیکی می‌پردازیم.

همانطور که قبلاً اشاره شد، چند نوع فرایند انتقال وجود دارد که در اینجا علاوه بر فرایند انتقال حرارت، بقیه موارد به طور مختصر بیان می‌شود.

الف- انتقال جرم: اگر اختلاف غلظت ماده در نواحی مختلف یک محلول وجود داشته باشد، در این سیستم تعادل مادی برقرار نیست و ماده از ناحیه غلیظ‌تر به ناحیه رقیق‌تر منتقل می‌شود و این انتقال تا زمانی ادامه می‌یابد که غلظت آن ماده در نواحی مختلف یکسان شود. این جریان ماده، نفوذ یا انتقال جرم نام دارد.

ب- انتقال اندازه حرکت: اگر در یک سیستم نیروهای نابرابر و خنثی نشده‌ای وجود داشته باشد، سیستم در تعادل مکانیکی نبوده و قسمت‌هایی از آن شروع به حرکت می‌کنند. این جریان نیرو، انتقال اندازه حرکت نام دارد.

ج- انتقال حرارت: اگر بین سیستم و محیط آن و یا درون سیستم، اختلاف دمایی وجود داشته باشد، سیستم در تعادل حرارتی نبوده و انتقال حرارت رخ می‌دهد. حرارت به سه طریق هدایت، همرفت و تابش می‌تواند منتقل شود. تمام این پدیده‌ها نیاز به وجود اختلاف دمایی دارند [۳].

به دلیل اینکه بحث مورد مطالعه در تحقیق حاضر هدایت گرمایی است، به دو موضوع همرفت و تابش به طور مختصر اشاره می‌شود.

تابش عبارت است از نشر انرژی توسط ماده به صورت امواج الکترومغناطیس (یا فوتون‌ها) که به علت تغییر ساختار الکترونی اتم‌ها یا مولکول‌های آن ماده رخ می‌دهد. برخلاف هدایت و همرفت، این حالت از انتقال حرارت نیازی به محیط مادی ندارد. در واقع انتقال انرژی از طریق تابش، در خلاء بهتر و سریعتر صورت می‌گیرد.

جابجایی یا همرفت چیزی جز انتقال گرما از یک مکان به مکان دیگر به وسیله حرکت سیال نیست. بنابراین همرفت فرایندی است که در آن انتقال گرما از طریق انتقال جرم اتفاق می‌افتد [۱].

هدایت گرمایی، عبارتست از انتقال انرژی از ذرات پراثرژی یک جسم به ذرات کم‌انرژی‌ای که در همسایگی آن‌ها قرار دارند. این انتقال انرژی در اثر برهمکنش بین ذرات رخ می‌دهد. هدایت می‌تواند در جامدات، مایعات و گازها انجام شود. در گازها، مولکول‌ها حرکت تصادفی دارند و برخورد آن‌ها منجر به هدایت می‌شود. در مایعات برخورد‌های پشت سرهم بین مولکول‌های لایه‌های مجاور، هدایت را ممکن می‌سازد و در جامدات ارتعاش مولکول‌های شبکه و انرژی که توسط الکترون‌های آزاد منتقل می‌شود، عامل هدایت است [۳].

## ۲-۱- روشهای اندازه‌گیری هدایت گرمایی

تمام فرایندهای شیمیایی با تولید یا جذب انرژی به صورت گرما همراه هستند که این انتقال گرما غالباً به دو روش هدایت و همرفت رخ می‌دهد. برای اندازه‌گیری هدایت گرمایی سیالات در

مراجع علمی روش‌های متفاوتی ذکر شده است که از آن جمله می‌توان به تکنیک میزان شار گرمایی<sup>۱</sup>، تکنیک تشعشع<sup>۲</sup>، روش منبع مسطح گذار<sup>۳</sup>، روش سیم داغ گذار<sup>۴</sup> اشاره کرد [۴]. داده‌های تجربی هدایت گرمایی مورد استفاده در این تحقیق از روش دینامیکی سیم داغ گذار محاسبه شده است که در ادامه توضیح مختصری در مورد این روش خواهیم داد [۳].

## ۱-۲-۱- روش سیم داغ گذار برای اندازه‌گیری هدایت گرمایی سیالات

در گذشته به علت کمبود و فقدان داده‌های تجربی صحیح و برنامه پیش‌بینی قابل اطمینان رسانایی گرمایی مایعات با صحت کافی به سختی نشان داده می‌شود. در دهه ۱۹۷۰ داده‌هایی با صحت بالا در دامنه‌ی وسیع دما و فشار در آزمایشگاه‌های بولدر، لیزبون و لندن<sup>۵</sup> با روش سیم داغ گذار بدست آمد [۵]. روش سیم داغ گذار دقیق‌ترین روش تجربی اندازه‌گیری هدایت گرمایی است و به کمک آن می‌توان هدایت گرمایی سیالات خالص و مخلوط‌هایشان را در حالت مایع، بخار و سیال فوق بحرانی در محدوده‌ی نسبتاً وسیعی از دما و فشار اندازه‌گیری کرد. سل اندازه‌گیری شامل استوانه‌ای است که یک سیم بسیار نازک، از وسط آن عبور کرده است. سیم داغ بسته به نوع سیال از جنس تنگستن با قطر ۴ میکرون، پلاتین با قطر ۱۲/۷ میکرون و ... انتخاب می‌شود. این سیم به طور الکتریکی گرم شده و پس از اینکه حالت پایا برقرار شد، دمای سیم از طریق تعیین مقاومت الکتریکی آن، اندازه‌گیری می‌شود. از طرف دیگر دمای جداره استوانه توسط یک حمام که دمای آن با ترموستات ثابت نگاه‌داشته شده، کنترل می‌شود [۳].

---

1- Heat flux meter techniques  
2- Flash technique  
3- Transient plane-source method  
4- Transient hotwire method  
5- Boulder, Lisbon, and London

علت استفاده از واژه «گذار» در این روش، آن است که توان الکتریکی بطور ناگهانی به سیم داده شده و اندازه‌گیری اختلاف دمای سیم در محدوده‌ی کوچک زمانی (از مرتبه‌ی یک ثانیه) انجام می‌شود. در این روش در زمان کوتاه  $t$ ، گرمای ثابت بر واحد طول سیم،  $q$ ، اعمال می‌شود. سپس هدایت گرمایی از شیب نمودار  $\Delta T$  بر حسب نمودار  $\ln(t)$  طبق رابطه‌ی زیر تعیین می‌شود:

$$\Delta T = \frac{q}{4\pi\lambda} \ln\left(\frac{4at}{r_0 c}\right) \quad (2-1)$$

در این رابطه،  $a$  نفوذپذیری گرمایی سیال،  $a = \frac{\lambda}{\rho C_p}$ ،  $r_0$  شعاع سیم،  $c$  ثابت اولر و برابر  $1/781$  می‌باشد. در این روش پاسخ دمایی بدست آمده از مرتبه‌ی چند کلون است و به علت اینکه در نزدیکی نقطه‌ی بحرانی، همرفت به راحتی اتفاق می‌افتد، این روش نتایج دقیقی نمی‌دهد [۳].

### ۳-۱- روش‌های پیش‌بینی هدایت گرمایی

#### ۳-۱-۱- پیش‌بینی هدایت گرمایی مایعات با استفاده از توابع همبستگی

اکثر نظریه‌های ارائه شده برای پیش‌بینی هدایت گرمایی مایعات، براساس مدل بریچمن<sup>۱</sup> استوارند. طبق این مدل مولکول‌های مایع به عنوان نوسانگرهایی در نظر گرفته می‌شوند که در موقعیت تعادلی خود در حال ارتعاش هستند و انتقال انرژی در مولکول‌های واقع در لایه‌ی گرم‌تر به مولکول‌های واقع در لایه‌ی سردتر در اثر همین ارتعاش‌های مولکولی انجام می‌شود. طبق این مدل برای  $\lambda$  می‌توان نوشت:

$$\lambda = 4.04 \times 10^{-16} \frac{u}{l^2} \quad (3-1)$$

---

1- Bridgman

که  $u$  سرعت صوت در مایع و  $l$  فاصله بین دو مولکول مجاور است. حال اگر یک مول مایع در نظر گرفته شود، حجم آن  $V = \frac{m}{\rho}$  می‌باشد و مولکول‌های مایع در یک شبکه‌ی مکعبی آرایش دارند که طول هر ضلع مکعب بطور متوسط برابر است با:

$$l = \sqrt[3]{\frac{M}{N_A \rho}} \quad (4-1)$$

در سال ۲۰۰۲، نجفی و همکارانش با بررسی رفتار دمایی هدایت گرمایی مایعات، تابع نمایی زیر را با ۶ پارامتر تنظیم‌پذیر برای پیش‌بینی هدایت گرمایی این مواد ارائه دادند.

$$\lambda = ae^{bT^*} \left( \frac{c + \rho^* g}{1 + h\rho^* l} \right) \quad (5-1)$$

که در این رابطه  $T^* = \frac{T}{T_c}$  و  $\rho^* = \frac{\rho}{\rho_c}$  می‌باشند و پارامترهای تنظیم‌پذیر  $a, b, c, g, h$  و  $l$  به کمک روش حداقل مربعات خطا تنظیم شده‌اند. از این معادله برای تعیین هدایت گرمایی مایعات در محدوده‌ی دمایی بین نقطه ذوب تا دمای بحرانی استفاده شده است [۳].

همچنین در همین مرجع رابطه‌ی ساده‌تری با سه پارامتر قابل تنظیم  $a, b, c$  برای محاسبه هدایت گرمایی مایعات، ارائه شده است:

$$\lambda = ae^{bT^*} \sinh(\rho^* c) \quad (6-1)$$

که ضرایب  $a, b, c$  با روش حداقل مربعات خطا بدست آمده‌اند [۳].

### ۱-۳-۲- محاسبه هدایت گرمایی با استفاده از تئوری انسکوگ توسعه یافته<sup>۱</sup>

هدایت گرمایی سیالات چگال طبق نظریه‌ی انسکوگ توسعه یافته چنین محاسبه می‌شود [۶ و

:۵۵]

$$\lambda = \lambda_0 b_0 \rho \left[ \frac{l}{Y} + 1.2 + 0.755Y \right] \quad (7-1)$$

که در آن  $\lambda$  هدایت گرمایی سیال چگال،  $\lambda_0$  هدایت گرمایی گاز کره سخت رقیق،  $b_0$  حجم ممنوعه و  $\rho$  دانسیته است و مقدار  $Y$  نیز از معادله‌ی زیر بدست می‌آید:

$$Y = \frac{l}{\rho RT} \left[ T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_{\rho} \right] - 1 \quad (8-1)$$

بنابراین طبق این رابطه برای پیش‌بینی هدایت گرمایی سیالات چگال باید مقادیر  $\lambda_0$ ،  $b_0$ ، دانسیته و

ضریب فشار حرارتی  $a = \frac{\lambda}{\rho C_p}$  برای سیال مورد نظر در هر حالت ترمودینامیکی معین در اختیار

باشد. اصلی‌ترین محدودیت معادله‌ی (۷-۱)، عدم وجود مقدار تجربی برای  $b_0$  اکثر ترکیبات می‌باشد.

پارساfer و کلانتر در سال ۲۰۰۷ نشان دادند که می‌توان مقادیر  $\lambda_0$  و  $b_0$  را از نظریه کرات سخت

جایگزین نمود زیرا سیالات در دانسیته‌های بالا تقریباً رفتار کره‌ی سخت از خود نشان می‌دهند. طبق

نظریه‌ی جنبشی گازها، هدایت گرمایی گاز کره‌ی سخت رقیق ( $\lambda_0$ ) چنین به دست می‌آید:

$$\lambda_0 = \frac{5}{16} \left( C_{V,m} + \frac{9}{4} R \right) \left( \frac{RT}{\pi M} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{l}{N_A \sigma^2} \quad (9-1)$$

که در آن  $M$  جرم مولکولی،  $R$  ثابت گازها،  $T$  دما،  $N_A$  عدد آووگادرو و  $\sigma$  قطر مولکولی است. آن‌ها با جایگذاری عبارت فوق برای  $\lambda_0$  و  $\left(\frac{2}{3}\right)\pi\sigma^3$  برای  $b_0$  در معادله‌ی (۷-۱) عبارت زیر را برای پیش‌بینی هدایت گرمایی سیالات چگال ارائه کردند.

$$\frac{\eta Y}{\sqrt{T}\rho} = \left(\frac{2}{3}\pi\sigma^3\right) \left(\frac{5}{16}\left(C_{V,m} + \frac{9}{4}R\right)\left(\frac{RT}{\pi M}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{1}{N_A\sigma^2}\right) (1 + 1.2Y + 0.755Y^2) \Rightarrow$$

$$\frac{\eta Y}{\sqrt{T}\rho\left(C_{V,m} + \frac{9}{4}R\right)} = iY^2 + jY + k \quad (10-1)$$

که می‌توان آن را به صورت کلی زیر نوشت:

$$\frac{\lambda Y}{\rho\sqrt{T}\left(C_{V,m} + \frac{9}{4}R\right)} = iY^2 + jY + K \quad (11-1)$$

که در آن ضریب  $i$ ،  $j$  و  $k$  به دلیل وجود یک عامل  $\sigma$  در آن‌ها وابستگی به دما دارند. سپس آن‌ها نشان دادند در سیالات چگال که تقریباً رفتار کروی سخت از خود نشان می‌دهند این وابستگی دمایی جزئی است زیرا قطر مولکولی کرات سخت به دما وابسته نمی‌باشد [۶]. آن‌ها با استفاده از این رابطه توانستند هدایت گرمایی سیالات ساده‌ی تک اتمی را پیش‌بینی کنند.

### ۱-۳-۳- پیش‌بینی هدایت گرمایی با شبکه‌ی عصبی مصنوعی

جعفری امام‌زاده‌ای (۱۳۸۲) در پایان‌نامه کارشناسی ارشد خود با عنوان "پیش‌بینی هدایت گرمایی سیالات در محدوده وسیعی از دما و فشار با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی به کمک الگوریتم آموزشی لوبنبرگ مارکوت" از شبکه‌ی عصبی مصنوعی برای پیش‌بینی هدایت گرمایی گازها،

مایعات و مبردها در محدوده وسیعی از دما و فشار استفاده نمود. وی برای این کار از دو پارامتر دما و چگالی برای هر ترکیب به عنوان ورودی استفاده کرد و برای هر ماده یک شبکه‌ی بهینه شده ارائه داد [۳].

مدرس و خواجه در سال ۲۰۱۱ یک روش مدلسازی برای هدایت گرمایی ۱۱۶ الکل مایع در دما و فشار استاندارد ارائه نمودند. آنها در این کار با استفاده از روش تخمین تابع ژنتیک<sup>۱</sup> (GFA) بهترین توصیفگرها را انتخاب نمودند و سپس با روش خطی و غیر خطی سیستم استنتاج فازی-عصبی سازگار<sup>۲</sup> (ANFIS) به مدلسازی برای پیش‌بینی این خاصیت در الکل‌های موردنظر پرداختند. نتایج RMSE حاصل از سری تست برای روش‌های GFA و ANFIS به ترتیب عبارتند از: (۰/۰۴۷۴) و (۰/۰۴۶۵) [۴].

---

1- Genetic Function Approximation  
2- Adaptive neuron-fuzzy inference system



## فصل دوم

### بخش تئوری

## ۲-۱- مقدمه

بهبود میزان آگاهی بشر همواره نیازمند اطلاعات بیشتر است. برای این منظور دستگاه‌ها و وسایلی پیشرفته به کار گرفته می‌شوند تا داده‌های فراوان حاصل از اندازه‌گیری‌های زیاد روی نمونه‌های متعدد را با صرف هزینه‌های سنگین، در اختیار قرار دهند. تفسیر و ارزیابی این داده‌ها با روش‌های معمول کاری مشکل و در اغلب اوقات غیر ممکن می‌نماید. از این رو به کارگیری روش‌هایی که دستیابی ارزان و سریع اطلاعات را فراهم آورد، بسیار مورد توجه است. در علم شیمی نیز با توجه به گستردگی فراوان و وجود مسائل پیچیده و حل نشده‌ی بسیار، بکارگیری چنین روش‌هایی از ضروریات است. پیشرفت استراتژی‌های محاسباتی و الگوریتم‌ها، اشتیاق دانشمندان را برای مواجه شدن با حجم انبوه داده‌ها دو چندان کرده است [۷]. استفاده از علوم ریاضی، آمار و کامپیوتر در زمینه‌های مختلف علمی همچون زیست‌شناسی، داروسازی و شیمی منجر به پیدایش علوم جدیدی مانند بیومتریک، آماردارویی و کمومتریکس<sup>۱</sup> گردیده است [۸].

## ۲-۲- کمومتریکس

کمومتریکس شاخه‌ای از شیمی است که با هدف تهیه‌ی حداکثر اطلاعات از داده‌های شیمیایی، بوجود آمده است. کاربرد عملی ریاضی، آمار و کامپیوتر در شیمی را کمومتریکس گویند. در واقع چنین تلفیقی با سه هدف عمده صورت می‌پذیرد که عبارتند از:

۱. طراحی یا بهبود فرایندهای اندازه‌گیری شیمیایی

۲. استخراج اطلاعات شیمیایی مفیدتر از داده‌های فیزیکی و شیمیایی

۳. پیدا کردن دانشی در مورد سیستم‌های شیمیایی [۹، ۱۰].

پیدایش این زمینه‌ی علمی که یکی از شاخه‌های شیمی به حساب می‌آید به سال ۱۹۶۹ برمی‌گردد،

زمانی که جرز، کوالسکی، آیزناور و ریلی<sup>۱</sup> مقاله‌ای را در زمینه‌ی کاربرد ماشین یادگیری جهت طبقه‌بندی طیف جرمی با تفکیک پایین منتشر کردند. اما اصطلاح کمومتریکس اولین بار توسط سوانت ولد<sup>۲</sup> سوئدی و بروس کوالسکی<sup>۳</sup> آمریکایی در سال ۱۹۷۲ مطرح شد [۱۱].

در پی کوشش‌های فراوان این دو دانشمند، انجمن بین‌المللی کمومتریکس<sup>۴</sup> (ICS) در سال ۱۹۷۴ تأسیس گردید [۱۲]. این انجمن واژه‌ی کمومتریکس را به این صورت تعریف کرده است: کمومتریکس مجموعه‌ای از قواعد شیمیایی است که از روش‌های ریاضی و آمار برای طراحی یا انتخاب یک روش مناسب برای آزمایش و یا برای حصول حداکثر اطلاعات شیمیایی از داده‌های حاصل از یک فرآیند استفاده می‌کند [۱۲]. در این تعریف سخنی از کامپیوتر به میان نیامده است زیرا انجام محاسبات پیچیده‌ی ریاضی و آماری بدون استفاده از کامپیوتر عملاً کاری غیر ممکن است. استفاده از کامپیوتر و تکنیک‌های اطلاعاتی برای حل مسائل در شیمی را کموانفورماتیکس<sup>۵</sup> گویند. اصطلاح کموانفورماتیکس اولین بار توسط براون<sup>۶</sup> در سال ۱۹۹۸ عنوان شد و هر چند که اصطلاحات مشابه نیز بدان اطلاق می‌شود اما عمومیت ندارد [۱۳، ۱۴]. کموانفورماتیکس جزء لاینفک کمومتریکس است و امروزه بیشترین کاربرد آن در شرکت‌های داروسازی در بخش‌های فرآیند، طراحی و کشف دارو، ذخیره و بازیابی اطلاعات شیمیایی و آزمایشگاه‌های مجازی می‌باشد. هر چند که این روش در صنعت نیز جهت آنالیز داده‌های شیمیایی به کار گرفته می‌شود. کمومتریکس از داده‌های شیمیایی موجود، حداکثر اطلاعات را استخراج می‌کند و در مرحله‌ی بعد این اطلاعات به منظور اتخاذ تصمیم بهتر و عملکرد سریعتر به دانش تبدیل می‌شود. امروزه با پیشرفت کامپیوترها، ریزپردازنده‌ها و بسته‌های نرم‌افزاری، کمومتریکس به یک علم توانمند در

---

1- Jurs, Kowalski, Isenhour and Reilly

2- Svante Wold

3- Bruce Kowalski

4- International Chemometrics Society

5- Chemoinformatics

6- Brown

انجام بسیاری از فعالیتهای شیمیایی، زیستی، دارویی و حتی نانو تکنولوژی تبدیل شده است [۱۵]

[۸،

## ۲-۳- نگاهی کوتاه به رابطه‌ی کمی ساختار- خاصیت (QSPR)<sup>۱</sup>

یک شاخه‌ی مهم از مطالعات کمومتریکس، تحقیقات مربوط به ارتباط کمی ساختار- خاصیت می‌باشد. هدف اصلی تحقیقات QSPR پیش‌بینی خواص فیزیکی، بیولوژیکی و شیمیایی پیچیده‌ی ترکیبات مختلف شیمیایی از طریق ساختارهای مولکولی آنها می‌باشد. اولین مرحله در انجام این تحقیقات انتخاب یک سری داده‌های شیمیایی یا بیوشیمیایی معتبر است. در مطالعات QSPR با توجه به این فرض اساسی که هر خاصیت شیمیایی یا بیوشیمیایی از ساختمان مولکول‌ها و برهم‌کنش آنها با محیط اطرافشان پدید می‌آید، به جنبه‌های مختلف ساختمان مولکول‌ها کمیت داده می‌شود. این مقادیر محاسبه شده ساختاری، توصیفگر نامیده می‌شوند. به این مرحله اصطلاحاً رمزی کردن گفته می‌شود. از آنجایی که در این مرحله معمولاً تعداد نسبتاً زیادی توصیفگرهای مولکولی محاسبه می‌شوند، از روش‌های انتخاب ویژگی برای انتخاب مفیدترین و مناسب‌ترین توصیفگرها جهت مدل‌سازی استفاده می‌شود. سپس با استفاده از روش‌های ریاضی، توصیفگرهای انتخاب شده به کمیت شیمیایی یا بیوشیمیایی ربط داده می‌شوند. نتیجه‌ی این محاسبات، مدل‌های ریاضی است که در آن توصیفگرها به عنوان متغیرهای مستقل و خاصیت شیمیایی یا بیوشیمیایی مورد نظر به عنوان متغیر وابسته در نظر گرفته می‌شود. این مدل‌ها ارتباط کمی ساختار- خاصیت نامیده می‌شوند. تعدادی از روش‌هایی که به طور وسیعی در مطالعات مدل‌سازی ارتباط کمی ساختار- خاصیت استفاده می‌شوند، روش‌های خطی هستند که مدل‌های خطی ساده و قابل تفسیری را می‌سازند، مانند روش حداقل مربعات متداول<sup>۲</sup> (OLS)، رگرسیون اجزاء اصلی<sup>۳</sup> (PCR)، آنالیز اجزای اصلی (PCA)<sup>۴</sup>، رگرسیون خطی

---

1- Quantitative structure- property relationship

2- Ordinary Least Squares

3- Principal Component Regression

4- Principle Component Analysis

چندگانه<sup>۱</sup> (MLR) و حداقل مربعات جزئی<sup>۲</sup> (PLS). دیگر روش‌ها مانند شبکه‌ی عصبی<sup>۳</sup> (ANN)، ماشین‌های بردار پشتیبان<sup>۴</sup> (SVM) و الگوریتم ژنتیک<sup>۵</sup> (GA) مدل‌هایی غیرخطی‌اند. سهم اصلی برای گسترش استفاده از مدل‌های ارتباط کمی ساختار-خاصیت به توسعه‌ی توصیف‌گرهای ساختاری و معادلات ریاضی که خواص فیزیکی و شیمیایی را به ساختار شیمیایی مرتبط می‌کنند مربوط است. مراحل کلی یک مدل‌سازی QSPR در جدول (۱-۲) نشان داده شده است [۱۶].

جدول (۱-۲): مراحل مدل‌سازی در یک مطالعه‌ی QSPR

انتخاب سری داده‌ها
انتخاب و محاسبه توصیف‌گرها
ارزیابی و تجزیه و تحلیل آماری توصیف‌گرها
تقسیم‌بندی سری داده‌ها به سری‌های آموزش و ارزیابی و تست
آنالیز آماری مدل‌ها و انتخاب مدل مناسب
ارزیابی اعتبار مدل‌های انتخاب شده
پیش‌بینی خصوصیت موردنظر

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

### ۲-۳-۱- انتخاب سری داده‌ها

اولین مرحله‌ی روش QSPR، انتخاب یکسری داده مناسب و معتبر می‌باشد. این مرحله با انتخاب یکسری ترکیبات که کمیت خاصیت شیمیایی آنها در شرایط یکسان بدست آمده است، همراه می‌باشد. هر چه سری داده‌ها وسیع‌تر و متنوع‌تر می‌باشد، مدل بدست آمده مدلی کلی‌تر و معتبرتر بوده و محدود به یک گروه خاص از ترکیبات نخواهد بود.

---

1- Multiple Linear Regression  
 2- Partial Least Squares  
 3- Artificial Neural Networks  
 4- Support Vector Machines  
 5- Genetic Algorithm

## ۲-۳-۲- انواع توصیفگرها

توصیفگرهای مولکولی که نقش اساسی در شیمی، علوم دارویی، تحقیقات پزشکی و ... دارند، نتیجه‌ی نهایی یک روش ریاضی و منطقی هستند که اطلاعات شیمیایی مربوط به یک مولکول را به یک مجموعه عدد مفید تبدیل می‌کنند. این توصیفگرها به دو گروه کلی توصیفگرهای مولکولی تجربی و تئوری تقسیم‌بندی می‌شوند. از جمله توصیفگرهای تجربی می‌توان به ممان دو قطبی، قطبش پذیری و ... اشاره کرد. این توصیف‌کننده‌ها به صورت تجربی حاصل می‌شوند در حالیکه توصیفگرهای تئوری از نمایش مولکولی حاصل می‌شوند و بر حسب انواع مختلف نمایش مولکولی، به صورت‌های بدون بعد، یک بعدی، دو بعدی و سه بعدی دسته‌بندی می‌شوند.

الف) توصیفگرهای بدون بعد: ساده‌ترین نوع نمایش مولکولی، فرمول شیمیایی است و در واقع لیستی از اتم‌های مختلف موجود در یک مولکول می‌باشد که هر یک با اندیسی همراه می‌شود. این اندیس نشان دهنده‌ی تعداد اتم مورد نظر در مولکول می‌باشد. این نوع نمایش هیچ اطلاعاتی در مورد ساختار مولکول ارائه نمی‌کند. توصیفگرهایی که براساس این نمایش حاصل می‌گردند توصیفگر بدون بعد نامیده می‌شوند. اکثر توصیفگرهای جزء، همچون تعداد اتم‌ها و وزن مولکولی از این دسته می‌باشند.

ب) توصیفگرهای یک بعدی: نوع دیگر نمایش مولکولی، نمایش زیر ساختاری می‌باشد، که یک نوع نمایش تک بعدی است و شامل لیستی از تعداد زیر ساختارهای موجود در مولکول می‌باشد. توصیفگرهای حاصل از این نوع نمایش توصیفگرهای یک بعدی نامیده می‌شوند.

ج) توصیفگرهای دو بعدی: نوع سوم نمایش مولکولی، نمایش دو بعدی است که نحوه‌ی اتصال اتم‌ها و نیز ماهیت پیوند شیمیایی مابین آنها را تعریف می‌کند. این نوع نمایش که مبتنی بر گراف مولکولی است نمایش توپولوژیکی نیز نامیده می‌شود و توصیفگرهای حاصل از آن به توصیفگرهای دو بعدی موسوم می‌باشند.

د) توصیفگرهای سه بعدی: نمایش سه بعدی مولکول را مانند یک جسم صلب هندسی در فضا نشان می‌دهد. این نوع نمایش نه تنها نحوه‌ی اتصال و ماهیت پیوند بین اتم‌ها را نشان می‌دهد، بلکه آرایش فضایی کل مولکول را نیز نشان می‌دهد. و به آن نمایش هندسی گفته می‌شود. توصیفگرهای حاصل از این نمایش توصیفگرهای سه بعدی نامیده می‌شوند.

علاوه بر تقسیم بندی ذکر شده، توصیفگرها براساس نوع ویژگی توصیف شده توسط آنها، به ۵ گروه توصیفگرهای توپولوژیکی<sup>۱</sup>، توصیفگرهای هندسی<sup>۲</sup>، توصیفگرهای الکترونی<sup>۳</sup>، توصیفگرهای فیزیکوشیمیایی<sup>۴</sup> و توصیفگرهای هیبریدی<sup>۵</sup> (یا توسعه یافته) تقسیم می‌شوند که هر کدام در ادامه بطور خلاصه توضیح داده می‌شوند [۱۶].

## ۲-۳-۱- توصیفگرهای توپولوژیکی

توصیفگرهای توپولوژیکی جزء ساده‌ترین توصیفگرها می‌باشند و به ساختار فضایی مولکول ارتباط ندارند. بنابراین می‌توان آنها را بدون بهینه کردن ساختار مولکول، محاسبه کرد. این توصیفگرها به نوع و تعداد اتم‌ها، نوع پیوندها، نوع و تعداد گروه‌های عاملی و نحوه‌ی ارتباط اتم‌ها به یکدیگر بستگی دارند. توصیفگرهای توپولوژیکی خود به چهار دسته توصیفگرهای جزء<sup>۶</sup>، توصیفگرهای زیرساختاری<sup>۷</sup>، توصیفگرهای محیطی<sup>۸</sup> و اندیس‌های ارتباط مولکولی<sup>۹</sup> تقسیم می‌شوند [۱۷، ۱۸].

الف) توصیفگرهای جزء: از جمله ساده‌ترین توصیفگرهای توپولوژیکی می‌باشند و می‌توان آنها را از فرمول گسترده مولکول‌ها به دست آورد. توصیفگرهایی همچون تعداد اتم‌ها، تعداد پیوند، وزن مولکولی، تعداد حلقه‌ها و ... از این دسته‌اند.

- 
- 1- Topological descriptors
  - 2- Geometrical descriptors
  - 3- Electronic descriptors
  - 4- Physicochemical descriptors
  - 5- Hybrid descriptors
  - 6- Fragment descriptors
  - 7- Substructure descriptors
  - 8- Environmental descriptors
  - 9- Molecular connectivity indexes

ب) توصیفگرهای زیرساختاری: این توصیفگرها که برای اولین بار در سال ۱۹۸۵ توسط کایر<sup>۱</sup> پیشنهاد شدند [۱۹]، اطلاعاتی را در مورد وجود یا عدم وجود زیرساختارهای معین یا گروه‌های عاملی و نیز تعداد آنها در اختیار قرار می‌دهد. بنابراین مقدار این توصیفگر برای یک گروه عاملی یا یک زیرساختار، به اندازه تعداد آن گروه در مولکول می‌باشد. از جمله این توصیفگرها، اندیس کاپا<sup>۲</sup> را می‌توان نام برد که ارتباط بین شکل هندسی و فعالیت شیمیایی را معرفی می‌کند.

ج) توصیفگرهای محیطی: این توصیفگرها که به توصیفگرهای زیرساختاری مربوط می‌شوند، موقعیت یک زیرساختار یا گروه عاملی را در مولکول نشان می‌دهند. اگر یک زیرساختار در یک مولکول وجود داشته باشد با اتم مجاور خود تشکیل یک شبه مولکول می‌دهد، که مقدار توصیفگر محیطی برای این شبه مولکول برابر با اندیس ارتباط مولکولی درجه‌ی اول آن خواهد بود. در صورتی که چند زیر ساختار وجود داشته باشد، مقدار متوسط اندیس‌های ارتباطی آنها در نظر گرفته خواهد شد.

د) اندیس‌های ارتباط مولکولی: اندیس‌های ارتباط مولکولی که به آنها اندیس‌های توپولوژیکی<sup>۳</sup> نیز گفته می‌شود، توصیفگرهای دو بعدی هستند که براساس تئوری گراف بنا نهاده شده‌اند و اطلاعاتی در مورد ساختمان، اندازه و میزان شاخه‌ای شدن مولکول، در اختیار قرار می‌دهند. اولین اندیس از این دسته، نخستین بار توسط راندیک<sup>۴</sup> در سال ۱۹۷۵ تحت عنوان اندیس شاخه‌ای شدن آلکانها ارائه گردید [۲۰]. سپس در سال ۱۹۷۶ کایر و هال<sup>۵</sup>، این اندیس را اصلاح کرده و اطلاعاتی راجع به اتم‌های ناجور در اختیار گذاشتند [۲۱]. جدول (۲-۲) فهرستی از اندیس‌های توپولوژیکی را نشان می‌دهد.

---

1- kier  
2- Kappa index  
3- Topological indexes  
4- Randic  
5- Kier and Hall



جدول (۲-۲): لیست اندیس‌های توپولوژیکی

اندیس توپولوژیکی	نماد
عدد واینر <sup>۱</sup>	W
اندیس هوزویا <sup>۲</sup>	Z
اندیس راندیک	X
اندیس بالابان <sup>۳</sup>	J
اندیس شولتر <sup>۴</sup>	MTI
عدد هاراری <sup>۵</sup>	H

## ۲-۲-۳-۲- توصیفگرهای هندسی

این توصیفگرها جزء توصیفگرهای سه بعدی هستند، یعنی برای محاسبه‌ی آنها نیاز به ساختار سه بعدی مولکول است. بنابراین قبل از انجام این محاسبات ابتدا باید ساختار سه بعدی مولکول رسم و از لحاظ انرژی و ساختمان بهینه شود. جهت انجام این کار اغلب از بسته‌های نرم افزاری چون Gaussian، HyperChem، و Mopac استفاده می‌شود [۲۲]. دو نوع روش در شیمی محاسباتی برای بهینه شدن ساختار مولکولی وجود دارد [۲۳، ۲۴]:

### ۱) مکانیک مولکولی (۲) مکانیک کوانتومی

در روش مکانیک مولکولی که براساس روابط کلاسیک است، ساختار مولکولی به صورت گوی و فنر در نظر گرفته می‌شود و براساس برنامه‌های نرم‌افزاری طول و زوایای پیوندی و صورتبندی مولکولی تغییر کرده تا کمترین انرژی مکانیک مولکولی بدست آید. اما در روش مکانیک کوانتومی براساس معادله‌ی شرودینگر اثرات الکترونی بررسی می‌شود. در نتیجه این روش از صحت بیشتری برخوردار است. از جمله روش‌های مکانیک کوانتومی، می‌توان به روش‌های آغازین<sup>۶</sup> و روش‌های

---

1- Wiener number  
 2- Hosoya index  
 3- Balaban index  
 4- Schultz index  
 5- Harary number  
 6- ab Initio

نیمه تجربی<sup>۱</sup> اشاره کرد. پس از بهینه‌سازی ساختار، اتم‌ها نسبت به هم در موقعیتی قرار می‌گیرند که سطح انرژی مولکول به حداقل برسد. این ساختار به خوبی نشان دهنده‌ی موقعیت اتم‌ها در فضا، نوع پیوند بین اتم‌ها، زاویه‌ی بین این پیوندها و ... می‌باشد. بنابراین این توصیف‌گرها، اطلاعات جامع‌تری نسبت به توصیف‌گرهای توپولوژیکی در اختیار قرار می‌دهند.

### ۳-۲-۳-۲- توصیف‌گرهای الکترونی

این دسته از توصیف‌گرها نشان دهنده‌ی خواص الکترونی مولکول‌ها می‌باشند و اطلاعات مفیدی در مورد بار روی اتم‌ها و قسمت‌های مختلف مولکول و نیز برهمکنش‌های الکترونی بین مولکولی و درون مولکولی در اختیار قرار می‌دهند. این نوع از برهمکنش‌ها خواص فیزیکی و شیمیایی مولکول‌ها را شدیداً تحت تأثیر قرار می‌دهند. اهمیت این برهمکنش‌ها زمانی بیشتر است که مولکول‌های عمل‌کننده، قطبی باشند [۱۸].

اندازه و قدرت نیروهای حاصل از برهمکنش‌های الکترونی تابعی از بار جزئی اتم‌ها، نحوه‌ی توزیع بار در مولکول، گشتاور دوقطبی، فاصله‌ی بین بارهای مختلف و قطبش‌پذیری مولکول‌ها می‌باشد. بنابراین دانستن مقادیر فوق برای یک مولکول می‌تواند در پیش‌بینی و توجیه رفتار آن در محیط مفید باشد. برای محاسبه‌ی این توصیف‌گرها نیز باید ساختار سه بعدی مولکول بهینه شود. برخی از توصیف‌گرهای الکترونی در جدول (۳-۲) آورده شده‌اند.

---

1- Semi empirical

جدول (۲-۳): برخی از توصیفگرهای الکترونی

علامت اختصاری	نام توصیفگر
HOMO	انرژی بالاترین تراز اشغال شده <sup>۱</sup>
LUMO	انرژی پایین‌ترین تراز اشغال نشده <sup>۲</sup>
POL	قطبش پذیری
$\mu$	گشتاور دو قطبی
ENA	چگالی الکترونی روی منفی‌ترین اتم
TEE	انرژی الکترونی کل
PCPA	بار جزئی روی مثبت‌ترین اتم
PP	پارامتر قطبیت
CPSA	مساحت سطح جزئی باردار شده <sup>۳</sup>

## ۲-۳-۴- توصیفگرهای فیزیکوشیمیایی

این گروه از توصیفگرها بیانگر آن دسته از خواص فیزیکی و شیمیایی مولکول‌ها هستند که به ساختمان شیمیایی مولکول‌ها ارتباط دارند. از جمله‌ی این توصیفگرها می‌توان به نقطه‌ی جوش، ضریب شکست، ثابت تفکیک اسیدی، ثابت هانش<sup>۴</sup> و ثابت هامت<sup>۵</sup> اشاره کرد [۱۸].

## ۲-۳-۵- توصیفگرهای توسعه یافته

در بررسی فرایندها و فعالیت‌های مولکولی، در نظر گرفتن هم زمان فرم ساختاری و الکترونی مولکول از اهمیت ویژه‌ای برخوردار می‌باشد. در یک مولکول، هر اتم علاوه بر تأثیر بر سایر اتم‌ها، خودش نیز تحت تأثیر آنها قرار می‌گیرد. بنابراین توصیفگرهایی که بتوانند بطور همزمان برهمکنش‌های الکترونی-توپولوژیکی اتم‌های تشکیل دهنده‌ی مولکول را نشان دهند، بسیار مفید خواهند بود، زیرا حاوی اطلاعات بیشتری در مورد مولکول هستند. از جمله این توصیفگرها می‌توان اندیس‌های الکتروتوپولوژیکی اتم‌ها و اندیس‌های الکتروتوپولوژیکی پیوند را ذکر کرد [۱۸].

- 
- 1- Highest Occupied Molecular Orbital
  - 2- Lowest Unoccupied Molecular Orbital
  - 3- Charge Partial Surface Area
  - 4- Hansch constant
  - 5- Hammet constant

## ۲-۳-۳- حذف توصیفگرهای اضافی

پس از آنکه توصیفگرها محاسبه شدند، باید توصیفگرهایی که اطلاعات کمتری در مورد تغییرات خواص شیمیایی و یا بیولوژیکی موردنظر دارند را حذف نمود. از این رو توصیفگرهایی که برای تمام مولکولها، مقادیر ثابت، تقریباً ثابت و یا صفر داشته باشند، حذف می‌شوند. همچنین توصیفگرهایی که کمتر از ۱۰٪ مقادیر غیرصفر و یا بیش از ۹۰٪ مقادیر یکسان دارند، مفید نبوده و کنار گذاشته می‌شوند. برای حذف بقیه توصیفگرهای غیر مفید، ماتریس همبستگی از طریق نرم‌افزار SPSS<sup>۱</sup> یا Matlab<sup>۲</sup> بین توصیفگرها تشکیل می‌شود. همبستگی بیش از ۹۰٪ بین توصیفگرها مبین رابطه‌ی خطی بین آنها می‌باشد. در این صورت توصیفگری که محاسبه‌ی آن مشکل‌تر، توجیه تأثیرش بر متغیر وابسته سخت‌تر و ضریب وابسته‌اش کمتر باشد، حذف می‌شود.

## ۲-۳-۴- تقسیم بندی سری داده‌ها به سری‌های آموزش، ارزیابی و تست

برای مدل‌سازی لازم است که سری داده‌های جمع‌آوری شده، به سری آموزش<sup>۳</sup>، سری ارزیابی<sup>۴</sup> و سری تست<sup>۵</sup> تقسیم شود. سری آموزش که بدان سری مرجع نیز گفته می‌شود، شامل اکثریت مولکولهای سری داده‌ها است و از این سری برای مدل‌سازی استفاده می‌شود. سری تأیید که سری ارزیابی نیز نامیده می‌شود، شامل تقریباً ۱۵٪ مولکولهای سری داده‌هاست و به گونه‌ای انتخاب می‌شود که نماینده‌ی کل ترکیبات موجود در سری آموزشی باشد. سری تست که سری آزمایشی نیز نامیده می‌شود، نیز شامل حدوداً ۱۵٪ داده‌ها می‌باشد که از این سری صرفاً به منظور ارزیابی قدرت مدل استفاده می‌شود و هیچ دخالتی در مدل‌سازی نخواهد داشت. در اکثر مواقع انتخاب این سه سری بطور تصادفی از سری داده‌های اولیه انجام می‌شود به طوری که انواع مختلف مولکولهای موجود در

---

1- Statistical Package for the Social Science

2- Matrix Laboratory

3- Train set

4- Validation set

5- Test set

سری داده‌ها را شامل می‌شود. به عبارت دیگر مولکولهایی که در سه سری آموزش و پیش بینی و تست وجود دارند، بایستی با یکدیگر تقارب ساختاری داشته باشند [۳۳]. در این تحقیق برای افزایش دقت کار تقسیم بندی سری داده‌ها به کمک نرم‌افزار SPSS از طریق روش تحلیل مولفه‌های اساسی (PC)<sup>۱</sup> انجام شده است. دلیل استفاده از روش مولفه‌های اساسی کاهش خطاها و دسترسی به نتایج بهتری می‌باشد. اگر در هر مجموعه داده  $n$  متغیر وجود داشته باشد، هر متغیر می‌تواند دارای چند بعد باشد. با توجه به اینکه اغلب درک و شهود فضای چند بعدی دشوار است، روش تحلیل مولفه‌های اساسی ابعاد کلیه مشاهدات را براساس شاخص ترکیبی و دسته‌بندی مشاهدات مشابه کاهش می‌دهد. این روش یک روش ساده و غیر پارامتریک برای استخراج اطلاعات از یک مجموعه داده پیچیده می‌باشد. به طور کلی کاربرد عمده روش تحلیل مولفه‌های اساسی عبارت است از: کاهش تعداد متغیرها و یافتن ساختار ارتباطی بین متغیرها که در حقیقت همان دسته‌بندی متغیرهاست. اولین مولفه‌ی اساسی استخراج شده بیشترین مقدار پراکندگی داده‌ها را در کل مجموعه داده‌ها در نظر می‌گیرد. این امر بدان معنی است که اولین مولفه، حداقل با تعدادی از متغیرها همبسته است. دومین مولفه استخراج شده دو ویژگی مهم دارد. این مولفه بیشترین واریانس مجموعه‌ی داده‌ها که توسط مولفه‌ی اول محاسبه نشده است را در نظر می‌گیرد، به عبارت دیگر دومین مولفه با تعدادی از متغیرهای مشاهده شده که همبستگی بالایی با جزء اول ندارند، همبسته است. ویژگی دوم این است که مولفه‌ی دوم با مولفه‌ی اول همبستگی ندارد، یعنی همبستگی بین دو مولفه صفر است. سایر مولفه‌های استخراج شده در این روش نیز دو ویژگی مذکور را دارا می‌باشند. معمولاً دو مولفه‌ی اول مقدار قابل توجهی از پراکندگی داده‌ها را در نظر می‌گیرند، بنابراین نمودار پراکندگی براساس دو مولفه‌ی اول رسم می‌شود. روش مذکور از این بابت که هیچ تابع توزیع احتمالی برای مشاهدات در نظر نمی‌گیرد، روشی آماری نیست. بنابراین دانستن این نکته که PC تنها برای ارائه داده‌ها به شکلی ساده‌تر و با ابعاد کمتر به کار می‌رود مهم است. در روش PC در بسته نرم‌افزاری SPSS در نوار ابزار

---

1- Principle Component

گزینه Analyze، Dimension Reduction، Factor را انتخاب کرده یک سری مولفه ساخته می‌شود سپس نمودار پراکندگی داده‌ها براساس مولفه اول و دوم ساخته می‌شود و در آخر هم جداسازی و انتخاب سری داده‌های آموزش، تست و ارزیابی صورت می‌گیرد.

## ۲-۳-۵- انتخاب توصیفگرهای نهایی

از بین توصیفگرهای باقیمانده تنها تعداد اندکی برای پیش‌بینی خاصیت مورد نظر مناسب هستند. برای انتخاب مجموعه‌ای از متغیرها که بتواند کارآمدترین مدل را جهت پیش‌بینی خاصیت مورد نظر ارائه دهد از روشهای مختلف انتخاب متغیر مثل رگرسیون خطی مرحله‌ای، CDFS<sup>۱</sup> و الگوریتم ژنتیک می‌توان استفاده کرد که در ادامه راجع به هر کدام از آنها توضیح داده خواهد شد.

## ۲-۳-۵-۱- رگرسیون خطی چندگانه

یکی از متداول‌ترین و ساده‌ترین روش‌ها برای انتخاب متغیرهای مناسب در QSPR، استفاده از روش رگرسیون خطی مرحله‌ای می‌باشد. در این روش خصوصیت شیمیایی و یا بیولوژیکی مورد نظر بعنوان متغیر وابسته و توصیفگرها بعنوان متغیرهای مستقل در نظر گرفته می‌شوند. رگرسیون خطی چندتایی از طریق توسعه رگرسیون خطی ساده با در نظر گرفتن بیش از یک متغیر مستقل، حاصل می‌شود. یک مدل رگرسیون خطی  $m$  بعدی براساس  $i$  امین مقدار مشاهده شده‌ی متغیر وابسته  $Y_i$ ، با رابطه‌ی زیر نشان داده می‌شود:

$$Y_i = b_0 + b_1X_{i1} + b_2X_{i2} + \dots + b_{m-1}X_{im-1} \quad (1-2)$$

در این رابطه  $X_{ik}$  معرف  $k$ امین متغیر مستقل متعلق به  $k$ امین نمونه مشاهده شده می‌باشد. پارامترهای  $b_1, b_2, \dots, b_{m-1}$  ضرایب رگرسیون و  $b_0$  مقدار ثابت معادله می‌باشد.

برای انتخاب بهترین توصیفگرها می‌توان از روش ورود اجباری<sup>۱</sup>، روش پیش رونده<sup>۲</sup>، روش پس رونده<sup>۳</sup> و روش مرحله‌ای<sup>۴</sup> برای انتخاب متغیر و مدل‌سازی مبتنی بر رگرسیون خطی چندگانه، استفاده کرد [۲۵].

در روش ورود اجباری از همه‌ی متغیرهای مستقل در مدل‌سازی استفاده می‌گردد و بدلیل اینکه اثرات مثبت و منفی متغیرهای وارد شده در مدل و میزان همبستگی آن‌ها با خاصیت مورد مطالعه نادیده گرفته می‌شود، برای ساخت مدل بکارگیری این روش چندان مناسب نمی‌باشد.

در روش پیش‌رونده ابتدا متغیری که بیشترین همبستگی را با متغیر وابسته دارد وارد مدل می‌شود و سپس مدل ساخته شده از نظر آماری مورد بررسی قرار می‌گیرد. به همین ترتیب متغیرها در مدل وارد شده و تا زمانی که پارامترهای آماری حاصل از متغیرهای خارج از مدل معنی‌دار نباشند تکرار می‌شود تا در نهایت مدل مناسب انتخاب گردد.

در روش پس‌رونده ابتدا تمامی متغیرها در ساخت مدل بکار می‌روند، سپس تک تک متغیرها از مدل حذف شده و اثر هر متغیر به کمک پارامترهای آماری  $R$  و  $F$  مورد بررسی قرار می‌گیرد، تا در آخر تعداد متغیر مناسب بدست آید.

در روش مرحله‌ای، که ترکیبی از دو روش پس‌رونده و پیش‌رونده می‌باشد، ابتدا با توجه به ضریب همبستگی، متغیر اولیه انتخاب می‌شود. سپس مدل دو متغیری ایجاد شده و پارامترهای آماری آن مدل مورد بررسی قرار می‌گیرد. در صورتیکه مدل از نظر آماری بی‌معنا باشد، متغیر بکار گرفته شده در آن مدل حذف می‌گردد. سپس مدل سه متغیری ساخته می‌شود و دوباره پارامترهای آماری

---

1- Enter method  
2- Forward method  
3- Backward method  
4- Stepwise method

آن مورد بررسی قرار می‌گیرد. این کار تا جایی ادامه می‌یابد که تعداد توصیفگرهای مناسب انتخاب شوند.

مهم‌ترین پارامترهای آماری که برای انتخاب بهترین مدل و به تبع آن برای بهترین توصیفگرها مدنظر قرار دارند عبارتند از: ضریب همبستگی رگرسیون<sup>۱</sup> ( $R$ )، ضریب تعیین<sup>۲</sup> ( $R^2$ ) و ضریب تعیین تصحیح شده<sup>۳</sup> ( $R_{adj}^2$ )، آماره  $F$ ، میانگین مربع خطا<sup>۴</sup> ( $MSE$ ).

وقتی که فقط یک متغیر مستقل در مدل باشد، مقدار ضریب همبستگی رگرسیون برابر با ضریب همبستگی متغیر مستقل و متغیر وابسته است. ولی در صورت وجود چندین متغیر مستقل در مدل، مقدار  $R$ ، ضریب همبستگی چند متغیره بین متغیر وابسته و مجموع متغیرهای مستقل معادله رگرسیون می‌باشد. هر چه  $R$  یک مدل به یک نزدیکتر باشد، آن مدل مناسب‌تر خواهد بود. ضریب همبستگی دو متغیر  $x$  و  $y$  براساس رابطه (۲-۲) است [۲۶].

$$R = \frac{\sum(x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum(x_i - \bar{x})^2 \sum(y_i - \bar{y})^2}} \quad (2-2)$$

پارامتر دیگری که برای بیان دقت خط رگرسیون برآورد شده و نشان دهنده نسبت تغییرات متغیر وابسته به متغیر مستقل است ضریب تعیین می‌باشد که رابطه ریاضی مربوط به آن به صورت زیر است.

$$R^2 = \frac{SSR}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST} \quad (3-2)$$

که  $SSR$ <sup>۵</sup>، بیانگر مجموع مربعات انحراف مقادیر پیش‌بینی شده‌ی متغیر وابسته از میانگین مقادیر آن است طبق رابطه زیر:

---

1 Correlation coefficient  
 2 Determination coefficient  
 3 Adjusted determination coefficient  
 4- Mean Square Error  
 5- Sum Square Regression



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

و  $SST^1$ ، نشانگر مجموع مربعات انحراف مقادیر واقعی متغیر وابسته از میانگین مقادیر آن است به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$SST = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (5-2)$$

$SSE^2$  نیز مبین مجموع انحرافات مقادیر واقعی متغیر وابسته از مقادیر پیش‌بینی شده برای آن است:

$$SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (6-2)$$

بنابراین می‌توان نوشت:

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

طبق رابطه‌ی (7-2) اگر برای تمام نقاط  $y_i = \hat{y}_i$  باشد، مقدار  $R^2$  برابر یک می‌شود و کوچکترین انحراف از این حالت باعث می‌شود، ضریب تعیین از یک کوچکتر شود. ضریب تعیین تصحیح شده یکی از پارامترهای دیگر ارزیابی مدل‌های مختلف با تعداد متفاوت متغیرهای مستقل است و مزیت این پارامتر به ضریب تعیین این است که تعداد پارامترهای موجود در مدل را به حساب می‌آورد و بدین صورت تعریف می‌شود:

$$R_{adj}^2 = 1 - \frac{n-1}{n-p-1} \cdot \frac{SSE}{SST} = 1 - (1 - R^2) \frac{n-1}{n-p-1} \quad (8-2)$$

که در این رابطه،  $p$  تعداد متغیرهای مستقل و  $n$  تعداد ترکیبات مورد نظر می‌باشد.

آماره‌ی  $F$  معیار دیگری برای ارزیابی مدل بوده و مقدار آن بیانگر میزان معنی‌دار بودن کلی

مدل است که با نسبت میانگین مربعات رگرسیون ( $MSR$ ) به میانگین مربعات باقیمانده‌ها ( $MSE$ ) است.

---

1- Sum Square Total  
2- Sum Square Error

$$F = \frac{MSR}{MSE} = \frac{SSR/df_m}{SSE/df_{res}} \quad (9-2)$$

$$df_m = p, \quad df_{res} = n - p - 1$$

چند پارامتر دیگر برای ارزیابی مدل بدین صورت هستند:

خطای استاندارد پیش‌بینی<sup>۱</sup> ( $SEP$ )، میانگین خطای مطلق<sup>۲</sup> ( $MAE$ )، خطای نسبی پیش‌بینی<sup>۳</sup>

( $REP$ )، میانگین مربع خطاها ( $MSE$ ) و میانگین خطای نسبی<sup>۴</sup> ( $MRE$ ) نیز به عنوان پارامترهای

ارزیابی می‌باشند که طبق روابط (۲-۱۰) تا (۲-۱۴) محاسبه می‌شوند:

$$SEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y})^2}{n}} \quad (10-2)$$

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}|}{n} \quad (11-2)$$

$$REP(\%) = \frac{100}{\bar{y}} \times \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y})^2}{n}} \quad (12-2)$$

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y})^2}{n} \quad (13-2)$$

$$MRE = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{|y_i - \hat{y}|}{y_i}}{n} \times 100 \quad (14-2)$$

یک مدل مناسب باید دارای ویژگی‌های زیر باشد:

❑ تعداد متغیرهای مستقل آن کم و حضور آنها در مدل قابل توجیه باشد.

❑ محاسبه متغیرهای مستقل آن ساده باشد.

❑ حتی الامکان توصیفگرهای مدل، توصیفگرهای تئوری باشند.

❑ ضریب همبستگی توصیفگرهایی که در مدل حضور دارند کم باشد.

❑ خطای استاندارد مدل کم باشد.

❑ آماره  $F$  آن بزرگ باشد.

❑ مدل  $R$  نزدیک به یک داشته باشد.

---

1- Standard Error of Prediction  
2- Mean Absolute Error  
3- Relative Error of Prediction  
4- Mean Relative Error

□ قدرت پیش بینی مدل بالا باشد.

## ۲-۳-۵-۲- روش CDFS

هدف روش CDFS به عنوان روش انتخاب متغیر، حذف توصیفگرهای تصادفی انتخاب شده توسط رگرسیون خطی چندگانه، می باشد. در روش رگرسیون خطی چندگانه تمام مراحل ساخت مدل به خصوص مرحله‌ی انتخاب توصیفگر به نوع دسته‌بندی مربوط می باشد و در نتیجه، عملکرد و قدرت مدل بسیار وابسته به جداسازی اولیه است. که این موضوع تأثیر جداسازی داده‌ها در انتخاب توصیفگر را به اثبات می‌رساند. برای حل مشکل و انتخاب توصیفگرهای مناسب بدون وابستگی به چگونگی تفکیک اولیه داده‌ها، در روش CDFS، انواع زیادی از دسته‌بندی‌های آموزش و ارزیابی در نظر گرفته می‌شود تا حساسیت مدل به نوع و تعداد مولکولهای موجود در مدل از بین برود سپس با استفاده از رگرسیون مرحله‌ای مناسب‌ترین توصیفگرها برای هر دسته‌بندی انتخاب می‌شود. قابل ذکر است که در انواع گروه‌های دسته‌بندی شده، سری تست ثابت می‌باشد. سپس از بین تمام توصیفگرهای منتخب هر دسته‌بندی، توصیفگرهایی که بیش از ۵۰٪ تکرار شده‌اند، به عنوان متغیرهای مستقل انتخاب شده و توصیفگرهای اصلی مدل نهایی را تشکیل می‌دهند.

تفاوت CDFS با روش رگرسیون مرحله‌ای در این است که، در روش رگرسیون مرحله‌ای، تنها با یک دسته‌بندی معین توصیفگرهای نهایی انتخاب می‌شوند، در نتیجه احتمال حضور توصیفگر تصادفی بسیار می‌باشد. در حالیکه در روش CDFS دسته‌بندی‌های زیادی صورت گرفته و توصیفگرهای نهایی برای هر دسته‌بندی مشخص می‌شود. سپس از اشتراک همه‌ی توصیفگرها، توصیفگرهای نهایی برای ساخت مدل انتخاب می‌شوند، که این موضوع برتری روش CDFS را به روش رگرسیون چندگانه خطی به منظور انتخاب توصیفگر نشان می‌دهد. زیرا احتمال حضور توصیفگر تصادفی و نامعتبر را حذف می‌کند [۲۷].

## ۲-۳-۵-۳- الگوریتم ژنتیک

امروزه روش‌های کلاسیک با بزرگ‌تر و پیچیده‌تر شدن مسائل و اهمیت یافتن سرعت رسیدن به پاسخ، دیگر جوابگوی حل بسیاری از مسائل نیستند، چرا که فضای جستجو با افزایش بعد مسئله به صورت نمایی زیاد می‌شود و این روش‌ها بدلیل محدودیت‌های هزینه‌ای، مقرون به صرفه نیستند. به همین دلیل در سال‌های اخیر استفاده از الگوریتم‌های جستجوی تصادفی مثل الگوریتم‌های تکاملی<sup>۱</sup> و الگوریتم‌های جستجوی ابتکاری<sup>۲</sup> به جای جستجوی همه جانبه مفیدتر می‌باشد. تفاوت روش‌های بهینه سازی کلاسیک و الگوریتم‌های تکاملی، در فرآیند جستجو و اطلاعات استفاده شده در این فرآیند می‌باشد.

الگوریتم‌های جستجوی ابتکاری الگوریتم‌هایی هستند که با الهام از فرآیندهای فیزیکی، بیولوژیکی و طبیعی به وجود آمده‌اند. برخی از این الگوریتم‌ها عبارت از الگوریتم ژنتیکی، پخت شبیه سازی شده<sup>۳</sup>، جستجوی ممنوع<sup>۴</sup>، الگوریتم ایمنی<sup>۵</sup>، الگوریتم جستجوی جمعیت مورچگان<sup>۶</sup> و بهینه سازی جمعیت ذره‌ها<sup>۷</sup> می‌باشند. هر یک از این الگوریتم‌ها به ترتیب از علم وراثت و تکامل، مشاهدات ترمودینامیکی، پاسخ حافظه، سیستم دفاعی انسان، رفتار مورچه‌ها در هنگام جستجوی غذا و رفتار اجتماعی پرندگان الهام گرفته و پایه‌گذاری شده‌اند و هر یک خصوصیات منحصر به خود را دارا می‌باشند [۲۸].

- 
- 1- Evolutionary Algorithm
  - 2- Heuristic
  - 3- Simulated annealing
  - 4- Tabu search
  - 5- Immune Algorithm
  - 6- Ant colony search algorithm
  - 7- Particle swarm optimization

## ۲-۳-۵-۳ الف: وراثت و انتخاب طبیعی

گریگور مندل<sup>۱</sup> پایه گذار علم وراثت، نشان داد که خصوصیات والدین به فرزندانشان انتقال می‌یابد. هر موجود زنده دارای خصوصیات ژنتیکی منحصر به فردی است که در DNA آن نهفته می‌باشد. کوچکترین واحد وراثت ژن است و هر ژن معرف یک خصوصیت خاص در موجود زنده می‌باشد. از ترکیب ژن‌ها، کروموزوم‌ها به وجود می‌آیند. کروموزوم‌ها در موجودات زنده به صورت جفت هستند و به هر جفت کروموزوم، همتا یا همولوگ گفته می‌شود.

تولید مثل در جانداران تک سلولی طی فرآیندی به نام تقسیم سلولی میتوز انجام می‌شود. در این فرآیند ابتدا کروموزوم والد از خود کپی برداری می‌کند و سپس کروموزوم کپی شده از کروموزوم والد جدا گشته و سلول به دو نیم تقسیم می‌شود. طی این عمل تمام خصوصیات والد به فرزند منتقل می‌شود. اما گاهی هنگام کپی برداری، تغییری در کروموزوم فرزند ایجاد می‌شود (نوکلئوتید عوض می‌شود) و این تغییر سبب بروز صفات جدیدی در فرزند می‌گردد که در والد وجود نداشته است، به این عمل جهش<sup>۲</sup> گفته می‌شود.

سایر جانداران برای تولید نسل، از روش تولید مثل جنسی استفاده می‌کنند. یک جاندار  $n$  کروموزومی، سلول‌های جنسی دارد که هر کدام  $\frac{n}{2}$  کروموزوم تک دارند. ترکیب سلول‌های جنسی پدر و مادر منجر به تشکیل سلول فرزند می‌شود. این فرزند دقیقاً  $n$  کروموزوم دارد که نیمی از آنها را از پدر و نیم دیگر را از مادر دریافت کرده است. علاوه بر جهش، همبری<sup>۳</sup> نیز سبب بروز صفات و خصوصیتی در فرزند می‌شود که در والدینش وجود نداشته است. همبری که در سلول‌های جنسی والدین رخ می‌دهد عبارت از شکسته شدن دو کروموزوم از دو همتا از محلی معین و جابجایی تکه‌های جدا شده است. به عبارت دیگر، در همبری، دو کروموزومی که یکسان نیستند از محل‌هایی معین شکسته و سپس تکه‌های آنها جابجا می‌شود. تئوری تکامل داروین بیان می‌دارد تغییراتی که در

---

1- Gregor Mendel

2- Mutation

3- Cross-over

خصوصیات فرزند نسبت به والدینش به وجود می‌آید، بسته به این که توانایی فرزند را در سازگاری با محیط بیشتر و یا کمتر کند، شانس بقای آن را به ترتیب بیشتر و یا کمتر می‌کند. به عبارت دیگر، طبیعت افراد قوی‌تر و سازگارتر را با احتمال بیشتری نسبت به افراد ضعیف‌تر و ناسازگارتر، برای ادامه حیات نگاه می‌دارد [۲۹، ۳۰].

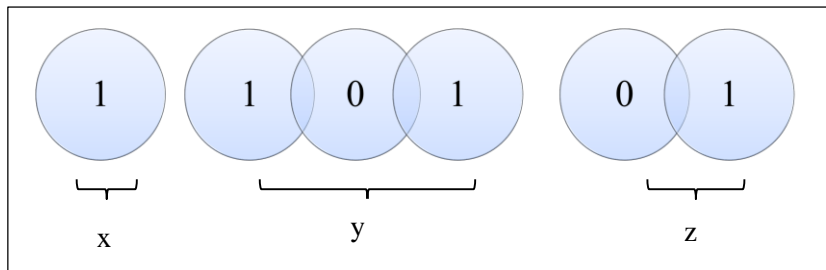
## ۲-۳-۵-۳-ب: الگوریتم ژنتیک

در الگوریتم ژنتیک (GA)، متغیرهای مسئله، خصوصیات فردی فرض می‌شوند. این خصوصیات توسط ژن‌ها به صورت رمز درآمده‌اند و با کنار هم گذاشتن آن‌ها از طریق ایجاد یک جمعیت تصادفی، فرد بهینه و یا جمعیت بهینه با خصوصیات برتر جستجو می‌شود. بقای افراد با خصوصیات برتر یا ضعیف‌تر، به انتخاب طبیعی واگذار می‌شود. به عبارت دیگر بقای افراد یک پدیده‌ی احتمالی، اما وابسته به میزان شایستگی آن‌ها می‌باشد. مهمترین خصوصیات الگوریتم ژنتیکی عبارتند از:

۱. شروع جستجو با یک مجموعه جواب و انجام جستجو به صورت موازی
۲. استفاده از احتمالات، جهت تولید نسل‌های بعد
۳. توانایی بهینه‌سازی مسائل با توابع پیوسته و گسسته
۴. سرعت بالای بهینه‌سازی
۵. گیر نیفتادن در بهینه‌های محلی و پیدا کردن بهینه‌ی فرامحلی
۶. توانایی بهینه‌سازی مسائل با تعداد متغیر زیاد
۷. ارائه مجموعه جواب‌های قابل قبول به جای ارائه تنها یک جواب

مهمترین و پرکاربردترین واژه‌هایی که در الگوریتم ژنتیکی بکار برده می‌شوند، به صورت خلاصه در ادامه توضیح داده شده‌اند.

الف) کروموزوم: در الگوریتم ژنتیکی، هر فرد تنها یک کروموزوم دارد و هر کروموزوم به معنای یک راه حل مسئله به صورت رمزی شده می‌باشد. کروموزوم‌ها از ترکیب مقادیر مختلف متغیرها یا ژن‌ها (هر ژن مبین یک متغیر است) به وجود می‌آیند. در الگوریتم ژنتیکی دوتایی<sup>۱</sup>، ژن‌ها از تعداد معینی بیت تشکیل شده‌اند. پس هر کروموزوم به صورت یک رشته از بیت‌ها می‌باشد که هر ژن آن تعدادی بیت را شامل می‌شود. بسته به مقادیری که بیت‌های یک ژن می‌گیرند، مقدار ژن تغییر می‌کند. شکل (۱-۲) یک کروموزوم ۶ بیتی را که از ۳ ژن  $x$ ,  $y$ ,  $z$  تشکیل شده است، نشان می‌دهد [۲۹، ۳۰].



شکل (۱-۲): شمای یک کروموزوم ۶ بیتی

ب) جمعیت: به تعداد مشخصی از کروموزوم‌ها که در کنار هم قرار بگیرند، جمعیت گفته می‌شود و با نماد  $N$  معرفی می‌گردد. هر جمعیت توسط عملگرهای وراثتی (انتخاب، همبندی و جهش) جمعیت بعدی را می‌سازد.

ج) تابع شایستگی<sup>۲</sup>: برتری کروموزوم‌ها (افراد) نسبت به یکدیگر با توجه به یک معیار سنجیده می‌شود. این معیار تابع شایستگی است. برای حل هر مسئله بهینه‌سازی، باید یک تابع شایستگی تعریف شود. بهینه‌سازی به فرآیندی اطلاق می‌گردد که طی آن با تنظیم ورودی‌ها، بهترین مشخصه‌ی خروجی مدنظر باشد. در فرآیند بهینه‌سازی الگوریتم ژنتیک، همواره ماکزیمم شدن تابع شایستگی

1- Binary genetic algorithm  
2- Fitness function

مدنظر است. تابع شایستگی برای هر کروموزوم یک عدد نامنفی ارائه می کند که نشان دهنده‌ی کارایی و توانایی کروموزوم در حل مسئله است.

(د) تولید مثل: پس از آنکه تمام افراد جمعیت توسط تابع شایستگی ارزیابی شدند، شایسته‌ترین آن‌ها طبق قوانین احتمالات انتخاب، و با یکدیگر تولید مثل می کنند. این عمل نیازمند عملگرهای وراثتی می باشد.

(ه) عملگر انتخاب: انتخاب والدین جهت تولیدمثل و همچنین تعیین اینکه والدین چندبار حق زاد و ولد دارند، به کمک عملگر انتخاب که براساس اصل انتخاب طبیعی داروین عمل می کند، صورت می پذیرد. عملگر انتخاب با توجه به شایستگی کروموزوم‌ها، بطور تصادفی یک کروموزوم را انتخاب و یک کپی از آن را به حوضچه‌ی ازدواج<sup>۱</sup> منتقل می کند. کروموزوم انتخاب شده از جمعیت اولیه حذف نمی شود و شانس انتخاب مجدد را دارد. عمل انتخاب و انتقال کروموزوم به تعداد جمعیت اولیه‌ی کروموزوم‌ها، انجام می شود. به عبارت دیگر  $N$  دفعه عمل انتخاب والد انجام شده و  $N$  والد در حوضچه-ی ازدواج پدید می آید. ممکن است کروموزوم بیش از یکبار برای تولید مثل انتخاب شود، در این صورت حداقل تعداد کروموزومی که برای تولید مثل انتخاب نشده‌اند و از دور خارج شده و نسل و خصوصیاتش از بین رفته است، برابر با تعداد دفعات انتخاب آن کروموزوم منهای یک خواهد بود. برای مثال اگر کروموزومی ۶ بار انتخاب شود حداقل ۵ کروموزوم دیگر نسل‌شان از بین رفته است. بطور کلی افراد شایسته‌تر شانس زاد و ولد بیشتری دارند و فرزندان شایسته‌تری نیز تولید می کنند.

(و) عملگر همبندی: بطور تصادفی دو کروموزوم از حوضچه‌ی ازدواج انتخاب شده و با یکدیگر ازدواج می کنند و دو فرزند برای نسل بعد بوجود می آورند. دو والد انتخاب شده دیگر به حوضچه‌ی ازدواج برنمی گردد. پس از آنکه  $\frac{n}{2}$  بار عمل انتخاب والد از حوضچه ازدواج صورت گرفت، حوضچه ازدواج خالی گشته و  $N$  فرزند بوجود می آید. طی فرآیند ازدواج، عملگر همبندی طبق آنچه که در بخش (۲-۳-۵) عنوان شد، عمل می کند.

---

1- Mating pool



ز) عملگر جهش: در کروموزوم‌های فرزند بصورت کاملاً اتفاقی خصوصیت جزئی به منظور افزایش سازگاری با محیط صورت می‌پذیرد. این کار توسط عملگر جهش انجام می‌شود.

ح) همگرایی<sup>۱</sup>: پیشرفت به سوی یکنواختی را همگرایی گویند. در الگوریتم ژنتیکی، نسل به نسل جمعیت شایسته‌تر شده و جواب‌ها به سمت بهینه‌ی فرا محلی همگرا می‌شوند. زمانی که شایستگی افراد جمعیت و متوسط شایستگی جمعیت زیاد شود، شایستگی کروموزوم‌های جمعیت تقریباً یکسان و یکنواخت می‌شود و اصطلاحاً گفته می‌شود که الگوریتم همگرا شده است. اگر الگوریتم ژنتیکی به سمت بهینه‌های محلی همگرا شود، همگرایی زودرس رخ داده است. راهکار رهایی از این نوع همگرایی، در ادامه همین فصل توضیح داده شده است. با توجه به آنچه که عنوان شده می‌توان الگوریتم ژنتیکی را با وراثت به صورت جدول (۲-۴) مقایسه کرد [۲۹، ۳۰].

جدول (۲-۴): مقایسه وراثت و الگوریتم ژنتیکی

الگوریتم ژنتیکی	وراثت
یک راه حل رمزی برای مسأله	فرد
مجموعه‌ای از راه حل‌ها	جمعیت
کیفیت یک راه حل	شایستگی
مقادیر مختلف یک متغیر	حالات مختلف یک ژن
عملگر انتخاب	انتخاب طبیعی
عملگرهای جستجو	همبری و جهش

## ۲-۳-۵-۳-ج: ساختار الگوریتم ژنتیکی

۱- از جمله پارامترهایی که در ابتدای شروع الگوریتم باید مقدار دهی شود، می‌توان به تعداد کروموزوم‌ها ( $N$ )، شرط توقف، تعداد متغیرها ( $m$ )، دامنه متغیرها، طول هر متغیر (تعداد بیت‌های هر

1- convergence

متغیر) و ... اشاره کرد. طول هر کروموزوم ( $L$ ) به تعداد متغیرهای آن کروموزوم و تعداد بیت‌های هر متغیر بستگی دارد و از رابطه‌ی (۲-۱۵) مشخص می‌شود.

$$L = \sum l_i \quad (۲-۱۵)$$

در این رابطه  $l_i$  طول متغیر  $i$ ام بر حسب بیت می‌باشد. ترتیب بیت‌ها برای تمام کروموزوم‌ها باید یکسان باشد. همچنین تابع شایستگی نیز قبل از شروع الگوریتم باید تعریف شود.

۲- جمعیت اولیه‌ای از کروموزوم‌ها نیز به صورت کاملاً تصادفی ایجاد می‌گردد. تعداد اعضای جمعیت (تعداد کروموزوم‌ها) با توجه به فضای مسئله تعیین می‌شود.

۳- پس از ایجاد یک جمعیت تصادفی، باید کروموزوم‌ها رمزگشایی شوند. بدین منظور کروموزوم‌ها تک تک از جمعیت جدا شده، ژن‌های آن مشخص گردیده و سپس اطلاعات دودویی ژن‌ها به اطاعات دهنده‌ی تبدیل می‌شود. اطاعات دهنده‌ی نشان‌دهنده‌ی تعداد حالات مختلف یک متغیر است.

۴- هر کروموزوم براساس معیاری که توسط تابع شایستگی تعریف می‌شود، ارزیابی می‌گردد.

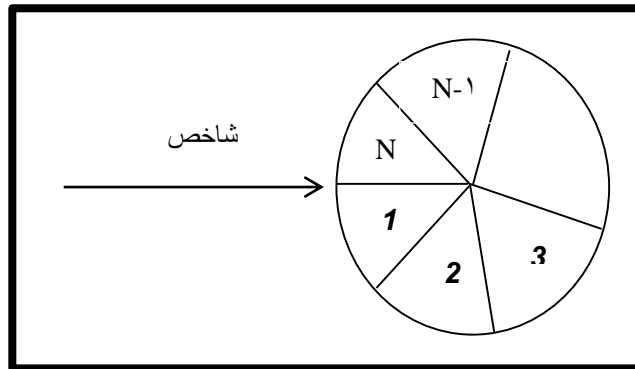
۵- پس از ارزیابی کروموزوم‌ها، باید تولید مثل انجام شود. بدین منظور ابتدا عملگر انتخاب، عمل می‌کند. این عملگر، انتخاب را متناسب با برازندگی انجام می‌دهد. جهت پیاده سازی این عملگر، از تکنیک چرخ گردان<sup>۱</sup> استفاده می‌شود. به منظور تفهیم این تکنیک، فرض می‌شود که  $N$  کروموزوم وجود داشته باشد و شایستگی هر کروموزوم  $fit_i$  باشد. در این صورت شانس انتخاب ( $P_i$ ) هر کروموزوم از رابطه‌ی (۲-۱۶) به دست خواهد آمد.

$$P_i = \frac{fit_i}{\sum_{i=1}^N fit_i} \quad (۲-۱۶)$$

مطابق شکل (۲-۲) دایره‌ای در نظر گرفته می‌شود و به هر کروموزوم متناسب با شانس انتخاب آن یک قطاع تعلق می‌گیرد. اندازه  $\alpha$ ام که متعلق به کروموزوم  $i$ ام است برابر  $2\pi p_i$  خواهد بود.

---

1- Roulette wheel

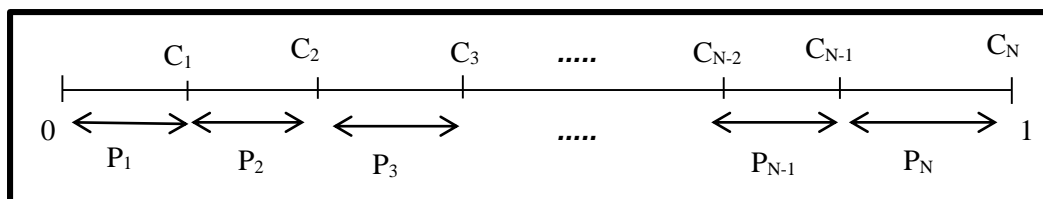


شکل (۲-۲): شمایی از چرخ گردان

سپس این چرخ دایره‌ای شکل چرخانده شده و پس از متوقف شدن، یک کپی از کروموزومی که شماره‌اش روبروی نشانگر واقع می‌شود به حوضچه ازدواج انتقال می‌یابد. بدین ترتیب یک کروموزوم متناسب با شایستگی‌اش و طبق قوانین احتمال انتخاب می‌شود. در عمل جهت اجرای عملگر انتخاب، از پارامتر  $C_i$  که مقدار آن از رابطه‌ی (۲-۱۷) بدست می‌آید، استفاده می‌شود.

$$C_i = \sum_{i=1}^n p_i \quad (۲-۱۷)$$

بازه اعداد بین ۰ و ۱ متناسب با  $C_i$  مربوط به هر کروموزوم مطابق شکل (۲-۳) تقسیم بندی می‌شود. سپس یک عدد تصادفی ( $q$ ) بین ۰ و ۱ انتخاب می‌شود. مطمئناً  $C_i < q \leq C_{i-1}$  می‌باشد. یک کپی از کروموزوم  $i$  به حوضچه‌ی ازدواج منتقل می‌شود. بدیهی است که هر چه  $P_i$  بزرگتر باشد، بازه‌ی بزرگتری به کروموزوم  $i$  اختصاص می‌یابد و شانس انتخاب آن کروموزوم بیشتر می‌شود. این شیوه‌ی انتخاب منطبق بر اصل انتخاب طبیعی داروین است.



شکل (۲-۳): تقسیم بازه ۰ و ۱ متناسب با  $C_i$  هر کروموزوم

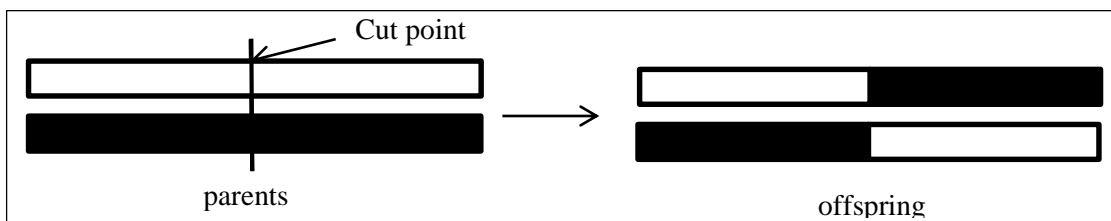
تعداد دفعاتی که انتظار می‌رود کروموزوم  $i$  طبق قوانین احتمال انتخاب شود، نرخ انتظار<sup>۱</sup> ( $EV$ ) نامیده شده و از رابطه (۲-۱۸) به دست می‌آید.

$$EV_i = P_i * N \quad (18-2)$$

$$\sum EV_i = \sum P_i * N = 1 * N = N \quad (19-2)$$

مفهوم رابطه‌ی اخیر، آن است که انجام  $N$  دفعه عمل انتخاب منجر به ایجاد  $N$  والد در حوضچه‌ی ازدواج می‌گردد.

۶- مهمترین عملگر در الگوریتم ژنتیکی، عملگر همبیری است. این عملگر ابتدا دو والد را بطور تصادفی از حوضچه‌ی ازدواج انتخاب می‌کند. سپس با یک احتمال معین که احتمال همبیری<sup>۲</sup> ( $PC$ ) نامیده می‌شود، عمل همبیری بین دو والد انتخاب شده انجام می‌شود و فرزندان نسل بعد بوجود می‌آیند. احتمال اینکه عمل همبیری انجام نشود  $1 - PC$  می‌باشد. اگر عمل همبیری انجام نشود خود والدین به نسل بعدی منتقل می‌شوند. همبیری انواع متفاوتی دارد که ساده‌ترین آنها همبیری تک نقطه‌ای<sup>۳</sup> بین دو والد است. این نوع همبیری در شکل (۲-۴) نشان داده شده است.



شکل (۲-۴): همبیری تک نقطه‌ای بین دو والد

نقطه‌ی برش<sup>۴</sup> در عمل همبیری به صورت تصادفی تعیین می‌شود و فرزندان<sup>۴</sup> که پس از این عمل ایجاد می‌شوند برخی از خصوصیات هر دو والد را دارا هستند.

---

1- Expected Value  
 2- Probability of cross-over  
 3- Single point cross-over  
 4- Cut point

۷- احتمال جهش<sup>۱</sup> ( $P_m$ ) در الگوریتم ژنتیکی بسیار پایین است (اغلب بین ۰/۰۱ تا ۰/۰۰۱). نحوه‌ی اجرای جهش به این صورت است که یک بیت از کروموزوم به صورت تصادفی انتخاب می‌شود و با احتمال  $P_m$  مقدار این بیت اگر ۱ باشد به ۰ و اگر ۰ باشد به ۱ تغییر داده می‌شود. پس تعداد کل بیت‌های جهش یافته در یک جمعیت  $N$  کروموزومی که طول هر کروموزوم آن  $L$  می‌باشد، برابر  $P_m * N * L$  خواهد بود. مهمترین مزیت جهش این است که خصوصیتی را که در هیچ کدام از والدین وجود نداشته است، در فرزندان بوجود می‌آورد. اما اگر میزان جهش زیاد شود، احتمال از بین رفتن کروموزوم‌های شایسته پیش می‌آید. همچنین جهش به شدت در همگرایی الگوریتم ژنتیکی تأثیر دارد و اگر احتمال جهش خیلی زیاد باشد، همگرایی از بین می‌رود و اگر خیلی کم باشد، سبب همگرایی زودرس می‌شود. بنابراین احتمال جهش باید متعادل و به گونه‌ای باشد که همگرایی مطلوبی را بوجود آورد [۳۱، ۳۲].

## ۲-۳-۵-۳-۵: ارزیابی کارایی الگوریتم ژنتیکی

برای ارزیابی کارایی الگوریتم ژنتیکی، باید معیاری برای همگرایی الگوریتم قرار داده شود و بررسی شود که آیا الگوریتم به بهینه فرا محلی همگرا می‌شود یا خیر. بدین منظور دو پارامتر متوسط شایستگی<sup>۲</sup> (Ave-fit) و شایسته‌ترین تاکنون<sup>۳</sup>، در تمام مراحل اجرای الگوریتم ژنتیکی محاسبه می‌شوند. متوسط شایستگی در واقع متوسط شایستگی جمعیت و میزان همگرایی الگوریتم را نشان می‌دهد و پارامتر شایسته‌ترین تاکنون، نشان دهنده‌ی برانزده‌ترین جواب الگوریتم است که از بین تمام نسل‌ها انتخاب می‌شود. این معیار مبین توانایی الگوریتم در یافتن بهینه‌ی فرامحلی است. اگر فاصله‌ی این دو پارامتر از یکدیگر زیاد باشد، نشان دهنده همگرا نشدن الگوریتم است و اگر این دو به هم خیلی نزدیک شوند می‌تواند ناشی از همگرایی زودرس الگوریتم باشد.

---

1- Probability of mutation  
2- Average fitness  
3- Best fit so far

از آنجایی که الگوریتم ژنتیکی بر مبنای احتمالات عمل می‌کند، بنابراین لازم است تا برای حل یک مسئله، الگوریتم به دفعات تکرار شود و سپس جواب‌ها مورد ارزیابی واقع شوند.

برخی از روش‌های مبتنی بر نخبه‌گرایی مانند برنامه تکاملی<sup>۱</sup> (EP)، به جای جایگزینی کامل والدین توسط فرزندان در نسل بعد، برخی از شایسته‌ترین والدها را نیز به نسل جدید منتقل می‌کنند و نسل‌های بعد هم براساس شایسته‌ترین کروموزوم‌ها شکل می‌گیرند. این عمل سبب کاهش احتمالات و افزایش قطعیت در الگوریتم می‌شود که نهایتاً بدلیل کاهش تنوع ژنی، الگوریتم به سمت بهینه محلی سوق داده می‌شود [۳۱، ۳۲].

## ۲-۳-۶- ساخت مدل

در این مرحله با استفاده از روش‌های آماری مختلف، مدل‌سازی انجام می‌شود. در واقع مدل یک معادله ریاضی است که بیانگر رابطه‌ی بین متغیر وابسته و متغیرهای مستقل (توصیفگرها) می‌باشد. با داشتن مقادیر متغیرهای مستقل وارد شده در مدل، می‌توان مقدار متغیر وابسته را محاسبه کرد. در مطالعات رابطه‌ی کمی ساختار- خاصیت، مدل‌سازی به دو صورت خطی و یا غیر خطی انجام می‌شود. در مدل خطی با در نظر گرفتن اینکه رابطه‌ی بین توصیفگرها و متغیر وابسته، یک رابطه‌ی خطی است، مدل‌سازی صورت می‌گیرد. زمانی که مدل‌های خطی نتایج مطلوبی ارائه ندهند و یا روابط غیر خطی بین توصیفگرها و متغیر وابسته وجود داشته باشد، از مدل غیرخطی استفاده می‌شود. در این حالت اغلب از شبکه‌های عصبی مصنوعی جهت مدل‌سازی استفاده می‌شود. در این پایان نامه تنها از روش شبکه‌ی عصبی مصنوعی برای مدل‌سازی به روش غیر خطی استفاده شده است لذا در ادامه مختصری راجع به این روش توضیح خواهیم داد.

---

1- Evolutionary Programming

## ۲-۳-۷- ارزیابی اعتبار مدل‌های انتخاب شده

به منظور ارزیابی اعتبار مدل‌های انتخاب شده در مرحله قبل، از نظر مستقل بودن آن‌ها نسبت به سری داده‌ها، از روش ارزیابی تقاطعی<sup>۱</sup> (CV) استفاده می‌شود. در این روش، هر بار تعداد معینی از مولکول‌ها کنار گذاشته می‌شوند و با بقیه مولکول‌ها، مدل‌سازی انجام می‌شود. سپس Y برای مولکول‌های کنار گذاشته شده پیش‌بینی می‌شود. این کار آنقدر تکرار می‌شود تا تمام مولکول‌ها، حداقل یکبار در دسته‌ای که در مدل‌سازی شرکت نمی‌کند، قرار گیرند. بسته به تعداد مولکول‌های کنار گذاشته شده، این روش به دو شیوه حذف یکتایی<sup>۲</sup> (LOO) و حذف چندتایی (LGO یا LMO<sup>۳</sup>) قابل انجام است. در شیوه LOO هر بار یک مولکول از سری داده‌ها کنار گذاشته شده و مدل‌سازی با بقیه مولکول‌ها انجام می‌پذیرد. بدیهی است که در این حالت، به تعداد مولکول‌های سری داده‌ها، باید این عمل صورت گیرد، اما در شیوه LGO هر بار یک چندتایی از مولکول‌های سری داده‌ها کنار گذاشته می‌شود. بقیه مراحل LGO مانند LOO است. تعداد دفعات انجام عمل LGO به تعداد مولکول‌هایی بستگی دارد که هر بار کنار گذاشته می‌شوند [۴۲].

آزمون تصادفی کردن داده‌ها<sup>۵</sup> یا به عبارتی آزمون Y- تصادفی نیز روشی برای ارزیابی اعتبار مدل است که هدف این روش بررسی هر گونه ارتباط تصادفی بین داده‌ها می‌باشد. در این روش به متغیر وابسته یا همان خاصیت مورد اندازه‌گیری، به جای پاسخ درست داده‌ی تصادفی داده می‌شود. اگر تفاوت چشمگیری بین نتایج حاصل از داده‌های تصادفی و داده‌های تجربی باشد نشان‌دهنده‌ی صحت و اعتبار کار است.

---

1- Cross Validation  
2- Leave One Out  
3- Leave Group Out  
4- Leave Multiple Out  
5- Y- randomization test

## ۲-۴- شبکه‌های عصبی مصنوعی

سیستم عصبی انسان یک سیستم بسیار پیچیده است که قادر به تفکر، یادگیری، یادآوری، تجزیه و تحلیل مسائل است. شبکه‌ی عصبی مصنوعی یک برنامه نرم‌افزاری است که نتیجه‌ی کوشش‌های دانشمندان جهت مدل‌سازی سیستم عصبی انسان می‌باشد. شبکه‌های عصبی مصنوعی، طرحی ساده شده از سیستم عصبی بیولوژیکی است که هر چند از لحاظ ساختاری، کاملاً شبیه آن نیست، اما بسیاری از توانمندیهای آن از جمله قابلیت پردازش سریع حجم وسیعی از داده‌ها و استخراج اطلاعات از آنها را دارا می‌باشد که این ویژگی در عصر حاضر بسیار حائز اهمیت می‌باشد. به این سیستم‌ها، هوشمند گفته می‌شود زیرا شبکه‌ها براساس محاسبات روی داده‌های عددی یا مثال‌ها، قوانین کلی را فرا می‌گیرند [۳۳].

## ۲-۴-۱- سیستم عصبی بدن انسان

در این قسمت ویژگی‌هایی از ساختار عملکرد مغز توضیح داده می‌شود که برای توسعه‌ی شبکه‌های عصبی مصنوعی الگوبرداری شده‌اند. سیستم عصبی بدن انسان به دو قسمت سیستم عصبی مرکزی<sup>۱</sup> (CNS) و سیستم عصبی محیطی تقسیم بندی می‌شود. سیستم اعصاب مرکزی شامل مغز و نخاع است که هر کدام شامل مناطق خاصی با وظایف معین هستند. به طور کلی فعالیت‌های CNS به سه دسته طبقه بندی می‌شوند: ورودی‌ها، که کلیه‌ی داده‌های وارده به مراکز مغزی را شامل می‌شود؛ خروجی‌ها، که در کنترل عضلات اندام‌ها و غدد نقش دارند؛ و آنچه که باعث ارتباط بین ورودی‌ها و خروجی‌ها می‌شود [۳۳].

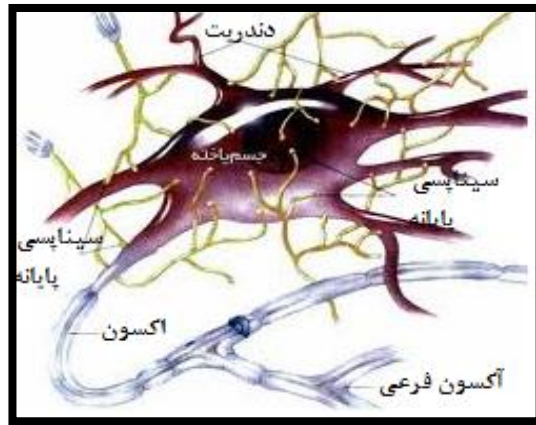
---

1 Central Nervous System



## ۲-۴-۱-۱- نرون زیستی

اعمال CNS از طریق میلیاردها نرون<sup>۱</sup> صورت می‌گیرد. نرون واژه‌ی یونانی به معنای سلول عصبی است. نرون‌ها بسته به محل استقرارشان در شبکه‌ی عصبی بدن از نظر شکل و اندازه با هم تفاوت دارند ولی ساختمان کلی آنها تقریباً یکسان است. ساختمان یک نرون در شکل (۲-۵) نشان داده شده است.



شکل (۲-۵): شمایی از نرون زیستی

یک نرون از سه قسمت جسم سلولی، دندریت‌ها<sup>۲</sup> و آکسون<sup>۳</sup> تشکیل شده است. جسم سلولی خود از هسته و پلازما تشکیل شده است. هسته شامل اطلاعات وراثتی است و پلازما مورد نیاز سلول عصبی را در خود حفظ می‌کند. دندریت‌ها رشته‌های ریشه مانند و کوتاه با سطح وسیع هستند که متصل به جسم سلولی بوده و به‌عنوان گیرنده‌ی نرون عمل می‌کنند. سطح دریافت‌کننده دندریت‌های یک نرون نوعی تقریباً  $25 \text{ mm}^2$  است. آکسون که به‌عنوان مسیر انتقال پیام عصبی می‌باشد، رشته‌ای دراز و بلند است که از یک طرف به جسم سلولی متصل و از طرف دیگر به یک شبکه‌ی رشته‌ای منتهی می‌شود (پایانه‌های آکسونی) و با دندریت‌های سایر نرون‌ها مرتبط است. آکسون اطلاعات خروجی را از جسم سلولی گرفته و به خارج از نرون می‌فرستد. ارتباط بین آکسون

---

1- Neuron  
2- Dendrite  
3- Axon

یک نرون و دندریت نرون دیگر را سیناپس<sup>۱</sup> (واژه یونانی به معنای تماس) می‌نامند. در واقع سلول‌های عصبی از طریق سیناپس‌ها با یکدیگر ارتباط برقرار می‌کنند. یک نرون منفرد می‌تواند دارای ۱۰۰۰ تا ۱۰۰۰۰ سیناپس باشد و با ۱۰۰ نرون دیگر ارتباط داشته باشد.

انتقال اطلاعات در سیستم عصبی به صورت الکتریکی و شیمیایی انجام می‌پذیرد. تحریکات بیرون و درون بدن توسط حسگرها دریافت شده و پس از جمع‌آوری به علائم الکتریکی تبدیل می‌شوند. اندازه‌ی بار الکتریکی به قدرت سیگنال ورودی بستگی دارد. هر سیگنال ورودی متناسب با قدرت خود وزن می‌گیرد و توسط دندریت‌ها به جسم سلولی منتقل می‌شود. چنانچه شدت مجموع سیگنال‌ها از حد آستانه نرون بیشتر شود، جسم سلولی فعال شده و سیگنال خروجی به صورت یک یا تعدادی پالس متوالی ایجاد می‌شود. هر چند که فیبر عصبی پالس را در طول خود هدایت می‌کند ولی انتقال پتانسیل عمل از یک نرون به نرون دیگر در محل سیناپس به یک انتقال دهنده‌ی عصبی<sup>۲</sup> یا انتقال دهنده‌ی هورمونی-عصبی نیاز دارد. با ورود پتانسیل عمل به انتهای عصب (پایانه‌های آکسونی)، انتقال دهنده‌های عصبی که در واقع واسطه‌های شیمیایی هستند و در میتوکندری‌ها نگهداری می‌شوند، در فضای سیناپسی آزاد گشته و از طریق اثر گذاشتن برگیرنده‌های موجود در غشاء نرون‌های دیگر، سبب تحریک یا مهار عمل آنها می‌شوند. نرونی که پیام را می‌فرستند به نرون پیش‌سیناپسی<sup>۳</sup> و نرونی که پیام را دریافت می‌کند به نرون پس‌سیناپسی<sup>۴</sup> معروف است [۳۴، ۳۵].

## ۲-۴-۲- تاریخچه‌ی شبکه‌های عصبی مصنوعی

اولین مطالعه روی فعالیت مغز انسان توسط ویلیام جیمز<sup>۵</sup> در سال ۱۸۹۰ صورت پذیرفت. اما آغاز واقعی مدل‌سازی سیستم عصبی به سال ۱۹۳۴ که والتر پیتز<sup>۶</sup> و وارن مک کالوچ<sup>۷</sup> مقاله‌ی خود را

---

1- Synapse  
2- Neurotransmitter  
3- Presynaptic  
4- Postsynaptic  
5- William James  
6- Walter Pitts  
7- Warren McCulloch

در مورد شبکه‌ی عصبی ساده‌شان منتشر کردند، برمی‌گردد [۳۶]، سیستم طراحی شده توسط آنها قابلیت آموزش نداشت لذا دونالد هب<sup>۱</sup>، قانون آموزش این شبکه‌ها را در کتابی تحت عنوان «سازماندهی رفتار» به چاپ رساند، که این قانون آموزش، امروزه تحت عنوان قانون هبیان<sup>۲</sup> معروف است. در سال ۱۹۵۸ فرانک روزنبلت<sup>۳</sup> اولین محاسبه‌گر عصبی موفقیت آمیز را طراحی کرد که توان شناسایی برخی کارکترها را داشت [۳۷]. در سال ۱۹۶۲ همین دانشمند کتاب خود تحت عنوان «اصول دینامیک عصبی» را منتشر کرد. در سال ۱۹۸۶ نقطه‌ی عطفی در تاریخ شبکه‌های عصبی مصنوعی پدید آمد. در این سال رومل هارت<sup>۴</sup> کتاب خود را در زمینه استراتژی یادگیری شبکه‌های عصبی مصنوعی به چاپ رساند که این امر باعث ایجاد زمینه‌های پژوهشی جدید و جالب در شاخه‌های مختلف علوم گردید [۳۸].

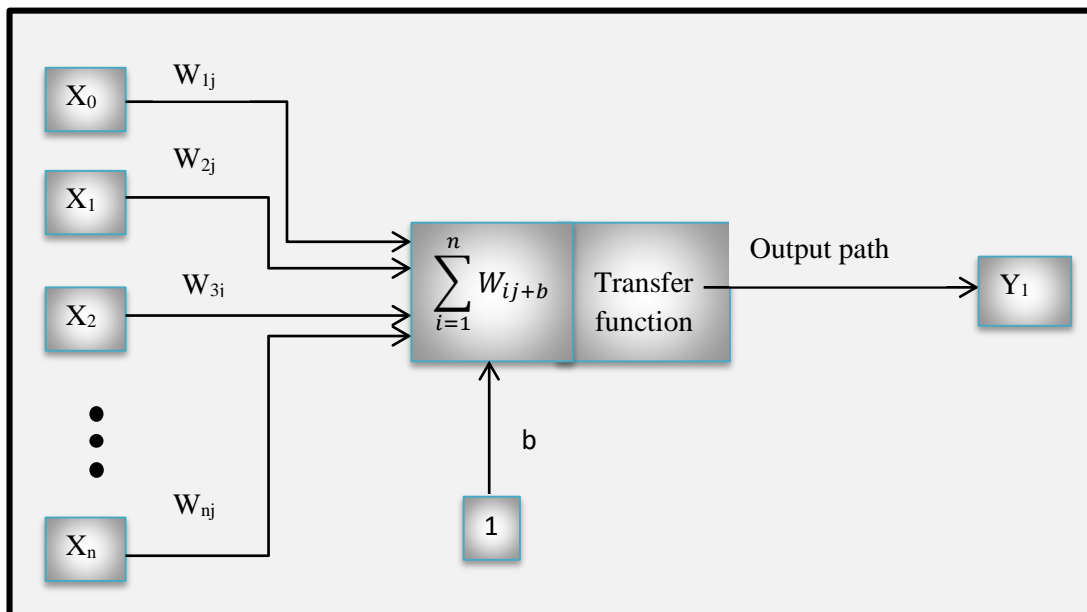
## ۲-۴-۳- مدل یک نرون مصنوعی

یک نرون طبیعی، دنیایی از پیچیدگی‌ها را در خود دارد و به همین دلیل ارائه‌ی یک مدل مصنوعی برای آن، به نحوی که بتواند همه‌ی خصوصیات آن را داشته باشد، کاری فوق العاده مشکل است. بنابراین در مدلی که ارائه می‌گردد، سعی می‌شود که خصوصیات اصلی یک نرون طبیعی لحاظ شود. به این مدل مصنوعی اصطلاحاً نرون مصنوعی<sup>۵</sup> یا عنصر پردازشگر<sup>۶</sup> گفته می‌شود. هر نرون مصنوعی شامل ورودی، جسم سلولی و یک خروجی است. شمای یک نرون مصنوعی در شکل (۲-۶) نشان داده شده است [۳۳]. هر ورودی قبل از اینکه وارد هسته‌ی اصلی عنصر پردازشگر شود، وزن‌دار می‌گردد، یعنی در ضرب  $W_j$  ضرب می‌شود. این کار معادل تأثیر سیناپس بر سیگنال ورودی قبل از

---

1- Donald hebb  
2- Hebbian rule  
3- Frank Rosenblatt  
4- Rumel Hart  
5- Artificial Neuron  
6- Processing Element

ورود به نرون بیولوژیکی است. به همین دلیل به وزن‌ها، وزن سیناپسی نیز گفته می‌شود. سپس ورودی‌های وزن‌دار شده با هم جمع‌زده می‌شوند. علاوه بر این نرون عصبی از یک بایاس هم برخوردار است. بایاس در واقع یک سیگنال ورودی به نرون است. سرانجام یک صافی غیرخطی که تابع فعالسازی<sup>۱</sup> یا تابع انتقال<sup>۲</sup> نامیده می‌شود، علائم ورودی را ترکیب و خروجی را بوجود می‌آورد.



شکل (۲-۶): شمای نرون مصنوعی لام

## ۴-۴-۲- تابع فعالسازی

توابع فعالسازی می‌توانند به صورت خطی و یا غیرخطی باشد. یک تابع فعالسازی براساس نیاز خاص حل یک مسئله که قرار است به وسیله شبکه‌ی عصبی حل شود، انتخاب می‌شود. در عمل تعداد محدودی از توابع فعالسازی مورد استفاده قرار می‌گیرند. توابع فعالسازی باید در محدوده‌ی مشخصی تعریف شده باشند و به صورت تدریجی بین دو مقدار مجانب تغییر کنند. متداول‌ترین تابع فعالسازی

1- Activation function  
2- Transfer function

غیرخطی در شبکه‌های عصبی تابع سیگموئیدی است که این به دلیل پیوسته بودن و سادگی محاسبه‌ی مشتق این تابع می‌باشد. این تابع می‌تواند مقادیر ورودی در محدوده‌ی  $-\infty$  تا  $+\infty$  را دریافت کند. اگر از تابع لگاریتم سیگموئیدی استفاده شود خروجی بین صفر و یک فشرده می‌شود، و اگر خروجی بین ۱ و ۱- فشرده شود، تابع تانژانت سیگموئیدی است [۳۵، ۳۸].

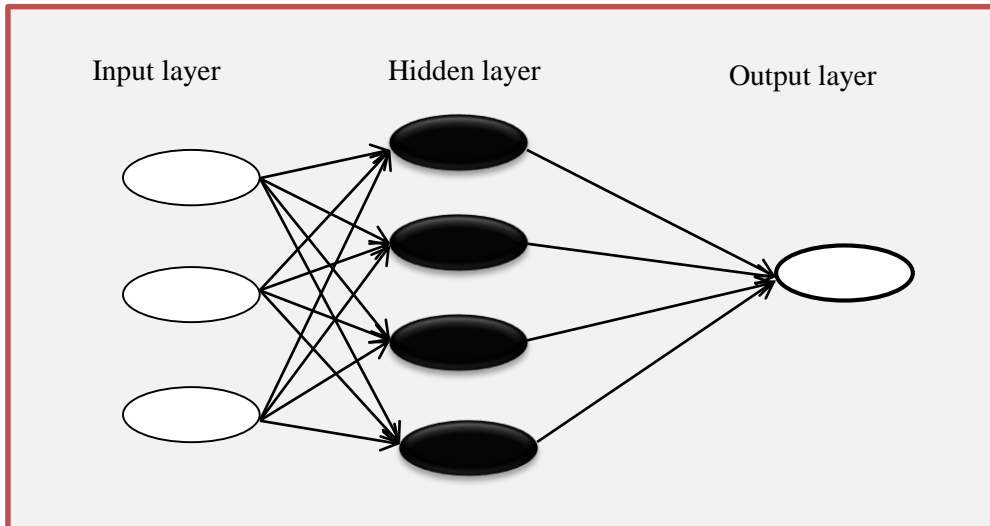
## ۲-۴-۵- ساختار شبکه‌های عصبی مصنوعی

در تعریفی ساده، شبکه‌ی عصبی مصنوعی به یک سیستم پردازش داده‌ها اطلاق می‌شود که از تعداد زیادی از عناصر پردازشگر ساده (نرون‌های مصنوعی) و بسیار مرتبط با هم تشکیل شده و ساختار آن از مغز انسان الهام گرفته شده است. شبکه‌های عصبی مصنوعی از نظر شیوه‌ی پردازش اطلاعات به دو دسته تقسیم می‌شوند: شبکه‌های پیشخور و شبکه‌های پسخور.

در شبکه‌های پیشخور مسیر پردازش همواره رو به جلو می‌باشد و به نرون‌های لایه‌ی قبل بازمی‌گردد بدین صورت که خروجی هر لایه، تأثیری بر همان لایه یا لایه‌های قبل ندارد. اما در شبکه‌های پسخور مسیر عبور سیگنال یکطرفه نیست، یعنی خروجی هر نرون بر روی همان نرون یا نرون‌های لایه‌ی قبل برمی‌گردد [۳۵].

شبکه‌های عصبی مصنوعی، شامل مجموعه‌ای از نرون‌ها هستند که در چند لایه، آرایش پیدا کرده‌اند و نحوه‌ی ارتباط نرون‌ها با یکدیگر به جای سیناپس، از طریق وزن می‌باشد. این شبکه‌ها از سه لایه‌ی ورودی، میانی (یا مخفی) و خروجی تشکیل شده‌اند. تعداد گره‌های موجود در لایه‌ی ورودی نشان دهنده‌ی تعداد متغیرهای مستقل وارد شده به شبکه می‌باشد. لایه‌ی خروجی، خروجی شبکه را در پاسخ به یک ورودی مشخص نشان می‌دهد و تعداد گره‌های لایه‌ی خروجی، نشان دهنده‌ی تعداد متغیرهای وابسته‌ای است که باید مدل‌سازی شود. سایر لایه‌ها که بین ورودی و خروجی قرار می‌گیرند، لایه‌های مخفی نامیده می‌شوند. شکل (۲-۷) شمای یک شبکه عصبی سه لایه را نشان

می‌دهد [۱۶]، مهمترین ویژگی شبکه‌های عصبی مصنوعی، آموزش پذیری، امکان بررسی ارتباطات غیرخطی و انجام محاسبات به صورت موازی می‌باشد.



شکل (۲-۷): شمایی از یک شبکه عصبی سه لایه

## ۲-۴-۶- یادگیری و یادآوری<sup>۱</sup> در شبکه های عصبی مصنوعی

منظور از یادگیری یا آموزش، فرآیندی است که موجب می‌شود سیستم بر اثر تغییر در محرک‌های بیرونی، پاسخی متناسب با آن ارائه دهد. به عبارت دیگر، فرآیند پیدا کردن وزن‌ها و بایاس‌های مناسب برای شبکه‌ی عصبی مصنوعی آموزش نامیده می‌شود. اما به عملی که طی آن یک شبکه آموزش دیده با ساختار وزنی مشخص یک ورودی را گرفته و خروجی متناسب با آن را ارائه نماید، یادآوری یا فراخوانی گفته می‌شود. دو فرآیند یادگیری و یادآوری مکمل یکدیگر هستند [۳۹].

در طی آموزش، شبکه در پاسخ به ورودی‌ها، مقدار وزن و بایاس خود را تغییر می‌دهد تا خروجی نهایی شبکه و خروجی واقعی با هم، همگرا گردند و زمانی که اختلاف بین این دو به حداقل

برسد، آموزش خاتمه می‌یابد. از مهمترین شیوه‌های آموزشی، می‌توان به یادگیری نظارت شده<sup>۱</sup> و یادگیری نظارت نشده<sup>۲</sup> اشاره کرد [۲۶، ۳۹].

در آموزش نظارت شده یا راهنمایی شده، ورودی و خروجی‌های متناظر با آن به شبکه داده می‌شود. سپس شبکه با استفاده از ورودی‌های داده شده پاسخی را ایجاد خواهد کرد، در ادامه خروجی حاصل از شبکه با خروجی مطلوب مقایسه می‌گردد که حاصل آن ایجاد یک سیگنال خطاست که موجب می‌شود شبکه برای کم کردن این سیگنال، وزن‌ها و بایاس خود را تعدیل نماید.

در آموزش نظارت نشده، خروجی‌های مطلوب به شبکه داده نمی‌شود، بنابراین شبکه کمکی را از خارج جهت آموزش دریافت نمی‌کند، لذا بایستی با استفاده از ورودی‌های داده شده، آموزش خود را انجام دهد. برای این کار، شبکه براساس تفاوت‌ها و شباهت‌های موجود در ورودی‌ها، آنها را دسته‌بندی کرده و الگوهای آموزشی خود را از آنها استخراج می‌نماید. در این شیوه‌ی آموزشی، شبکه برای طبقه بندی الگوهای ورودی به معیارهایی نیازمند می‌باشد که توسط کاربر تعیین می‌شود [۲۶، ۳۹].

در این پایان‌نامه از الگوریتم‌های آموزشی لوبنرگ-مارکوات و تنظیم بایزین استفاده گردیده است که جزء روش‌های آموزش با ناظر می‌باشند.

الگوریتم آموزشی لوبنرگ-مارکوات در سال ۱۹۹۴ معرفی شد که روش مناسبی برای آموزش شبکه‌هایی هستند که شاخص عملکرد آنها حداقل متوسط مربعات خطا می‌باشد. این روش تاکنون به عنوان سریعترین و مؤثرترین روش آموزش شبکه‌های عصبی شناخته شده است. سرعت همگرایی این روش صدها برابر بیشتر از شیوه‌های استاندارد مشابه است [۶].

معادله‌ی مربوط به الگوریتم لوبنرگ-مارکوات برای بهینه‌سازی پارامترهای شبکه و کاهش تابع خطا در هر مرحله طبق رابطه‌ی (۲-۲۰) می‌باشد:

---

1- Supervised learning  
2- Unsupervised learning

$$X_{k+1} = X_k - [J^T(X_k)J(X_k) + \mu_k I]^{-1} J^T(X_k) E(X_k) \quad (20-2)$$

که در آن  $X$  برداری است که مولفه‌هایش پارامترهای تنظیم پذیر شبکه (وزن‌ها و بایاس‌ها) می‌باشند.  $k$  نشان‌دهنده‌ی مرحله‌ی آموزش است،  $J$  معرف ماتریس ژاکوبین،  $I$  ماتریس یکانی،  $\mu$  ضریب یادگیری مارکوات بوده و عددی غیر منفی است، می‌باشد.

ماتریس ژاکوبین چنین تعریف می‌شود:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial e_1(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial e_1(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial e_1(x)}{\partial x_n} \\ \frac{\partial e_2(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial e_2(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial e_2(x)}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial e_n(x)}{\partial x_1} & \frac{\partial e_n(x)}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial e_n(x)}{\partial x_n} \end{bmatrix} \quad (21-2)$$

یعنی؛ ماتریس ژاکوبین شامل مشتقات مرتبه اول خطای شبکه نسبت به پارامترهای شبکه است.

برای جلوگیری از آموزش بیش از حد شبکه و ارتقاء عمومیت شبکه، الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین پیشنهاد شده است که در این الگوریتم تابع عملکرد متداول ( $MSE$ ) از طریق افزایش عبارات میانگین مربعات وزن‌ها و بایاس‌های شبکه اصلاح شده‌است.

$$F = \beta E_D + \alpha E_W \quad (22-2)$$

که در آن  $\alpha$  و  $\beta$  پارامترهای تابع کارایی،  $E_D$  و  $E_W$  به ترتیب میانگین مربعات خطاها و میانگین مربعات وزن‌ها می‌باشند که به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$E_D = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (e_i)^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - t_i)^2 \quad (23-2)$$

$$E_W = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (w_j)^2 \quad (24-2)$$

که در این روابط  $e_i$  بیانگر خطای مطلق،  $t_i$  مقادیر تجربی،  $y_i$  مقادیر محاسبه شده برای پارامتر تجربی مدنظر و  $N$  نشان‌دهنده تعداد مولکول‌ها می‌باشد. تابع خطا ترکیبی از میانگین مربع خطاها و میانگین مربع وزن‌هاست [۴۰].



## ۲-۴-۷- کاربردهای شبکه‌های عصبی مصنوعی

با توجه به محاسن و ویژگی‌های منحصر بفرد ذکر شده برای شبکه‌های عصبی مصنوعی، این شبکه‌ها کاربرد گسترده‌ای در مسائل کنترلی و بخصوص سیستم‌های پیچیده‌ای که مدلسازی آنها یا میسر نیست و یا به سختی انجام می‌شود، پیدا کرده‌اند. امروزه گزارشات فراوانی در مورد استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی در رشته‌های مختلف از جمله الکترونیک، اقتصاد، ورزش، علوم دارویی، کشاورزی و شیمی منتشر شده است [۴۱]. کاربرد شبکه‌های عصبی مصنوعی در شیمی و بخصوص در مطالعات تشخیص الگو، تفسیر طیف، کنترل کیفیت، طراحی آزمایش، کالیبراسیون غیر خطی، مدلسازی، پردازش سیگنال و ... رو به افزایش می‌باشد. آنچه که شبکه‌های عصبی مصنوعی را در آینده محبوب‌تر خواهد نمود، سرعت بالای کامپیوترها و الگوریتم‌های یادگیری سریعتر می‌باشد.

# فصل سوم

## بخش محاسبات

### ۳-۱- مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار - خاصیت

در این تحقیق از تکنیک‌های رگرسیون خطی چندگانه (MLR)، اتحاد جداسازی داده و انتخاب خاصیت (CDFS) و الگوریتم ژنتیک (GA) بعنوان روش‌های انتخاب توصیفگر و از شبکه‌ی عصبی مصنوعی برای مدلسازی غیر خطی استفاده شده است.

#### ۳-۱-۱- جمع‌آوری سری داده‌ها

با توجه به اینکه هدف این پایان‌نامه مدل‌سازی هدایت گرمایی آلکان‌های خطی مایع می‌باشد لذا پس از انجام تحقیق کتابخانه‌ای، داده‌های هدایت گرمایی ۱۵ آلکان خطی مایع از  $n$ -هگزان تا  $n$ -ایکوزان شامل ۱۲۱۵ داده در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار به عنوان سری داده‌ها انتخاب گردید. نام این ترکیبات به همراه محدوده‌ی دما و فشار، تعداد نقطه داده‌ی مورد استفاده از هر ترکیب در مدل‌سازی و مرجع مورد استفاده برای هر ترکیب در جدول (۳-۱) آمده است.

جدول (۳-۱): سری داده‌های جمع‌آوری شده

نام ترکیب	$\Delta T$ (K)	$\Delta P$ (MPa)	تعداد نقطه داده استفاده شده	مرجع
$n$ -هگزان	۲۹۸/۱۵-۳۷۳/۱۵	۲۴/۹۹-۲۵۰	۴۰	[۴۳،۴۴]
$n$ -هپتان	۲۹۸/۱۵-۳۷۳/۱۵	۲۴/۹۲-۲۵۰/۰۳	۳۸	[۴۴،۴۳]
$n$ -اکتان	۲۸۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۲۴/۹۲-۲۰۰/۰۵	۴۰	[۴۴]
$n$ -نونان	۳۰۸/۱۵-۳۶۳/۱۵	۵۳/۳-۵۰۳/۳	۶۴	[۴۵]
$n$ -دکان	۲۸۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۲۴/۹۲-۲۰۰/۰۵	۳۹	[۴۴،۴۳]
$n$ -آن‌دکان	۳۰۷/۷۵-۶۳۷/۴۵	۴/۹۰۳۳-۴۰۳/۲	۶۷	[۴۵،۴۶]
$n$ -دودکان	۲۹۸/۱۵-۳۷۳/۱۵	۲۴/۹۲-۲۰۰/۰۵	۳۹	[۴۶]
$n$ -تری‌دکان	۲۴/۳۰-۴۶۸/۴۰	۳۰۸/۱۵-۳۴۶/۱۵	۵۷	[۴۷]
$n$ -تترادکان	۲۹۳/۱۵-۴۷۳/۱۵	۹/۸-۴۹	۹۵	[۴۸]
$n$ -پنتادکان	۳۰۷/۸-۶۷۷/۷	۹/۸۱-۴۹/۰۴	۱۷۴	[۴۹]
$n$ -هگزا‌دکان	۳۱۳/۱۵-۶۹۳/۱۵	۹/۸۱-۴۹/۰۴	۱۰۰	[۵۰]
$n$ -هپتا‌دکان	۳۱۳/۱۵-۶۹۳/۱۵	۴/۹۱-۴۹/۰۳	۱۲۰	[۵۱]
$n$ -اکتا‌دکان	۳۱۳/۱۵-۶۹۳/۱۵	۹/۸-۴۹/۰۳	۱۵۰	[۵۲]
$n$ -نونادکان	۳۱۳/۱۵-۶۹۳/۱۵	۲/۵-۴۹/۰۳	۱۵۲	[۵۳]
$n$ -ایکوزان	۳۳۳/۱۵-۴۷۳/۱۵	۹/۹۰-۴۹/۰۱	۴۰	[۵۴]

### ۳-۱-۲- رسم و بهینه‌سازی ساختار مولکول‌ها

به منظور بهینه کردن ساختار مولکول‌ها، از محاسبات مکانیک کوانتومی مبتنی بر روش‌های نیمه تجربی با به کارگیری هامیلتونی AM1 (تا حد ۰/۰۰۱ کیلوکالری بر مول) موجود در بسته نرم‌افزاری Hyperchem استفاده گردید.

### ۳-۱-۳- محاسبه‌ی توصیفگرها و ارزیابی و تجزیه تحلیل آنها

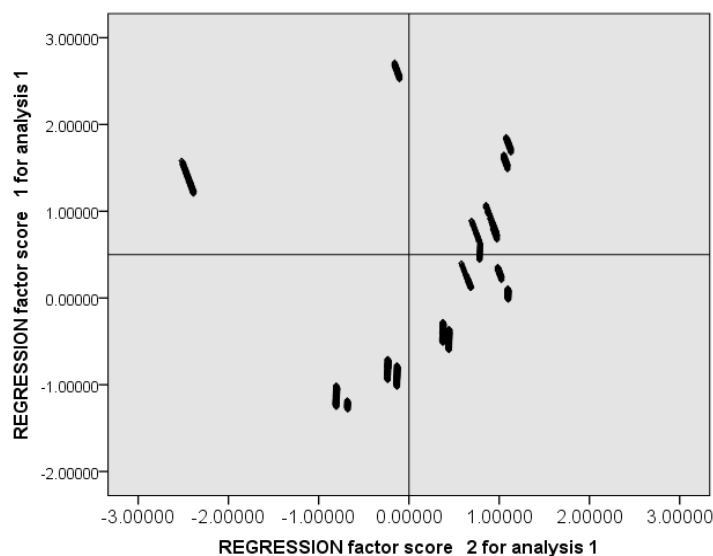
برای محاسبه‌ی اغلب توصیفگرها، در اختیار داشتن ساختمان سه بعدی و حالت پایدار مولکول، ضروری است. برای این منظور ساختارهای بهینه شده‌ی مولکول‌ها در نرم‌افزار Hyperchem وارد بسته نرم‌افزاری Dragon گردید و برای هر مولکول ۱۴۸۱ توصیفگر عمومی در ۱۸ طبقه متفاوت محاسبه شد. همچنین تعداد ۲۱ توصیفگر اختصاصی نیز به کمک بسته‌ی نرم‌افزاری Hyperchem محاسبه گردید. با توجه به اینکه هدایت گرمایی به دما و فشار وابسته است لذا دو متغیر تجربی دما و فشار نیز به توصیفگرهای ساختاری اضافه شدند و در مجموع برای هر مولکول ۱۵۰۴ توصیفگر به دست آمد. در مرحله‌ی آنالیز آماری توصیفگرها ابتدا توصیفگرهای دارای مقادیر ثابت و یا تقریباً ثابت که حاوی اطلاعات کمی بودند، حذف گردید. سپس با بسته نرم‌افزاری Matlab ماتریس همبستگی بین توصیفگرهای باقی‌مانده تشکیل شد و توصیفگرهایی که همبستگی بیش از ۹۰٪ داشتند، حذف گردید. که نتایج حاصل از این کار در جدول (۲-۳) به طور خلاصه گزارش شده است.

جدول (۳-۰-۲): نتایج تجزیه و تحلیل توصیفگرها

۱۴۸۱	تعداد توصیفگرهای محاسبه شده توسط Dragon
۲۱	تعداد توصیفگرهای محاسبه شده توسط Hyperchem
۱۵۰۴	تعداد کل توصیفگرهای محاسبه شده با دما و فشار
۵۲۴	تعداد توصیفگرهای دارای مقادیر ثابت و یا تقریباً ثابت
۹۵۲	تعداد توصیفگرهای با ضریب همبستگی بیش از ۹۰٪
۲۸	تعداد توصیفگرهای باقی‌مانده

### ۳-۱-۴- تقسیم‌بندی سری داده‌ها

برای تقسیم‌بندی سری داده‌ها به سه دسته‌ی آموزش، ارزیابی و تست از روش تحلیل مولفه‌های اساسی (PC) استفاده گردید. تحلیل مولفه‌های اصلی یکی از انواع روش‌های تحلیل داده‌های چند متغیره است که هدف اصلی آن تقلیل بعد مساله مورد مطالعه است. با استفاده از تحلیل مولفه‌های اساسی می‌توان تعداد زیادی متغیر مستقل همبسته را با تعداد محدودی متغیر مستقل جدید که مولفه‌های اساسی نامیده می‌شوند و ناهمبسته‌اند، جایگزین نمود. به این ترتیب، نه تنها بعد مساله تقلیل می‌یابد بلکه مساله‌ی چند همخطی نیز پیش نمی‌آید. برای رسم نمودار پراکندگی داده‌ها از طریق روش تحلیل مولفه‌های اساسی (PC) در بسته نرم‌افزاری SPSS در نوار ابزار گزینه Analyze، Dimension Reduction، Factor را انتخاب کرده تا یک سری مولفه ساخته شود. با توجه به اینکه معمولاً دو مولفه‌ی اول مقدار قابل توجهی از پراکندگی داده‌ها را در نظر می‌گیرند، بنابراین نمودار پراکندگی براساس دو مولفه‌ی اول رسم می‌شود. شکل (۳-۱) پراکندگی داده‌ها بر روی نمودار PC را نشان می‌دهد. در نهایت دسته‌بندی سری داده‌های آموزش از داده‌های موجود در محیط نمودار ترسیم شده و سری داده‌های تست و ارزیابی از داده‌های بطن نمودار مذکور، انجام پذیرفت.



شکل (۳-۱): پراکندگی داده‌ها بر روی نمودار PC

## ۳-۱-۵- انتخاب توصیفگرهای مناسب

در این تحقیق از سه روش متفاوت رگرسیون خطی مرحله‌ای، اتحاد جداسازی داده و انتخاب خاصیت (CDFS) و الگوریتم ژنتیک برای انتخاب توصیفگرهای مناسب استفاده شده است که به ترتیب نتایج حاصل از هر یک از روش‌ها در ادامه گزارش شده‌اند.

## ۳-۱-۵-۱- انتخاب توصیفگرهای معتبر به روش رگرسیون مرحله‌ای

برای انتخاب توصیفگرهای معتبر و مناسب تمامی توصیفگرهای باقیمانده اعم از مستقل و وابسته را وارد بسته‌ی نرم‌افزار SPSS کرده و سپس برای انجام روش رگرسیون مرحله‌ای با انتخاب منوی Linear, Regression, Analyze، ۱۶ مدل بدست آمد. مدلی که تعداد توصیفگرهای آن کمتر و مقدار ضریب تعیین ( $R^2$ ) بیشتری و مقدار میانگین مربع خطا (MSE) کمتری برای سری ارزیابی داشته باشد به عنوان بهترین مدل انتخاب گردید. توصیفگرهای انتخاب شده در هر مدل و همچنین پارامترهای آماری مربوط به سری ارزیابی مدل‌های ۳ تا ۱۶ بدست آمده از رگرسیون مرحله‌ای در جدول (۳-۳) آورده شده است. (از آنجایی که مدل‌های ۱ و ۲ فقط شامل توصیفگرهای تجربی می‌باشند و هیچ توصیفگر تئوری در این دو مدل وجود ندارد، در جدول (۳-۳) گزارش نشده‌اند). با توجه به نتایج موجود در این جدول، مدل ۹ به عنوان مدل برتر خطی و توصیفگرهای موجود در این مدل به عنوان توصیفگرهای منتخب در روش MLR انتخاب شدند.

در جدول (۴-۳) توصیفگرهای مدل بهینه را که بیشترین ارتباط را با هدایت گرمایی دارند به جز دما و فشار، آورده شده است. همچنین در جدول (۵-۳) عدم همبستگی میان توصیفگرها گزارش شده است. این موضوع نشان می‌دهد که هر یک از توصیفگرها جنبه متفاوت و مستقلی از ساختار مولکول و تأثیر آن بر هدایت گرمایی را دارا می‌باشند. در ادامه فصل نتایج مدل‌سازی شبکه‌ی عصبی مصنوعی با توصیفگرهای انتخاب شده به روش رگرسیون مرحله‌ای آورده شده است.

جدول (۳-۳): مقایسه‌ی آماره‌ی سری ارزیابی مدل‌های بدست آمده از روش MLR

مدل	توصیفگرها	R <sup>2</sup>	MSE
۳	P- T- R6u	۰/۹۵۴۲	۴۳/۶۱۱۷
۴	P- T- R6u- Mor18v	۰/۹۶۲۸	۳۵/۶۳۶۲
۵	P- T- R6u- Mor18v- R8m	۰/۹۶۰۸	۳۷/۳۶۹۸
۶	P- T- R6u- Mor18v- R8m- Mor25u	۰/۹۶۱۲	۳۵/۹۳۲۹
۷	P- T- R6u- Mor18v- R8m- Mor25u- JGI5	۰/۹۶۲۸	۳۵/۴۰۰۱
۸	P- T- R6u- Mor18v- R8m- Mor25u- JGI5- GATS2m	۰/۹۶۳۱	۳۴/۹۳۴۰
۹	P- T- R6u- Mor18v- Mor25u- JGI5- GATS2m	۰/۹۷۱۳	۳۴/۱۵۶۵
۱۰	P- T- R6u- Mor18v- Mor25u- JGI5- GATS2m E1u	۰/۹۶۲۹	۳۵/۰۷۹۰
۱۱	P- T- R6u- Mor18v- Mor25u- JGI5- GATS2m E1u- Mor20v	۰/۹۶۲۴	۳۵/۶۲۶۰
۱۲	P- T- R6u- Mor18v- Mor25u- JGI5- GATS2m E1u- Mor20v- R8m	۰/۹۶۳۴	۳۴/۵۶۱۸
۱۳	P- T- Mor18v- Mor25u- JGI5- GATS2m E1u- Mor20v- R8m	۰/۹۶۳۵	۳۴/۴۷۲۵
۱۴	P- T- Mor18v- Mor25u- JGI5- GATS2m E1u- Mor20v- R8m- Mv	۰/۹۶۳۶	۳۴/۳۸۴۹
۱۵	P- T- Mor18v- Mor25u- JGI5- GATS2m E1u- Mor20v- R8m- Mv- Mor26e	۰/۹۶۳۶	۳۴/۴۸۳۶
۱۶	P- T- R6u- Mor18v- Mor25u- JGI5- GATS2m E1u- Mor20v- R8m- Mv- Mor26e	۰/۹۶۳۸	۳۴/۲۱۴۰

جدول (۳-۴): نماد، گروه، نام کامل و اثر متوسط توصیفگرهای مستقل انتخاب شده توسط MLR

تعداد	نماد	گروه	نام کامل	اثر متوسط
۱	R6u	GETAWAY	R autocorrelation of lag 6	-۱۲/۳۲۲
۲	Mor18v	3D MORSE	3D-MORSE-signal 18	۱۴/۱۴۸
۳	Mor25u	3D MORSE	3D-MORSE-signal 25	۵/۹۵۱
۴	JGI5	Galvez topological	mean topological charge index of order 6	۹/۹۹
۵	GATS2m	2D autocorrelations	Geary autocorrelation- lag 2	-۴/۱۸۷

جدول (۳-۵): ماتریس همبستگی میان توصیفگرهای انتخاب شده در MLR

	P	T	R6u	Mor18v	Mor25u	JGI5	GATS2m
P	۱						
T	-۰/۴۱۷	۱					
R6u	۰/۶۴۸	-۰/۵۰۷	۱				
Mor18v	-۰/۳۲۵	۰/۳۰۸	-۰/۴۰۶	۱			
Mor25u	-۰/۰۱۱	۰/۲۰۱	-۰/۱۸۵	۰/۴۲۱	۱		
JGI5	-۰/۰۱۲	-۰/۱۰۹	-۰/۰۶۳	-۰/۳۱۵	-۰/۵۱۱	۱	
GATS2m	-۰/۵۵۸	-۰/۶۱۵	۰/۷۹۵	-۰/۵۱۲	-۰/۵۰۸	۰/۲۱۷	۱

## ۳-۱-۵-۲- انتخاب توصیفگرهای معتبر به روش CDFS

همانطور که در قسمت (۲-۵-۳-۲) توضیح داده شد برای انتخاب توصیفگرهای نهایی به روش CDFS، در گام اول سری تست طبق روش PC جدا گردید و کنار گذاشته شد. سپس داده‌های باقیمانده در ۱۶ گروه متفاوت به دو سری آموزش و ارزیابی دسته بندی شدند. اکنون به دو صورت می‌توان توصیفگرهای مناسب هر گروه را مشخص کرد: ۱- می‌توان با استفاده از روش رگرسیون مرحله‌ای پارامترهای آماری  $R^2$  و MSE را برای سری ارزیابی هر مدل محاسبه نمود تا توصیفگرهای بهینه‌ی هر گروه انتخاب شود. ۲- تمامی توصیفگرهای باقیمانده را برای هر گروه در شبکه عصبی گذاشته تا توصیفگرهای بهینه به دست آید، سپس با توجه به کمترین مقدار MSE تعداد توصیفگر مناسب هر گروه مشخص شود. در نهایت از بین تمام توصیفگرهای بهینه شده در سری‌های مختلف، توصیفگرهایی که بیش از ۵۰٪ تکرار شده‌اند، انتخاب شده و این متغیرهای مستقل، توصیفگرهای اصلی مدل نهایی را تشکیل می‌دهند.

نتایج انتخاب توصیفگرهای بهینه‌ی مربوط به ۱۶ سری مختلف در جدول (۳-۶) آمده است. متغیر K گزارش شده در جدول بیانگر تعداد توصیفگر انتخابی در هر دسته‌بندی می‌باشد. نتیجه حاصل از اشتراک توصیفگرهای گروه‌های مختلف موجود در جدول مذکور، بدین قرار است:

P- T- R6u- Mor18v- GATS2m- HATS6m- Mor20v

که این توصیفگرها به عنوان ورودی‌های مستقل انتخابی با روش CDFS برای مدل‌سازی در مرحله‌ی بعد مورد استفاده قرار گرفتند.

در جدول (۳-۷) نام تمامی توصیفگرهای انتخاب شده به جز دما و فشار به همراه گروه و معنی آن‌ها آمده است. همچنین در جدول (۳-۸) عدم همبستگی بین توصیفگرهای انتخابی در روش CDFS نشان داده شده است.



جدول (۳-۶): توصیفگرهای بهینه در ۱۶ گروه متفاوت

گروه	توصیفگرهای بهینه و انتخاب شده مربوط به هر گروه	K
۱	P- T- R6u- Mor18v- Mor25u- JGI5- GATS2m	۷
۲	P- T- R6u- Mor18v- GATS2m- HATS6m- Mor20v- Mor25u	۸
۳	P- T- R6u- Mor18v- HATS6m- GATS2m- Mor20v	۷
۴	P- T- R6u- Mor18v- GATS2m- HATS6m- Mor20v	۷
۵	P- T- R6u- Mor18v- Mor25u- JGI5- GATS2m	۷
۶	P- T- R6u- Mor18v- HATS6m- GATS2m- Mor20v- Mor26e- Mor25u	۹
۷	P- T- R6u- Mor18v- Mor20v- HATS6m- GATS2m	۷
۸	P- T- R6u- Mor18v- Mor25u- JGI5- GATS2m	۷
۹	P- T- R6u- Mor18v- GATS2m- HATS6m- Mor20v-Gs	۸
۱۰	P- T- R6u- Mor18v- Mor25u- JGI5	۶
۱۱	P- T- R6u- Mor18v- GATS2m- HATS6m- Mor20v- Gs	۸
۱۲	P- T- R6u- Mor18v- HATS6m- GATS2m- Mor20v- Mor25u	۸
۱۳	P- T- R6u- Mor18v- GATS2m- HATS6m- Mor20v	۷
۱۴	P- T- R6u- Mor18v- GATS2m- HATS6m- Mor20v	۷
۱۵	P- T- R6u- Mor18v- Mor25u- JGI5- GATS2m- Mor08p	۸
۱۶	P- T- R6u- Mor18v- GATS2m- HATS6m- Mor20v- Gs	۸

جدول (۳-۷): نماد، گروه، نام کامل و اثر متوسط توصیفگرهای مستقل انتخاب شده توسط CDFS

تعداد	نماد	گروه	نام کامل	اثر متوسط
۱	R6u	GETAWAY	R autocorrelation of lag 6	-۸/۹۴
۲	Mor18v	3D MORSE	3D-MORSE-signal 18	۱۵/۴۷۲
۳	GATS2m	2D autocorrelations	Geary autocorrelation- lag 2	-۷/۰۱۲
۴	HATS6m	GETAWAY	Leverage- weighted utocorrelation of lag 6	۱۰/۰۸۳
۵	Mor20v	3D MORSE	3D-MORSE-signal 20	-۴/۵۴۲

جدول (۳-۸): ماتریس همبستگی میان توصیفگرهای انتخاب شده در CDFS

	P	T	R6u	Mor18v	GATS2m	HATS6m	Mor20v
P	۱						
T	-۰/۴۱۷	۱					
R6u	۰/۶۴۸	-۰/۵۰۷	۱				
Mor18v	-۰/۳۲۵	۰/۳۰۸	-۰/۴۰۶	۱			
GATS2m	۰/۵۵۸	-۰/۶۱۵	۰/۷۹۵	-۰/۵۱۲	۱		
HATS6m	۰/۱۰۶	-۰/۲۱۲	۰/۰۶۰	-۰/۴۷۰	۰/۳۳۶	۱	
Mor20v	۰/۴۲۹	-۰/۴۵۸	۰/۷۴۵	-۰/۴۴۸	۰/۷۶۹	۰/۲۹۱	۱

### ۳-۱-۵-۳- انتخاب توصیفگرهای معتبر به روش الگوریتم ژنتیک

از آنجا که الگوریتم ژنتیک فقط نقش انتخاب توصیفگر را ایفا می‌کند، بنابراین در اجرای آن نیازی به مرحله‌ی رمزگشایی نیست و تمام ژن‌ها تک بیتی در نظر گرفته شده و هر ژن معرف یک توصیفگر است. به منظور اجرای برنامه‌ی الگوریتم ژنتیک تمام توصیفگرهای باقیمانده به عنوان ورودی به این برنامه داده شدند. برنامه M-file استفاده شده در این تحقیق در بسته‌ی نرم‌افزاری Matlab دارای مقادیر پیش‌فرض احتمال پیوند ۰/۵، احتمال جهش ۰/۰۱ و اندازه جمعیتی برابر با ۳۰ می‌باشد. سپس این برنامه چندین بار تکرار گردید تا احتمال انتخاب توصیفگرهای تصادفی به حداقل برسد. در جدول (۳-۹) توصیفگرهای منتخب برای ۱۲ بار اجرای الگوریتم ژنتیک گزارش شده است.

جدول (۳-۹): توصیفگرهای انتخابی الگوریتم ژنتیک

شماره	توصیفگرهای انتخاب شده از الگوریتم ژنتیک
۱	P- T- Mor18V- GATS2m- Mor25u- R6u- HATS6m
۲	P- T- Mor18V- GATS2m- HATS6m- R6u
۳	P- T- Mor18V- GATS2m- R6u- Mor20v- Mor25u- R8u
۴	P- T- Mor18V- GATS2m- Mor20v- R6u - Mor25u-IC4- Mor16p
۵	P- T- Mor18V- R6u- Mor25u- RDF080u- GATS2m- R8m
۶	P- T- Mor18V- Mor20v- R6u- HATS6m- IC4- GATS2m- Mor25u
۷	P- T- Mor18V- R6u- L2s- HATS6m- Mor20v- GATS2m
۸	P- T- Mor18V- R6u- Mor20v- Mor25u- R5p- R8u
۹	P- T- Mor18V- R6u- IC4- Mor25u- HATS6m
۱۰	P- T- Mor18V- GATS2m- Mor20v- R6u- HATS6m
۱۱	P- T- Mor18V- R6u- Mor25u- GATS2m- Mor20v- HATS6m
۱۲	P- T- Mor18V- Mor25u- R6u- GATS2m- R8u- R8m

با توجه به نتایج موجود در جدول (۳-۱۰) توصیفگرهایی که بیش از ۵۰٪ تکرار شده‌اند

عبارتند از:

P- T- Mor18V- R6u- GATS2m- Mor25u- Mor20v- HATS6m

نام توصیفگرهای مولکولی همراه گروه و معنی آنها در جدول (۳-۱۰) گزارش شده است. در جدول (۳-۱۱) نیز عدم همبستگی میان توصیفگرهای انتخاب شده در الگوریتم ژنتیک را گزارش می‌کند، که نشانگر مناسب بودن توصیفگرهای انتخابی می‌باشد.

جدول (۳-۱۰): نماد، گروه، نام کامل و اثر متوسط توصیفگرهای مستقل انتخاب شده توسط GA

تعداد	نماد	گروه	نام کامل	اثر متوسط
۱	Mor18v	3D MORSE	3D-MORSE-signal 18	۱۴/۸
۲	R6u	GETAWAY	R autocorrelation of lag 6	-۸/۸۱۵
۳	GATS2m	2D autocorrelations	Geary autocorrelation- lag 2	-۵/۱۵۷
۴	Mor25u	3D MORSE	3D-MORSE-signal 25	۱/۸۵۹
۵	Mor20v	3D MORSE	3D-MORSE-signal 20	-۳/۶۸۱
۶	HATS6m	GETAWAY	Leverage- weighted utocorrelation of lag 6	۱۰/۰۲۲

توصیفگرهای موجود در جدول (۳-۱۱) همراه با دما و فشار، بعنوان ورودی‌های مستقل انتخابی با روش الگوریتم ژنتیک در مدل‌سازی شبکه عصبی مصنوعی بکار گرفته شدند.

جدول (۳-۱۱): ماتریس همبستگی میان توصیفگرهای انتخاب شده با روش GA

	P	T	Mor18v	R6u	GATS2m	Mor25u	Mor20v	HATS6m
P	۱							
T	-۰/۴۱۷	۱						
Mor18v	-۰/۳۲۵	۰/۳۰۸	۱					
R6u	۰/۶۴۸	-۰/۵۰۷	-۰/۴۰۶	۱				
GATS2m	۰/۵۵۸	-۰/۶۱۵	-۰/۵۱۲	۰/۷۹۵	۱			
Mor25u	-۰/۰۱۱	۰/۲۰۱	۰/۴۲۱	-۰/۱۸۵	-۰/۵۰۸	۱		
Mor20v	۰/۴۲۹	-۰/۴۵۸	-۰/۴۴۸	۰/۷۴۵	۰/۷۶۹	-۰/۴۶۲	۱	
HATS6m	۰/۱۰۶	-۰/۲۱۲	-۰/۴۷۰	۰/۰۶۰	۰/۳۳۶	-۰/۳۷۹	۰/۲۹۱	۱

### ۳-۱-۶- مدل‌سازی غیر خطی با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی

توصیفگرهایی که با روش‌های متفاوت انتخاب شده‌اند، به عنوان ورودی به شبکه‌ی عصبی مصنوعی داده شدند تا در نهایت شبکه‌ی بهینه انتخاب شود. در تمام شبکه‌های طراحی شده، به ازای هر توصیفگر انتخابی یک نرون ورودی وجود دارد. لایه‌ی خروجی نیز شامل یک نرون می‌باشد که هدایت گرمایی متناظر با ورودی‌ها را نشان می‌دهد. تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی نامعلوم است و جزء پارامترهایی است که باید بهینه شود. علاوه بر تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی، تعداد ورودی شبکه، تعداد دور آموزشی، نوع تابع آموزشی، نوع تابع انتقال و مقدار پارامتر ممنوم نیز بهینه گردید. مقدار بهینه برای هر یک از این کمیت‌ها زمانی است که میانگین مربع خطا به عنوان تابع عملکرد شبکه برای سری ارزیابی مینیمم باشد.

در ادامه نتایج مدل‌سازی غیر خطی شبکه‌ی عصبی مصنوعی را به طور جداگانه با استفاده از توصیفگرهای منتخب به سه روش رگرسیون مرحله‌ای، استراتژی CDFS و الگوریتم ژنتیک شرح داده می‌شود. قابل ذکر است که در تمامی این مطالعات از دو تابع آموزشی لونیبرگ-مارکوارت (trainlm) و بایزین (trainbr) و دو تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی (logsig) و تانژانت سیگموئیدی (tansig) استفاده گردید. بنابراین در هر قسمت از ترکیب دو تابع آموزشی و دو تابع انتقال چهار شبکه‌ی عصبی مصنوعی مختلف طراحی و هر کدام بطور جداگانه بهینه‌سازی شد.

### ۳-۱-۶-۱- بهینه‌سازی مدل شبکه عصبی مصنوعی با توصیفگرهای انتخابی به

#### روش رگرسیون مرحله‌ای

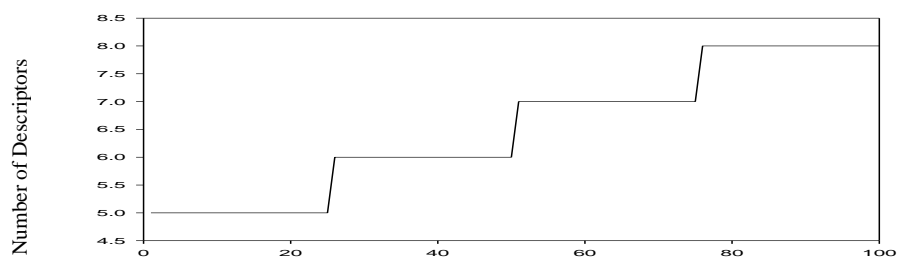
شبکه عصبی مورد استفاده در این پروژه، شبکه‌ای با سه لایه ورودی، میانی و خروجی می‌باشد، که تعداد گره‌های موجود در لایه ورودی شامل ۷ توصیفگر ذکر شده در بخش (۳-۱-۵-۱) است که به روش رگرسیون مرحله‌ای انتخاب شده‌اند. لایه خروجی دارای یک نرون است که

نشان‌دهنده‌ی هدایت گرمایی مطابق با ورودی‌ها می‌باشد. برای بهینه‌سازی پارامترهای شبکه از روش بهینه‌سازی همزمان استفاده گردید به این صورت که  $\mu$  با مقدار ثابت  $0.0005$ ، تعداد ورودی‌های شبکه از ۲ تا ۸، تعداد گره‌ی پنهان شبکه از ۲ تا ۱۰ گره و تعداد دور آموزشی شبکه از ۱۰ تا ۱۰۰ با گام ۱۰ انتخاب گردید و به ازای همه ترکیب‌های ممکن این سه پارامتر، چهار شبکه‌ی عصبی طراحی شده بهینه گردید. قسمتی از روند تغییرات پارامترهای شبکه در حین بهینه‌سازی همزمان پارامترها به همراه مقادیر MSE به دست آمده برای سری ارزیابی به صورت نموداری بر حسب یک بردار مرجع فرضی (شمارنده) در شکل‌های (۳-۲) تا (۳-۵) آمده است.

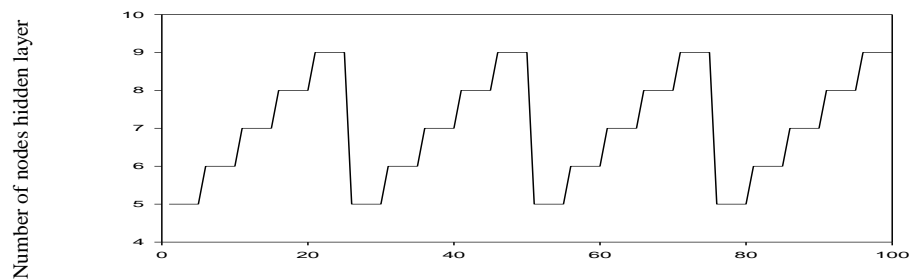
نتایج موجود در این شکل‌ها نشان می‌دهد که شبکه‌ای با الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین و تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی با ۷ توصیفگر در لایه‌ی ورودی، ۷ گره در لایه‌ی پنهان و دور آموزشی ۸۰، کمترین مقدار MSE را برای سری ارزیابی دارا می‌باشد. در نتیجه این شبکه به عنوان شبکه‌ی بهینه با استفاده از توصیفگرهای منتخب به روش رگرسیون مرحله‌ای انتخاب گردید. در جدول (۳-۱۲) مقادیر پارامترهای بهینه‌ی مربوط به هر شبکه آورده شده است.

جدول (۳-۱۲): توابع و پارامترهای بهینه‌ی شبکه‌های آموزشی SR-ANN براساس MSE در مقدار  $\mu$  ثابت  $0.0005$

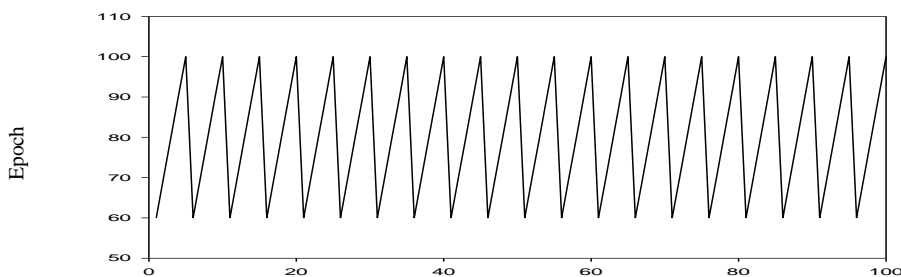
MSE	تعداد دورهای آموزشی	تعداد گره	تعداد توصیفگر	تابع آموزشی	تابع انتقال
۱/۲۷۹۹	۸۰	۷	۷	بایزین	لگاریتم
۱/۳۳۰۳	۸۰	۹	۸	لونبرگ-مارکوات	لگاریتم
۱/۳۱۳۷	۷۰	۹	۸	بایزین	تانژانت
۱/۳۰۳۳	۹۰	۹	۸	لونبرگ-مارکوات	تانژانت



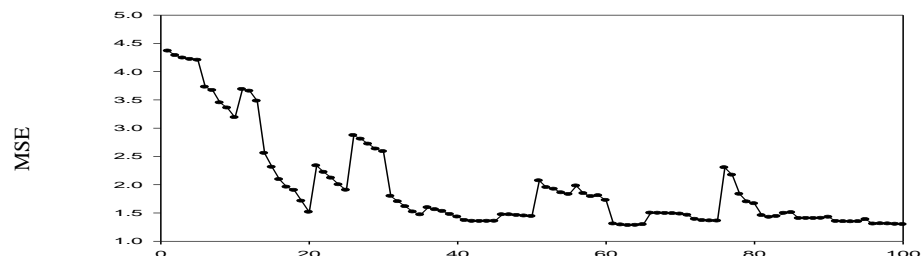
(الف)



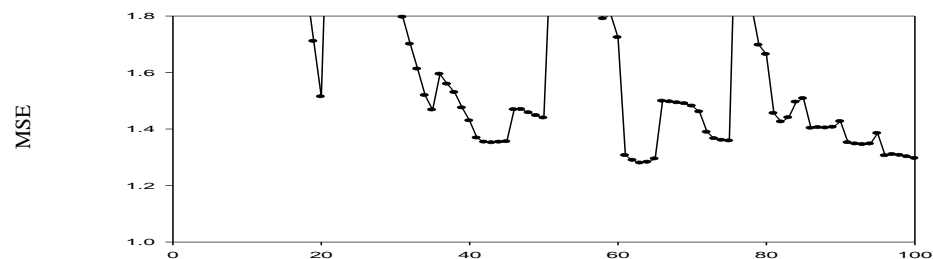
(ب)



(ج)



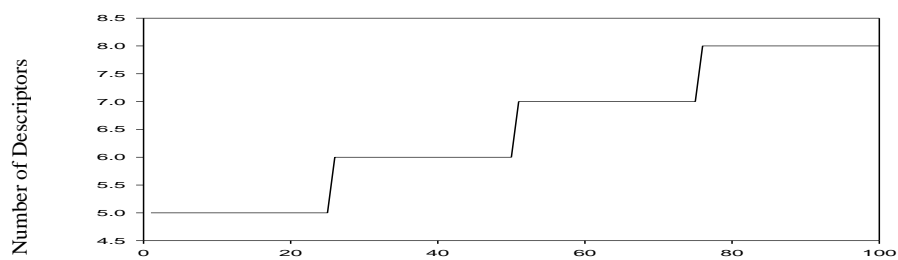
(د)



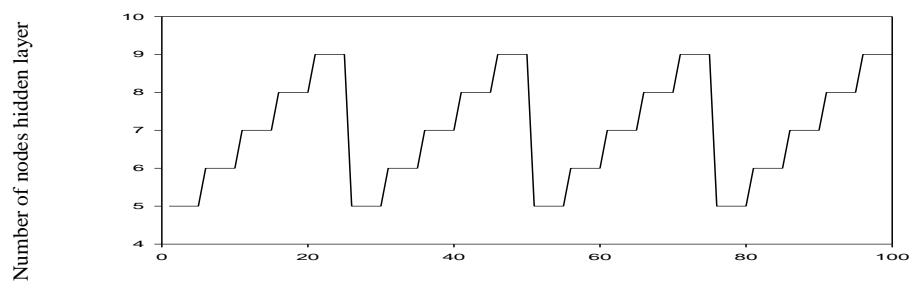
(ه)

بردار مرجع

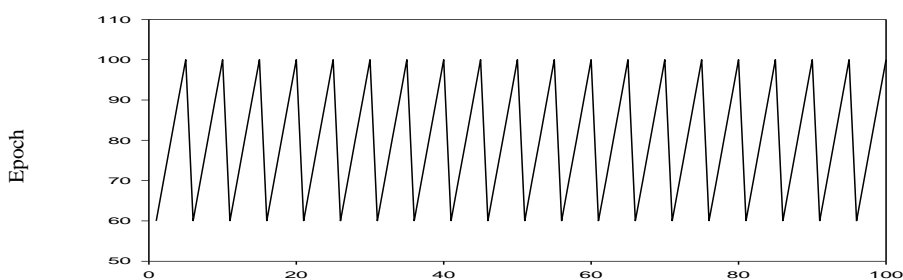
شکل (۳-۲): نمودارهای (الف) تعداد توصیفگر، (ب) تعداد نرون لایه مخفی، (ج) دور آموزش، (د) سری ارزیابی و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان می‌دهد، برای تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین



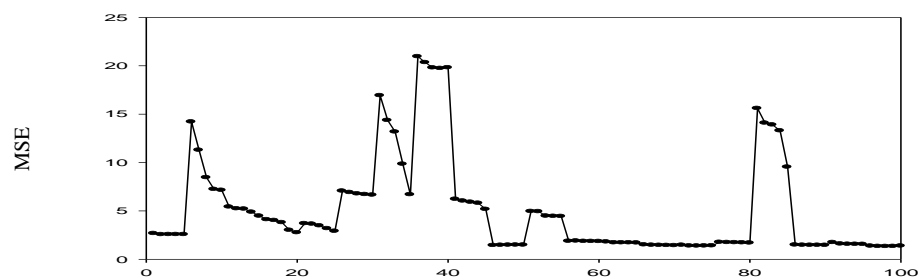
(الف)



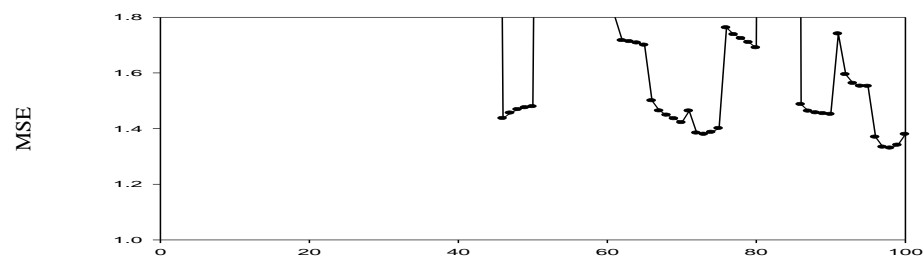
(ب)



(ج)



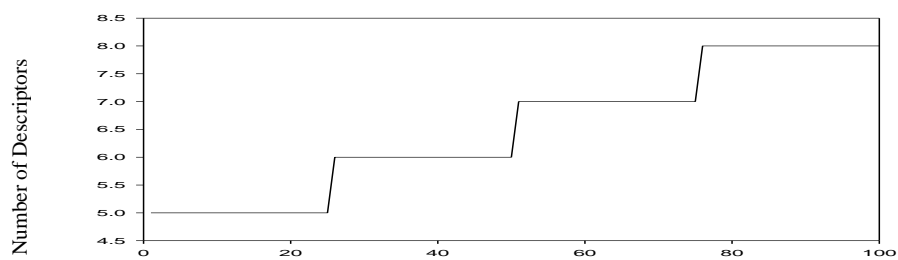
(د)



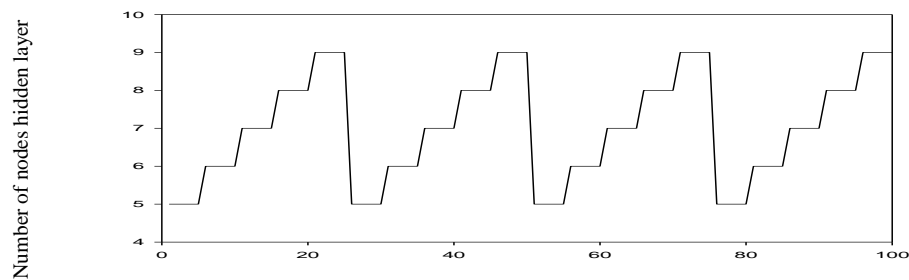
(ه)

بردار مرجع

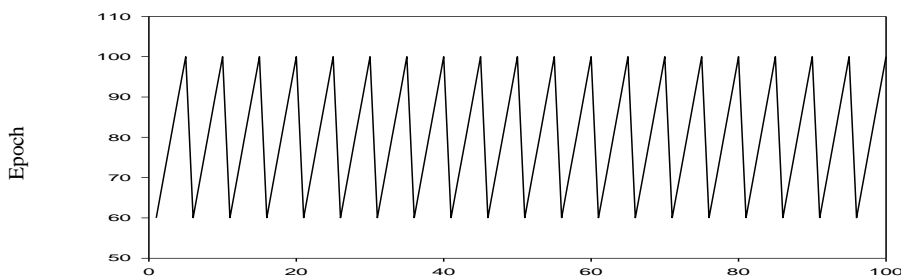
شکل (۳-۳): نمودارهای (الف) تعداد توصیفگر، (ب) تعداد نرون لایه مخفی، (ج) دور آموزش، (د) سری ارزیابی و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان می‌دهد، برای تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی لونیبرگ-مارکوارت



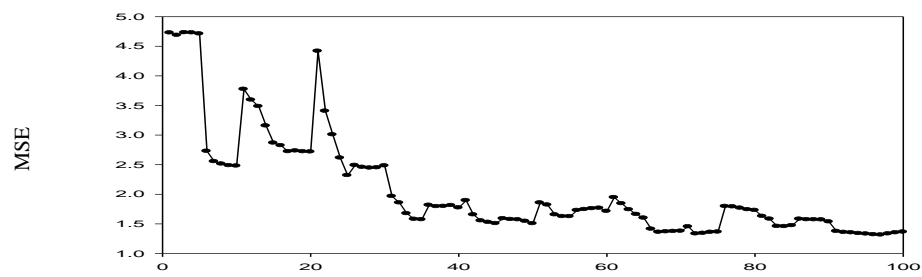
(الف)



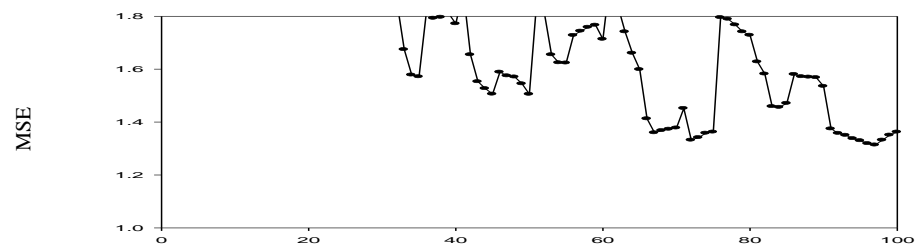
(ب)



(ج)



(د)

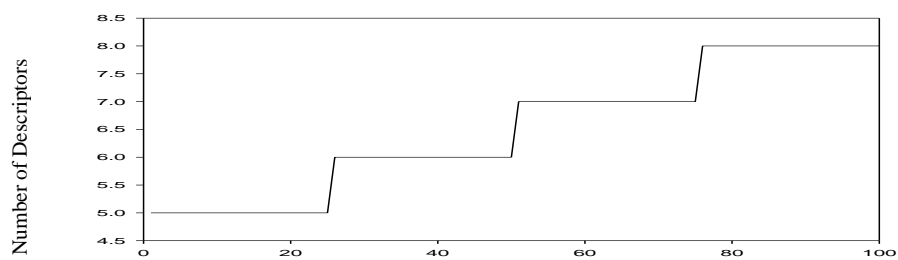


(ه)

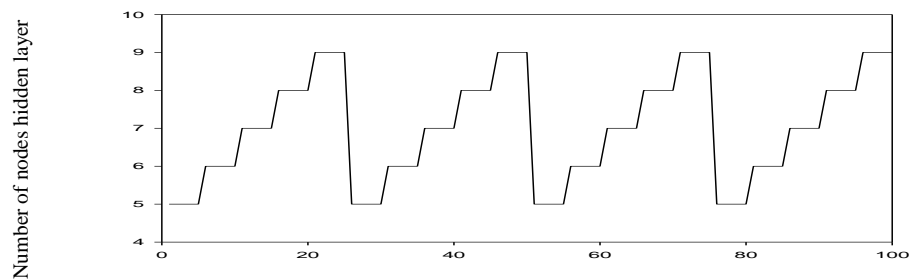
بردار مرجع

شکل (۳-۴): نمودارهای (الف) تعداد توصیفگر، (ب) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ج) دور آموزش، (د) سری ارزیابی و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان می‌دهد، برای تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین

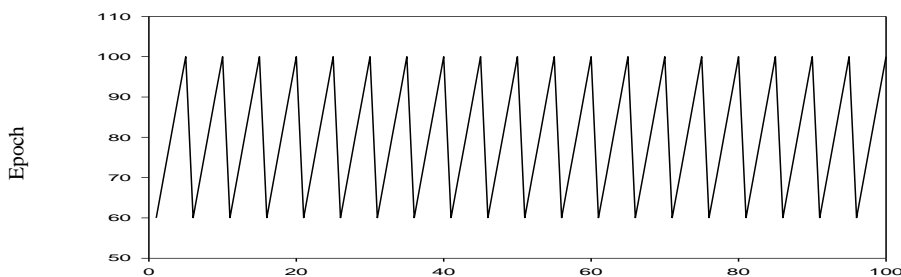




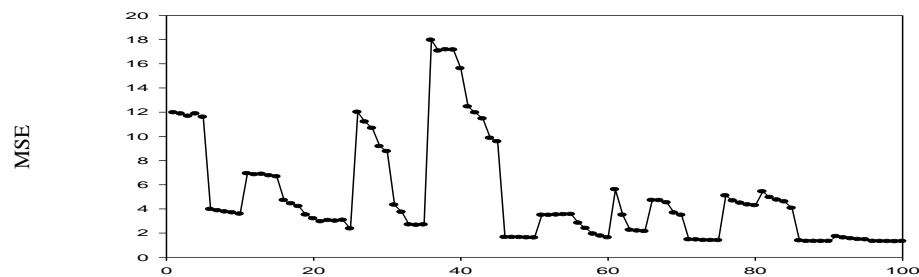
(الف)



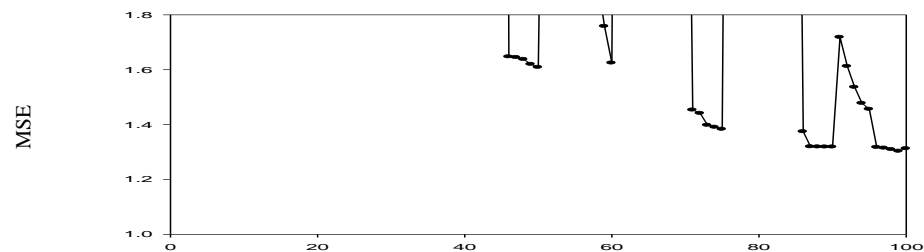
(ب)



(ج)



(د)

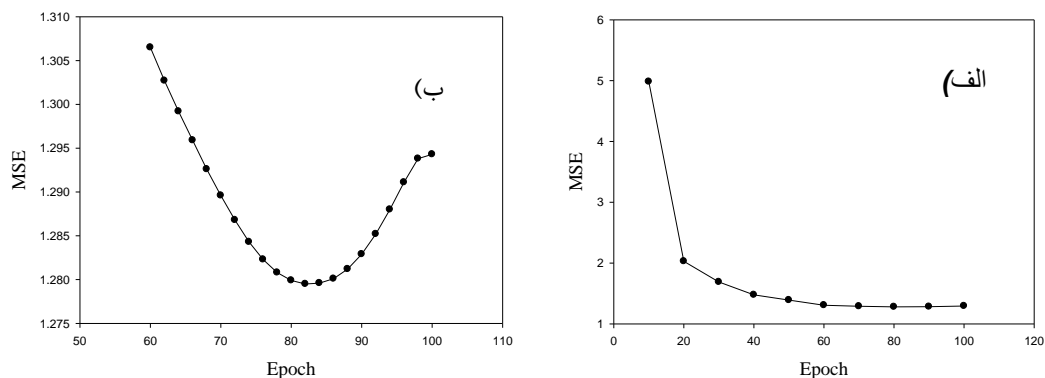


(ه)

بردار مرجع

شکل (۳-۵): نمودارهای (الف) تعداد توصیفگر، (ب) تعداد نرون لایه مخفی، (ج) دور آموزش، (د) سری ارزیابی و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان می‌دهد، برای تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوارت

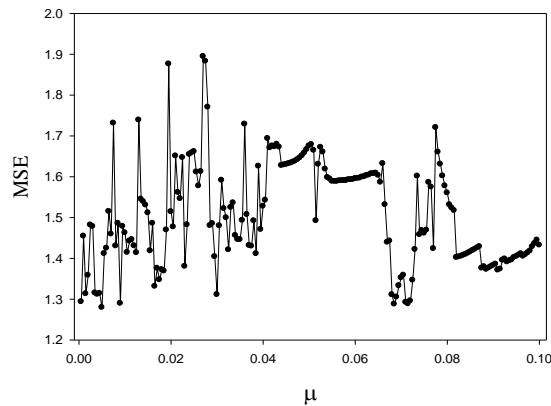
اگرچه دور آموزشی برای شبکه‌ی بهینه ۸۰ بدست آمد اما برای تعیین دقیق‌تر دور آموزش (Epoch)، شبکه‌ای با همان مقادیر بهینه تعداد نرون لایه ورودی، تعداد نرون لایه پنهان، تابع آموزش و تابع انتقال اما با تعداد دورهای ۶۰ تا ۱۰۰ با گام ۲ مورد بررسی قرار گرفت که طبق شکل (۳-۶) دور آموزشی ۸۲ با مقدار  $MSE = 1/2795$  به عنوان تعداد دور بهینه برای شبکه انتخاب گردید.



شکل (۳-۶): نمودار میانگین مربعات خطا برای سری ارزیابی بر حسب تعداد دورهای آموزش متفاوت الف) برای گام ۱۰ و ب) برای گام ۲

در ادامه‌ی روند بهینه کردن شبکه‌ی مورد بررسی، مقدار پارامتر  $\mu$  نیز بایستی بهینه شود که بدین منظور، در ساختار شبکه‌ی بهینه با ۷ متغیر ورودی، ۷ گره در لایه پنهان، الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین، تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و دور آموزشی ۸۲، مقدار  $\mu$  از ۰/۰۰۰۵ تا ۰/۱ با گام‌های ۰/۰۰۰۵ تغییر داده شد و برای هر مورد مقدار میانگین مربع خطا برای سری ارزیابی محاسبه گردید. نتایج موجود نشان می‌دهد که مقدار بهینه‌ی  $\mu$  برابر ۰/۰۰۵ می‌باشد که مقدار MSE در این نقطه برابر با ۱/۲۷۹۵ است. نمودار مقدار میانگین مربع خطا بر حسب  $\mu$  حول نقطه‌ی بهینه در شکل (۳-۷) رسم شده است.

توابع و مقادیر پارامترهای بهینه شده شبکه‌ی عصبی برای پیش بینی هدایت گرمایی در آلکان‌های خطی، در جدول (۳-۱۳) ارائه شده است.



شکل (۳-۷): نمودار میانگین مربع خطای حاصل از سری ارزیابی بر حسب پارامتر  $\mu$

جدول (۳-۱۳): توابع و مقادیر پارامترهای بهینه شده SR-ANN

Train br	تابع آموزش
logsig	تابع انتقال لایه پنهان
pure line	تابع انتقال لایه خروجی
۷	تعداد نرون لایه پنهان
۷	تعداد متغیرهای ورودی
۸۲	تعداد دوره‌های آموزش
۰/۰۰۵	پارامتر $\mu$

### ۳-۱-۶-۲- بهینه‌سازی مدل با شبکه عصبی مصنوعی با توصیفگرهای CDFS

در این بخش نیز از شبکه‌ی عصبی سه لایه، شامل لایه‌ی ورودی، لایه‌ی میانی و لایه‌ی خروجی استفاده شد. برای طراحی یک شبکه‌ی بهینه، مانند قبل باید پارامترهای شبکه بهینه شوند. بر این اساس شبکه‌ای با مقدار  $\mu$  ثابت ۰/۰۰۰۵ و تعداد متغیر ورودی ثابت ۷ توصیفگر معرفی شده در جدول (۳-۷)، تعداد متفاوت گره در لایه‌ی پنهان از ۲ تا ۱۰ و تعداد دور آموزشی از ۱۰ تا ۱۰۰ با گام ابتدایی ۱۰ توسط دو الگوریتم آموزشی لونیگ-مارکوارت و تنظیم بایزین و همچنین توابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و تانژانت سیگموئیدی، در لایه‌ی میانی، آموزش داده شد. در تمامی مراحل

بهینه‌سازی شبکه‌ها، حداقل رساندن تابع عملکرد MSE در سری ارزیابی مورد نظر است. نتایج حاصل

از این بررسی‌ها در جداول (۳-۱۴) تا (۳-۱۷) گزارش شده است.

جدول (۳-۱۴): مقادیر MSE حاصل از سری ارزیابی برای شبکه‌ای با تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی، الگوریتم آموزشی بایزین، تعداد ورودی ثابت ۷ و با تعداد دور آموزشی متفاوت و تعداد گره‌های متفاوت در لایه میانی

Epoch ↓	N								
	۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۹	۱۰
۱۰	۶/۱۳۸۳	۶/۴۵۶۰	۱۵۶/۰۸۵۷	۵/۱۸۷۹	۳/۶۹۲۸	۴/۴۳۵۶	۲/۴۹۱۱	۴/۷۲۷۶	۴/۹۶۴۶
۲۰	۶/۱۷۶۰	۴/۵۶۱۱	۴/۳۷۶۷	۱/۹۱۳۵	۲/۲۴۲۱	۲/۳۴۹۱	۱/۲۵۸۴	۲/۴۶۹۵	۳/۷۹۳۲
۳۰	۵/۵۲۲۹	۳/۱۹۱۷	۳/۷۸۱۱	۲/۳۰۱۲	۲/۳۷۹۸	۲/۰۷۷۳	۱/۱۴۸۴	۱/۶۷۹۴	۲/۰۸۸۴
۴۰	۵/۵۲۵۳	۳/۰۷۲۶	۲/۹۵۳۴	۱/۹۴۱۹	۲/۲۴۳۹	۱/۹۷۴۲	۱/۱۱۲۳	۱/۵۰۴۸	۱/۶۱۲۳
۵۰	۵/۴۱۷۳	۲/۹۷۰۸	۳/۱۹۲۲	۱/۴۶۰۳	۱/۸۷۸۸	۱/۷۶۷۷	۱/۱۲۹۲	۱/۳۵۱۲	۱/۱۶۱۳
۶۰	۵/۳۹۰۲	۲/۹۷۵۹	۲/۷۲۴۶	۱/۴۰۱۵	۱/۶۰۶۹	۱/۶۰۱۱	۱/۱۴۰۲	۱/۱۵۵۶	۱/۰۷۳۴
۷۰	۵/۳۷۸۴	۲/۹۷۵۹	۲/۰۵۷۷	۱/۴۰۵۰	۱/۴۶۴۶	۱/۳۴۰۷	۱/۱۳۹۴	۱/۰۷۲۶	۱/۰۶۰۱
۸۰	۵/۳۶۷۱	۲/۹۷۵۹	۱/۴۷۸۳	۱/۴۰۴۳	۱/۲۷۵۹	۱/۲۳۲۷	۱/۱۳۹۳	۰/۹۹۱۴	۱/۰۶۴۱
۹۰	۵/۳۶۷۱	۲/۹۷۵۹	۱/۳۵۶۴	۱/۴۰۲۸	۱/۲۶۱۳	۱/۲۱۷۶	۱/۱۵۱۴	۱/۰۲۳۹	۱/۰۷۴۰
۱۰۰	۵/۳۶۷۱	۲/۹۷۵۹	۱/۴۳۳۸	۱/۴۰۱۷	۱/۲۷۱۴	۱/۲۰۱۰	۱/۲۴۲۶	۱/۰۷۰۶	۱/۰۹۸۳

جدول (۳-۱۵): مقادیر MSE حاصل از سری ارزیابی برای شبکه‌ای با تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی، الگوریتم آموزشی

لونیگ-مارکوات، تعداد ورودی ثابت ۷ و با تعداد دور آموزشی متفاوت و تعداد گره‌های متفاوت در لایه میانی

Epoch ↓	N								
	۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۹	۱۰
۱۰	۱۳/۴۲۰۳	۱۲/۹۹۰۹	۵/۰۹۹۰	۴/۳۸۵۷	۴/۴۵۴۵	۳۶/۳۸۱۶	۳/۳۵۴۳	۲/۰۴۲۵	۹/۳۶۷۵
۲۰	۱۴/۲۸۷۹	۱۳/۳۶۳۱	۲/۶۵۲۱	۲/۴۹۸۰	۲/۵۳۱۱	۷/۰۷۲۸	۲/۲۰۳۳	۱/۴۹۸۷	۲/۶۵۷۰
۳۰	۱۴/۴۰۲۲	۱۲/۹۲۷۴	۲/۷۶۱۴	۲/۴۲۸۹	۱/۸۹۴۲	۴/۴۶۹۷	۱/۷۹۹۹	۱/۳۹۶۳	۱/۶۳۹۰
۴۰	۱۴/۴۳۲۹	۱۲/۸۹۲۵	۳/۰۷۵۱	۲/۳۷۸۵	۱/۶۹۰۱	۳/۹۲۸۰	۱/۷۶۱۰	۱/۳۲۵۸	۱/۳۵۶۳
۵۰	۱۴/۶۱۳۱	۱۳/۰۸۲۲	۳/۰۶۹۶	۲/۳۵۱۰	۱/۴۴۳۰	۳/۶۳۳۶	۱/۶۹۴۵	۱/۳۴۰۱	۱/۳۰۳۳
۶۰	۱۴/۶۵۹۳	۱۳/۲۴۲۴	۳/۴۱۷۶	۲/۳۱۳۷	۱/۴۳۴۲	۳/۲۷۷۹	۱/۴۷۵۲	۱/۴۸۰۸	۱/۲۶۱۰
۷۰	۱۴/۶۸۱۵	۱۳/۰۶۰۲	۳/۳۲۷۳	۲/۲۸۶۱	۱/۴۴۵۹	۳/۱۵۹۳	۱/۳۲۱۶	۱/۴۸۹۵	۱/۲۳۷۱
۸۰	۱۴/۶۲۶۲	۱۳/۱۵۰	۳/۲۰۶۶	۲/۲۶۶۱	۱/۴۳۹۸	۲/۶۹۶۹	۱/۲۸۱۶	۱/۴۶۲۲	۱/۱۱۵۳
۹۰	۱۴/۷۱۲۸	۱۳/۱۲۸۰	۳/۱۳۸۶	۲/۲۵۶۵	۱/۴۳۱۵	۲/۶۱۵۷	۱/۲۶۸۹	۱/۴۶۵۸	۰/۹۵۱۹
۱۰۰	۱۴/۰۰۸۱	۱۳/۴۰۶۷	۳/۰۱۱۴	۲/۲۵۰۳	۱/۴۲۱۸	۲/۵۶۶۸	۱/۲۵۳۶	۱/۴۳۳۲	۰/۹۲۷۳

جدول (۳-۱۶): مقادیر MSE حاصل از سری ارزیابی برای شبکه‌ای با تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی، الگوریتم آموزشی بایزین، تعداد ورودی ثابت ۷ و با تعداد دور آموزشی متفاوت و تعداد گره‌های متفاوت در لایه میانی

Epoch ↓	N									
	۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۹	۱۰	
۱۰	۸/۸۲۸۹	۸/۳۰۷۱	۵/۵۶۹۷	۵/۶۷۸۵	۳/۴۲۸۲	۳/۶۷۰۶	۶/۲۳۹۹	۳/۲۳۶۲	۲/۷۵۶۴	
۲۰	۴/۹۸۰۷	۳/۰۵۷۸	۳/۱۹۴۹	۳/۰۱۴۵	۱/۶۳۱۸	۲/۳۵۰۰	۱/۹۰۵۶	۲/۸۴۰۴	۱/۹۲۸۱	
۳۰	۵/۱۴۶۴	۲/۹۷۶۳	۲/۶۷۱۵	۳/۰۵۸۷	۱/۲۴۹۳	۱/۸۰۶۸	۱/۷۱۱۴	۲/۱۷۶۲	۱/۶۴۴۲	
۴۰	۵/۳۷۵۲	۲/۹۷۸۱	۲/۴۷۰۸	۱/۹۲۰۰	۱/۳۱۶۰	۱/۶۴۳۶	۱/۳۳۲۷	۱/۹۳۸۲	۱/۵۸۵۰	
۵۰	۵/۳۷۵۲	۲/۹۷۸۱	۲/۸۱۱۷	۱/۶۲۳۳	۱/۳۴۰۴	۱/۴۶۳۸	۱/۱۲۷۹	۱/۶۴۳۸	۱/۴۱۶۸	
۶۰	۵/۳۷۵۲	۲/۹۷۸۱	۲/۹۲۹۰	۱/۵۲۱۷	۱/۳۴۰۳	۱/۲۴۷۰	۱/۰۰۶۳	۱/۳۶۵۱	۱/۳۷۴۷	
۷۰	۵/۳۷۵۲	۲/۹۷۸۱	۳/۰۲۷۱	۱/۴۹۵۵	۱/۳۴۰۳	۱/۲۰۰۷	۱/۱۰۸۳	۱/۰۸۳۹	۱/۳۰۲۳	
۸۰	۵/۳۷۵۲	۲/۹۷۸۱	۲/۸۴۱۸	۱/۵۰۲۲	۱/۳۴۰۳	۱/۱۱۹۷	۱/۰۵۲۱	۱/۰۷۲۰	۱/۱۵۷۰	
۹۰	۵/۳۷۵۲	۲/۹۷۸۱	۲/۶۶۹۲	۱/۵۳۱۷	۱/۳۴۰۳	۱/۰۷۳۹	۱/۰۳۰۹	۱/۰۶۲۶	۱/۰۷۳۸	
۱۰۰	۵/۳۷۵۲	۲/۹۷۸۱	۲/۶۵۶۷	۱/۵۱۷۱	۱/۳۴۰۳	۱/۰۵۹۲	۱/۰۲۰۹	۱/۰۴۲۳	۱/۰۲۸۸	

جدول (۳-۱۷): مقادیر MSE حاصل از سری ارزیابی برای شبکه‌ای با تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی، الگوریتم آموزشی لونیبرگ-مارکوات، تعداد ورودی ثابت ۷ و با تعداد دور آموزشی متفاوت و تعداد گره‌های متفاوت در لایه میانی

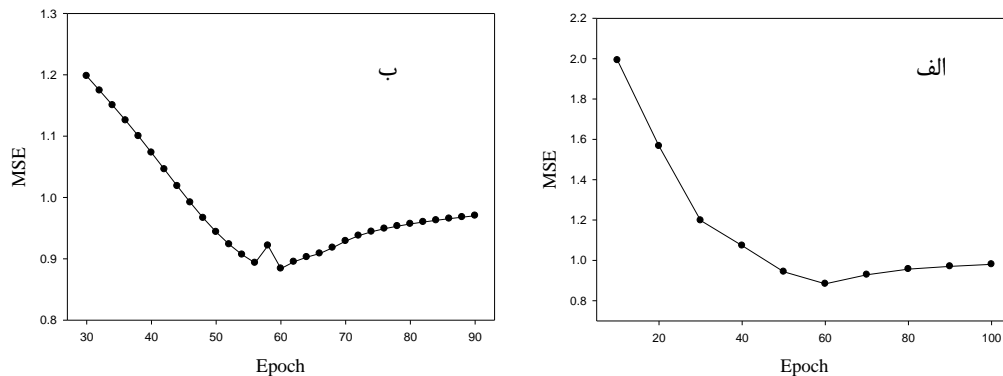
Epoch ↓	N									
	۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۹	۱۰	
۱۰	۱۳/۶۲۲۴	۱۴/۲۴۵۱	۸/۷۰۴۴	۷/۵۳۰۲	۱۰/۲۱۹۶	۳/۹۹۳۰	۱۶/۰۵۷۸	۱/۹۹۲۵	۴/۴۸۳۴	
۲۰	۱۴/۹۳۳۷	۱۴/۶۶۵۷	۸/۲۱۴۰	۴/۹۴۶۱	۴/۷۰۱۱	۱/۹۶۶۸	۷/۲۰۵۵	۱/۵۶۶۹	۲/۲۷۲۳	
۳۰	۱۵/۰۹۷۵	۱۴/۷۲۵۶	۶/۵۴۵۵	۲/۹۴۷۱	۲/۵۸۶۱	۲/۰۷۴۸	۵/۹۰۵۱	۱/۱۹۸۱	۱/۲۱۲۸	
۴۰	۱۵/۱۷۷۱	۱۴/۵۴۱۳	۶/۶۳۴۴	۲/۶۰۶۳	۱/۹۹۹۱	۲/۱۰۱۳	۵/۳۲۷۹	۱/۰۷۳۲	۱/۰۳۴۴	
۵۰	۱۵/۳۱۲۱	۱۴/۸۰۳۳	۳/۹۲۱۱	۲/۶۱۶۶	۱/۸۱۷۷	۱/۹۹۳۸	۴/۸۰۷۵	۰/۹۴۳۷	۱/۰۶۱۹	
۶۰	۱۵/۳۲۱۵	۱۴/۸۵۱۲	۳/۷۲۰۹	۲/۶۸۱۴	۱/۷۵۹۶	۱/۸۷۳۵	۴/۳۷۵۳	۰/۸۸۴	۱/۱۸۲۵	
۷۰	۱۵/۲۶۴۴	۱۴/۸۸۳۷	۳/۸۲۴۹	۲/۷۵۸۵	۱/۷۲۴۲	۲/۱۱۵۵	۴/۱۵۱۸	۰/۹۲۸۹	۱/۲۰۹۱	
۸۰	۱۵/۱۸۰۹	۱۴/۹۱۳۵	۳/۸۴۹۱	۲/۷۰۱۵	۱/۶۹۵۹	۲/۲۵۱۰	۳/۹۶۲۶	۰/۹۵۶۸	۱/۲۱۶۰	
۹۰	۱۴/۹۸۰۷	۱۴/۹۰۸۷	۳/۸۰۹۴	۳/۰۳۱۱	۱/۶۱۸۸	۲/۲۶۸۸	۳/۹۱۲۰	۰/۹۷۰۲	۱/۲۱۴۵	
۱۰۰	۱۴/۹۳۶۲	۱۵/۰۷۴۷	۳/۷۴۴۱	۲/۳۱۹۳	۱/۵۰۶۵	۲/۱۹۶۹	۳/۹۸۲۶	۰/۹۸۰۳	۱/۱۶۲۹	

نتایج موجود در جداول (۳-۱۴) تا (۳-۱۷) نشان می‌دهد که در الگوریتم آموزشی لونیبرگ-

مارکوات با تابع تانژانت سیگموئیدی، تعداد ۹ گره در لایه‌ی پنهان، و دور آموزشی ۶۰، کمترین مقدار

میانگین مربع خطا (MSE) بدست می‌آید. برای بهینه‌سازی دقیق‌تر دور آموزشی، دور ۳۰ تا ۹۰ با گام

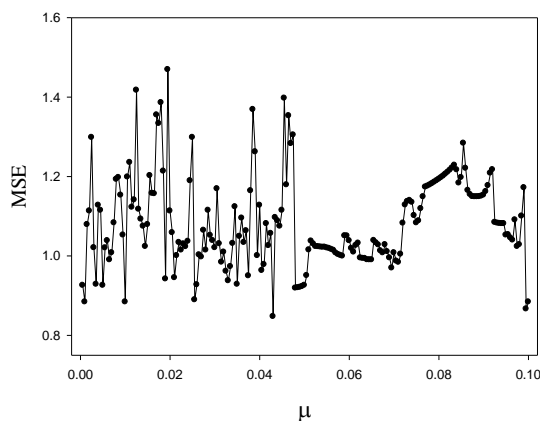
۲ بررسی شد که دور آموزشی ۶۰ با مقدار MSE، ۰/۸۸۴۰ به عنوان دور بهینه انتخاب گردید. نمودار میانگین مربعات خطا در دوره‌های آموزشی متفاوت در شکل (۳-۸) نشان داده شده است.



شکل (۳-۸): نمودار میانگین مربعات خطا برای سری ارزیابی بر حسب تعداد دوره‌های آموزش متفاوت الف) برای گام ۱۰ و ب) برای گام ۲

در ادامه بهینه کردن شبکه‌ی مورد بررسی، مقدار پارامتر  $\mu$  نیز بهینه می‌شود که بدین منظور، در ساختار شبکه‌ی بهینه با ۷ متغیر ورودی، ۹ گره در لایه‌ی پنهان، الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوات، تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی و دور آموزشی ۶۰، مقدار  $\mu$  از ۰/۰۰۰۵ تا ۰/۱ با گام‌های ۰/۰۰۰۵ تغییر داده شد و آنگاه برای هر مورد مقدار میانگین مربع خطا برای سری ارزیابی محاسبه و ثبت گردید که مقدار ۰/۰۴۳ به عنوان مقدار بهینه‌ی  $\mu$  انتخاب شد. در این نقطه بهینه مقدار MSE برابر با ۰/۸۴۷۳ است. نمودار مقدار میانگین مربع خطا بر حسب  $\mu$  حول نقطه‌ی بهینه در شکل (۳-۹) رسم شده است.

توابع و مقدار پارامترهای بهینه شده‌ی شبکه‌ی CDFS-ANN برای پیش بینی هدایت گرمایی در آلکان‌های خطی، در جدول (۳-۱۸) ارائه شده است.



شکل (۳-۹): نمودار میانگین مربع خطای حاصل از سری ارزیابی بر حسب پارامتر  $\mu$

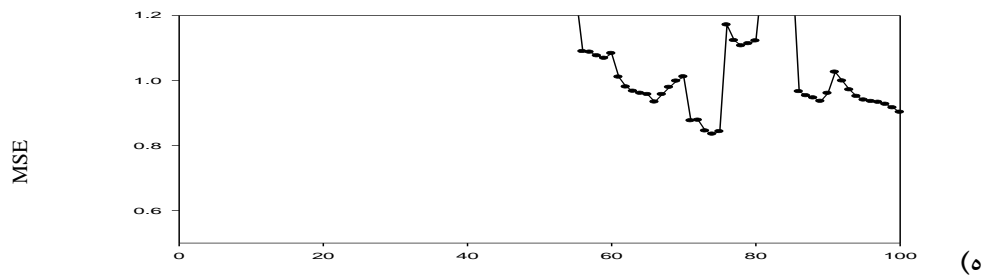
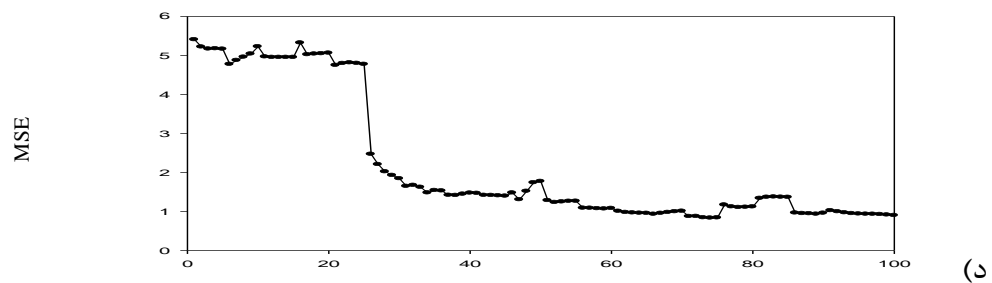
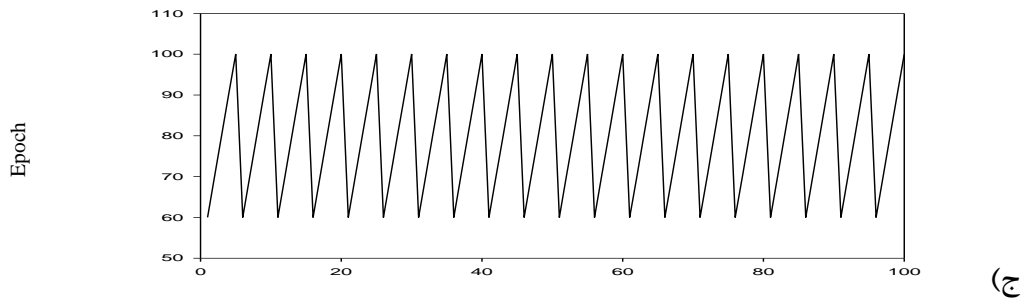
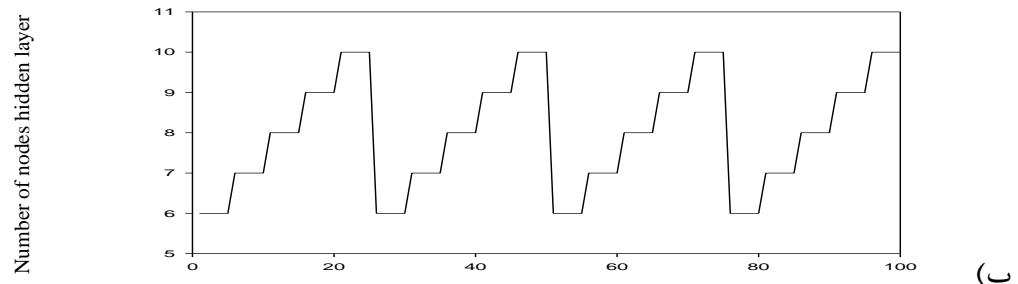
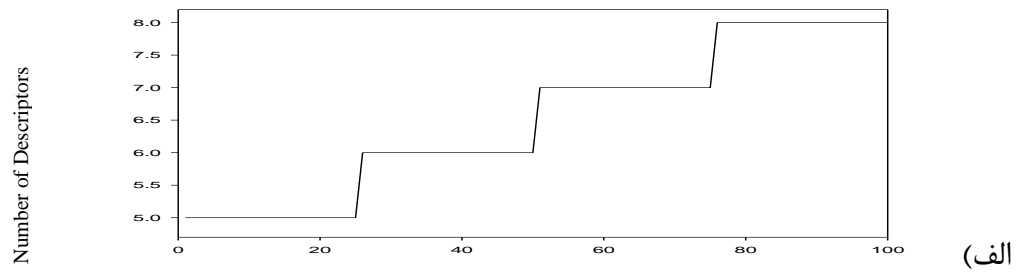
جدول (۳-۱۸): توابع و مقادیر پارامترهای بهینه شده CDFS-ANN

Train lm	تابع آموزش
tansig	تابع انتقال لایه پنهان
pure line	تابع انتقال لایه خروجی
۹	تعداد نرون لایه پنهان
۷	تعداد متغیرهای ورودی
۶۰	تعداد دوره‌های آموزش
۰/۰۴۳	پارامتر $\mu$

### ۳-۶-۱-۳- بهینه‌سازی مدل شبکه عصبی مصنوعی با توصیفگرهای الگوریتم

#### ژنتیک

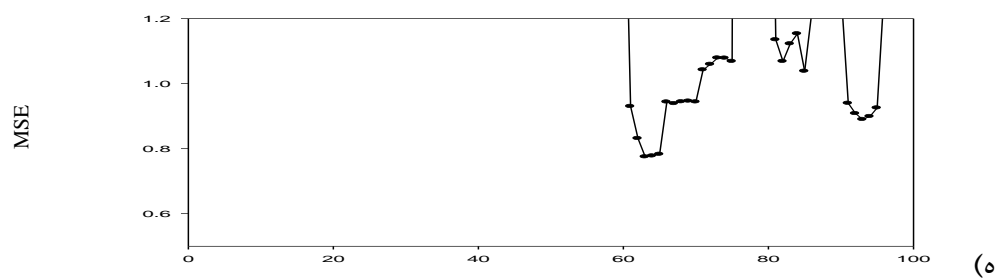
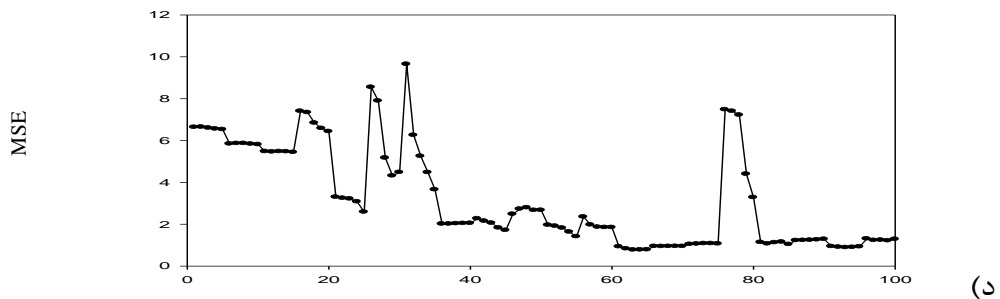
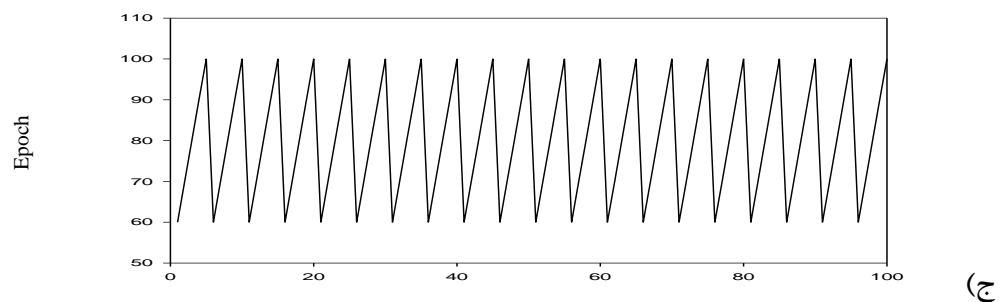
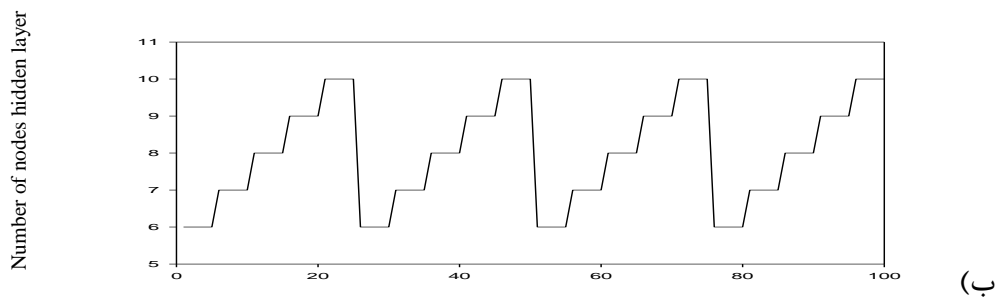
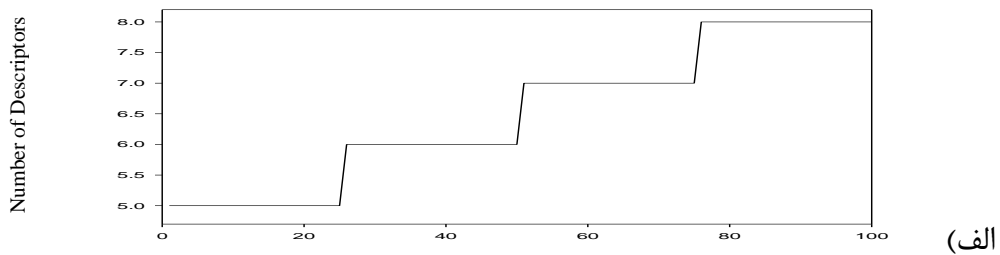
شبکه‌ی عصبی مورد مطالعه در این بخش نیز، شبکه‌ای سه لایه می‌باشد. به منظور به حداقل رساندن تابع عملکرد MSE در سری ارزیابی، شبکه‌هایی با مقدار  $\mu$  ثابت ۰/۰۰۰۵، تعداد ورودی ۲ تا ۸ متغیرهای مستقل ذکر شده در بخش (۳-۵-۱-۳)، تعداد متفاوت گره‌های لایه میانی از ۲ تا ۱۰ و دور آموزشی متغیر ۱۰ تا ۱۰۰ با گام ۱۰ طراحی گردید. شبکه‌های طراحی شده به ازای همه ترکیب‌های ممکن از این سه پارامتر بهینه‌سازی گردید که نتایج این بررسی‌ها در شکل‌های (۳-۱۰) تا (۳-۱۳) نشان داده شده است.



بردار مرجع

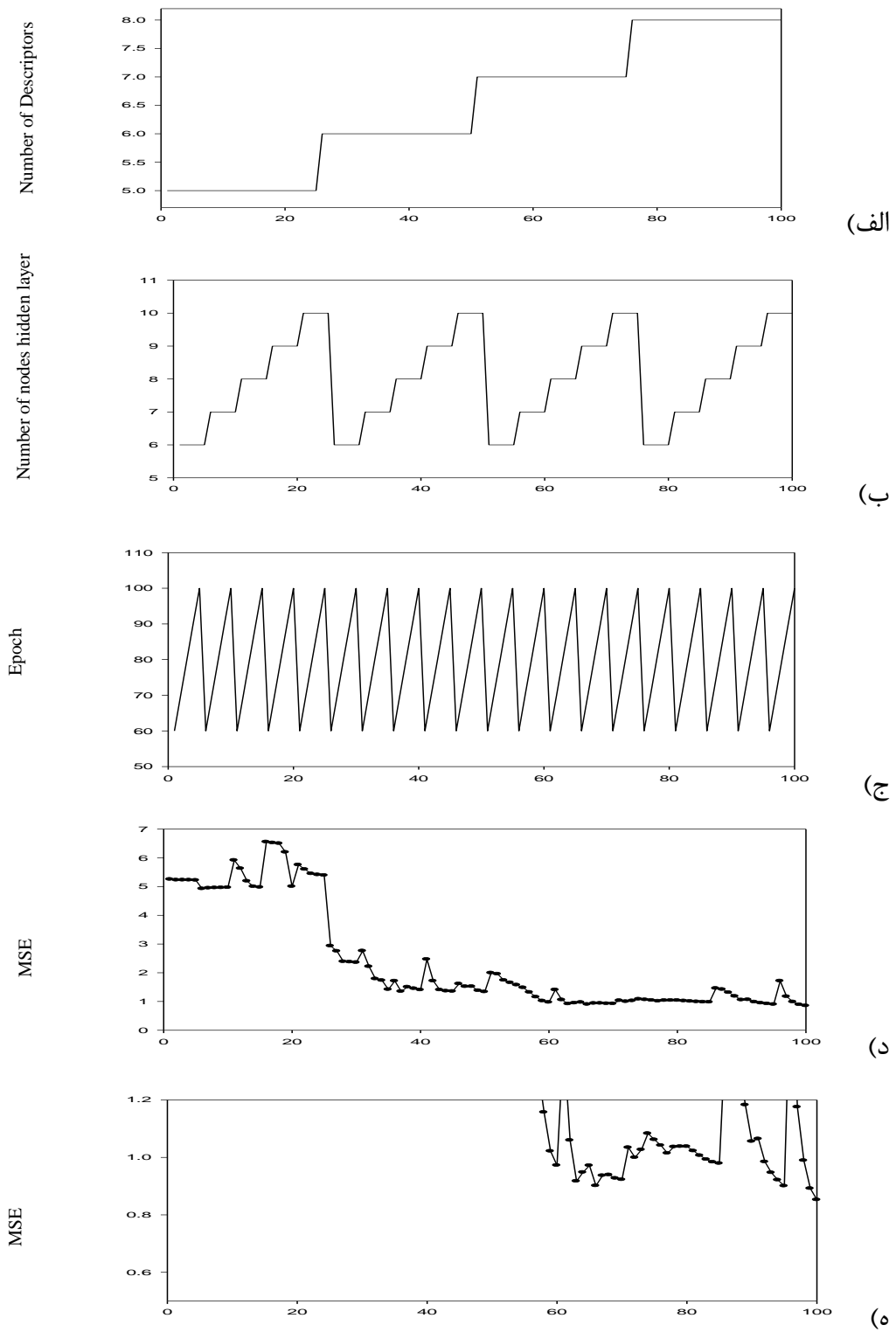
شکل (۳-۱۰): نمودارهای (الف) تعداد توصیفگر، (ب) تعداد نرون لایه مخفی، (ج) دور آموزش، (د) سری ارزیابی MSE و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان می‌دهد، برای تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین





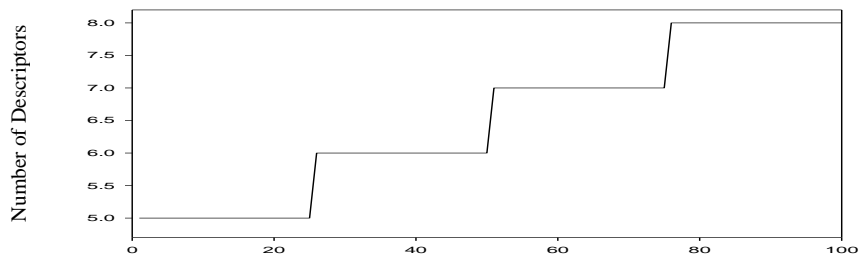
بردار مرجع

شکل (۳-۱۱): نمودارهای (الف) تعداد توصیفگر، (ب) تعداد نرون لایه مخفی، (ج) دور آموزش، (د) سری ارزیابی MSE و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان می‌دهد، برای تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی لونیبرگ-مارکوارت

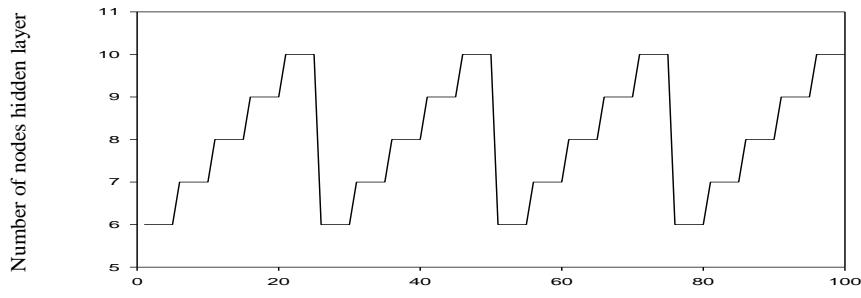


بردار مرجع

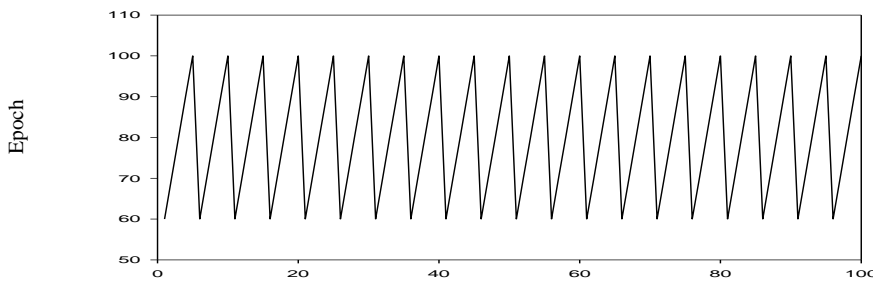
شکل (۳-۱۲): نمودارهای (الف) تعداد توصیفگر، (ب) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ج) دور آموزش، (د) سری ارزیابی MSE و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان می‌دهد، برای تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین



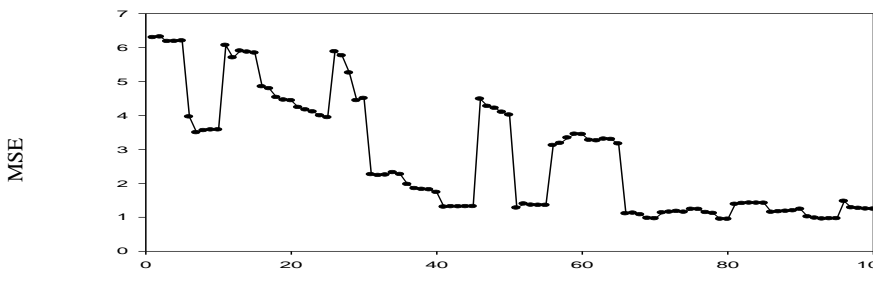
(الف)



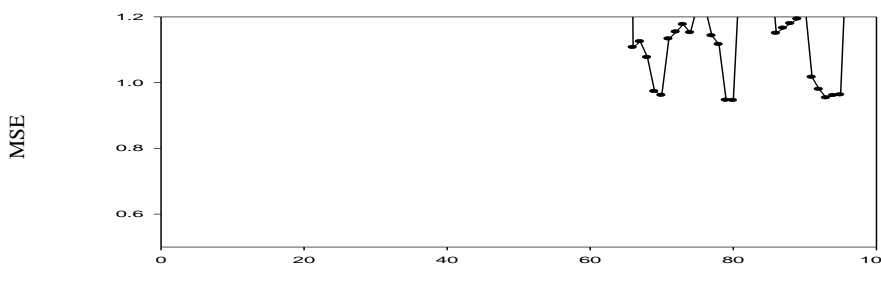
(ب)



(ج)



(د)



(ه)

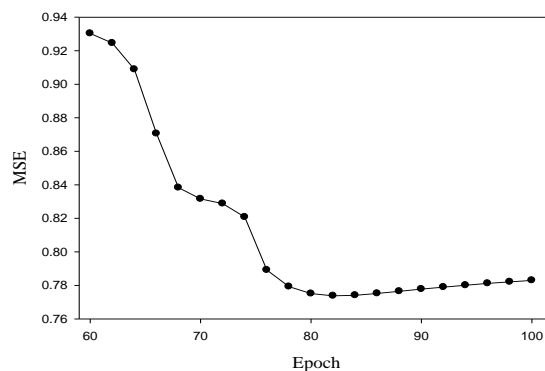
بردار مرجع

شکل (۳-۱۳): نمودارهای (الف) تعداد توصیفگر، (ب) تعداد نرون لایه مخفی، (ج) دور آموزش، (د) سری ارزیابی MSE و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری ارزیابی که مینیمم مقدار آن را بر حسب بردار مرجع بهتر نشان می‌دهد، برای تابع انتقال تانژانت سیگموئیدی و الگوریتم آموزشی لونیبرگ-مارکوارت

جدول (۳-۱۹): توابع و پارامترهای بهینه‌ی شبکه‌های آموزشی براساس MSE در مقدار  $\mu$  ثابت ۰/۰۰۰۵

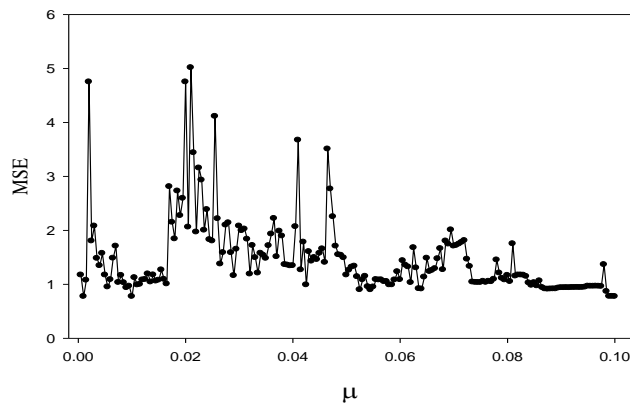
MSE	تعداد دوره‌های آموزشی	تعداد گره	تعداد توصیفگر	تابع آموزشی	تابع انتقال
۰/۸۳۵۱	۹۰	۱۰	۷	بایزین	لگاریتم
۰/۷۷۵۱	۸۰	۸	۷	لونبرگ-مارکوات	لگاریتم
۰/۸۵۲۶	۱۰۰	۱۰	۸	بایزین	تانژانت
۰/۹۴۶۰	۱۰۰	۶	۸	لونبرگ-مارکوات	تانژانت

در این پروژه الگوریتم ژنتیک با شبکه عصبی مصنوعی (GA-ANN) جفت گردید که به این جفت شدن، شبکه عصبی ژنتیکی<sup>۱</sup> (GNN) هم گفته می‌شود. در جدول (۳-۱۹) توابع و پارامترهای بهینه شبکه‌های عصبی GNN آورده شده است. نتایج موجود در این شکل‌ها نشان می‌دهد که شبکه‌ای با الگوریتم آموزشی لونبرگ مارکوات و تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی با ۷ توصیفگر در لایه‌ی ورودی، ۸ گره در لایه‌ی پنهان و دور آموزشی بهینه ۸۰ کمترین مقدار MSE برابر با ۰/۷۷۵۱ را برای سری ارزیابی بدست می‌دهد، در نتیجه این شبکه به عنوان شبکه‌ی بهینه انتخاب گردید. برای تعیین دقیق‌تر دور آموزش، شبکه‌ای با همان مقادیر بهینه تعداد نرون لایه ورودی، تعداد لایه‌ی پنهان، تابع آموزش و تابع انتقال اما با تعداد دوره‌های ۶۰ تا ۱۰۰ با گام ۲ مورد بررسی قرار گرفت که طبق شکل (۳-۱۴) دور آموزشی ۸۲ با مقدار MSE، ۰/۷۷۳۸ به عنوان بهترین مقدار برای تعداد دور آموزشی در شبکه‌ی بهینه انتخاب گردید.



شکل (۳-۱۴): نمودار میانگین مربعات خطا برای سری ارزیابی بر حسب تعداد دوره‌های آموزش متفاوت با گام ۲

در ادامه بهینه کردن شبکه مورد بررسی، مقدار پارامتر  $\mu$  نیز بایستی بهینه شود که بدین منظور، در ساختار شبکه‌ی بهینه با ۷ متغیر ورودی، ۸ گره در لایه پنهان، الگوریتم آموزشی لونیگ-مارکوات، تابع انتقال لگاریتم سیگموئیدی و دور آموزشی ۸۲، مقدار  $\mu$  از ۰/۰۰۰۵ تا ۰/۱ با گام‌های ۰/۰۰۰۵ تغییر داده شد و آنگاه برای هر مورد مقدار میانگین مربع خطا برای سری ارزیابی محاسبه و ثبت گردید که مقدار ۰/۰۰۱ به عنوان مقدار بهینه‌ی  $\mu$  انتخاب شد. مقدار MSE برابر ۰/۷۷۳۸ است. نمودار مقدار میانگین مربع خطا بر حسب  $\mu$  حول نقطه‌ی بهینه در شکل (۳-۱۵) رسم شده است.



شکل (۳-۱۵): نمودار میانگین مربع خطای حاصل از سری ارزیابی بر حسب پارامتر  $\mu$

توابع و مقادیر پارامترهای بهینه شده شبکه‌ی عصبی برای پیش بینی هدایت گرمایی در آلکان‌های خطی، در جدول (۳-۲۰) ارائه شده است:

جدول (۳-۲۰): توابع و مقادیر پارامترهای بهینه شده‌ی GNN

Train lm	تابع آموزش
logsig	تابع انتقال لایه پنهان
pure line	تابع انتقال لایه خروجی
۸	تعداد نرون لایه پنهان
۷	تعداد متغیرهای ورودی
۸۲	تعداد دورهای آموزش
۰/۰۰۱	پارامتر $\mu$

### ۳-۱-۷- ارزیابی مدل‌های غیر خطی

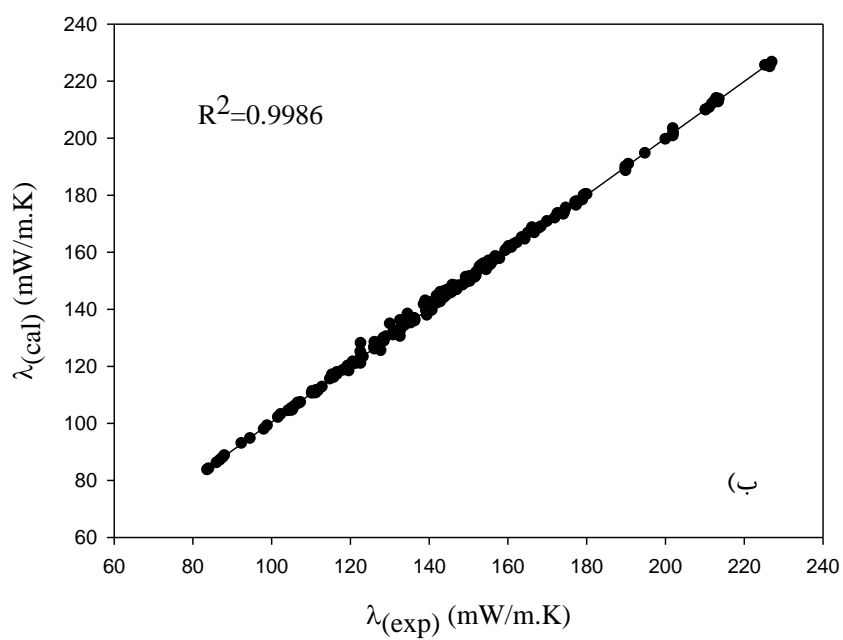
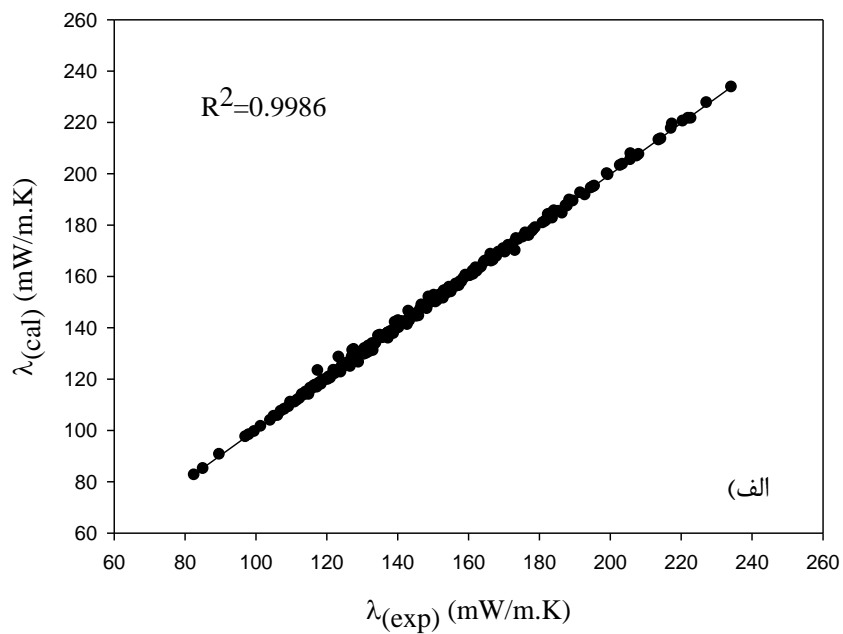
در مرحله‌ی آخر مدل‌های بدست آمده از شبکه‌ی عصبی مصنوعی که با سه روش متفاوت انتخاب توصیفگر طراحی و بهینه‌سازی گردید، مورد ارزیابی قرار گرفت. همانطور که گفته شده بود سری تست به صورت نقطه‌ای که شامل ۲۱۶ سری نقطه جداسازی شده بود. برای این منظور از نمودار برگشتی، نمودار خطای باقیمانده، روش حذف گروهی (LGO) و روش آزمون  $Y$ -تصافی استفاده گردید که در ادامه راجع به هر یک توضیح داده خواهد شد. در جدول (۳-۲۱) پارامترهای آماری حاصل از سری‌های ارزیابی و تست برای سه روش انجام شده به طور مختصر آورده شده است.

جدول (۳-۲۱): پارامترهای آماری سری‌های ارزیابی و تست

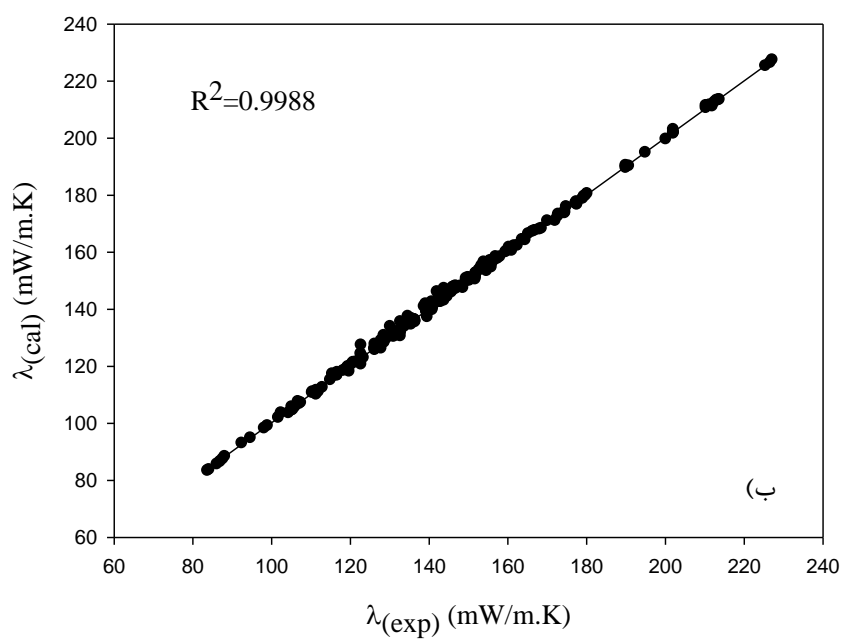
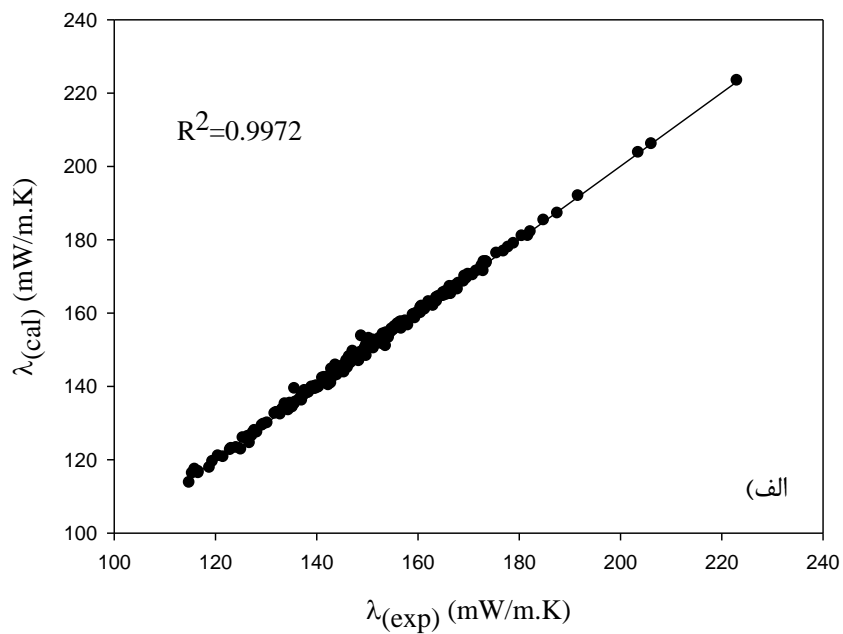
	SR-ANN	CDFS-ANN	GNN
$R^2_{\text{validation}}$	۰/۹۹۸۶	۰/۹۹۷۲	۰/۹۹۷۵
$MSE_{\text{validation}}$	۱/۲۷۹۵	۰/۸۴۷۳	۰/۷۷۳۸
$R^2_{\text{test}}$	۰/۹۹۸۶	۰/۹۹۸۸	۰/۹۹۸۸
$MSE_{\text{test}}$	۱/۱۷۵۷	۱/۰۴۱۱	۱/۱۰۷۹

### ۳-۱-۷-۱- ارزیابی مدل‌های غیر خطی با استفاده از نمودار برگشتی

در نمودار برگشتی مقادیر پیش‌بینی شده بر حسب مقادیر تجربی رسم می‌گردد و با توجه به مقدار ضریب تعیین ( $R^2$ ) به دست آمده از نمودار، پراکندگی نقاط در اطراف خط برگشت تعیین می‌شود. تغییرات مقدار  $R^2$  بین ۱ و ۰ است. هر چه مقدار  $R^2$  به دست آمده به یک نزدیک‌تر باشد به این معناست که همبستگی بیشتری بین داده‌ها وجود داشته و نتایج پیش‌بینی شده به واقعیت نزدیک‌تر می‌باشند. نتایج حاصل از نمودارهای برگشتی مربوط به سه روش SR-ANN، CDFS-ANN و GNN برای سری ارزیابی و سری تست در شکل‌های (۳-۱۶)، (۳-۱۷) و (۳-۱۸) آورده شده است که مقدار  $R^2$  گزارش شده در هر شکل نشان‌دهنده‌ی توانایی بسیار بالای نتایج پیش‌بینی شده‌ی هدایت گرمایی نسبت به مقادیر تجربی در شبکه‌های بهینه شده می‌باشد.

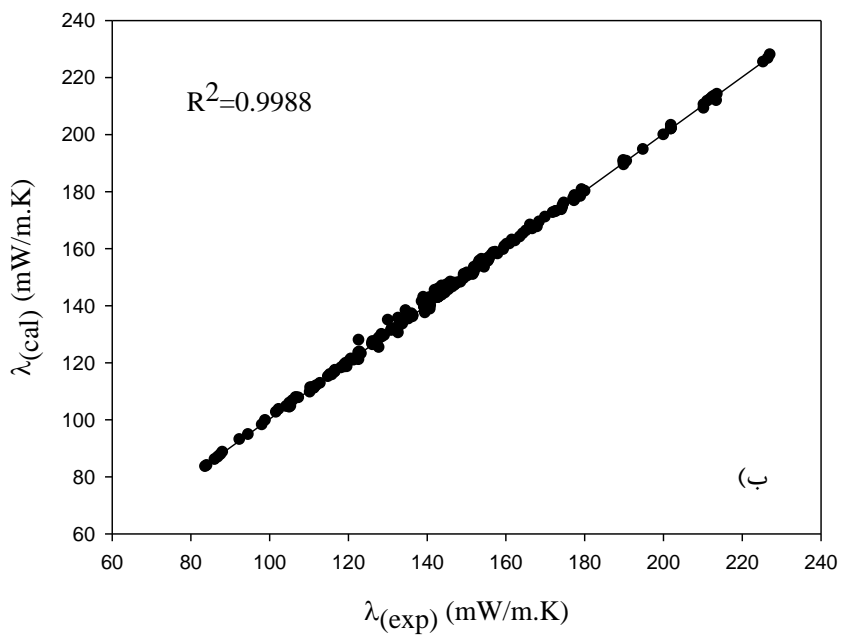
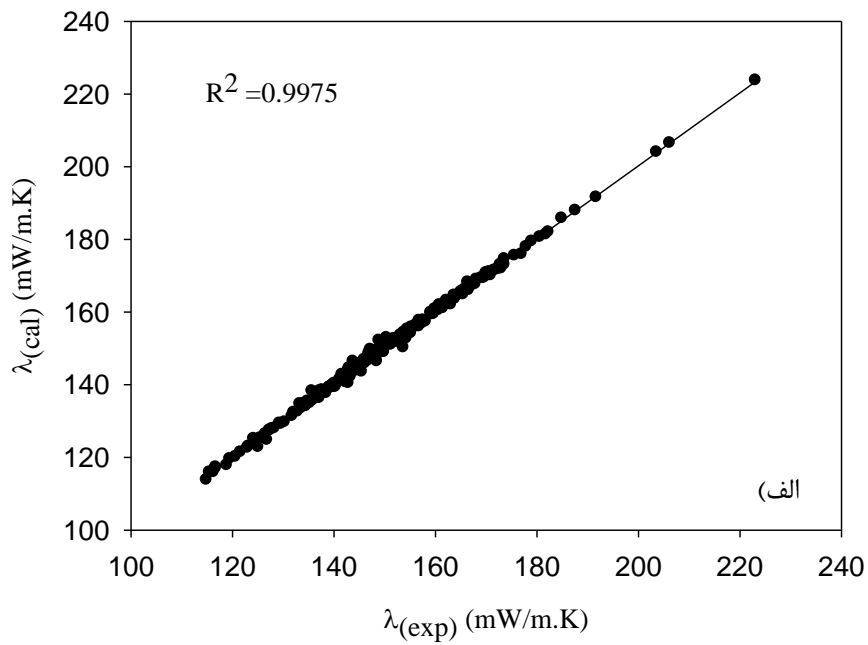


شکل (۳-۱۶): نمودار برگشتی حاصل از SR-ANN برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست



شکل (۳-۱۷): نمودار برگشتی حاصل از CDFS-ANN برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست



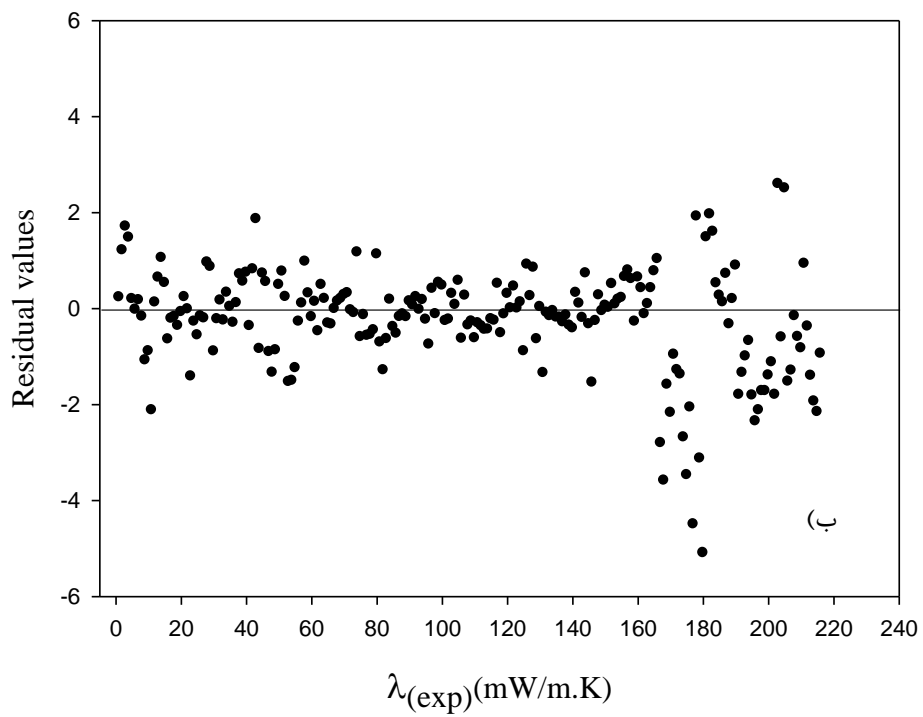
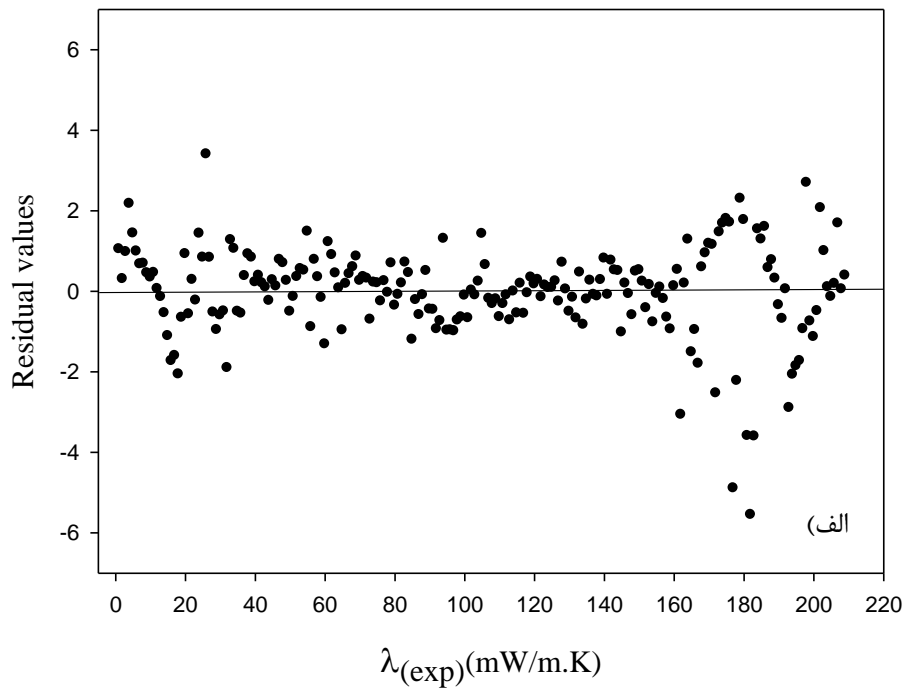


شکل (۳-۱۸): نمودار برگشتی حاصل از GNN برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست

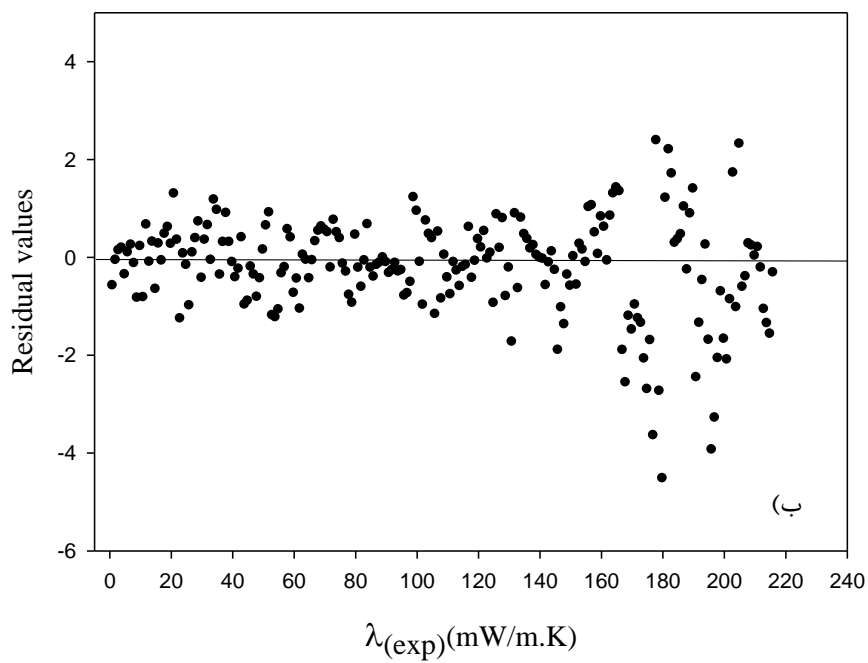
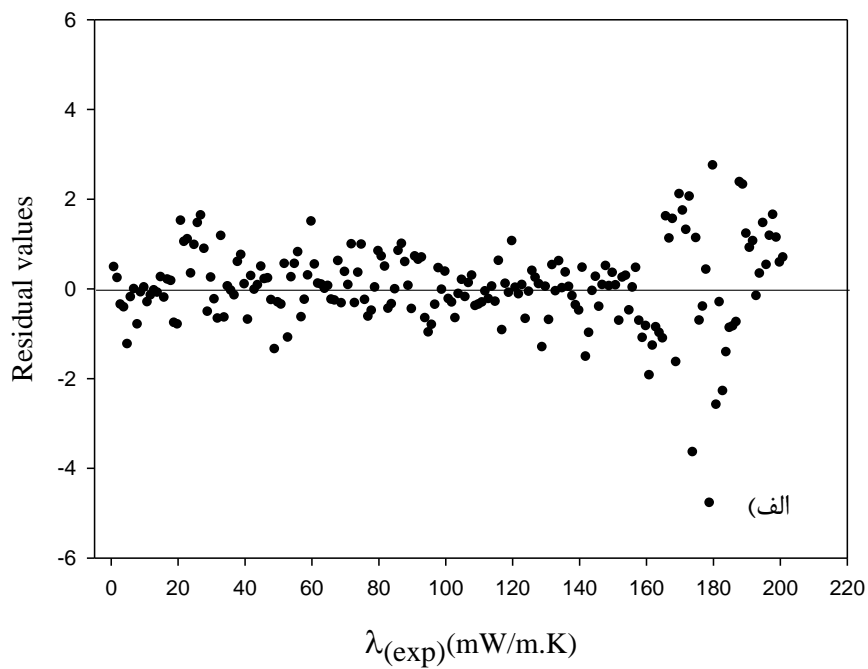
### ۳-۱-۷-۲- ارزیابی مدل‌های غیر خطی با استفاده از نمودار خطای باقیمانده

خطای باقیمانده به تفاوت مقادیر پیش‌بینی شده و مقادیر تجربی گفته می‌شود. اگر پراکندگی مقادیر در حول محور صفر یکنواخت باشد، این امر نشان‌دهنده‌ی تصادفی بودن خطاها است.

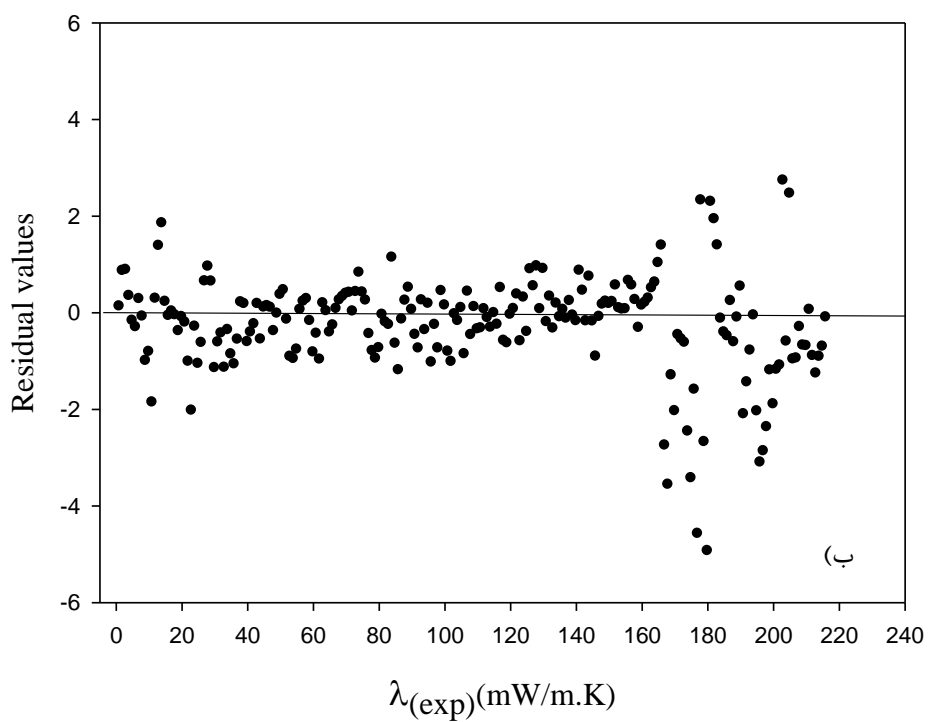
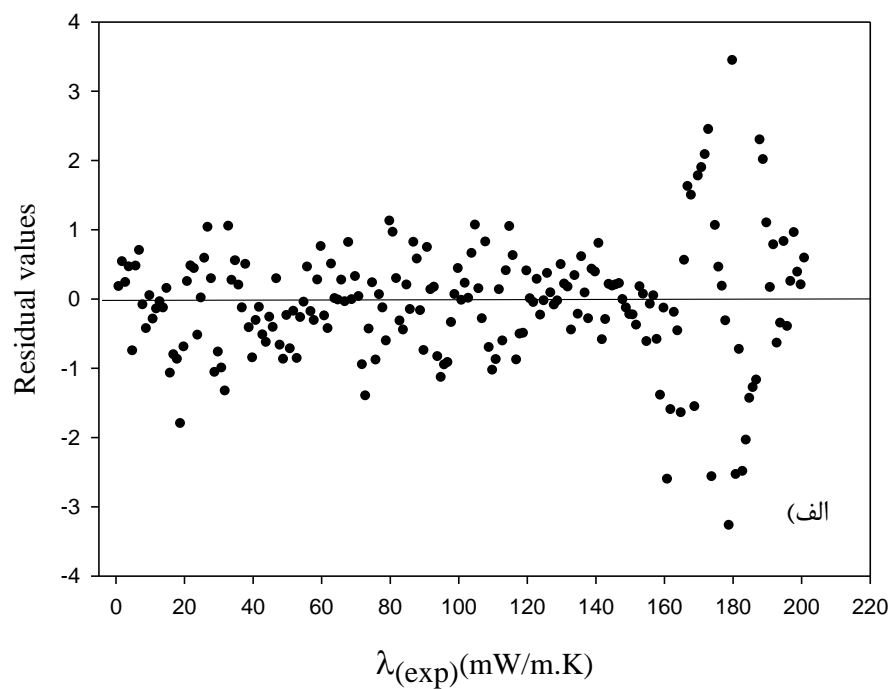
شکل‌های (۱۹-۳) تا (۲۱-۳) نمودار خطای باقیمانده‌های مربوط به سه روش انجام شده‌ی SR-ANN، CDFS-ANN و GNN برای سری ارزیابی و سری تست را نشان می‌دهند. پراکندگی متقارن داده‌ها در این شکل‌های در حول خطای صفر نشان از عدم وجود خطای سیستماتیک در داده‌ها می‌باشد.



شکل (۳-۱۹): نمودار خطای باقیمانده حاصل از SR-ANN برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست



شکل (۳-۲۰): نمودار خطای باقیمانده حاصل از CDFS-ANN برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست



شکل (۳-۲۱): نمودار خطای باقیمانده حاصل از GNN برای (الف) سری ارزیابی و (ب) سری تست

### ۳-۱-۷-۳- ارزیابی مدل‌های غیر خطی با استفاده از آزمون Y- تصادفی

در این روش به متغیر وابسته یا همان خاصیت مورد اندازه‌گیری، به جای مقادیر تجربی درست داده‌ی تصادفی داده می‌شود، سپس ضریب تعیین ( $R^2$ ) برای سری‌های ارزیابی و تست محاسبه گردید. مقادیر پایین ضریب تعیین نشان‌دهنده‌ی عدم وجود ارتباط شانس‌ی یا وابستگی ساختاری به سری آموزش در مدل توسعه یافته توسط شبکه می‌باشد. در جدول (۳-۲۲) نتایج حاصل از تکرار این آزمون نشان داده شده است.

جدول (۳-۲۲): مقادیر  $R^2$  با روش آزمون Y- تصادفی برای سری ارزیابی و تست سه روش SR-ANN، CDFS-ANN و GNN

شماره تکرار آزمون	SR-ANN		CDFS-ANN		GNN	
	$R^2_{\text{validation}}$	$R^2_{\text{test}}$	$R^2_{\text{validation}}$	$R^2_{\text{test}}$	$R^2_{\text{validation}}$	$R^2_{\text{test}}$
۱	۰/۰۴۴۷	۰/۱۰۷۵	۰/۰۹۹۲	۰/۱۰۶۴	۰/۱۵۷۱	۰/۱۰۵۲
۲	۰/۱۲۸۹	۰/۰۰۹۴	۰/۰۸۹۳	۰/۰۲۳۵	۰/۰۵۰۲	۰/۰۲۸۶
۳	۰/۲۲۸۵	۰/۱۶۰۵	۰/۲۸۹۳	۰/۱۳۸۱	۰/۲۶۶۰	۰/۱۴۱۱
۴	۰/۲۹۰۳	۰/۲۱۹۸	۰/۲۸۱۷	۰/۲۰۰۲	۰/۲۶۶۴	۰/۳۱۶۰
۵	۰/۴۰۲۴	۰/۲۸۴۷	۰/۳۲۶۳	۰/۱۴۷۸	۰/۳۶۱۳	۰/۱۹۸۳
۶	۰/۳۱۴۲	۰/۲۴۶۴	۰/۴۳۱۸	۰/۲۵۵۳	۰/۴۷۱۹	۰/۲۴۲۹
۷	۰/۳۰۰۲	۰/۲۰۹۴	۰/۳۹۲۵	۰/۳۰۰۲	۰/۱۷۱۴	۰/۲۵۵۶
۸	۰/۱۹۴۱	۰/۱۶۸۴	۰/۳۶۵۹	۰/۱۵۷۱	۰/۱۹۲۳	۰/۲۰۱۳
۹	۰/۱۶۰۱	۰/۱۲۷۲	۰/۱۹۰۸	۰/۱۲۴۲	۰/۲۲۵۵	۰/۱۲۶۵
۱۰	۰/۰۹۸۱	۰/۱۳۶۰	۰/۱۴۰۰	۰/۰۹۷۱	۰/۱۴۴۰	۰/۱۰۷۵

### ۳-۱-۷-۴- ارزیابی مدل‌های غیر خطی با استفاده از روش حذف گروهی

برای بررسی بیشتر قدرت پیش‌بینی مدل بهینه‌ی شبکه‌ی عصبی مصنوعی از روش حذف گروهی استفاده شده است. در این روش، هر بار یک مولکول که شامل یک سری داده در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار می‌باشد، کنار گذاشته می‌شود و در شبکه‌ی بهینه‌ی ساخته شده با بقیه مولکول‌ها مدل‌سازی انجام می‌شود. این فرایند تا زمانیکه کلیه مولکول‌ها یک دور از سری داده‌ها خارج شوند، ادامه پیدا می‌کند. ارزیابی‌های محاسبه شده برای تک تک مولکول‌ها در شبکه‌ی بهینه با سه روش انتخابی برای توصیف‌گرهای مناسب به طور مقایسه‌ای با یکدیگر در پیوست، در جدول (۱-پ) آورده شده است.

### ۳-۱-۸- بررسی ارتباط توصیف‌گرهای معتبر شبکه‌ی بهینه با هدایت گرمایی

شبکه‌ی بهینه CDFS-ANN به عنوان بهترین شبکه انتخاب گردید بنابراین در این بخش به بررسی ارتباط توصیف‌گرهای منتخب در روش CDFS-ANN با هدایت گرمایی اشاره می‌شود.

### ۳-۱-۸-۱- توصیف‌گرهای 3D- MORSE

توصیف‌گرهای 3D- MORSE جزء توصیف‌گرهای نمایش سه بعدی ساختارهای مولکولی براساس پراش الکترون طبقه‌بندی می‌شوند. در سال ۱۹۳۱ توسط وایرل<sup>۲</sup> معادله‌ای (۳-۱) برای محاسبه‌ی این توصیف‌گرها پیشنهاد شد.

$$I(s) = \sum_{i=1}^{A-1} \sum_{j=i+1}^A W_i W_j \frac{\sin(s \cdot r_{ij})}{s \cdot r_{ij}} \quad (1-3)$$

1- 3D- Molecular Representation of Structure based on Electron diffraction descriptors

2- Wierl

در رابطه‌ی (۱-۳)، شدت الکترون پراکنده شده،  $W_i$  و  $W_j$  خاصیت اتمی اتم‌های  $i$  و  $j$ ،  $r_{ij}$  فاصله‌ی بین اتم‌های  $i$  و  $j$ ،  $A$  تعداد کل اتم‌ها می‌باشد و پارامتر  $S$  نیز بیانگر پراکندگی در جهات مختلف توسط مجموعه‌ای از اتم‌های  $A$  که در موقعیت  $r_i$  قرار گرفته‌اند، از رابطه‌ی (۲-۳) به دست می‌آید.

$$S = 4\pi \cdot \sin(v/2) / \lambda \quad (2-3)$$

در این رابطه  $v$  زاویه‌ی پراکندگی و  $\lambda$  طول موج پرتو الکترون است. تمام روابط با فرض اینکه مولکول‌ها صلب باشند، ارائه شده‌اند با توجه به جدول (۲۳-۳) توصیفگر Mor18v برای همه‌ی ترکیبات دارای مقادیر منفی و اثر متوسط (۱۵/۴۷۲) و توصیفگر Mor20v برای همه‌ی ترکیبات دارای مقادیر مثبت و اثر متوسط (-۴/۵۴۲) می‌باشد، بنابراین این دو توصیفگر اثر یکسانی بر هدایت گرمایی دارند.

### ۳-۱-۸-۲- توصیفگرهای GETAWAY<sup>۱</sup>

این توصیفگرها بیان کننده‌ی خاصیت‌های توپولوژیکی و هندسی مولکول می‌باشند که توسط ماتریس تأثیر مولکولی (MIM)<sup>۲</sup> محاسبه می‌شوند. این ماتریس به آسانی از مختصات فضایی اتم‌های مولکول در یک صورتبندی مشخص به دست می‌آید که با رابطه زیر بیان می‌گردد:

$$H = M(M^T M) \cdot M^T \quad (3-3)$$

در رابطه‌ی فوق  $M$  ماتریس مختصات اتمی، بالانویس  $T$  به معنای ماتریس ترانپوز و  $H$  ماتریس تأثیر مولکولی است. عناصر قطری ( $h_{ij}$ ) ماتریس  $H$  لوریج<sup>۳</sup> نام دارند که هر یک بیانگر اثر یک اتم در ایجاد شکل کلی مولکول است. به عنوان مثال اتم‌های دورتر نسبت به اتم‌های نزدیکتر به مرکز اتم، دارای

---

1- Geometrical, Topology and atom Weighted assembly  
 2- Molecular Influence Matrix  
 3- Leverage



$(h_{ij})$  بزرگتری هستند. اولین سری از این توصیفگرهای مولکولی H-GETAWAY نامیده می‌شوند که تنها توسط اطلاعات به دست آمده توسط ماتریس نفوذ مولکولی محاسبه می‌شوند که HATS6m در این دسته می‌باشد. اثر متوسط توصیفگر برابر این (۱۰/۰۸۳) است که با افزایش اثر این توصیفگر هدایت گرمایی نیز افزایش می‌یابد. که سری R-GETAWAY ترکیبی از اطلاعات ماتریس تأثیر- فاصله است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$[R]_{ij} = \left[ \frac{\sqrt{h_{ii}h_{jj}}}{r_{ij}} \right]_{ij} \quad i \neq j \quad (4-3)$$

$h_{ii}$  و  $h_{jj}$  لوریج (قدرت نفوذ) دو اتم  $i$  و  $j$  و  $r_{ij}$  فاصله‌ی آن دو اتم است. توصیفگر R6u نیز جزء این دسته می‌باشد که دو اتم در فاصله‌ی توپولوژیکی ۶ قرار دارند و با ویژگی خاصی از مولکول وزن دار نشده، محاسبه می‌شود. این توصیفگرها از آن جهت مهم هستند که به ساختار سه بعدی مولکول حساس هستند. معمولاً برای مقایسه مولکول‌ها و حتی صورت‌بندی‌ها از نظر شکل، تقارن، اندازه اتم به کار می‌روند. این توصیفگر در مدل دارای علامت منفی است و نشان می‌دهد که با مقدار اثر متوسط (-۸/۹۴۰) باعث کاهش مقدار هدایت گرمایی می‌شود.

### ۳-۱-۸-۳- توصیفگرهای 2D- autocorrelation

توصیفگرهای دو بعدی خود ارتباطی از گراف مولکولی و از طریق محاسبه مجموع اوزان اتم‌های انتهایی کل مسیرها با طول مسیر مورد نظر (lag)، به دست می‌آیند. نوعی از این توصیفگرها گروه خودهمبستگی گری<sup>۱</sup> در سال ۱۹۵۴ توسط گری<sup>۲</sup> پیشنهاد شدند که ضریب گری نام دارند و طبق معادله (۵-۳) محاسبه می‌شوند.

1- Ceary Autocorrelation  
2- Ceary

$$C(d) = \frac{\frac{1}{2\Delta} \sum_{i=1}^A \sum_{j=1}^A \delta_{ij} \cdot (w_i - w_j)^2}{\frac{1}{(A-1)} \cdot \sum_{i=1}^A (w_i - \bar{w})^2} \quad (5-3)$$

که  $w$  یک ویژگی اتم،  $\bar{w}$  میانگین مقدار آن خاصیت روی مولکول،  $A$  تعداد اتمها و  $d$  فاصله توپولوژیکی است و  $\delta_{ij}$ ، دلتای کرونکر است (اگر  $d_{ij} = d$  باشد  $\delta_{ij} = 1$  است و در غیر اینصورت صفر است).  $\Delta$  هم مجموع دلتاهای کرونکر است. مقدار این توصیفگرها از جنس فاصله است بنابراین از یک تا بی نهایت متغیر است. معنی عبارت 2m در توصیفگر GATS2m بیانگر فاصله توپولوژیکی 2 و وزن دار شدن این توصیفگر توسط جرمهای اتمی است. با توجه به اینکه مقدار اثر این توصیفگر (-7/0.12) می باشد با کاهش جرم اتمی، کاهش هدایت گرمایی رخ می دهد.

جدول (3-23): مقادیر توصیفگرهای تئوری انتخاب شده با روش CDFS

نام ترکیب	R6u	GATS2m	Mor18v	Mor20v	HATS6m
n-هگزان	0/1140	0/0310	-0/0440	0/0520	0/0120
n-هپتان	0/0920	0/0309	-0/0480	0/0450	0/0210
n-اکتان	0/0780	0/0312	-0/0420	0/0440	0/0200
n-نونان	0/11350	0/0311	-0/0320	0/0470	0/0160
n-دکان	0/1220	0/0310	-0/0240	0/0480	0/0140
n-آن دکان	0/1110	0/0311	-0/0320	0/0400	0/0120
n-دودکان	0/0960	0/0310	-0/0240	0/0440	0/0110
n-تری دکان	0/0890	0/0312	-0/0400	0/0260	0/0100
n-تترادکان	0/0810	0/0311	-0/0290	0/0460	0/0090
n-پنتادکان	0/0760	0/0300	-0/0360	0/0310	0/0090
n-هگزادکان	0/0710	0/0300	-0/0270	0/0400	0/0090
n-هپتادکان	0/0680	0/0301	-0/0260	0/0310	0/0080
n-اکتادکان	0/0650	0/0300	-0/0200	0/0310	0/0080
n-نونادکان	0/0630	0/0303	-0/0170	0/0240	0/0080
n-ایکوزان	0/0600	0/0300	-0/0240	0/0260	0/0080

## ۲-۲- نتیجه‌گیری

در این تحقیق از روش مدل‌سازی شبکه عصبی مصنوعی به عنوان روشی قدرتمند و کارآمد برای پیش‌بینی هدایت گرمایی یک سری همولوگ از آلکان‌های خطی استفاده شده است. از آنجایی که محاسبه هدایت گرمایی به صورت تجربی با صرف هزینه، زمان و پیچیدگی‌های زیادی همراه است، بنابراین استفاده از این روش از اهمیت بالایی برخوردار است. برای انتخاب توصیفگرهای معتبر و مناسب از روش‌های MLR، CDFS و GA استفاده گردید. مقایسه‌ی نتایج سه روش نشان می‌دهد که روش CDFS، نتایج بهتری را در انتخاب توصیفگرهای مناسب نسبت به دو روش دیگر برای پیش‌بینی هدایت گرمایی ارائه می‌دهد. مقدار MSE محاسبه شده از طریق روش‌های ANN-MLR، CDFS-ANN و GA-ANN برای سری تست به ترتیب (۱/۱۷۵۷، ۱/۰۴۱۱ و ۱/۱۰۷۹) می‌باشد. اگرچه MSE حاصل از سه روش بسیار به هم نزدیک است، اما روش CDFS علاوه بر داشتن کمترین مقدار MSE بین سه روش ارائه شده، به دلیل عدم وابستگی به نوع دسته‌بندی و حذف توصیفگرهای تصادفی از ارجحیت بیشتری برخوردار است. به همین دلیل مدل حاصل از روش CDFS-ANN به عنوان مدل برتر انتخاب شد. همچنین نتایج حاصل از ارزیابی مدل‌های بهینه شده با کمک نمودار برگشتی، نمودار خطای باقیمانده، آزمون Y-تصادفی و روش حذف گروهی تأییدی بر قدرت مدل بهینه‌ی انتخاب شده است. بنابراین روش مدل‌سازی شبکه‌ی عصبی مصنوعی یک روش کاملاً موفق در پیش‌بینی خواص فیزیکی و شیمیایی می‌باشد.

## ۳-۲- آینده‌نگری

نتایج حاصل از پیش‌بینی توسط مدل‌سازی شبکه‌ی عصبی مصنوعی هدایت گرمایی آلکان‌های خطی نشان داد که می‌توان از این روش برای پیش‌بینی هدایت گرمایی سایر سیالات نیز استفاده نمود.

برای انتخاب توصیفگر مناسب و معتبر می‌توان از سایر روش‌ها مثل روش‌های تخمین تابع ژنتیک (GFA)<sup>۱</sup>، الگوریتم جستجوی ممنوع<sup>۲</sup>، الگوریتم اجتماع مورچگان<sup>۳</sup>، الگوریتم بهینه‌سازی جمعیت ذره‌ها<sup>۴</sup> و آنالیز حداقل مربعات جزئی (PLS)<sup>۵</sup> استفاده و نتایج را با این کار مقایسه کرد.

برای مدل‌سازی می‌توان از روش‌های اساس تابع تابشی (RBF)<sup>۶</sup>، ماشین‌های بردار پشتیبان (SVM)<sup>۷</sup>، حداقل مربعات ماشین‌های بردار پشتیبان (LS-SVM)<sup>۸</sup> و سیستم استنتاج فازی-عصبی سازگار (ANFIS)<sup>۹</sup> استفاده کرد.

- 
- 1- Genetic Function Approximation
  - 2- Tabu Search
  - 3- Ant Colony Optimization
  - 4- Honey-bee Matikg Optimization Algorithm
  - 5- Partial Least Squares
  - 6- Radial basis function
  - 7-Support Vector Machines
  - 8- Least Squares Support Vector Machines
  - 9-Adaptive neuron-fuzzy inference system

## پیوست

جدول (۱-پ): گزارش داده‌های تجربی و نتایج محاسباتی از روش حذف گروهی برای مولکول‌های مختلف

ن-هگزان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۲۹/۳	۱۴۷/۳	۱۳۵/۷	۱۲۹/۵
۲	۱۳۸/۴	۱۵۹/۳	۱۴۴/۵	۱۳۹/۲
۳	۱۴۷/۲	۱۷۰/۲	۱۵۲/۳	۱۴۸/۰
۴	۱۵۳/۹	۱۸۰/۱	۱۵۹/۱	۱۵۶/۱
۵	۱۶۰/۶	۱۸۹/۲	۱۶۵/۲	۱۶۳/۵
۶	۱۶۶/۶	۱۹۷/۶	۱۷۰/۶	۱۷۰/۴
۷	۱۷۲/۸	۲۰۵/۵	۱۷۵/۳	۱۷۶/۷
۸	۱۷۸/۳	۲۱۲/۹	۱۷۹/۶	۱۸۲/۶
۹	۱۸۲/۳	۲۱۹/۹	۱۸۳/۴	۱۸۸/۱
۱۰	۱۸۷/۷	۲۲۶/۵	۱۸۶/۸	۱۹۳/۲
۱۱	۱۲۱/۶	۱۳۹/۰	۱۳۱/۶	۱۲۲/۷
۱۲	۱۳۰/۹	۱۵۱/۶	۱۴۰/۶	۱۳۲/۶
۱۳	۱۴۰/۶	۱۶۲/۹	۱۴۸/۵	۱۴۱/۷
۱۴	۱۴۷/۹	۱۷۳/۳	۱۵۵/۴	۱۵۰/۱
۱۵	۱۵۵/۰	۱۸۲/۷	۱۶۱/۵	۱۵۷/۷
۱۶	۱۶۱/۱	۱۹۱/۴	۱۶۶/۷	۱۶۴/۷
۱۷	۱۶۶/۹	۱۹۹/۵	۱۷۱/۳	۱۷۱/۲
۱۸	۱۷۲/۷	۲۰۷/۱	۱۷۵/۴	۱۷۷/۳
۱۹	۱۷۷/۳	۲۱۴/۳	۱۷۸/۹	۱۸۲/۹
۲۰	۱۸۲/۴	۲۲۱/۰	۱۸۲/۱	۱۸۸/۲
۲۱	۱۱۳/۴	۱۳۰/۶	۱۲۷/۷	۱۱۴/۹
۲۲	۱۲۳/۶	۱۴۳/۷	۱۳۷/۰	۱۲۵/۳
۲۳	۱۳۳/۶	۱۵۵/۶	۱۴۵/۱	۱۳۴/۷
۲۴	۱۴۱/۹	۱۶۶/۳	۱۵۲/۰	۱۴۳/۴
۲۵	۱۴۸/۴	۱۷۶/۰	۱۵۸/۰	۱۵۱/۲
۲۶	۱۵۵/۹	۱۸۴/۹	۱۶۳/۱	۱۵۸/۴
۲۷	۱۶۱/۷	۱۹۳/۲	۱۶۷/۶	۱۶۵/۱
۲۸	۱۶۷/۹	۲۰۰/۸	۱۷۱/۴	۱۷۱/۳
۲۹	۱۷۳/۲	۲۰۸/۰	۱۷۴/۷	۱۷۷/۱
۳۰	۱۷۷/۲	۲۱۴/۷	۱۷۷/۶	۱۸۲/۶
۳۱	۱۰۶/۶	۱۲۲/۱	۱۲۴/۲	۱۰۶/۴
۳۲	۱۱۷/۴	۱۳۵/۸	۱۳۳/۸	۱۱۷/۴
۳۳	۱۲۶/۹	۱۴۸/۱	۱۴۲/۰	۱۲۷/۲
۳۴	۱۳۵/۹	۱۵۹/۱	۱۴۸/۹	۱۳۶/۲
۳۵	۱۴۳/۶	۱۶۹/۱	۱۵۴/۸	۱۴۴/۴
۳۶	۱۵۰/۳	۱۷۸/۱	۱۵۹/۹	۱۵۱/۸
۳۷	۱۵۶/۸	۱۸۶/۴	۱۶۴/۱	۱۵۸/۷

ادامہ جدول (۱-پ)

ن-ہگزان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۳۸	۱۶۲/۶	۱۹۴/۰	۱۶۷/۷	۱۶۵/۰
۳۹	۱۶۸/۱	۲۰۱/۱	۱۷۰/۷	۱۷۱/۰
۴۰	۱۷۳/۳	۲۰۷/۷	۱۷۳/۳	۱۷۶/۶
ن-ہپتان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۳۴/۵	۱۶۸/۸	۱۳۱/۹	۱۲۸/۶
۲	۱۴۴/۱	۱۷۷/۷	۱۴۱/۵	۱۳۸/۵
۳	۱۵۱/۵	۱۸۵/۲	۱۵۰/۱	۱۴۷/۸
۴	۱۵۹/۵	۱۹۱/۹	۱۵۷/۹	۱۵۶/۸
۵	۱۶۶/۶	۱۹۷/۷	۱۶۴/۸	۱۶۵/۱
۶	۱۷۳/۰	۲۰۲/۹	۱۷۱/۰	۱۷۳/۱
۷	۱۷۸/۳	۲۰۷/۵	۱۷۶/۵	۱۸۰/۴
۸	۱۸۲/۶	۲۱۱/۸	۱۸۱/۷	۱۸۷/۴
۹	۱۲۸/۳	۱۶۶/۷	۱۲۵/۷	۱۲۳/۹
۱۰	۱۳۷/۲	۱۷۶/۱	۱۳۵/۷	۱۳۴/۳
۱۱	۱۴۵/۲	۱۸۴/۱	۱۴۴/۹	۱۴۴/۱
۱۲	۱۵۴/۵	۱۹۱/۲	۱۵۳/۳	۱۵۳/۵
۱۳	۱۶۱/۴	۱۹۷/۳	۱۶۰/۸	۱۶۲/۳
۱۴	۱۶۸/۳	۲۰۲/۸	۱۶۷/۵	۱۷۰/۸
۱۵	۱۷۳/۶	۲۰۷/۷	۱۷۳/۵	۱۷۸/۶
۱۶	۱۷۹/۸	۲۱۲/۲	۱۷۹/۱	۱۸۶/۰
۱۷	۱۸۴/۶	۲۱۶/۳	۱۸۴/۳	۱۹۲/۸
۱۸	۱۸۹/۱	۲۲۰/۲	۱۸۹/۶	۱۹۹/۳
۱۹	۱۲۱/۲	۱۶۴/۵	۱۱۹/۳	۱۱۹/۸
۲۰	۱۳۳/۵	۱۷۴/۵	۱۲۹/۸	۱۳۰/۶
۲۱	۱۴۱/۵	۱۸۳/۰	۱۳۹/۴	۱۴۰/۸
۲۲	۱۴۹/۶	۱۹۰/۵	۱۴۸/۵	۱۵۰/۷
۲۳	۱۵۷/۵	۱۹۷/۰	۱۵۶/۵	۱۵۹/۹
۲۴	۱۶۴/۷	۲۰۲/۹	۱۶۳/۹	۱۶۸/۷
۲۵	۱۷۱/۴	۲۰۸/۱	۱۷۰/۴	۱۷۷/۰
۲۶	۱۷۸/۴	۲۱۲/۹	۱۷۶/۵	۱۸۴/۸
۲۷	۱۸۳/۱	۲۱۷/۳	۱۸۲/۲	۱۹۲/۱
۲۸	۱۸۸/۶	۲۲۱/۴	۱۸۷/۷	۱۹۸/۹
۲۹	۱۱۵/۳	۱۶۲/۳	۱۱۲/۹	۱۱۶/۱
۳۰	۱۲۷/۸	۱۷۲/۹	۱۲۳/۷	۱۲۷/۳
۳۱	۱۳۴/۷	۱۸۱/۹	۱۳۳/۸	۱۳۷/۹
۳۲	۱۴۵/۷	۱۸۹/۹	۱۴۳/۴	۱۴۸/۲
۳۳	۱۵۴/۰	۱۹۶/۹	۱۵۲/۱	۱۵۷/۸
۳۴	۱۶۳/۱	۲۰۳/۲	۱۶۰/۱	۱۶۷/۰
۳۵	۱۷۰/۵	۲۰۸/۷	۱۶۷/۲	۱۷۵/۶

ن-ہیٹان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۳۶	۱۷۶/۹	۲۱۳/۸	۱۷۳/۹	۱۸۳/۸
۳۷	۱۸۲/۲	۲۱۸/۵	۱۸۰/۰	۱۹۱/۴
۳۸	۱۸۵/۶	۲۲۲/۹	۱۸۶/۰	۱۹۸/۶
۳۹	۱۳۹/۹	۱۳۸/۴	۱۴۰/۰	۱۴۰/۱
ن-اکتان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۴۸/۳	۱۴۶/۳	۱۴۹/۸	۱۵۰/۷
۲	۱۵۴/۹	۱۵۱/۹	۱۵۷/۸	۱۵۹/۷
۳	۱۶۲/۱	۱۵۷/۳	۱۶۴/۹	۱۶۷/۶
۴	۱۶۸/۱	۱۶۲/۵	۱۷۰/۹	۱۷۴/۵
۵	۱۷۳/۶	۱۶۷/۸	۱۷۶/۱	۱۸۰/۵
۶	۱۷۹/۱	۱۷۳/۰	۱۸۰/۵	۱۸۵/۸
۷	۱۸۳/۵	۱۷۸/۳	۱۸۴/۴	۱۹۰/۶
۸	۱۳۷/۱	۱۳۸/۲	۱۳۶/۷	۱۳۵/۸
۹	۱۴۵/۴	۱۴۴/۳	۱۴۶/۵	۱۴۶/۵
۱۰	۱۵۲/۶	۱۵۰/۰	۱۵۵/۰	۱۵۵/۸
۱۱	۱۵۹/۷	۱۵۵/۴	۱۶۲/۵	۱۶۴/۱
۱۲	۱۶۵/۷	۱۶۰/۶	۱۶۸/۹	۱۷۱/۲
۱۳	۱۷۲/۲	۱۶۵/۹	۱۷۴/۵	۱۷۷/۵
۱۴	۱۷۷/۷	۱۷۱/۱	۱۷۹/۲	۱۸۳/۰
۱۵	۱۸۲/۳	۱۷۶/۴	۱۸۳/۳	۱۸۸/۰
۱۶	۱۳۱/۵	۱۳۴/۹	۱۳۰/۶	۱۲۷/۷
۱۷	۱۳۹/۸	۱۴۱/۳	۱۴۱/۱	۱۳۹/۰
۱۸	۱۴۷/۵	۱۴۷/۱	۱۵۰/۴	۱۴۸/۷
۱۹	۱۵۵/۳	۱۵۲/۶	۱۵۸/۶	۱۵۷/۵
۲۰	۱۶۱/۷	۱۵۷/۸	۱۶۵/۶	۱۶۵/۰
۲۱	۱۶۸/۶	۱۶۳/۱	۱۷۱/۸	۱۷۱/۸
۲۲	۱۷۴/۶	۱۶۸/۳	۱۷۷/۱	۱۷۷/۷
۲۳	۱۷۹/۴	۱۷۳/۶	۱۸۱/۷	۱۸۳/۱
۲۴	۱۲۴/۵	۱۳۲/۱	۱۲۴/۷	۱۱۹/۱
۲۵	۱۳۴/۹	۱۳۸/۷	۱۳۵/۸	۱۳۰/۸
۲۶	۱۴۳/۳	۱۴۴/۷	۱۴۵/۷	۱۴۱/۱
۲۷	۱۵۱/۱	۱۵۰/۳	۱۵۴/۷	۱۵۰/۳
۲۸	۱۵۹/۰	۱۵۵/۷	۱۶۲/۴	۱۵۸/۳
۲۹	۱۶۵/۷	۱۶۱/۰	۱۶۹/۳	۱۶۵/۵
۳۰	۱۷۲/۱	۱۶۶/۲	۱۷۵/۱	۱۷۱/۸
۳۱	۱۷۷/۶	۱۷۱/۵	۱۸۰/۳	۱۷۷/۵
۳۲	۱۱۹/۶	۱۲۹/۸	۱۱۸/۹	۱۱۰/۲

ادامہ جدول (۱-پ)

<b>n-اکتان</b>	<b>مقادیر تجربی (mW/m.K)</b>	<b>MLR-ANN</b>	<b>CDFS-ANN</b>	<b>GA-ANN</b>
۳۳	۱۲۹/۲	۱۳۶/۷	۱۳۰/۵	۱۲۲/۳
۳۴	۱۳۷/۷	۱۴۲/۹	۱۴۱/۱	۱۳۳/۰
۳۵	۱۴۷/۲	۱۴۸/۸	۱۵۰/۷	۱۴۲/۶
۳۶	۱۵۵/۳	۱۵۴/۲	۱۵۹/۲	۱۵۱/۰
۳۷	۱۶۲/۴	۱۵۹/۶	۱۶۶/۷	۱۵۸/۶
۳۸	۱۶۸/۱	۱۶۴/۹	۱۷۳/۲	۱۶۵/۳
۳۹	۱۷۵/۵	۱۷۰/۲	۱۷۹/۰	۱۷۱/۴
<b>n-نونان</b>	<b>مقادیر تجربی (mW/m.K)</b>	<b>MLR-ANN</b>	<b>CDFS-ANN</b>	<b>GA-ANN</b>
۱	۱۴۳/۲	۱۴۵/۳	۱۴۲/۹	۱۴۲/۸
۲	۱۴۳/۳	۱۴۵/۳	۱۴۲/۹	۱۴۲/۸
۳	۱۴۳/۵	۱۴۵/۴	۱۴۳/۰	۱۴۲/۹
۴	۱۴۷/۱	۱۴۹/۱	۱۴۶/۸	۱۴۶/۷
۵	۱۵۴/۱	۱۵۶/۲	۱۵۴/۰	۱۵۳/۸
۶	۱۵۵/۳	۱۵۷/۹	۱۵۵/۶	۱۵۵/۵
۷	۱۶۰/۳	۱۶۳/۲	۱۶۱/۰	۱۶۰/۷
۸	۱۶۵/۱	۱۶۷/۸	۱۶۵/۶	۱۶۵/۲
۹	۱۷۰/۶	۱۷۳/۷	۱۷۱/۵	۱۷۱/۰
۱۰	۱۷۳/۳	۱۷۶/۲	۱۷۳/۸	۱۷۳/۴
۱۱	۱۷۷/۷	۱۸۱/۰	۱۷۸/۵	۱۷۸/۰
۱۲	۱۸۲/۳	۱۸۵/۱	۱۸۲/۴	۱۸۲/۱
۱۳	۱۸۷/۶	۱۹۰/۳	۱۸۷/۵	۱۸۷/۴
۱۴	۱۹۳/۴	۱۹۵/۳	۱۹۲/۴	۱۹۲/۸
۱۵	۱۹۹/۵	۲۰۰/۸	۱۹۸/۴	۱۹۹/۱
۱۶	۲۰۴/۱	۲۰۴/۳	۲۰۲/۹	۲۰۳/۶
۱۷	۲۰۸/۹	۲۰۸/۰	۲۰۸/۱	۲۰۸/۸
۱۸	۲۱۴/۰	۲۱۱/۵	۲۱۳/۸	۲۱۴/۳
۱۹	۲۱۸/۵	۲۱۴/۲	۲۱۸/۹	۲۱۹/۱
۲۰	۲۲۳/۱	۲۱۶/۸	۲۲۳/۶	۲۲۴/۱
۲۱	۲۲۷/۳	۲۱۸/۹	۲۲۷/۳	۲۲۸/۸
۲۲	۱۳۳/۸	۱۳۶/۱	۱۳۳/۸	۱۳۳/۳
۲۳	۱۴۳/۶	۱۴۵/۵	۱۴۳/۱	۱۴۳/۱
۲۴	۱۵۰/۲	۱۵۲/۷	۱۵۰/۴	۱۵۰/۵
۲۵	۱۵۱/۵	۱۵۴/۰	۱۵۱/۶	۱۵۱/۷
۲۶	۱۵۶/۶	۱۵۹/۷	۱۵۷/۳	۱۵۷/۴
۲۷	۱۶۰/۳	۱۶۳/۲	۱۶۰/۹	۱۶۰/۹
۲۸	۱۶۴/۵	۱۶۷/۳	۱۶۴/۹	۱۶۵/۰
۲۹	۱۷۲/۸	۱۷۵/۵	۱۷۳/۰	۱۷۳/۰
۳۰	۱۷۴/۵	۱۷۶/۹	۱۷۴/۳	۱۷۴/۳



n-نوناں	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۳۱	۱۸۱/۱	۱۸۳/۵	۱۸۰/۷	۱۸۱/۰
۳۲	۱۸۸/۰	۱۸۹/۹	۱۸۷/۱	۱۸۷/۶
۳۳	۱۹۵/۷	۱۹۶/۸	۱۹۴/۵	۱۹۵/۲
۳۴	۲۰۲/۲	۲۰۲/۲	۲۰۱/۰	۲۰۱/۷
۳۵	۲۰۶/۷	۲۰۵/۷	۲۰۵/۹	۲۰۶/۵
۳۶	۲۱۴/۷	۲۱۱/۱	۲۱۴/۸	۲۱۴/۸
۳۷	۲۲۰/۶	۲۱۴/۵	۲۲۱/۰	۲۲۰/۸
۳۸	۲۲۷/۲	۲۱۷/۹	۲۲۶/۶	۲۲۷/۹
۳۹	۱۳۷/۷	۱۴۰/۷	۱۳۷/۹	۱۳۷/۷
۴۰	۱۴۴/۸	۱۴۷/۵	۱۴۴/۷	۱۴۴/۸
۴۱	۱۵۱/۷	۱۵۴/۷	۱۵۱/۹	۱۵۲/۱
۴۲	۱۵۹/۲	۱۶۲/۲	۱۵۹/۴	۱۵۹/۷
۴۳	۱۶۷/۸	۱۷۰/۷	۱۶۸/۰	۱۶۸/۳
۴۴	۱۷۵/۵	۱۷۸/۱	۱۷۵/۳	۱۷۵/۶
۴۵	۱۸۱/۸	۱۸۴/۱	۱۸۱/۴	۱۸۱/۷
۴۶	۱۸۸/۰	۱۸۹/۹	۱۸۷/۵	۱۸۷/۸
۴۷	۱۹۵/۴	۱۹۶/۲	۱۹۴/۸	۱۹۴/۹
۴۸	۲۰۵/۸	۲۰۴/۶	۲۰۶/۵	۲۰۵/۶
۴۹	۲۱۱/۳	۲۰۸/۲	۲۱۲/۲	۲۱۰/۸
۵۰	۲۲۲/۹	۲۱۴/۷	۲۲۲/۸	۲۲۲/۰
۵۱	۲۲۶/۷	۲۱۶/۶	۲۲۵/۱	۲۲۵/۸
۵۲	۱۳۱/۲	۱۳۴/۵	۱۳۱/۳	۱۳۰/۵
۵۳	۱۳۹/۱	۱۴۲/۳	۱۳۹/۰	۱۳۸/۸
۵۴	۱۴۸/۶	۱۵۱/۳	۱۴۸/۰	۱۴۸/۱
۵۵	۱۵۴/۷	۱۵۸/۲	۱۵۵/۰	۱۵۵/۱
۵۶	۱۶۲/۵	۱۶۶/۵	۱۶۳/۵	۱۶۳/۶
۵۷	۱۶۹/۷	۱۷۳/۲	۱۷۰/۲	۱۷۰/۳
۵۸	۱۷۴/۳	۱۷۸/۴	۱۷۵/۶	۱۷۵/۶
۵۹	۱۷۵/۵	۱۷۸/۷	۱۷۵/۹	۱۷۵/۹
۶۰	۱۸۲/۴	۱۸۵/۹	۱۸۳/۴	۱۸۳/۳
۶۱	۱۹۳/۱	۱۹۵/۱	۱۹۴/۱	۱۹۳/۴
۶۲	۲۱۰/۴	۲۰۷/۷	۲۱۲/۴	۲۰۹/۷
۶۳	۲۱۳/۸	۲۰۹/۸	۲۱۵/۸	۲۱۲/۹
۶۴	۲۲۵/۴	۲۱۶/۱	۲۲۳/۹	۲۲۳/۹
n-دکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۴۳/۰	۱۴۵/۷	۱۳۳/۹	۱۴۲/۳
۲	۱۵۰/۳	۱۵۳/۷	۱۴۲/۷	۱۵۰/۳
۳	۱۵۸/۱	۱۶۰/۷	۱۵۰/۷	۱۵۷/۵

ادامہ جدول (۱-پ)

$n$ -دکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۴	۱۶۳/۵	۱۶۷/۰	۱۵۸/۱	۱۶۴/۰
۵	۱۶۹/۱	۱۷۲/۷	۱۶۵/۰	۱۶۹/۷
۶	۱۷۳/۹	۱۷۸/۰	۱۷۱/۷	۱۷۵/۰
۷	۱۷۹/۰	۱۸۲/۹	۱۷۸/۰	۱۷۹/۷
۸	۱۳۹/۸	۱۴۲/۴	۱۳۱/۸	۱۳۹/۵
۹	۱۴۷/۶	۱۵۰/۸	۱۴۰/۸	۱۴۷/۸
۱۰	۱۵۴/۹	۱۵۸/۰	۱۴۸/۸	۱۵۵/۳
۱۱	۱۶۱/۲	۱۶۴/۶	۱۵۶/۴	۱۶۲/۰
۱۲	۱۶۷/۲	۱۷۰/۵	۱۶۳/۴	۱۶۸/۱
۱۳	۱۷۲/۶	۱۷۶/۱	۱۷۰/۱	۱۷۳/۵
۱۴	۱۷۷/۹	۱۸۱/۱	۱۷۶/۵	۱۷۸/۴
۱۵	۱۸۲/۶	۱۸۶/۰	۱۸۲/۹	۱۸۲/۹
۱۶	۱۳۴/۱	۱۳۶/۷	۱۲۷/۹	۱۳۵/۰
۱۷	۱۴۳/۴	۱۴۵/۷	۱۳۷/۰	۱۴۳/۸
۱۸	۱۵۱/۲	۱۵۳/۴	۱۴۵/۳	۱۵۱/۷
۱۹	۱۵۸/۱	۱۶۰/۵	۱۵۳/۰	۱۵۸/۹
۲۰	۱۶۴/۲	۱۶۶/۸	۱۶۰/۲	۱۶۵/۳
۲۱	۱۷۰/۹	۱۷۲/۷	۱۶۷/۱	۱۷۱/۱
۲۲	۱۷۵/۲	۱۷۸/۱	۱۷۳/۶	۱۷۶/۳
۲۳	۱۸۰/۶	۱۸۳/۲	۱۸۰/۰	۱۸۱/۱
۲۴	۱۳۰/۷	۱۳۱/۰	۱۲۳/۴	۱۳۰/۵
۲۵	۱۳۸/۸	۱۴۰/۵	۱۳۲/۶	۱۳۹/۸
۲۶	۱۴۷/۶	۱۴۸/۷	۱۴۱/۱	۱۴۸/۱
۲۷	۱۵۴/۶	۱۵۶/۲	۱۴۹/۰	۱۵۵/۸
۲۸	۱۶۱/۵	۱۶۲/۹	۱۵۶/۳	۱۶۲/۶
۲۹	۱۶۷/۴	۱۶۹/۱	۱۶۳/۳	۱۶۸/۷
۳۰	۱۷۳/۳	۱۷۴/۷	۱۶۹/۹	۱۷۴/۳
۳۱	۱۷۸/۴	۱۸۰/۱	۱۷۶/۵	۱۷۹/۳
۳۲	۱۲۴/۲	۱۲۵/۲	۱۱۸/۵	۱۲۶/۱
۳۳	۱۳۳/۳	۱۳۵/۳	۱۲۷/۸	۱۳۵/۸
۳۴	۱۴۲/۸	۱۴۴/۰	۱۳۶/۴	۱۴۴/۶
۳۵	۱۵۱/۳	۱۵۱/۹	۱۴۴/۴	۱۵۲/۶
۳۶	۱۵۷/۸	۱۵۸/۹	۱۵۱/۸	۱۵۹/۸
۳۷	۱۶۳/۷	۱۶۵/۳	۱۵۸/۹	۱۶۶/۳
۳۸	۱۶۹/۸	۱۷۱/۳	۱۶۵/۷	۱۷۲/۱
۳۹	۱۷۶/۳	۱۷۶/۹	۱۷۲/۳	۱۷۷/۴
$n$ -آن دکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۳۱/۳	۱۳۸/۸	۱۲۲/۷	۱۳۲/۵

ن-آن دکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۲	۱۴۵/۴	۱۵۳/۹	۱۳۷/۷	۱۴۵/۹
۳	۱۵۰/۴	۱۵۹/۲	۱۴۳/۵	۱۵۰/۷
۴	۱۵۳/۲	۱۶۲/۶	۱۴۷/۲	۱۵۳/۹
۵	۱۵۹/۵	۱۶۸/۷	۱۵۴/۰	۱۵۹/۶
۶	۱۶۴/۸	۱۷۴/۵	۱۶۰/۳	۱۶۵/۱
۷	۱۶۸/۴	۱۷۸/۵	۱۶۴/۵	۱۶۸/۸
۸	۱۷۱/۴	۱۸۱/۳	۱۶۷/۴	۱۷۱/۴
۹	۱۷۵/۶	۱۸۵/۸	۱۷۱/۸	۱۷۵/۶
۱۰	۱۷۹/۰	۱۸۸/۸	۱۷۴/۷	۱۷۸/۴
۱۱	۱۸۳/۹	۱۹۴/۴	۱۷۹/۸	۱۸۳/۵
۱۲	۱۸۹/۶	۲۰۰/۲	۱۸۴/۸	۱۸۸/۶
۱۳	۱۹۵/۰	۲۰۶/۰	۱۸۹/۶	۱۹۳/۴
۱۴	۲۰۰/۲	۲۱۱/۴	۱۹۳/۷	۱۹۷/۶
۱۵	۲۰۵/۸	۲۱۸/۰	۱۹۸/۷	۲۰۲/۳
۱۶	۲۰۶/۱	۲۱۸/۱	۱۹۸/۷	۲۰۲/۴
۱۷	۲۱۲/۰	۲۲۴/۶	۲۰۳/۴	۲۰۶/۵
۱۸	۱۲۸/۲	۱۳۵/۶	۱۲۰/۱	۱۲۹/۲
۱۹	۱۴۳/۸	۱۵۲/۱	۱۳۶/۱	۱۴۳/۴
۲۰	۱۴۳/۴	۱۵۲/۱	۱۳۶/۱	۱۴۳/۴
۲۱	۱۴۳/۲	۱۵۲/۲	۱۳۶/۲	۱۴۳/۵
۲۲	۱۵۰/۰	۱۵۹/۲	۱۴۳/۶	۱۴۹/۸
۲۳	۱۵۰/۰	۱۵۹/۴	۱۴۳/۸	۱۵۰/۰
۲۴	۱۵۵/۳	۱۶۵/۴	۱۵۰/۲	۱۵۵/۶
۲۵	۱۶۰/۴	۱۷۰/۹	۱۵۵/۹	۱۶۰/۷
۲۶	۱۶۵/۳	۱۷۶/۰	۱۶۱/۱	۱۶۵/۵
۲۷	۱۷۲/۹	۱۸۳/۳	۱۶۸/۳	۱۷۲/۴
۲۸	۱۷۶/۹	۱۸۸/۰	۱۷۲/۷	۱۷۶/۸
۲۹	۱۸۰/۲	۱۹۱/۰	۱۷۵/۴	۱۷۹/۶
۳۰	۱۸۷/۲	۱۹۸/۷	۱۸۲/۰	۱۸۶/۵
۳۱	۱۹۱/۱	۲۰۲/۷	۱۸۵/۳	۱۸۹/۹
۳۲	۱۹۵/۳	۲۰۷/۳	۱۸۸/۹	۱۹۳/۷
۳۳	۲۰۰/۳	۲۱۲/۵	۱۹۲/۹	۱۹۷/۷
۳۴	۲۰۲/۱	۲۱۴/۴	۱۹۴/۳	۱۹۹/۰
۳۵	۲۰۳/۳	۲۱۵/۹	۱۹۵/۴	۲۰۰/۱
۳۶	۲۰۸/۲	۲۲۱/۱	۱۹۹/۱	۲۰۳/۶
۳۷	۲۱۳/۸	۲۲۷/۶	۲۰۳/۷	۲۰۷/۵
۳۸	۱۲۵/۵	۱۳۲/۴	۱۱۷/۵	۱۲۶/۰
۳۹	۱۲۲/۵	۱۲۹/۴	۱۱۵/۱	۱۲۳/۰
۴۰	۱۲۰/۰	۱۲۶/۰	۱۱۲/۳	۱۱۹/۶

ادامہ جدول (۱-پ)

آن-دکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۴۱	۱۱۶/۷	۱۲۳/۴	۱۱۰/۳	۱۱۷/۱
۴۲	۱۱۴/۲	۱۲۰/۶	۱۰۸/۲	۱۱۴/۵
۴۳	۱۱۱/۸	۱۱۷/۸	۱۰۶/۱	۱۱۱/۹
۴۴	۱۰۹/۴	۱۱۴/۹	۱۰۴/۰	۱۰۹/۳
۴۵	۱۰۶/۸	۱۱۲/۵	۱۰۲/۴	۱۰۷/۱
۴۶	۱۰۵/۲	۱۱۰/۲	۱۰۰/۹	۱۰۵/۱
۴۷	۱۰۲/۵	۱۰۷/۶	۹۹/۳	۱۰۲/۹
۴۸	۱۰۱/۵	۱۰۵/۳	۹۷/۹	۱۰۰/۹
۴۹	۹۹/۷	۱۰۲/۹	۹۶/۵	۹۹/۰
۵۰	۹۸/۲	۱۰۰/۶	۹۵/۱	۹۷/۱
۵۱	۹۶/۳	۹۸/۴	۹۳/۶	۹۵/۳
۵۲	۹۴/۷	۹۵/۹	۹۱/۸	۹۳/۳
۵۳	۹۲/۵	۹۳/۱	۸۹/۵	۹۱/۰
۵۴	۹۱/۲	۹۱/۲	۸۷/۶	۸۹/۵
۵۵	۸۹/۸	۸۸/۹	۸۵/۰	۸۷/۶
۵۶	۸۹/۳	۸۷/۱	۸۲/۷	۸۶/۲
۵۷	۸۸/۲	۸۴/۶	۷۹/۰	۸۴/۲
۵۸	۸۷/۷	۸۲/۵	۷۵/۷	۸۲/۶
۵۹	۸۷/۰	۸۰/۱	۷۱/۵	۸۰/۷
۶۰	۸۶/۲	۷۷/۵	۶۶/۴	۷۸/۶
۶۱	۸۵/۵	۷۵/۸	۶۳/۱	۷۷/۲
۶۲	۸۵/۲	۷۴/۰	۵۹/۲	۷۵/۷
۶۳	۸۴/۸	۷۱/۸	۵۴/۷	۷۳/۹
۶۴	۸۴/۲	۶۹/۷	۵۰/۴	۷۲/۲
۶۵	۸۳/۸	۶۷/۸	۴۶/۵	۷۰/۶
۶۶	۸۲/۷	۶۳/۵	۳۸/۴	۶۷/۰
۶۷	۸۲/۰	۶۱/۱	۳۴/۲	۶۴/۹
آن-دکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۴۳/۳	۱۳۹/۰	۱۴۶/۸	۱۳۷/۷
۲	۱۵۰/۲	۱۴۶/۵	۱۵۴/۵	۱۴۴/۴
۳	۱۵۶/۶	۱۵۳/۴	۱۶۱/۱	۱۵۰/۵
۴	۱۶۳/۳	۱۵۹/۷	۱۶۷/۰	۱۵۶/۱
۵	۱۶۸/۶	۱۶۵/۵	۱۷۲/۲	۱۶۱/۱
۶	۱۷۴/۲	۱۷۱/۰	۱۷۷/۱	۱۶۵/۸
۷	۱۷۷/۰	۱۷۴/۰	۱۷۹/۸	۱۶۸/۳
۸	۱۴۰/۳	۱۳۶/۴	۱۴۴/۱	۱۳۴/۵
۹	۱۴۷/۴	۱۴۴/۳	۱۵۲/۲	۱۴۱/۴
۱۰	۱۵۴/۳	۱۵۱/۵	۱۵۹/۱	۱۴۷/۶

$n$ -دودکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱۱	۱۶۱/۴	۱۵۸/۱	۱۶۵/۳	۱۵۳/۳
۱۲	۱۶۶/۶	۱۶۴/۲	۱۷۰/۸	۱۵۸/۵
۱۳	۱۷۲/۴	۱۶۹/۹	۱۷۵/۹	۱۶۳/۳
۱۴	۱۷۸/۱	۱۷۵/۲	۱۸۰/۷	۱۶۷/۷
۱۵	۱۸۳/۰	۱۸۰/۳	۱۸۵/۳	۱۷۱/۸
۱۶	۱۳۷/۴	۱۳۴/۷	۱۴۲/۳	۱۳۲/۴
۱۷	۱۴۵/۶	۱۴۲/۸	۱۵۰/۶	۱۳۹/۴
۱۸	۱۵۲/۵	۱۵۰/۲	۱۵۷/۸	۱۴۵/۷
۱۹	۱۵۹/۲	۱۵۷/۰	۱۶۴/۱	۱۵۱/۶
۲۰	۱۶۵/۱	۱۶۳/۳	۱۶۹/۸	۱۵۶/۹
۲۱	۱۷۰/۷	۱۶۹/۲	۱۷۵/۱	۱۶۱/۸
۲۲	۱۷۶/۷	۱۷۴/۷	۱۸۰/۱	۱۶۶/۳
۲۳	۱۸۱/۵	۱۷۹/۹	۱۸۴/۹	۱۷۰/۴
۲۴	۱۳۲/۹	۱۳۰/۲	۱۳۸/۰	۱۲۷/۵
۲۵	۱۴۱/۳	۱۳۸/۸	۱۴۶/۹	۱۳۴/۷
۲۶	۱۴۸/۷	۱۴۶/۷	۱۵۴/۵	۱۴۱/۳
۲۷	۱۵۵/۸	۱۵۴/۱	۱۶۱/۴	۱۴۷/۴
۲۸	۱۶۲/۵	۱۶۰/۹	۱۶۷/۵	۱۵۳/۰
۲۹	۱۶۸/۱	۱۶۷/۲	۱۷۳/۲	۱۵۸/۲
۳۰	۱۷۴/۳	۱۷۳/۱	۱۷۸/۶	۱۶۲/۹
۳۱	۱۷۹/۰	۱۷۸/۸	۱۸۳/۷	۱۶۷/۳
۳۲	۱۲۷/۳	۱۲۵/۵	۱۳۳/۸	۱۲۲/۹
۳۳	۱۳۷/۱	۱۳۴/۸	۱۴۳/۲	۱۳۰/۴
۳۴	۱۴۴/۷	۱۴۳/۲	۱۵۱/۳	۱۳۷/۳
۳۵	۱۵۲/۳	۱۵۱/۱	۱۵۸/۶	۱۴۳/۶
۳۶	۱۵۸/۷	۱۵۸/۳	۱۶۵/۲	۱۴۹/۴
۳۷	۱۶۴/۷	۱۶۵/۲	۱۷۱/۳	۱۵۴/۹
۳۸	۱۷۰/۰	۱۷۱/۵	۱۷۶/۹	۱۵۹/۸
۳۹	۱۷۶/۱	۱۷۷/۶	۱۸۲/۴	۱۶۴/۴
$n$ -تری دکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۴۰/۴	۱۲۷/۵	۱۴۱/۹	۱۲۶/۸
۲	۱۴۴/۴	۱۳۱/۷	۱۴۵/۸	۱۳۰/۶
۳	۱۴۸/۰	۱۳۵/۹	۱۴۹/۶	۱۳۴/۳
۴	۱۵۰/۷	۱۳۹/۵	۱۵۳/۱	۱۳۷/۶
۵	۱۵۲/۹	۱۴۲/۷	۱۵۶/۱	۱۴۰/۶
۶	۱۵۵/۱	۱۴۶/۲	۱۵۹/۴	۱۴۳/۸
۷	۱۵۹/۵	۱۴۹/۱	۱۶۲/۲	۱۴۶/۴
۸	۱۶۰/۶	۱۵۱/۳	۱۶۴/۴	۱۴۸/۵

n-تری دکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۹	۱۶۳/۸	۱۵۴/۹	۱۶۸/۱	۱۵۱/۹
۱۰	۱۶۵/۹	۱۵۷/۶	۱۷۰/۸	۱۵۴/۵
۱۱	۱۶۸/۳	۱۶۰/۰	۱۷۳/۳	۱۵۶/۷
۱۲	۱۷۲/۲	۱۶۳/۷	۱۷۷/۳	۱۶۰/۳
۱۳	۱۷۳/۶	۱۶۵/۹	۱۷۹/۶	۱۶۲/۴
۱۴	۱۷۶/۴	۱۶۸/۴	۱۸۲/۴	۱۶۴/۹
۱۵	۱۷۸/۹	۱۷۱/۶	۱۸۶/۲	۱۶۸/۱
۱۶	۱۴۰/۲	۱۲۷/۷	۱۴۲/۷	۱۲۷/۴
۱۷	۱۴۳/۱	۱۳۰/۹	۱۴۵/۷	۱۳۰/۳
۱۸	۱۴۶/۶	۱۳۵/۴	۱۵۰/۰	۱۳۴/۴
۱۹	۱۴۹/۵	۱۳۹/۰	۱۵۳/۴	۱۳۷/۷
۲۰	۱۵۲/۲	۱۴۲/۱	۱۵۶/۴	۱۴۰/۵
۲۱	۱۵۴/۴	۱۴۴/۸	۱۵۹/۰	۱۴۳/۰
۲۲	۱۵۶/۸	۱۴۸/۰	۱۶۲/۲	۱۴۶/۰
۲۳	۱۶۰/۸	۱۵۲/۹	۱۶۷/۲	۱۵۰/۶
۲۴	۱۶۲/۲	۱۵۴/۳	۱۶۸/۶	۱۵۱/۹
۲۵	۱۶۴/۵	۱۵۶/۷	۱۷۱/۱	۱۵۴/۲
۲۶	۱۷۰/۱	۱۶۲/۸	۱۷۷/۷	۱۶۰/۱
۲۷	۱۷۱/۹	۱۶۴/۷	۱۷۹/۹	۱۶۲/۰
۲۸	۱۷۴/۹	۱۶۸/۰	۱۸۳/۶	۱۶۵/۲
۲۹	۱۸۰/۴	۱۷۳/۰	۱۸۹/۹	۱۷۰/۳
۳۰	۱۸۳/۸	۱۷۵/۶	۱۹۳/۳	۱۷۳/۰
۳۱	۱۸۴/۹	۱۷۷/۸	۱۹۶/۱	۱۷۵/۲
۳۲	۱۸۷/۶	۱۷۹/۷	۱۹۸/۹	۱۷۷/۳
۳۳	۱۹۰/۰	۱۸۲/۳	۲۰۲/۶	۱۸۰/۰
۳۴	۱۴۰/۷	۱۲۸/۲	۱۴۴/۸	۱۲۸/۷
۳۵	۱۴۴/۷	۱۳۲/۹	۱۴۹/۳	۱۳۳/۰
۳۶	۱۴۸/۱	۱۳۶/۶	۱۵۳/۰	۱۳۶/۵
۳۷	۱۵۲/۳	۱۴۱/۰	۱۵۷/۴	۱۴۰/۶
۳۸	۱۵۸/۶	۱۴۹/۰	۱۶۵/۶	۱۴۸/۱
۳۹	۱۵۹/۳	۱۴۹/۴	۱۶۶/۱	۱۴۸/۶
۴۰	۱۶۲/۶	۱۵۳/۰	۱۶۹/۹	۱۵۲/۰
۴۱	۱۶۳/۷	۱۵۴/۶	۱۷۱/۶	۱۵۳/۵
۴۲	۱۶۶/۶	۱۵۷/۳	۱۷۴/۶	۱۵۶/۱
۴۳	۱۶۹/۳	۱۶۰/۵	۱۷۸/۳	۱۵۹/۲
۴۴	۱۷۲/۷	۱۶۳/۴	۱۸۱/۷	۱۶۲/۱
۴۵	۱۷۷/۰	۱۶۷/۵	۱۸۶/۷	۱۶۶/۱
۴۶	۱۷۸/۶	۱۷۰/۱	۱۹۰/۱	۱۶۸/۸
۴۷	۱۸۳/۲	۱۷۴/۵	۱۹۶/۱	۱۷۳/۴

$n$ -تری دکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۴۸	۱۸۶/۴	۱۷۷/۴	۲۰۰/۳	۱۷۶/۴
۴۹	۱۸۸/۶	۱۷۹/۹	۲۰۴/۰	۱۷۹/۱
۵۰	۱۹۱/۷	۱۸۲/۷	۲۰۸/۳	۱۸۲/۱
۵۱	۱۹۵/۶	۱۸۶/۵	۲۱۴/۵	۱۸۶/۳
۵۲	۱۹۹/۲	۱۸۹/۸	۲۲۰/۱	۱۹۰/۱
۵۳	۲۰۲/۹	۱۹۲/۸	۲۲۵/۲	۱۹۳/۶
۵۴	۲۰۶/۲	۱۹۶/۴	۲۳۱/۴	۱۹۷/۸
۵۵	۲۰۹/۹	۱۹۹/۹	۲۳۷/۲	۲۰۱/۷
۵۶	۲۱۳/۱	۲۰۲/۹	۲۴۲/۲	۲۰۵/۱
۵۷	۲۱۷/۵	۲۰۷/۳	۲۴۹/۰	۲۰۹/۹
$n$ -تترا دکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۴۱/۰	۱۳۶/۲	۱۳۵/۶	۱۴۳/۴
۲	۱۴۴/۲	۱۳۹/۲	۱۳۹/۳	۱۴۶/۱
۳	۱۴۶/۹	۱۴۲/۲	۱۴۲/۸	۱۴۸/۵
۴	۱۴۹/۵	۱۴۵/۰	۱۴۶/۲	۱۵۰/۷
۵	۱۵۲/۱	۱۴۷/۸	۱۴۹/۵	۱۵۲/۸
۶	۱۳۸/۵	۱۳۴/۳	۱۳۳/۸	۱۴۰/۱
۷	۱۴۱/۸	۱۳۷/۴	۱۳۷/۴	۱۴۲/۹
۸	۱۴۴/۷	۱۴۰/۴	۱۴۱/۰	۱۴۵/۴
۹	۱۴۷/۵	۱۴۳/۳	۱۴۴/۴	۱۴۷/۷
۱۰	۱۵۰/۴	۱۴۶/۱	۱۴۷/۷	۱۴۹/۹
۱۱	۱۳۶/۲	۱۳۲/۳	۱۳۱/۸	۱۳۶/۹
۱۲	۱۳۹/۵	۱۳۵/۵	۱۳۵/۵	۱۳۹/۸
۱۳	۱۴۲/۸	۱۳۸/۶	۱۳۹/۱	۱۴۲/۵
۱۴	۱۴۵/۷	۱۴۱/۶	۱۴۲/۵	۱۴۴/۹
۱۵	۱۴۸/۷	۱۴۴/۵	۱۴۵/۸	۱۴۷/۲
۱۶	۱۳۳/۹	۱۳۰/۵	۱۲۹/۸	۱۳۳/۸
۱۷	۱۳۷/۴	۱۳۳/۷	۱۳۳/۶	۱۳۶/۹
۱۸	۱۴۰/۹	۱۳۶/۹	۱۳۷/۲	۱۳۹/۶
۱۹	۱۴۳/۹	۱۳۹/۹	۱۴۰/۷	۱۴۲/۱
۲۰	۱۴۷/۰	۱۴۲/۹	۱۴۴/۰	۱۴۴/۵
۲۱	۱۳۱/۸	۱۲۸/۷	۱۲۷/۸	۱۳۰/۷
۲۲	۱۳۵/۴	۱۳۲/۰	۱۳۱/۶	۱۳۴/۰
۲۳	۱۳۹/۰	۱۳۵/۲	۱۳۵/۲	۱۳۶/۸
۲۴	۱۴۲/۱	۱۳۸/۳	۱۳۸/۷	۱۳۹/۵
۲۵	۱۴۵/۳	۱۴۱/۳	۱۴۲/۱	۱۴۱/۹
۲۶	۱۲۹/۶	۱۲۶/۹	۱۲۵/۸	۱۲۷/۸
۲۷	۱۳۳/۴	۱۳۰/۳	۱۲۹/۶	۱۳۱/۲

n-تترادگان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۲۸	۱۳۷/۱	۱۳۳/۶	۱۳۳/۲	۱۳۴/۲
۲۹	۱۴۰/۳	۱۳۶/۷	۱۳۶/۸	۱۳۶/۹
۳۰	۱۴۳/۶	۱۳۹/۸	۱۴۰/۲	۱۳۹/۵
۳۱	۱۲۷/۵	۱۲۵/۲	۱۲۳/۶	۱۲۴/۹
۳۲	۱۳۱/۳	۱۲۸/۷	۱۲۷/۵	۱۲۸/۵
۳۳	۱۳۵/۲	۱۳۲/۰	۱۳۱/۲	۱۳۱/۶
۳۴	۱۳۸/۵	۱۳۵/۲	۱۳۴/۷	۱۳۴/۵
۳۵	۱۴۲/۰	۱۳۸/۴	۱۳۸/۲	۱۳۷/۱
۳۶	۱۲۵/۴	۱۲۳/۵	۱۲۱/۵	۱۲۲/۱
۳۷	۱۲۹/۳	۱۲۷/۱	۱۲۵/۳	۱۲۵/۸
۳۸	۱۳۳/۳	۱۳۰/۵	۱۲۹/۱	۱۲۹/۱
۳۹	۱۳۶/۸	۱۳۳/۸	۱۳۲/۷	۱۳۲/۱
۴۰	۱۴۰/۳	۱۳۷/۰	۱۳۶/۲	۱۳۴/۹
۴۱	۱۲۳/۴	۱۲۱/۹	۱۱۹/۳	۱۱۹/۴
۴۲	۱۲۷/۴	۱۲۵/۶	۱۲۳/۲	۱۲۳/۳
۴۳	۱۳۱/۵	۱۲۹/۱	۱۲۶/۹	۱۲۶/۷
۴۴	۱۳۵/۰	۱۳۲/۵	۱۳۰/۶	۱۲۹/۸
۴۵	۱۳۸/۶	۱۳۵/۷	۱۳۴/۱	۱۳۲/۷
۴۶	۱۲۱/۳	۱۲۰/۴	۱۱۷/۱	۱۱۶/۷
۴۷	۱۲۵/۴	۱۲۴/۲	۱۲۱/۰	۱۲۰/۸
۴۸	۱۲۹/۶	۱۲۷/۸	۱۲۴/۷	۱۲۴/۴
۴۹	۱۳۳/۲	۱۳۱/۲	۱۲۸/۴	۱۲۷/۶
۵۰	۱۳۶/۹	۱۳۴/۵	۱۳۲/۰	۱۳۰/۶
۵۱	۱۱۹/۳	۱۱۹/۰	۱۱۴/۹	۱۱۴/۱
۵۲	۱۲۳/۵	۱۲۲/۸	۱۱۸/۷	۱۱۸/۴
۵۳	۱۲۷/۸	۱۲۶/۵	۱۲۲/۵	۱۲۲/۱
۵۴	۱۳۱/۶	۱۳۰/۰	۱۲۶/۲	۱۲۵/۵
۵۵	۱۳۵/۲	۱۳۳/۴	۱۲۹/۸	۱۲۸/۶
۵۶	۱۱۷/۳	۱۱۷/۶	۱۱۲/۷	۱۱۱/۶
۵۷	۱۲۱/۶	۱۲۱/۶	۱۱۶/۵	۱۱۶/۱
۵۸	۱۲۶/۱	۱۲۵/۳	۱۲۰/۳	۱۱۹/۹
۵۹	۱۲۹/۹	۱۲۸/۹	۱۲۴/۰	۱۲۳/۴
۶۰	۱۳۳/۵	۱۳۲/۴	۱۲۷/۶	۱۲۶/۶
۶۱	۱۱۵/۳	۱۱۶/۴	۱۱۰/۵	۱۰۹/۱
۶۲	۱۱۹/۸	۱۲۰/۴	۱۱۴/۳	۱۱۳/۸
۶۳	۱۲۴/۳	۱۲۴/۳	۱۱۸/۱	۱۱۷/۸
۶۴	۱۲۸/۳	۱۲۷/۹	۱۲۱/۸	۱۲۱/۴
۶۵	۱۳۲/۰	۱۳۱/۵	۱۲۵/۴	۱۲۴/۷
۶۶	۱۱۳/۴	۱۱۵/۲	۱۰۸/۴	۱۰۶/۸
۶۷	۱۱۸/۱	۱۱۹/۳	۱۱۲/۱	۱۱۱/۶



ادامه جدول (۱-پ)

$n$ -تترادکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۶۸	۱۲۲/۶	۱۲۳/۳	۱۱۵/۹	۱۱۵/۸
۶۹	۱۲۶/۷	۱۲۷/۰	۱۱۹/۵	۱۱۹/۵
۷۰	۱۳۰/۴	۱۳۰/۷	۱۲۳/۲	۱۲۲/۹
۷۱	۱۱۱/۵	۱۱۴/۱	۱۰۶/۳	۱۰۴/۵
۷۲	۱۱۶/۴	۱۱۸/۳	۱۱۰/۰	۱۰۹/۵
۷۳	۱۲۱/۰	۱۲۲/۴	۱۱۳/۷	۱۱۳/۸
۷۴	۱۲۵/۲	۱۲۶/۲	۱۱۷/۳	۱۱۷/۷
۷۵	۱۲۹/۰	۱۲۹/۹	۱۲۰/۹	۱۲۱/۲
۷۶	۱۰۹/۷	۱۱۳/۱	۱۰۴/۲	۱۰۲/۳
۷۷	۱۱۴/۷	۱۱۷/۴	۱۰۷/۹	۱۰۷/۵
۷۸	۱۱۹/۴	۱۲۱/۶	۱۱۱/۵	۱۱۲/۰
۷۹	۱۲۳/۶	۱۲۵/۵	۱۱۵/۱	۱۱۵/۹
۸۰	۱۲۷/۶	۱۲۹/۳	۱۱۸/۷	۱۱۹/۵
۸۱	۱۰۸/۰	۱۱۲/۱	۱۰۲/۳	۱۰۰/۲
۸۲	۱۱۳/۱	۱۱۶/۶	۱۰۵/۹	۱۰۵/۶
۸۳	۱۱۷/۸	۱۲۰/۹	۱۰۹/۴	۱۱۰/۲
۸۴	۱۲۲/۱	۱۲۴/۹	۱۱۳/۰	۱۱۴/۲
۸۵	۱۲۶/۱	۱۲۸/۸	۱۱۶/۶	۱۱۷/۹
۸۶	۱۰۶/۳	۱۱۱/۳	۱۰۰/۴	۹۸/۲
۸۷	۱۱۱/۵	۱۱۵/۹	۱۰۳/۹	۱۰۳/۷
۸۸	۱۱۶/۲	۱۲۰/۲	۱۰۷/۴	۱۰۸/۵
۸۹	۱۲۰/۷	۱۲۴/۴	۱۱۰/۹	۱۱۲/۶
۹۰	۱۲۴/۷	۱۲۸/۴	۱۱۴/۵	۱۱۶/۴
۹۱	۱۰۴/۷	۱۱۰/۵	۹۸/۷	۹۶/۳
۹۲	۱۰۹/۹	۱۱۵/۲	۱۰۲/۱	۱۰۲/۰
۹۳	۱۱۴/۷	۱۱۹/۷	۱۰۵/۵	۱۰۶/۹
۹۴	۱۱۹/۳	۱۲۴/۰	۱۰۹/۰	۱۱۱/۱
۹۵	۱۲۳/۳	۱۲۸/۰	۱۱۲/۴	۱۱۵/۰
$n$ -پننادکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۴۲/۵	۱۴۷/۴	۱۴۸/۰	۱۴۳/۵
۲	۱۴۵/۵	۱۵۰/۰	۱۵۱/۶	۱۴۶/۸
۳	۱۴۸/۵	۱۵۲/۷	۱۵۵/۳	۱۴۹/۹
۴	۱۵۱/۵	۱۵۵/۶	۱۵۹/۰	۱۵۲/۹
۵	۱۵۵/۲	۱۵۸/۶	۱۶۲/۸	۱۵۵/۸
۶	۱۴۰/۵	۱۴۴/۳	۱۴۴/۸	۱۴۰/۶
۷	۱۴۳/۴	۱۴۷/۰	۱۴۸/۶	۱۴۴/۱
۸	۱۴۶/۲	۱۴۹/۹	۱۵۲/۴	۱۴۷/۳
۹	۱۴۹/۰	۱۵۲/۹	۱۵۶/۲	۱۵۰/۴

پننادکان-n	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱۰	۱۵۱/۷	۱۵۶/۰	۱۶۰/۰	۱۵۳/۴
۱۱	۱۳۶/۹	۱۴۱/۵	۱۴۱/۸	۱۳۸/۱
۱۲	۱۴۰/۰	۱۴۴/۳	۱۴۵/۷	۱۴۱/۶
۱۳	۱۴۲/۷	۱۴۷/۲	۱۴۹/۶	۱۴۵/۰
۱۴	۱۴۶/۰	۱۵۰/۳	۱۵۳/۵	۱۴۸/۲
۱۵	۱۴۹/۶	۱۵۳/۶	۱۵۷/۵	۱۵۱/۳
۱۶	۱۳۴/۰	۱۳۸/۸	۱۳۸/۹	۱۳۵/۷
۱۷	۱۳۷/۵	۱۴۱/۶	۱۴۲/۹	۱۳۹/۳
۱۸	۱۴۰/۸	۱۴۴/۷	۱۴۷/۰	۱۴۲/۸
۱۹	۱۴۴/۰	۱۴۷/۹	۱۵۱/۰	۱۴۶/۱
۲۰	۱۴۷/۰	۱۵۱/۳	۱۵۵/۰	۱۴۹/۳
۲۱	۱۳۲/۰	۱۳۵/۸	۱۳۵/۸	۱۳۳/۱
۲۲	۱۳۵/۵	۱۳۸/۸	۱۳۹/۹	۱۳۶/۹
۲۳	۱۳۸/۲	۱۴۲/۰	۱۴۴/۱	۱۴۰/۵
۲۴	۱۴۱/۸	۱۴۵/۳	۱۴۸/۲	۱۴۳/۹
۲۵	۱۴۴/۵	۱۴۸/۹	۱۵۲/۲	۱۴۷/۲
۲۶	۱۲۹/۵	۱۳۳/۶	۱۳۳/۵	۱۳۱/۳
۲۷	۱۳۲/۰	۱۳۶/۸	۱۳۷/۷	۱۳۵/۱
۲۸	۱۳۶/۲	۱۴۰/۰	۱۴۱/۹	۱۳۸/۸
۲۹	۱۳۹/۴	۱۴۳/۵	۱۴۶/۱	۱۴۲/۳
۳۰	۱۴۲/۷	۱۴۷/۱	۱۵۰/۳	۱۴۵/۷
۳۱	۱۲۷/۴	۱۳۱/۴	۱۳۱/۰	۱۲۹/۴
۳۲	۱۳۱/۱	۱۳۴/۶	۱۳۵/۴	۱۳۳/۴
۳۳	۱۳۵/۳	۱۳۸/۰	۱۳۹/۷	۱۳۷/۱
۳۴	۱۳۸/۵	۱۴۱/۶	۱۴۳/۹	۱۴۰/۸
۳۵	۱۴۱/۸	۱۴۵/۳	۱۴۸/۱	۱۴۴/۲
۳۶	۱۲۵/۲	۱۲۹/۱	۱۲۸/۶	۱۲۷/۶
۳۷	۱۲۸/۷	۱۳۲/۵	۱۳۳/۰	۱۳۱/۷
۳۸	۱۳۳/۲	۱۳۶/۰	۱۳۷/۴	۱۳۵/۵
۳۹	۱۳۶/۵	۱۳۹/۷	۱۴۱/۷	۱۳۹/۲
۴۰	۱۳۹/۸	۱۴۳/۵	۱۴۶/۰	۱۴۲/۸
۴۱	۱۲۳/۴	۱۲۶/۹	۱۲۶/۱	۱۲۵/۹
۴۲	۱۲۶/۲	۱۳۰/۴	۱۳۰/۷	۱۳۰/۰
۴۳	۱۳۱/۰	۱۳۴/۰	۱۳۵/۱	۱۳۴/۰
۴۴	۱۳۴/۵	۱۳۷/۸	۱۳۹/۶	۱۳۷/۸
۴۵	۱۳۸/۲	۱۴۱/۸	۱۴۳/۹	۱۴۱/۴
۴۶	۱۲۰/۵	۱۲۵/۱	۱۲۴/۱	۱۲۴/۵
۴۷	۱۲۴/۴	۱۲۸/۶	۱۲۸/۷	۱۲۸/۷
۴۸	۱۲۹/۱	۱۳۲/۴	۱۳۳/۳	۱۳۲/۷

پننادان-n	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۴۹	۱۳۳/۲	۱۳۶/۳	۱۳۷/۸	۱۳۶/۶
۵۰	۱۳۵/۵	۱۴۰/۴	۱۴۲/۲	۱۴۰/۳
۵۱	۱۱۹/۵	۱۲۳/۴	۱۲۲/۲	۱۲۳/۲
۵۲	۱۲۳/۴	۱۲۷/۱	۱۲۶/۹	۱۲۷/۵
۵۳	۱۲۷/۵	۱۳۰/۹	۱۳۱/۶	۱۳۱/۶
۵۴	۱۳۱/۲	۱۳۴/۹	۱۳۶/۱	۱۳۵/۶
۵۵	۱۳۴/۵	۱۳۹/۱	۱۴۰/۶	۱۳۹/۳
۵۶	۱۱۶/۷	۱۲۱/۶	۱۲۰/۲	۱۲۱/۹
۵۷	۱۲۰/۸	۱۲۵/۴	۱۲۵/۰	۱۲۶/۳
۵۸	۱۲۵/۴	۱۲۹/۳	۱۲۹/۷	۱۳۰/۵
۵۹	۱۲۹/۵	۱۳۳/۵	۱۳۴/۳	۱۳۴/۵
۶۰	۱۳۳/۲	۱۳۷/۸	۱۳۸/۹	۱۳۸/۳
۶۱	۱۱۵/۰	۱۲۰/۰	۱۱۸/۳	۱۲۰/۸
۶۲	۱۱۹/۵	۱۲۳/۹	۱۲۳/۲	۱۲۵/۲
۶۳	۱۲۴/۰	۱۲۸/۰	۱۲۸/۰	۱۲۹/۵
۶۴	۱۲۸/۰	۱۳۲/۳	۱۳۲/۸	۱۳۳/۶
۶۵	۱۳۲/۱	۱۳۶/۷	۱۳۷/۴	۱۳۷/۵
۶۶	۱۱۳/۲	۱۱۸/۵	۱۱۶/۶	۱۱۹/۷
۶۷	۱۱۸/۱	۱۲۲/۵	۱۲۱/۶	۱۲۴/۲
۶۸	۱۲۲/۷	۱۲۶/۷	۱۲۶/۵	۱۲۸/۶
۶۹	۱۲۷/۰	۱۳۱/۱	۱۳۱/۳	۱۳۲/۷
۷۰	۱۳۱/۰	۱۳۵/۶	۱۳۶/۰	۱۳۶/۷
۷۱	۱۱۱/۵	۱۱۷/۱	۱۱۴/۹	۱۱۸/۷
۷۲	۱۱۷/۰	۱۲۱/۲	۱۲۰/۰	۱۲۳/۳
۷۳	۱۲۱/۵	۱۲۵/۵	۱۲۴/۹	۱۲۷/۸
۷۴	۱۲۶/۱	۱۳۰/۰	۱۲۹/۸	۱۳۲/۰
۷۵	۱۳۰/۲	۱۳۴/۶	۱۳۴/۶	۱۳۶/۰
۷۶	۱۱۰/۵	۱۱۵/۸	۱۱۳/۳	۱۱۷/۸
۷۷	۱۱۵/۵	۱۲۰/۰	۱۱۸/۴	۱۲۲/۵
۷۸	۱۲۰/۵	۱۲۴/۴	۱۲۳/۵	۱۲۷/۰
۷۹	۱۲۴/۵	۱۲۹/۰	۱۲۸/۵	۱۳۱/۳
۸۰	۱۲۹/۵	۱۳۳/۷	۱۳۳/۳	۱۳۵/۴
۸۱	۱۰۹/۴	۱۱۴/۴	۱۱۱/۶	۱۱۶/۸
۸۲	۱۱۴/۲	۱۱۸/۸	۱۱۶/۹	۱۲۱/۶
۸۳	۱۱۹/۸	۱۲۳/۳	۱۲۲/۰	۱۲۶/۲
۸۴	۱۲۴/۴	۱۲۸/۰	۱۲۷/۱	۱۳۰/۶
۸۵	۱۲۸/۱	۱۳۲/۸	۱۳۲/۰	۱۳۴/۷
۸۶	۱۰۷/۵	۱۱۳/۰	۱۰۹/۸	۱۱۵/۸
۸۷	۱۱۳/۰	۱۱۷/۵	۱۱۵/۲	۱۲۰/۷

n-پنٹاڈکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۸۸	۱۱۸/۴	۱۲۲/۱	۱۲۰/۵	۱۲۵/۴
۸۹	۱۲۳/۱	۱۲۷/۰	۱۲۵/۶	۱۲۹/۸
۹۰	۱۲۷/۸	۱۳۱/۹	۱۳۰/۷	۱۳۴/۱
۹۱	۱۰۷/۲	۱۱۲/۱	۱۰۸/۷	۱۱۵/۱
۹۲	۱۱۳/۲	۱۱۶/۷	۱۱۴/۱	۱۲۰/۱
۹۳	۱۱۸/۰	۱۲۱/۴	۱۱۹/۵	۱۲۴/۹
۹۴	۱۲۳/۰	۱۲۶/۳	۱۲۴/۷	۱۲۹/۴
۹۵	۱۲۷/۵	۱۳۱/۴	۱۲۹/۸	۱۳۳/۸
۹۶	۱۰۵/۵	۱۱۱/۱	۱۰۷/۳	۱۱۴/۴
۹۷	۱۱۱/۵	۱۱۵/۷	۱۱۲/۹	۱۱۹/۴
۹۸	۱۱۶/۷	۱۲۰/۶	۱۱۸/۴	۱۲۴/۳
۹۹	۱۲۲/۵	۱۲۵/۶	۱۲۳/۷	۱۲۸/۹
۱۰۰	۱۲۷/۲	۱۳۰/۸	۱۲۸/۸	۱۳۳/۳
۱۰۱	۱۰۵/۴	۱۱۰/۳	۱۰۶/۴	۱۱۳/۹
۱۰۲	۱۱۰/۵	۱۱۵/۱	۱۱۲/۱	۱۱۹/۰
۱۰۳	۱۱۶/۰	۱۲۰/۰	۱۱۷/۶	۱۲۳/۹
۱۰۴	۱۲۱/۸	۱۲۵/۱	۱۲۳/۰	۱۲۸/۵
۱۰۵	۱۲۶/۵	۱۳۰/۴	۱۲۸/۲	۱۳۳/۱
۱۰۶	۱۰۴/۵	۱۰۹/۳	۱۰۵/۲	۱۱۳/۱
۱۰۷	۱۰۹/۸	۱۱۴/۲	۱۱۱/۰	۱۱۸/۳
۱۰۸	۱۱۵/۵	۱۱۹/۲	۱۱۶/۶	۱۲۳/۳
۱۰۹	۱۲۱/۰	۱۲۴/۵	۱۲۲/۰	۱۲۸/۱
۱۱۰	۱۲۵/۹	۱۲۹/۸	۱۲۷/۴	۱۳۲/۶
۱۱۱	۱۰۳/۲	۱۰۸/۶	۱۰۴/۴	۱۱۲/۶
۱۱۲	۱۰۹/۲	۱۱۳/۶	۱۱۰/۲	۱۱۷/۸
۱۱۳	۱۱۵/۰	۱۱۸/۷	۱۱۵/۹	۱۲۲/۹
۱۱۴	۱۲۰/۵	۱۲۴/۰	۱۲۱/۴	۱۲۷/۸
۱۱۵	۱۰۲/۴	۱۰۷/۸	۱۰۳/۵	۱۱۲/۰
۱۱۶	۱۰۸/۷	۱۱۲/۹	۱۰۹/۴	۱۱۷/۳
۱۱۷	۱۱۴/۸	۱۱۸/۱	۱۱۵/۱	۱۲۲/۵
۱۱۸	۱۲۰/۰	۱۲۳/۵	۱۲۰/۷	۱۲۷/۴
۱۱۹	۱۰۱/۸	۱۰۷/۱	۱۰۲/۷	۱۱۱/۳
۱۲۰	۱۰۸/۲	۱۱۲/۲	۱۰۸/۷	۱۱۶/۸
۱۲۱	۱۱۴/۰	۱۱۷/۶	۱۱۴/۵	۱۲۲/۰
۱۲۲	۱۱۹/۵	۱۲۳/۱	۱۲۰/۱	۱۲۷/۰
۱۲۳	۱۰۱/۵	۱۰۶/۷	۱۰۲/۲	۱۱۱/۰
۱۲۴	۱۰۸/۰	۱۱۱/۹	۱۰۸/۳	۱۱۶/۵
۱۲۵	۱۱۳/۷	۱۱۷/۳	۱۱۴/۱	۱۲۱/۸
۱۲۶	۱۱۹/۰	۱۲۲/۸	۱۱۹/۸	۱۲۶/۸

n-پنٹادکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱۲۷	۱۰۰/۵	۱۰۶/۲	۱۰۱/۸	۱۱۰/۵
۱۲۸	۱۰۷/۵	۱۱۱/۵	۱۰۷/۹	۱۱۶/۱
۱۲۹	۱۱۳/۴	۱۱۶/۹	۱۱۳/۸	۱۲۱/۵
۱۳۰	۱۱۹/۱	۱۲۲/۶	۱۱۹/۵	۱۲۶/۶
۱۳۱	۱۰۰/۲	۱۰۵/۷	۱۰۱/۴	۱۱۰/۱
۱۳۲	۱۰۷/۰	۱۱۱/۱	۱۰۷/۶	۱۱۵/۷
۱۳۳	۱۱۳/۰	۱۱۶/۶	۱۱۳/۵	۱۲۱/۲
۱۳۴	۱۱۸/۳	۱۲۲/۳	۱۱۹/۳	۱۲۶/۴
۱۳۵	۹۹/۷	۱۰۵/۳	۱۰۱/۲	۱۰۹/۶
۱۳۶	۱۰۶/۸	۱۱۰/۷	۱۰۷/۳	۱۱۵/۴
۱۳۷	۱۱۳/۰	۱۱۶/۳	۱۱۳/۳	۱۲۰/۹
۱۳۸	۱۱۸/۰	۱۲۲/۱	۱۱۹/۱	۱۲۶/۲
۱۳۹	۹۹/۵	۱۰۵/۰	۱۰۱/۰	۱۰۹/۳
۱۴۰	۱۰۶/۵	۱۱۰/۴	۱۰۷/۲	۱۱۵/۱
۱۴۱	۱۱۲/۵	۱۱۶/۱	۱۱۳/۲	۱۲۰/۶
۱۴۲	۱۱۸/۱	۱۲۱/۹	۱۱۹/۰	۱۲۶/۰
۱۴۳	۹۹/۰	۱۰۴/۶	۱۰۱/۰	۱۰۸/۹
۱۴۴	۱۰۶/۳	۱۱۰/۲	۱۰۷/۱	۱۱۴/۸
۱۴۵	۱۱۲/۲	۱۱۵/۹	۱۱۳/۱	۱۲۰/۴
۱۴۶	۱۱۷/۵	۱۲۱/۸	۱۱۸/۹	۱۲۵/۸
۱۴۷	۹۸/۵	۱۰۴/۳	۱۰۱/۱	۱۰۸/۵
۱۴۸	۱۰۶/۰	۱۰۹/۹	۱۰۷/۲	۱۱۴/۴
۱۴۹	۱۱۲/۰	۱۱۵/۷	۱۱۳/۱	۱۲۰/۱
۱۵۰	۱۱۷/۰	۱۲۱/۶	۱۱۸/۹	۱۲۵/۶
۱۵۱	۹۸/۲	۱۰۴/۰	۱۰۱/۳	۱۰۸/۰
۱۵۲	۱۰۶/۱	۱۰۹/۶	۱۰۷/۳	۱۱۴/۰
۱۵۳	۱۱۱/۵	۱۱۵/۵	۱۱۳/۲	۱۱۹/۸
۱۵۴	۱۱۶/۸	۱۲۱/۴	۱۱۹/۰	۱۲۵/۴
۱۵۵	۹۸/۰	۱۰۳/۷	۱۰۱/۵	۱۰۷/۶
۱۵۶	۱۰۵/۵	۱۰۹/۴	۱۰۷/۵	۱۱۳/۷
۱۵۷	۱۱۱/۴	۱۱۵/۳	۱۱۳/۴	۱۱۹/۶
۱۵۸	۱۱۷/۰	۱۲۱/۳	۱۱۹/۱	۱۲۵/۲
۱۵۹	۹۷/۶	۱۰۳/۵	۱۰۱/۹	۱۰۷/۳
۱۶۰	۱۰۵/۲	۱۰۹/۲	۱۰۷/۸	۱۱۳/۴
۱۶۱	۱۱۱/۰	۱۱۵/۱	۱۱۳/۶	۱۱۹/۳
۱۶۲	۱۱۶/۷	۱۲۱/۲	۱۱۹/۲	۱۲۵/۰
۱۶۳	۹۷/۲	۱۰۳/۳	۱۰۲/۳	۱۰۷/۰
۱۶۴	۱۰۵/۰	۱۰۹/۱	۱۰۸/۱	۱۱۳/۱
۱۶۵	۱۱۱/۰	۱۱۵/۰	۱۱۳/۸	۱۱۹/۱

n-پنٹادکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱۶۶	۱۱۶/۵	۱۲۱/۱	۱۱۹/۴	۱۲۴/۸
۱۶۷	۹۷/۰	۱۰۳/۱	۱۰۲/۸	۱۰۶/۶
۱۶۸	۱۰۴/۵	۱۰۸/۹	۱۰۸/۵	۱۱۲/۹
۱۶۹	۱۱۰/۸	۱۱۴/۸	۱۱۴/۱	۱۱۸/۹
۱۷۰	۱۱۶/۰	۱۲۰/۹	۱۱۹/۶	۱۲۴/۷
۱۷۱	۹۶/۵	۱۰۲/۹	۱۰۳/۴	۱۰۶/۳
۱۷۲	۱۰۴/۲	۱۰۸/۷	۱۰۹/۰	۱۱۲/۵
۱۷۳	۱۱۰/۴	۱۱۴/۷	۱۱۴/۵	۱۱۸/۶
۱۷۴	۱۱۵/۵	۱۲۰/۸	۱۱۹/۸	۱۲۴/۵
n-ہگزادکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۴۴/۱	۱۴۷/۷	۱۲۷/۸	۱۴۴/۴
۲	۱۴۷/۶	۱۵۰/۷	۱۳۱/۶	۱۴۷/۲
۳	۱۵۰/۵	۱۵۳/۴	۱۳۵/۳	۱۴۹/۹
۴	۱۵۳/۲	۱۵۵/۹	۱۳۸/۸	۱۵۲/۷
۵	۱۵۵/۵	۱۵۸/۳	۱۴۲/۳	۱۵۵/۵
۶	۱۴۰/۷	۱۴۳/۸	۱۲۴/۵	۱۴۰/۵
۷	۱۴۳/۹	۱۴۶/۹	۱۲۸/۳	۱۴۳/۳
۸	۱۴۶/۸	۱۴۹/۸	۱۳۲/۱	۱۴۶/۲
۹	۱۴۹/۵	۱۵۲/۵	۱۳۵/۸	۱۴۹/۰
۱۰	۱۵۱/۹	۱۵۵/۰	۱۳۹/۵	۱۵۱/۸
۱۱	۱۳۶/۷	۱۳۹/۹	۱۲۱/۱	۱۳۶/۸
۱۲	۱۴۰/۱	۱۴۳/۲	۱۲۵/۲	۱۳۹/۷
۱۳	۱۴۳/۰	۱۴۶/۳	۱۲۹/۱	۱۴۲/۶
۱۴	۱۴۵/۸	۱۴۹/۲	۱۳۳/۰	۱۴۵/۵
۱۵	۱۴۸/۳	۱۵۱/۸	۱۳۶/۸	۱۴۸/۴
۱۶	۱۳۲/۹	۱۳۶/۰	۱۱۷/۹	۱۳۳/۲
۱۷	۱۳۶/۵	۱۳۹/۵	۱۲۲/۱	۱۳۶/۲
۱۸	۱۳۹/۶	۱۴۲/۸	۱۲۶/۲	۱۳۹/۳
۱۹	۱۴۲/۶	۱۴۵/۹	۱۳۰/۳	۱۴۲/۳
۲۰	۱۴۵/۴	۱۴۸/۸	۱۳۴/۳	۱۴۵/۳
۲۱	۱۲۹/۲	۱۳۲/۲	۱۱۴/۹	۱۲۹/۷
۲۲	۱۳۲/۹	۱۳۶/۰	۱۱۹/۳	۱۳۲/۹
۲۳	۱۳۶/۲	۱۳۹/۵	۱۲۳/۶	۱۳۶/۱
۲۴	۱۳۹/۴	۱۴۲/۸	۱۲۷/۹	۱۳۹/۳
۲۵	۱۴۲/۵	۱۴۵/۸	۱۳۲/۲	۱۴۲/۵
۲۶	۱۲۵/۶	۱۲۸/۶	۱۱۲/۱	۱۲۶/۴
۲۷	۱۲۹/۵	۱۳۲/۵	۱۱۶/۷	۱۲۹/۸
۲۸	۱۳۳/۰	۱۳۶/۳	۱۲۱/۲	۱۳۳/۲

n-ہگزاڈکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۲۹	۱۳۶/۳	۱۳۹/۸	۱۲۵/۷	۱۳۶/۵
۳۰	۱۳۹/۶	۱۴۳/۱	۱۳۰/۲	۱۳۹/۹
۳۱	۱۲۲/۴	۱۲۵/۱	۱۰۹/۵	۱۲۳/۲
۳۲	۱۲۶/۵	۱۲۹/۳	۱۱۴/۳	۱۲۶/۸
۳۳	۱۳۰/۳	۱۳۳/۳	۱۱۹/۰	۱۳۰/۵
۳۴	۱۳۳/۶	۱۳۷/۱	۱۲۳/۸	۱۳۴/۱
۳۵	۱۳۷/۲	۱۴۰/۶	۱۲۸/۵	۱۳۷/۶
۳۶	۱۱۹/۲	۱۲۱/۹	۱۰۷/۰	۱۲۰/۲
۳۷	۱۲۳/۵	۱۲۶/۴	۱۱۲/۱	۱۲۴/۱
۳۸	۱۲۷/۶	۱۳۰/۶	۱۱۷/۰	۱۲۸/۰
۳۹	۱۳۱/۲	۱۳۴/۶	۱۲۲/۰	۱۳۱/۹
۴۰	۱۳۴/۶	۱۳۸/۴	۱۲۷/۰	۱۳۵/۷
۴۱	۱۱۶/۰	۱۱۹/۰	۱۰۴/۸	۱۱۷/۵
۴۲	۱۲۰/۶	۱۲۳/۷	۱۱۰/۰	۱۲۱/۷
۴۳	۱۲۴/۹	۱۲۸/۲	۱۱۵/۲	۱۲۵/۹
۴۴	۱۲۸/۹	۱۳۲/۴	۱۲۰/۳	۱۳۰/۱
۴۵	۱۳۲/۵	۱۳۶/۴	۱۲۵/۵	۱۳۴/۲
۴۶	۱۱۳/۲	۱۱۶/۴	۱۰۲/۷	۱۱۵/۱
۴۷	۱۱۸/۱	۱۲۱/۳	۱۰۸/۰	۱۱۹/۶
۴۸	۱۲۲/۸	۱۲۶/۰	۱۱۳/۴	۱۲۴/۱
۴۹	۱۲۷/۳	۱۳۰/۵	۱۱۸/۷	۱۲۸/۶
۵۰	۱۳۱/۱	۱۳۴/۸	۱۲۴/۰	۱۳۳/۰
۵۱	۱۱۱/۱	۱۱۴/۱	۱۰۰/۶	۱۱۲/۹
۵۲	۱۱۶/۳	۱۱۹/۳	۱۰۶/۲	۱۱۷/۸
۵۳	۱۲۱/۵	۱۲۴/۲	۱۱۱/۶	۱۲۲/۶
۵۴	۱۲۶/۲	۱۲۸/۹	۱۱۷/۱	۱۲۷/۴
۵۵	۱۲۹/۸	۱۳۳/۴	۱۲۲/۶	۱۳۲/۱
۵۶	۱۰۹/۰	۱۱۲/۱	۹۸/۷	۱۱۱/۰
۵۷	۱۱۴/۵	۱۱۷/۵	۱۰۴/۴	۱۱۶/۲
۵۸	۱۱۹/۹	۱۲۲/۷	۱۱۰/۰	۱۲۱/۳
۵۹	۱۲۴/۹	۱۲۷/۶	۱۱۵/۵	۱۲۶/۴
۶۰	۱۲۸/۶	۱۳۲/۲	۱۲۱/۱	۱۳۱/۵
۶۱	۱۰۷/۲	۱۱۰/۴	۹۷/۰	۱۰۹/۲
۶۲	۱۱۳/۱	۱۱۶/۰	۱۰۲/۷	۱۱۴/۷
۶۳	۱۱۸/۶	۱۲۱/۴	۱۰۸/۴	۱۲۰/۲
۶۴	۱۲۳/۷	۱۲۶/۵	۱۱۴/۰	۱۲۵/۶
۶۵	۱۲۷/۵	۱۳۱/۴	۱۱۹/۷	۱۳۰/۹
۶۶	۱۰۵/۲	۱۰۹/۰	۹۵/۴	۱۰۷/۶
۶۷	۱۱۱/۸	۱۱۴/۸	۱۰۱/۱	۱۱۳/۴

ادامہ جدول (۱-پ)

n-ہگزادکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۶۸	۱۱۷/۴	۱۲۰/۳	۱۰۶/۹	۱۱۹/۲
۶۹	۱۲۲/۵	۱۲۵/۶	۱۱۲/۶	۱۲۴/۹
۷۰	۱۲۶/۵	۱۳۰/۷	۱۱۸/۳	۱۳۰/۴
۷۱	۱۰۳/۶	۱۰۷/۸	۹۴/۰	۱۰۶/۱
۷۲	۱۱۰/۴	۱۱۳/۷	۹۹/۸	۱۱۲/۲
۷۳	۱۱۶/۳	۱۱۹/۴	۱۰۵/۶	۱۱۸/۲
۷۴	۱۲۱/۴	۱۲۴/۹	۱۱۱/۴	۱۲۴/۱
۷۵	۱۲۵/۷	۱۳۰/۱	۱۱۷/۱	۱۲۹/۹
۷۶	۱۰۲/۵	۱۰۶/۷	۹۲/۸	۱۰۴/۸
۷۷	۱۰۹/۲	۱۱۲/۸	۹۸/۶	۱۱۱/۰
۷۸	۱۱۵/۳	۱۱۸/۶	۱۰۴/۴	۱۱۷/۲
۷۹	۱۲۰/۵	۱۲۴/۳	۱۱۰/۲	۱۲۳/۳
۸۰	۱۲۵/۰	۱۲۹/۷	۱۱۶/۰	۱۲۹/۳
۸۱	۱۰۱/۵	۱۰۵/۸	۹۱/۷	۱۰۳/۶
۸۲	۱۰۸/۴	۱۱۲/۰	۹۷/۵	۱۱۰/۰
۸۳	۱۱۴/۵	۱۱۸/۰	۱۰۳/۳	۱۱۶/۳
۸۴	۱۱۹/۶	۱۲۳/۷	۱۰۹/۱	۱۲۲/۵
۸۵	۱۲۴/۴	۱۲۹/۳	۱۱۴/۹	۱۲۸/۶
۸۶	۱۰۰/۸	۱۰۴/۹	۹۰/۵	۱۰۲/۶
۸۷	۱۰۷/۸	۱۱۱/۲	۹۶/۳	۱۰۹/۰
۸۸	۱۱۳/۸	۱۱۷/۳	۱۰۲/۱	۱۱۵/۴
۸۹	۱۱۸/۹	۱۲۳/۲	۱۰۷/۹	۱۲۱/۷
۹۰	۱۲۳/۹	۱۲۸/۹	۱۱۳/۶	۱۲۷/۸
۹۱	۱۰۰/۲	۱۰۴/۰	۸۸/۸	۱۰۱/۸
۹۲	۱۰۷/۴	۱۱۰/۴	۹۴/۶	۱۰۸/۲
۹۳	۱۱۳/۲	۱۱۶/۶	۱۰۰/۴	۱۱۴/۵
۹۴	۱۱۸/۲	۱۲۲/۷	۱۰۶/۲	۱۲۰/۸
۹۵	۱۲۳/۴	۱۲۸/۴	۱۱۱/۹	۱۲۶/۹
۹۶	۹۹/۵	۱۰۳/۱	۸۶/۵	۱۰۱/۰
۹۷	۱۰۶/۹	۱۰۹/۶	۹۲/۲	۱۰۷/۴
۹۸	۱۱۲/۷	۱۱۵/۹	۹۸/۰	۱۱۳/۶
۹۹	۱۱۷/۶	۱۲۲/۰	۱۰۳/۷	۱۱۹/۸
۱۰۰	۱۲۳/۰	۱۲۷/۹	۱۰۹/۴	۱۲۵/۹
n-ہبتادکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۴۴/۶	۱۴۶/۱	۱۳۸/۸	۱۴۱/۶
۲	۱۴۶/۵	۱۴۷/۵	۱۴۰/۳	۱۴۳/۴
۳	۱۵۰/۰	۱۵۰/۳	۱۴۳/۲	۱۴۶/۹
۴	۱۵۲/۹	۱۵۲/۹	۱۴۵/۹	۱۵۰/۲



ن-ہیٹادکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۵	۱۵۵/۶	۱۵۵/۵	۱۴۸/۶	۱۵۳/۲
۶	۱۵۸/۲	۱۵۸/۰	۱۵۱/۱	۱۵۶/۰
۷	۱۴۱/۲	۱۴۱/۶	۱۳۴/۷	۱۳۸/۴
۸	۱۴۳/۱	۱۴۳/۰	۱۳۶/۳	۱۴۰/۳
۹	۱۴۶/۶	۱۴۵/۹	۱۳۹/۳	۱۴۴/۰
۱۰	۱۴۹/۵	۱۴۸/۸	۱۴۲/۱	۱۴۷/۴
۱۱	۱۵۲/۳	۱۵۱/۵	۱۴۴/۹	۱۵۰/۵
۱۲	۱۵۵/۰	۱۵۴/۲	۱۴۷/۶	۱۵۳/۴
۱۳	۱۳۷/۳	۱۳۷/۰	۱۳۰/۶	۱۳۵/۲
۱۴	۱۳۹/۶	۱۳۸/۶	۱۳۲/۲	۱۳۷/۲
۱۵	۱۴۳/۰	۱۴۱/۷	۱۳۵/۳	۱۴۱/۱
۱۶	۱۴۶/۲	۱۴۴/۷	۱۳۸/۳	۱۴۴/۶
۱۷	۱۴۹/۲	۱۴۷/۶	۱۴۱/۲	۱۴۷/۹
۱۸	۱۵۲/۱	۱۵۰/۵	۱۴۴/۰	۱۵۱/۰
۱۹	۱۳۳/۳	۱۳۲/۵	۱۲۶/۵	۱۳۱/۹
۲۰	۱۳۵/۹	۱۳۴/۲	۱۲۸/۱	۱۳۴/۰
۲۱	۱۳۹/۴	۱۳۷/۴	۱۳۱/۴	۱۳۸/۱
۲۲	۱۴۲/۷	۱۴۰/۶	۱۳۴/۵	۱۴۱/۸
۲۳	۱۴۵/۸	۱۴۳/۸	۱۳۷/۶	۱۴۵/۳
۲۴	۱۴۸/۸	۱۴۶/۸	۱۴۰/۵	۱۴۸/۵
۲۵	۱۲۹/۷	۱۲۸/۱	۱۲۲/۵	۱۲۸/۵
۲۶	۱۳۲/۸	۱۲۹/۸	۱۲۴/۲	۱۳۰/۷
۲۷	۱۳۶/۵	۱۳۳/۳	۱۲۷/۶	۱۳۴/۹
۲۸	۱۳۹/۸	۱۳۶/۷	۱۳۰/۹	۱۳۸/۸
۲۹	۱۴۳/۰	۱۴۰/۰	۱۳۴/۱	۱۴۲/۵
۳۰	۱۴۶/۰	۱۴۳/۳	۱۳۷/۲	۱۴۵/۹
۳۱	۱۲۶/۲	۱۲۳/۸	۱۱۸/۷	۱۲۴/۸
۳۲	۱۲۹/۰	۱۲۵/۷	۱۲۰/۵	۱۲۷/۱
۳۳	۱۳۳/۰	۱۲۹/۴	۱۲۴/۱	۱۳۱/۵
۳۴	۱۳۶/۵	۱۳۳/۰	۱۲۷/۶	۱۳۵/۷
۳۵	۱۳۹/۸	۱۳۶/۵	۱۳۰/۹	۱۳۹/۶
۳۶	۱۴۲/۹	۱۳۹/۹	۱۳۴/۱	۱۴۳/۲
۳۷	۱۲۲/۶	۱۱۹/۷	۱۱۵/۲	۱۲۱/۰
۳۸	۱۲۵/۴	۱۲۱/۷	۱۱۷/۲	۱۲۳/۴
۳۹	۱۲۹/۵	۱۲۵/۶	۱۲۰/۹	۱۲۸/۰
۴۰	۱۳۳/۳	۱۲۹/۴	۱۲۴/۶	۱۳۲/۳
۴۱	۱۳۶/۷	۱۳۳/۱	۱۲۸/۱	۱۳۶/۴
۴۲	۱۴۰/۱	۱۳۶/۸	۱۳۱/۵	۱۴۰/۲
۴۳	۱۱۹/۰	۱۱۵/۸	۱۱۲/۱	۱۱۷/۰
۴۴	۱۲۲/۰	۱۱۷/۹	۱۱۴/۱	۱۱۹/۵

n-ہیٹادکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۴۵	۱۲۶/۳	۱۲۲/۰	۱۱۸/۱	۱۲۴/۳
۴۶	۱۳۰/۴	۱۲۶/۱	۱۲۱/۹	۱۲۸/۹
۴۷	۱۳۴/۰	۱۳۰/۰	۱۲۵/۶	۱۳۳/۲
۴۸	۱۳۷/۷	۱۳۳/۹	۱۲۹/۲	۱۳۷/۲
۴۹	۱۱۵/۵	۱۱۲/۲	۱۰۹/۳	۱۱۴/۲
۵۰	۱۱۸/۷	۱۱۴/۴	۱۱۱/۵	۱۱۵/۸
۵۱	۱۲۳/۲	۱۱۸/۸	۱۱۵/۷	۱۲۰/۸
۵۲	۱۲۷/۵	۱۲۳/۰	۱۱۹/۷	۱۲۵/۶
۵۳	۱۳۱/۵	۱۲۷/۲	۱۲۳/۶	۱۳۰/۱
۵۴	۱۳۴/۸	۱۳۱/۳	۱۲۷/۴	۱۳۴/۴
۵۵	۱۱۲/۵	۱۰۸/۹	۱۰۶/۹	۱۰۹/۶
۵۶	۱۱۵/۸	۱۱۱/۲	۱۰۹/۲	۱۱۲/۳
۵۷	۱۲۰/۷	۱۱۵/۸	۱۱۳/۶	۱۱۷/۵
۵۸	۱۲۵/۴	۱۲۰/۳	۱۱۷/۹	۱۲۲/۵
۵۹	۱۲۹/۳	۱۲۴/۷	۱۲۲/۱	۱۲۷/۳
۶۰	۱۳۳/۰	۱۲۹/۰	۱۲۶/۱	۱۳۱/۸
۶۱	۱۰۹/۹	۱۰۵/۹	۱۰۴/۹	۱۰۶/۴
۶۲	۱۱۳/۵	۱۰۸/۴	۱۰۷/۳	۱۰۹/۲
۶۳	۱۱۸/۳	۱۱۳/۲	۱۱۲/۰	۱۱۴/۶
۶۴	۱۲۳/۴	۱۱۸/۰	۱۱۶/۵	۱۱۹/۹
۶۵	۱۲۷/۷	۱۲۲/۶	۱۲۰/۹	۱۲۴/۹
۶۶	۱۳۱/۷	۱۲۷/۱	۱۲۵/۱	۱۲۹/۶
۶۷	۱۰۷/۵	۱۰۳/۴	۱۰۳/۱	۱۰۳/۶
۶۸	۱۱۱/۲	۱۰۵/۹	۱۰۵/۶	۱۰۶/۵
۶۹	۱۱۶/۶	۱۱۱/۰	۱۱۰/۶	۱۱۲/۱
۷۰	۱۲۱/۹	۱۱۶/۰	۱۱۵/۴	۱۱۷/۶
۷۱	۱۲۶/۴	۱۲۰/۸	۱۲۰/۱	۱۲۲/۸
۷۲	۱۳۰/۵	۱۲۵/۵	۱۲۴/۶	۱۲۷/۸
۷۳	۱۰۵/۶	۱۰۱/۲	۱۰۱/۵	۱۰۱/۱
۷۴	۱۰۹/۷	۱۰۳/۹	۱۰۴/۲	۱۰۴/۱
۷۵	۱۱۵/۳	۱۰۹/۲	۱۰۹/۵	۱۰۹/۹
۷۶	۱۲۰/۶	۱۱۴/۴	۱۱۴/۶	۱۱۵/۶
۷۷	۱۲۵/۳	۱۱۹/۴	۱۱۹/۵	۱۲۱/۱
۷۸	۱۲۹/۳	۱۲۴/۴	۱۲۴/۲	۱۲۶/۳
۷۹	۱۰۳/۹	۹۹/۴	۱۰۰/۱	۹۹/۰
۸۰	۱۰۸/۰	۱۰۲/۲	۱۰۳/۰	۱۰۲/۰
۸۱	۱۱۳/۸	۱۰۷/۸	۱۰۸/۵	۱۰۸/۰
۸۲	۱۱۹/۷	۱۱۳/۲	۱۱۳/۹	۱۱۳/۹
۸۳	۱۲۴/۳	۱۱۸/۴	۱۱۹/۱	۱۱۹/۶
۸۴	۱۲۸/۶	۱۲۳/۶	۱۲۴/۱	۱۲۵/۱

ادامہ جدول (۱-پ)

$n$ -ہیٹادکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۸۵	۱۰۲/۲	۹۸/۱	۹۸/۹	۹۷/۱
۸۶	۱۰۶/۷	۱۰۱/۰	۱۰۱/۸	۱۰۰/۳
۸۷	۱۱۲/۷	۱۰۶/۷	۱۰۷/۶	۱۰۶/۴
۸۸	۱۱۸/۲	۱۱۲/۳	۱۱۳/۳	۱۱۲/۵
۸۹	۱۲۳/۲	۱۱۷/۸	۱۱۸/۷	۱۱۸/۴
۹۰	۱۲۷/۸	۱۲۳/۱	۱۲۴/۰	۱۲۴/۱
۹۱	۱۰۰/۶	۹۷/۱	۹۷/۷	۹۵/۶
۹۲	۱۰۵/۵	۱۰۰/۱	۱۰۰/۸	۹۸/۷
۹۳	۱۱۱/۸	۱۰۶/۰	۱۰۶/۸	۱۰۵/۰
۹۴	۱۱۷/۴	۱۱۱/۷	۱۱۲/۷	۱۱۱/۳
۹۵	۱۲۲/۵	۱۱۷/۴	۱۱۸/۴	۱۱۷/۴
۹۶	۱۲۷/۲	۱۲۲/۹	۱۲۳/۹	۱۲۳/۳
۹۷	۹۹/۶	۹۶/۴	۹۶/۷	۹۴/۲
۹۸	۱۰۴/۳	۹۹/۵	۹۹/۹	۹۷/۴
۹۹	۱۱۰/۶	۱۰۵/۵	۱۰۶/۱	۱۰۳/۹
۱۰۰	۱۱۶/۵	۱۱۱/۵	۱۱۲/۱	۱۱۰/۲
۱۰۱	۱۲۱/۶	۱۱۷/۲	۱۱۸/۰	۱۱۶/۵
۱۰۲	۱۲۶/۴	۱۲۲/۹	۱۲۳/۷	۱۲۲/۶
۱۰۳	۹۸/۵	۹۶/۰	۹۵/۸	۹۳/۱
۱۰۴	۱۰۳/۲	۹۹/۱	۹۹/۰	۹۶/۴
۱۰۵	۱۰۹/۷	۱۰۵/۳	۱۰۵/۳	۱۰۲/۹
۱۰۶	۱۱۵/۶	۱۱۱/۴	۱۱۱/۵	۱۰۹/۴
۱۰۷	۱۲۱/۰	۱۱۷/۳	۱۱۷/۵	۱۱۵/۸
۱۰۸	۱۲۶/۰	۱۲۳/۰	۱۲۳/۴	۱۲۲/۱
۱۰۹	۹۷/۸	۹۵/۸	۹۵/۱	۹۲/۳
۱۱۰	۱۰۲/۶	۹۹/۰	۹۸/۳	۹۵/۵
۱۱۱	۱۰۹/۳	۱۰۵/۲	۱۰۴/۷	۱۰۲/۱
۱۱۲	۱۱۵/۱	۱۱۱/۴	۱۱۰/۹	۱۰۸/۶
۱۱۳	۱۲۰/۴	۱۱۷/۴	۱۱۶/۹	۱۱۵/۱
۱۱۴	۱۲۵/۴	۱۲۳/۲	۱۲۲/۹	۱۲۱/۶
۱۱۵	۹۷/۳	۹۵/۸	۹۴/۵	۹۱/۵
۱۱۶	۱۰۲/۰	۹۸/۹	۹۷/۷	۹۴/۸
۱۱۷	۱۰۸/۷	۱۰۵/۲	۱۰۴/۰	۱۰۱/۴
۱۱۸	۱۱۴/۸	۱۱۱/۴	۱۱۰/۲	۱۰۸/۰
۱۱۹	۱۲۰/۲	۱۱۷/۴	۱۱۶/۲	۱۱۴/۶
۱۲۰	۱۲۵/۰	۱۲۳/۳	۱۲۲/۲	۱۲۱/۱
$n$ -اکتادکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۴۸/۷	۱۵۲/۹	۱۴۹/۱	۱۵۰/۶
۲	۱۵۱/۹	۱۵۵/۳	۱۵۲/۱	۱۵۲/۹

اکتادکان-n	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۳	۱۵۴/۹	۱۵۷/۶	۱۵۴/۹	۱۵۵/۱
۴	۱۵۷/۸	۱۵۹/۷	۱۵۷/۷	۱۵۷/۱
۵	۱۶۰/۵	۱۶۱/۶	۱۶۰/۵	۱۵۸/۹
۶	۱۵۳/۸	۱۵۷/۷	۱۵۵/۹	۱۵۵/۵
۷	۱۵۰/۵	۱۵۵/۵	۱۵۳/۱	۱۵۳/۳
۸	۱۵۶/۶	۱۵۹/۸	۱۵۸/۶	۱۵۷/۵
۹	۱۴۷/۳	۱۵۳/۰	۱۵۰/۲	۱۵۱/۰
۱۰	۱۴۳/۸	۱۵۰/۴	۱۴۷/۳	۱۴۸/۵
۱۱	۱۴۹/۹	۱۵۵/۱	۱۵۲/۷	۱۵۳/۰
۱۲	۱۴۶/۸	۱۵۲/۶	۱۴۹/۸	۱۵۰/۶
۱۳	۱۴۳/۲	۱۴۹/۹	۱۴۶/۹	۱۴۸/۱
۱۴	۱۵۳/۲	۱۵۷/۴	۱۵۵/۵	۱۵۵/۲
۱۵	۱۵۶/۱	۱۵۹/۴	۱۵۸/۲	۱۵۷/۱
۱۶	۱۴۵/۶	۱۴۹/۰	۱۴۶/۲	۱۴۷/۳
۱۷	۱۴۸/۷	۱۵۱/۸	۱۴۹/۱	۱۴۹/۹
۱۸	۱۵۱/۸	۱۵۴/۳	۱۵۲/۰	۱۵۲/۳
۱۹	۱۵۴/۷	۱۵۶/۷	۱۵۴/۸	۱۵۴/۶
۲۰	۱۵۷/۵	۱۵۸/۸	۱۵۷/۶	۱۵۶/۶
۲۱	۱۵۰/۱	۱۵۴/۷	۱۵۲/۸	۱۵۲/۹
۲۲	۱۵۳/۲	۱۵۶/۹	۱۵۵/۵	۱۵۵/۰
۲۳	۱۴۶/۹	۱۵۲/۰	۱۴۹/۸	۱۵۰/۴
۲۴	۱۴۳/۰	۱۴۹/۳	۱۴۶/۹	۱۴۷/۸
۲۵	۱۳۹/۲	۱۴۶/۴	۱۴۳/۹	۱۴۵/۰
۲۶	۱۴۹/۵	۱۵۴/۲	۱۵۲/۳	۱۵۲/۵
۲۷	۱۴۶/۱	۱۵۱/۶	۱۴۹/۴	۱۵۰/۰
۲۸	۱۵۲/۸	۱۵۶/۵	۱۵۵/۰	۱۵۴/۷
۲۹	۱۴۲/۴	۱۴۸/۸	۱۴۶/۵	۱۴۷/۴
۳۰	۱۳۸/۸	۱۴۵/۹	۱۴۳/۵	۱۴۴/۶
۳۱	۱۴۲/۲	۱۴۵/۱	۱۴۲/۹	۱۴۳/۹
۳۲	۱۴۵/۳	۱۴۸/۲	۱۴۵/۸	۱۴۶/۸
۳۳	۱۴۸/۴	۱۵۱/۰	۱۴۸/۸	۱۴۹/۵
۳۴	۱۵۱/۴	۱۵۳/۶	۱۵۱/۶	۱۵۱/۹
۳۵	۱۵۴/۳	۱۵۶/۰	۱۵۴/۴	۱۵۴/۲
۳۶	۱۳۸/۸	۱۴۱/۲	۱۳۹/۳	۱۴۰/۴
۳۷	۱۴۲/۱	۱۴۴/۵	۱۴۲/۳	۱۴۳/۵
۳۸	۱۴۵/۴	۱۴۷/۶	۱۴۵/۳	۱۴۶/۵
۳۹	۱۴۸/۴	۱۵۰/۴	۱۴۸/۳	۱۴۹/۲
۴۰	۱۵۱/۲	۱۵۳/۱	۱۵۱/۲	۱۵۱/۷
۴۱	۱۳۹/۴	۱۴۵/۳	۱۴۳/۰	۱۴۴/۴
۴۲	۱۳۵/۲	۱۴۲/۰	۱۳۹/۹	۱۴۱/۳

اکتادان n	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۴۳	۱۴۶/۸	۱۵۱/۱	۱۴۸/۹	۱۴۹/۹
۴۴	۱۳۰/۷	۱۳۸/۵	۱۳۶/۷	۱۳۷/۹
۴۵	۱۴۳/۰	۱۴۸/۲	۱۴۵/۹	۱۴۷/۲
۴۶	۱۴۶/۴	۱۵۰/۸	۱۴۸/۶	۱۴۹/۷
۴۷	۱۳۸/۸	۱۴۴/۸	۱۴۲/۵	۱۴۴/۰
۴۸	۱۳۴/۷	۱۴۱/۵	۱۳۹/۴	۱۴۰/۹
۴۹	۱۴۲/۶	۱۴۷/۹	۱۴۵/۶	۱۴۶/۹
۵۰	۱۳۰/۲	۱۳۸/۰	۱۳۶/۲	۱۳۷/۵
۵۱	۱۳۵/۴	۱۳۷/۳	۱۳۵/۶	۱۳۶/۹
۵۲	۱۳۹/۰	۱۴۰/۹	۱۳۸/۸	۱۴۰/۳
۵۳	۱۴۲/۴	۱۴۴/۲	۱۴۱/۹	۱۴۳/۴
۵۴	۱۴۵/۵	۱۴۷/۳	۱۴۵/۰	۱۴۶/۴
۵۵	۱۴۸/۵	۱۵۰/۲	۱۴۸/۰	۱۴۹/۲
۵۶	۱۳۲/۱	۱۳۳/۵	۱۳۲/۰	۱۳۳/۴
۵۷	۱۳۶/۲	۱۳۷/۳	۱۳۵/۳	۱۳۷/۰
۵۸	۱۳۹/۶	۱۴۰/۹	۱۳۸/۶	۱۴۰/۵
۵۹	۱۴۲/۹	۱۴۴/۲	۱۴۱/۸	۱۴۳/۷
۶۰	۱۴۶/۱	۱۴۷/۴	۱۴۵/۰	۱۴۶/۷
۶۱	۱۴۰/۸	۱۴۵/۹	۱۴۳/۴	۱۴۵/۳
۶۲	۱۳۷/۰	۱۴۲/۶	۱۴۰/۱	۱۴۲/۲
۶۳	۱۳۲/۸	۱۳۹/۰	۱۳۶/۸	۱۳۸/۸
۶۴	۱۲۸/۷	۱۳۵/۳	۱۳۳/۴	۱۳۵/۲
۶۵	۱۲۳/۵	۱۳۱/۳	۱۲۹/۹	۱۳۱/۴
۶۶	۱۴۰/۳	۱۴۵/۵	۱۴۳/۰	۱۴۵/.
۶۷	۱۳۲/۴	۱۳۸/۶	۱۳۶/۴	۱۳۸/۴
۶۸	۱۳۶/۷	۱۴۲/۲	۱۳۹/۷	۱۴۱/۸
۶۹	۱۲۲/۸	۱۳۰/۸	۱۲۹/۴	۱۳۰/۹
۷۰	۱۲۷/۹	۱۳۴/۸	۱۳۲/۹	۱۳۴/۷
۷۱	۱۲۹/۰	۱۲۹/۸	۱۲۸/۵	۱۳۰/۰
۷۲	۱۳۳/۲	۱۳۳/۹	۱۳۲/۰	۱۳۳/۹
۷۳	۱۳۶/۸	۱۳۷/۷	۱۳۵/۵	۱۳۷/۶
۷۴	۱۴۰/۰	۱۴۱/۳	۱۳۸/۹	۱۴۱/۱
۷۵	۱۴۳/۳	۱۴۴/۷	۱۴۲/۳	۱۴۴/۳
۷۶	۱۲۶/۰	۱۲۶/۳	۱۲۵/۳	۱۲۶/۸
۷۷	۱۳۰/۲	۱۳۰/۷	۱۲۹/۰	۱۳۰/۹
۷۸	۱۳۳/۹	۱۳۴/۷	۱۳۲/۷	۱۳۴/۹
۷۹	۱۳۷/۵	۱۳۸/۶	۱۳۶/۴	۱۳۸/۶
۸۰	۱۴۰/۹	۱۴۲/۲	۱۳۹/۹	۱۴۲/۱
۸۱	۱۳۵/۷	۱۴۱/۸	۱۳۹/۶	۱۴۱/۷

اکتادان-n	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۸۲	۱۳۲/۰	۱۳۸/۱	۱۳۵/۹	۱۳۸/۲
۸۳	۱۲۷/۸	۱۳۴/۲	۱۳۲/۲	۱۳۴/۴
۸۴	۱۲۳/۱	۱۳۰/۰	۱۲۸/۵	۱۳۰/۴
۸۵	۱۱۷/۶	۱۲۵/۷	۱۲۴/۷	۱۲۶/۱
۸۶	۱۳۵/۴	۱۴۱/۴	۱۳۹/۳	۱۴۱/۴
۸۷	۱۳۱/۵	۱۳۷/۷	۱۳۵/۶	۱۳۷/۸
۸۸	۱۲۷/۴	۱۳۳/۸	۱۳۱/۹	۱۳۴/۰
۸۹	۱۲۲/۶	۱۲۹/۶	۱۲۸/۱	۱۳۰/۰
۹۰	۱۱۷/۱	۱۲۵/۲	۱۲۴/۲	۱۲۵/۷
۹۱	۱۲۲/۸	۱۲۳/۱	۱۲۲/۴	۱۲۳/۸
۹۲	۱۲۷/۴	۱۲۷/۷	۱۲۶/۴	۱۲۸/۲
۹۳	۱۳۱/۵	۱۳۲/۰	۱۳۰/۳	۱۳۲/۴
۹۴	۱۳۵/۲	۱۳۶/۱	۱۳۴/۲	۱۳۶/۴
۹۵	۱۳۸/۶	۱۳۹/۹	۱۳۸/۰	۱۴۰/۱
۹۶	۱۱۹/۸	۱۲۰/۲	۱۱۹/۷	۱۲۱/۱
۹۷	۱۲۵/۲	۱۲۵/۰	۱۲۴/۰	۱۲۵/۷
۹۸	۱۲۹/۴	۱۲۹/۶	۱۲۸/۲	۱۳۰/۲
۹۹	۱۳۳/۲	۱۳۳/۹	۱۳۲/۴	۱۳۴/۴
۱۰۰	۱۳۶/۸	۱۳۷/۹	۱۳۶/۴	۱۳۸/۳
۱۰۱	۱۱۷/۲	۱۱۷/۶	۱۱۷/۴	۱۱۸/۶
۱۰۲	۱۲۲/۸	۱۲۲/۶	۱۲۲/۰	۱۲۳/۶
۱۰۳	۱۲۷/۴	۱۲۷/۴	۱۲۶/۴	۱۲۸/۲
۱۰۴	۱۳۱/۴	۱۳۱/۹	۱۳۰/۹	۱۳۲/۶
۱۰۵	۱۳۵/۲	۱۳۶/۲	۱۳۵/۲	۱۳۶/۸
۱۰۶	۱۱۵/۱	۱۱۵/۳	۱۱۵/۳	۱۱۶/۵
۱۰۷	۱۲۰/۸	۱۲۰/۵	۱۲۰/۱	۱۲۱/۶
۱۰۸	۱۲۵/۷	۱۲۵/۵	۱۲۴/۹	۱۲۶/۵
۱۰۹	۱۲۹/۲	۱۳۰/۳	۱۲۹/۶	۱۳۱/۱
۱۱۰	۱۳۳/۹	۱۳۴/۸	۱۳۴/۳	۱۳۵/۵
۱۱۱	۱۱۳/۰	۱۱۳/۳	۱۱۳/۴	۱۱۴/۶
۱۱۲	۱۱۸/۹	۱۱۸/۸	۱۱۸/۵	۱۱۹/۹
۱۱۳	۱۲۴/۱	۱۲۴/۰	۱۲۳/۶	۱۲۵/۱
۱۱۴	۱۲۸/۶	۱۲۸/۹	۱۲۸/۶	۱۲۹/۹
۱۱۵	۱۳۲/۷	۱۳۳/۶	۱۳۳/۵	۱۳۴/۵
۱۱۶	۱۱۱/۰	۱۱۱/۶	۱۱۱/۶	۱۱۲/۹
۱۱۷	۱۱۷/۴	۱۱۷/۳	۱۱۷/۰	۱۱۸/۵
۱۱۸	۱۲۲/۶	۱۲۲/۷	۱۲۲/۴	۱۲۳/۸
۱۱۹	۱۲۷/۵	۱۲۷/۸	۱۲۷/۷	۱۲۸/۹
۱۲۰	۱۳۱/۸	۱۳۲/۷	۱۳۳/۰	۱۳۳/۷
۱۲۱	۱۰۹/۵	۱۱۰/۱	۱۱۰/۰	۱۱۱/۵

اکتادکان-n	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱۲۲	۱۱۶/۲	۱۱۶/۰	۱۱۵/۷	۱۱۷/۳
۱۲۳	۱۲۱/۵	۱۲۱/۶	۱۲۱/۳	۱۲۲/۸
۱۲۴	۱۲۶/۴	۱۲۷/۰	۱۲۶/۹	۱۲۸/۱
۱۲۵	۱۳۰/۸	۱۳۲/۰	۱۳۲/۴	۱۳۳/۰
۱۲۶	۱۰۸/۲	۱۰۸/۸	۱۰۸/۴	۱۱۰/۲
۱۲۷	۱۱۵/۰	۱۱۴/۹	۱۱۴/۳	۱۱۶/۲
۱۲۸	۱۲۰/۴	۱۲۰/۷	۱۲۰/۲	۱۲۱/۹
۱۲۹	۱۲۵/۵	۱۲۶/۲	۱۲۶/۱	۱۲۷/۴
۱۳۰	۱۳۰/۲	۱۳۱/۵	۱۳۱/۹	۱۳۲/۶
۱۳۱	۱۰۷/۱	۱۰۷/۷	۱۰۷/۰	۱۰۹/۱
۱۳۲	۱۱۳/۸	۱۱۳/۹	۱۱۳/۱	۱۱۵/۳
۱۳۳	۱۱۹/۳	۱۱۹/۹	۱۱۹/۲	۱۲۱/۲
۱۳۴	۱۲۴/۸	۱۲۵/۶	۱۲۵/۳	۱۲۶/۸
۱۳۵	۱۲۹/۵	۱۳۱/۰	۱۳۱/۳	۱۳۲/۲
۱۳۶	۱۰۶/۰	۱۰۶/۵	۱۰۵/۷	۱۰۸/۰
۱۳۷	۱۱۲/۸	۱۱۳/۰	۱۱۱/۹	۱۱۴/۴
۱۳۸	۱۱۸/۲	۱۱۹/۱	۱۱۸/۲	۱۲۰/۵
۱۳۹	۱۲۳/۹	۱۲۵/۰	۱۲۴/۴	۱۲۶/۳
۱۴۰	۱۲۸/۹	۱۳۰/۶	۱۳۰/۷	۱۳۱/۹
۱۴۱	۱۰۵/۰	۱۰۵/۴	۱۰۴/۶	۱۰۷/۱
۱۴۲	۱۱۲/۰	۱۱۲/۰	۱۱۰/۹	۱۱۳/۶
۱۴۳	۱۱۷/۴	۱۱۸/۳	۱۱۷/۳	۱۱۹/۹
۱۴۴	۱۲۳/۰	۱۲۴/۴	۱۲۳/۶	۱۲۵/۹
۱۴۵	۱۲۸/۴	۱۳۰/۱	۱۳۰/۰	۱۳۱/۶
۱۴۶	۱۰۴/۴	۱۰۴/۱	۱۰۳/۹	۱۰۶/۱
۱۴۷	۱۱۱/۴	۱۱۰/۸	۱۱۰/۲	۱۱۲/۸
۱۴۸	۱۱۶/۷	۱۱۷/۳	۱۱۶/۵	۱۱۹/۲
۱۴۹	۱۲۲/۳	۱۲۳/۶	۱۲۲/۹	۱۲۵/۴
۱۵۰	۱۲۷/۹	۱۲۹/۵	۱۲۹/۲	۱۳۱/۳
نونادکان-n	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱	۱۴۸/۹	۱۴۹/۷	۱۵۴/۱	۱۴۷/۳
۲	۱۵۰/۶	۱۵۱/۲	۱۵۵/۹	۱۴۹/۲
۳	۱۵۴/۰	۱۵۴/۳	۱۵۹/۴	۱۵۲/۷
۴	۱۵۷/۰	۱۵۷/۳	۱۶۲/۹	۱۵۵/۷
۵	۱۵۹/۸	۱۶۰/۲	۱۶۶/۴	۱۵۸/۴
۶	۱۶۲/۵	۱۶۳/۲	۱۶۹/۷	۱۶۰/۷
۷	۱۵۰/۸	۱۴۴/۶	۱۴۸/۳	۱۴۲/۵
۸	۱۴۵/۴	۱۴۵/۴	۱۴۹/۲	۱۴۳/۵

نوناڈا کان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۹	۱۵۱/۸	۱۴۵/۴	۱۴۹/۲	۱۴۳/۶
۱۰	۱۴۷/۲	۱۴۷/۰	۱۵۱/۰	۱۴۵/۵
۱۱	۱۵۳/۷	۱۴۷/۱	۱۵۱/۱	۱۴۵/۶
۱۲	۱۵۵/۲	۱۴۸/۴	۱۵۲/۶	۱۴۷/۲
۱۳	۱۵۰/۴	۱۵۰/۱	۱۵۴/۷	۱۴۹/۲
۱۴	۱۵۳/۴	۱۵۳/۲	۱۵۸/۴	۱۵۲/۴
۱۵	۱۵۶/۲	۱۵۶/۳	۱۶۱/۹	۱۵۵/۲
۱۶	۱۵۹/۱	۱۵۹/۳	۱۶۵/۵	۱۵۷/۷
۱۷	۱۴۲/۱	۱۴۱/۳	۱۴۴/۵	۱۳۹/۷
۱۸	۱۴۳/۹	۱۴۳/۰	۱۴۶/۴	۱۴۱/۸
۱۹	۱۴۷/۲	۱۴۶/۲	۱۵۰/۲	۱۴۵/۷
۲۰	۱۵۰/۳	۱۴۹/۴	۱۵۴/۰	۱۴۹/۱
۲۱	۱۵۳/۲	۱۵۲/۶	۱۵۷/۷	۱۵۲/۱
۲۲	۱۵۶/۱	۱۵۵/۶	۱۶۱/۳	۱۵۴/۸
۲۳	۱۴۲/۶	۱۳۶/۶	۱۳۹/۰	۱۳۴/۷
۲۴	۱۳۸/۵	۱۳۷/۵	۱۳۹/۹	۱۳۵/۹
۲۵	۱۴۳/۶۰	۱۳۷/۵	۱۴۰/۰	۱۳۵/۹
۲۶	۱۴۰/۵	۱۳۹/۲	۱۴۱/۹	۱۳۸/۱
۲۷	۱۵۵/۶	۱۳۹/۳	۱۴۲/۰	۱۳۸/۲
۲۸	۱۵۷/۱	۱۴۰/۶	۱۴۳/۶	۱۳۹/۹
۲۹	۱۴۳/۹	۱۴۲/۶	۱۴۵/۹	۱۴۲/۲
۳۰	۱۴۷/۱	۱۴۵/۹	۱۴۹/۸	۱۴۵/۸
۳۱	۱۵۰/۱	۱۴۹/۱	۱۵۳/۶	۱۴۹/۱
۳۲	۱۵۳/۰	۱۵۲/۳	۱۵۷/۳	۱۵۲/۰
۳۳	۱۳۵/۲	۱۳۳/۸	۱۳۵/۶	۱۳۲/۰
۳۴	۱۳۷/۲	۱۳۵/۶	۱۳۷/۷	۱۳۴/۴
۳۵	۱۴۰/۸	۱۳۹/۱	۱۴۱/۷	۱۳۸/۸
۳۶	۱۴۴/۱	۱۴۲/۶	۱۴۵/۷	۱۴۲/۶
۳۷	۱۴۷/۲	۱۴۵/۹	۱۴۹/۷	۱۴۶/۱
۳۸	۱۵۰/۲	۱۴۹/۲	۱۵۳/۵	۱۴۹/۲
۳۹	۱۳۵/۰	۱۲۹/۴	۱۳۰/۵	۱۲۷/۰
۴۰	۱۳۱/۷	۱۳۰/۳	۱۳۱/۶	۱۲۸/۳
۴۱	۱۳۶/۰	۱۳۰/۴	۱۳۱/۶	۱۲۸/۳
۴۲	۱۳۳/۹	۱۳۲/۲	۱۳۳/۷	۱۳۰/۸
۴۳	۱۳۸/۱	۱۳۲/۳	۱۳۳/۸	۱۳۰/۹
۴۴	۱۳۹/۶	۱۳۳/۸	۱۳۵/۵	۱۳۲/۹
۴۵	۱۳۷/۷	۱۳۵/۹	۱۳۷/۹	۱۳۵/۴
۴۶	۱۴۱/۲	۱۳۹/۵	۱۴۲/۰	۱۳۹/۵
۴۷	۱۴۴/۳	۱۴۳/۰	۱۴۶/۰	۱۴۳/۲
۴۸	۱۴۷/۴	۱۴۶/۴	۱۴۹/۹	۱۴۶/۵



n-نوناڈکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۴۹	۱۲۸/۶	۱۲۷/۱	۱۲۷/۸	۱۲۴/۷
۵۰	۱۳۰/۸	۱۲۹/۱	۱۲۹/۹	۱۲۷/۴
۵۱	۱۳۴/۶	۱۳۲/۹	۱۳۴/۲	۱۳۲/۳
۵۲	۱۳۸/۲	۱۳۶/۷	۱۳۸/۵	۱۳۶/۶
۵۳	۱۴۱/۶	۱۴۰/۴	۱۴۲/۶	۱۴۰/۵
۵۴	۱۴۴/۸	۱۴۳/۹	۱۴۶/۶	۱۴۴/۰
۵۵	۱۲۷/۹	۱۲۳/۱	۱۲۳/۲	۱۲۰/۰
۵۶	۱۲۵/۳	۱۲۴/۱	۱۲۴/۳	۱۲۱/۵
۵۷	۱۲۹/۱	۱۲۴/۱	۱۲۴/۳	۱۲۱/۵
۵۸	۱۲۷/۹	۱۲۶/۲	۱۲۶/۵	۱۲۴/۲
۵۹	۱۳۱/۳	۱۲۶/۳	۱۲۶/۶	۱۲۴/۴
۶۰	۱۳۲/۸	۱۲۷/۹	۱۲۸/۴	۱۲۶/۵
۶۱	۱۳۱/۹	۱۳۰/۲	۱۳۱/۰	۱۲۹/۴
۶۲	۱۳۵/۷	۱۳۴/۲	۱۳۵/۳	۱۳۳/۹
۶۳	۱۳۹/۳	۱۳۸/۰	۱۳۹/۶	۱۳۸/۰
۶۴	۱۴۲/۷	۱۴۱/۸	۱۴۳/۷	۱۴۱/۷
۶۵	۱۲۲/۱	۱۲۱/۳	۱۲۱/۲	۱۱۸/۵
۶۶	۱۲۵/۰	۱۲۳/۵	۱۲۳/۵	۱۲۱/۴
۶۷	۱۲۹/۲	۱۲۷/۸	۱۲۸/۱	۱۲۶/۸
۶۸	۱۳۳/۳	۱۳۱/۹	۱۳۲/۵	۱۳۱/۶
۶۹	۱۳۷/۲	۱۳۵/۹	۱۳۶/۹	۱۳۵/۸
۷۰	۱۴۰/۸	۱۳۹/۹	۱۴۱/۲	۱۳۹/۷
۷۱	۱۲۱/۳	۱۱۷/۷	۱۱۷/۳	۱۱۴/۴
۷۲	۱۱۹/۲	۱۱۸/۸	۱۱۸/۵	۱۱۵/۹
۷۳	۱۲۲/۷	۱۱۸/۹	۱۱۸/۵	۱۱۶/۰
۷۴	۱۲۲/۴	۱۲۱/۱	۱۲۰/۹	۱۱۹/۰
۷۵	۱۲۵/۱	۱۲۱/۲	۱۲۱/۰	۱۱۹/۱
۷۶	۱۲۶/۸	۱۲۳/۰	۱۲۲/۹	۱۲۱/۵
۷۷	۱۲۷/۲	۱۲۵/۶	۱۲۵/۶	۱۲۴/۶
۷۸	۱۳۱/۵	۱۲۹/۹	۱۳۰/۲	۱۲۹/۶
۷۹	۱۳۵/۵	۱۳۴/۲	۱۳۴/۷	۱۳۴/۰
۸۰	۱۳۹/۴	۱۳۸/۳	۱۳۹/۱	۱۳۸/۰
۸۱	۱۱۶/۴	۱۱۶/۶	۱۱۶/۲	۱۱۳/۸
۸۲	۱۲۰/۱	۱۱۹/۰	۱۱۸/۷	۱۱۶/۹
۸۳	۱۲۵/۱	۱۲۳/۶	۱۲۳/۵	۱۲۲/۷
۸۴	۱۲۹/۷	۱۲۸/۲	۱۲۸/۳	۱۲۷/۹
۸۵	۱۳۴/۱	۱۳۲/۶	۱۳۳/۰	۱۳۲/۵
۸۶	۱۳۸/۲	۱۳۷/۰	۱۳۷/۶	۱۳۶/۶
۸۷	۱۱۴/۹	۱۱۳/۳	۱۱۳/۰	۱۱۰/۲

n-نوناڈکان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۸۸	۱۱۴/۰	۱۱۴/۶	۱۱۴/۲	۱۱۱/۹
۸۹	۱۱۶/۵	۱۱۴/۶	۱۱۴/۳	۱۱۲/۰
۹۰	۱۱۸/۰	۱۱۷/۱	۱۱۶/۸	۱۱۵/۲
۹۱	۱۱۹/۲	۱۱۷/۲	۱۱۶/۹	۱۱۵/۳
۹۲	۱۲۱/۲	۱۱۹/۲	۱۱۹/۰	۱۱۷/۸
۹۳	۱۲۳/۲	۱۲۲/۰	۱۲۱/۹	۱۲۱/۲
۹۴	۱۲۸/۱	۱۲۶/۷	۱۲۶/۸	۱۲۶/۵
۹۵	۱۳۲/۶	۱۳۱/۴	۱۳۱/۷	۱۳۱/۲
۹۶	۱۳۶/۸	۱۳۵/۹	۱۳۶/۴	۱۳۵/۴
۹۷	۱۱۱/۷	۱۱۲/۸	۱۱۲/۵	۱۱۰/۳
۹۸	۱۱۶/۰	۱۱۵/۴	۱۱۵/۱	۱۱۳/۷
۹۹	۱۲۱/۶	۱۲۰/۵	۱۲۰/۴	۱۱۹/۸
۱۰۰	۱۲۶/۸	۱۲۵/۵	۱۲۵/۵	۱۲۵/۳
۱۰۱	۱۳۱/۶	۱۳۰/۳	۱۳۰/۶	۱۳۰/۱
۱۰۲	۱۳۵/۸	۱۳۵/۰	۱۳۵/۶	۱۳۴/۳
۱۰۳	۱۰۸/۸	۱۰۹/۹	۱۰۹/۴	۱۰۷/۱
۱۰۴	۱۰۹/۸	۱۱۱/۲	۱۱۰/۸	۱۰۸/۹
۱۰۵	۱۱۰/۷	۱۱۱/۳	۱۱۰/۸	۱۰۹/۰
۱۰۶	۱۱۴/۲	۱۱۳/۹	۱۱۳/۵	۱۱۲/۳
۱۰۷	۱۱۳/۷	۱۱۴/۰	۱۱۳/۶	۱۱۲/۵
۱۰۸	۱۱۵/۹	۱۱۶/۲	۱۱۵/۹	۱۱۵/۱
۱۰۹	۱۲۰/۰	۱۱۹/۲	۱۱۹/۰	۱۱۸/۶
۱۱۰	۱۲۵/۵	۱۲۴/۴	۱۲۴/۴	۱۲۴/۲
۱۱۱	۱۳۰/۵	۱۲۹/۴	۱۲۹/۷	۱۲۹/۰
۱۱۲	۱۳۵/۱	۱۳۴/۲	۱۳۴/۹	۱۳۳/۳
۱۱۳	۱۰۷/۵	۱۰۹/۹	۱۰۹/۱	۱۰۷/۵
۱۱۴	۱۱۲/۵	۱۱۲/۶	۱۱۱/۹	۱۱۱/۰
۱۱۵	۱۱۸/۶	۱۱۸/۱	۱۱۷/۷	۱۱۷/۴
۱۱۶	۱۲۴/۴	۱۲۳/۴	۱۲۳/۳	۱۲۳/۱
۱۱۷	۱۲۹/۵	۱۲۸/۵	۱۲۸/۸	۱۲۸/۰
۱۱۸	۱۳۴/۵	۱۳۳/۵	۱۳۴/۳	۱۳۲/۳
۱۱۹	۱۰۳/۳	۱۰۷/۲	۱۰۵/۹	۱۰۴/۳
۱۲۰	۱۰۶/۲	۱۰۸/۶	۱۰۷/۴	۱۰۶/۱
۱۲۱	۱۰۵/۴	۱۰۸/۷	۱۰۷/۵	۱۰۶/۲
۱۲۲	۱۱۱/۰	۱۱۱/۴	۱۱۰/۴	۱۰۹/۷
۱۲۳	۱۰۸/۶	۱۱۱/۶	۱۱۰/۵	۱۰۹/۹
۱۲۴	۱۱۱/۰	۱۱۳/۸	۱۱۳/۰	۱۱۲/۶
۱۲۵	۱۱۷/۵	۱۱۷/۰	۱۱۶/۴	۱۱۶/۲
۱۲۶	۱۲۳/۲	۱۲۲/۴	۱۲۲/۲	۱۲۱/۹

ادامہ جدول (۱-پ)

<b>n-نوناڈان</b>	<b>مقادیر تجربی (mW/m.K)</b>	<b>MLR-ANN</b>	<b>CDFS-ANN</b>	<b>GA-ANN</b>
۱۲۷	۱۲۸/۶	۱۲۷/۷	۱۲۸/۰	۱۲۶/۹
۱۲۸	۱۳۳/۸	۱۳۲/۸	۱۳۳/۷	۱۳۱/۳
۱۲۹	۱۰۴/۹	۱۰۷/۴	۱۰۵/۹	۱۰۴/۷
۱۳۰	۱۰۹/۵	۱۱۰/۳	۱۰۹/۰	۱۰۸/۳
۱۳۱	۱۱۶/۶	۱۱۵/۹	۱۱۵/۲	۱۱۴/۹
۱۳۲	۱۲۲/۳	۱۲۱/۵	۱۲۱/۳	۱۲۰/۷
۱۳۳	۱۲۷/۹	۱۲۶/۸	۱۲۷/۳	۱۲۵/۸
۱۳۴	۱۳۳/۲	۱۳۲/۱	۱۳۳/۳	۱۳۰/۲
۱۳۵	۱۰۳/۵	۱۰۶/۲	۱۰۴/۶	۱۰۳/۰
۱۳۶	۱۰۸/۲	۱۰۹/۱	۱۰۷/۸	۱۰۶/۷
۱۳۷	۱۱۵/۴	۱۱۴/۸	۱۱۴/۲	۱۱۳/۵
۱۳۸	۱۲۱/۵	۱۲۰/۴	۱۲۰/۵	۱۱۹/۴
۱۳۹	۱۲۷/۲	۱۲۵/۹	۱۲۶/۸	۱۲۴/۵
۱۴۰	۱۳۲/۵	۱۳۱/۱	۱۳۲/۹	۱۲۹/۰
۱۴۱	۱۰۲/۰	۱۰۴/۹	۱۰۳/۶	۱۰۱/۲
۱۴۲	۱۰۷/۰	۱۰۷/۹	۱۰۶/۹	۱۰۵/۰
۱۴۳	۱۱۴/۵	۱۱۳/۶	۱۱۳/۴	۱۱۱/۹
۱۴۴	۱۲۰/۶	۱۱۹/۳	۱۱۹/۹	۱۱۷/۹
۱۴۵	۱۲۶/۴	۱۲۴/۸	۱۲۶/۳	۱۲۳/۲
۱۴۶	۱۳۱/۸	۱۳۰/۱	۱۳۲/۶	۱۲۷/۷
۱۴۷	۱۰۰/۷	۱۰۳/۵	۱۰۲/۸	۹۹/۳
۱۴۸	۱۰۶/۰	۱۰۶/۵	۱۰۶/۲	۱۰۳/۱
۱۴۹	۱۱۴/۰	۱۱۲/۳	۱۱۲/۹	۱۱۰/۲
۱۵۰	۱۱۹/۸	۱۱۸/۰	۱۱۹/۵	۱۱۶/۳
۱۵۱	۱۲۵/۷	۱۲۳/۵	۱۲۶/۰	۱۲۱/۷
۱۵۲	۱۳۱/۳	۱۲۸/۸	۱۳۲/۳	۱۲۶/۳
<b>n-ایکوزان</b>	<b>مقادیر تجربی (mW/m.K)</b>	<b>MLR-ANN</b>	<b>CDFS-ANN</b>	<b>GA-ANN</b>
۱	۱۴۷/۴	۱۴۳/۳	۱۴۷/۴	۱۴۱/۴
۲	۱۵۰/۵	۱۴۶/۱	۱۵۰/۰	۱۴۴/۷
۳	۱۵۳/۶	۱۴۸/۸	۱۵۲/۷	۱۴۷/۷
۴	۱۵۶/۸	۱۵۱/۴	۱۵۵/۳	۱۵۰/۵
۵	۱۵۹/۹	۱۵۳/۹	۱۵۸/۰	۱۵۳/۲
۶	۱۴۲/۴	۱۳۹/۶	۱۴۳/۹	۱۳۷/۵
۷	۱۴۶/۱	۱۴۲/۷	۱۴۶/۷	۱۴۰/۹
۸	۱۴۹/۵	۱۴۵/۷	۱۴۹/۴	۱۴۴/۱
۹	۱۵۳/۰	۱۴۸/۵	۱۵۲/۱	۱۴۷/۰
۱۰	۱۵۶/۲	۱۵۱/۲	۱۵۴/۸	۱۴۹/۸
۱۱	۱۳۸/۲	۱۳۵/۹	۱۴۰/۴	۱۳۳/۵

n-ایکوزان	مقادیر تجربی (mW/m.K)	MLR-ANN	CDFS-ANN	GA-ANN
۱۲	۱۴۲/۱	۱۳۹/۳	۱۴۳/۲	۱۳۷/۱
۱۳	۱۴۵/۹	۱۴۲/۵	۱۴۶/۰	۱۴۰/۴
۱۴	۱۴۹/۵	۱۴۵/۵	۱۴۸/۸	۱۴۳/۵
۱۵	۱۵۳/۰	۱۴۸/۵	۱۵۱/۶	۱۴۶/۴
۱۶	۱۳۴/۱	۱۳۲/۴	۱۳۶/۷	۱۲۹/۶
۱۷	۱۳۸/۳	۱۳۵/۹	۱۳۹/۶	۱۳۳/۳
۱۸	۱۴۲/۳	۱۳۹/۳	۱۴۲/۶	۱۳۶/۸
۱۹	۱۴۶/۲	۱۴۲/۶	۱۴۵/۵	۱۴۰/۰
۲۰	۱۴۹/۹	۱۴۵/۸	۱۴۸/۵	۱۴۳/۰
۲۱	۱۳۰/۲	۱۲۸/۹	۱۳۳/۱	۱۲۵/۷
۲۲	۱۳۴/۷	۱۳۲/۷	۱۳۶/۲	۱۲۹/۶
۲۳	۱۳۹/۰	۱۳۶/۴	۱۳۹/۲	۱۳۳/۳
۲۴	۱۴۲/۹	۱۳۹/۹	۱۴۲/۴	۱۳۶/۶
۲۵	۱۴۶/۸	۱۴۳/۲	۱۴۵/۵	۱۳۹/۸
۲۶	۱۲۶/۳	۱۲۵/۷	۱۲۹/۵	۱۲۲/۳
۲۷	۱۳۱/۳	۱۲۹/۷	۱۳۲/۸	۱۲۶/۳
۲۸	۱۳۵/۷	۱۳۳/۶	۱۳۶/۱	۱۳۰/۱
۲۹	۱۳۹/۸	۱۳۷/۳	۱۳۹/۴	۱۳۳/۶
۳۰	۱۴۳/۶	۱۴۰/۹	۱۴۲/۸	۱۳۶/۹
۳۱	۱۲۲/۷	۱۲۲/۸	۱۲۶/۰	۱۱۹/۲
۳۲	۱۲۷/۸	۱۲۷/۰	۱۲۹/۵	۱۲۳/۵
۳۳	۱۳۲/۵	۱۳۱/۱	۱۳۳/۱	۱۲۷/۴
۳۴	۱۳۶/۷	۱۳۵/۱	۱۳۶/۶	۱۳۱/۱
۳۵	۱۴۰/۵	۱۳۸/۸	۱۴۰/۳	۱۳۴/۶
۳۶	۱۱۹/۱	۱۲۰/۱	۱۲۲/۷	۱۱۶/۵
۳۷	۱۲۴/۵	۱۲۴/۶	۱۲۶/۵	۱۲۱/۰
۳۸	۱۲۹/۳	۱۲۸/۹	۱۳۰/۳	۱۲۵/۱
۳۹	۱۳۳/۶	۱۳۳/۱	۱۳۴/۱	۱۲۹/۰
۴۰	۱۳۷/۶	۱۳۷/۱	۱۳۸/۰	۱۳۲/۶

## مراجع

- [۱]. صدیق ک، یمان ی، (۱۳۷۷)، "هدایت گرمایی"، صدر عاملی م، چاپ اول، انتشارات دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ۱.
- [۲]. لولین ای، (۱۳۸۰)، "شیمی فیزیک"، اسلامپور غ، پارسافر غ، مقاری ع، نجفی ب، جلد دوم، چاپ دوم، انتشارات فاطمی، تهران، ۶۲۸.
- [۳]. جعفری امامزاده ای م، (۱۳۸۲)، پایان نامه ارشد، "پیش بینی هدایت گرمایی سیالات در محدوده ی وسیعی از دما و فشار با استفاده از شبکه های عصبی مصنوعی به کمک الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوات"، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان.
- [4]. Khajeh A. and Modarress H., (2011), "Quantitative structure–property relationship prediction of liquid" **Struct Chem.**, 22, pp 1315.
- [5]. Calado J. C. G., Fareleira j. M. N. A. and Mardolcar U. V., (1988), "Thermal Conductivity of Liquid n-Alkanes" **Int. J. Thermophys.**, 3, 9, pp 351.
- [۶]. کلانتر ز، (۱۳۸۵)، رساله ی دکتری، "پیش بینی خواص ترمودینامیکی و انتقالی سیالات آلی چگال با استفاده از روش سهم گروه ها و شبکه ی عصبی موجک"، دانشکده شیمی: دانشگاه صنعتی اصفهان.
- [7]. Mutihac L. and Mutihac R., (2008), "Mining in chemometrics", **J. Anal. Chim. Acta.**, 612, pp 1.
- [8]. Wehrens R. and Buydens L.M. C., (2000), "Classical and Nonclassical Optimization Methods", **Encyclopedia of Analytical Chemistry**, R.A. Meyer, John Wiley & Sons., pp 9678.
- [9]. Massart D. L., Vandeginste B. G., Buydens L. M. C., Jong S. D., Lewi P. J.,

- (1997), "**Handbook of Chemometrics and Qualimetrics**", Part A, Elsevier Science.
- [10]. Vandeginste B. G. M., Massart D. L., Buydens L. M. C., Jonge S. D., Lewi P. J., Smeyers Verbeke J., (1998), "**Handbook of Chemometrics and Qualimetrics**", Part B, Elsevier Science.
- [11]. Brereton R. G., (2007), "**Applied Chemometrics for Scientists**", John Wiley & Sons.
- [12]. Enix G. W., Zwaniger H. W., Geiss S., (1997), "**Chemometrics Environmental Analysis**", Wiley- VCH.
- [13]. Brown F. K., (1998), "**Chemoinformatics: What is it and How does it Impact Drug Discovery**", Med. Chem., 33, pp 375.
- [14]. Leach A. R., Gillet V. J., (2003), "**An Introduction to Chemoinformatics**", Springer.
- [15]. Chen H., Bakshi B. R., Goel P. K., (2007), "Toward Bayesian chemometrics-a tutorial on some recent advances", **J. Anal. Chim. Acta.**, 602, pp 1.
- [۱۶]. محسنی ب، (۱۳۸۷)، پایان نامه ارشد، "مدل سازی تمایل اتصال بنزودیازپین ها به گیرنده گابا-A به روش QSPR با استفاده از تکنیک های الگوریتم ژنتیکی و شبکه ی عصبی مصنوعی"، دانشکده علوم، دانشگاه شهید باهنر کرمان.
- [17]. Petitjean M., (1992), "Applications of the Radius-Diameter Diagram to the Classification of Topological and Geometrical Shapes of Chemical Compounds"; **J. Chem. Inf. Comput. Sci.**, 32, pp 331.
- [18]. Todeschini R., Consonni V., (2000), "**Handbook of molecular descriptors**", Wiley- VCH.
- [19]. Kier L. B., (1985), "A Shape Index from Molecular Graphs", **Quant. Struct. Act.**

**Relat.**, 4, pp 109.

[20]. Bondi A., (1964), "van der Waals Volumes and Radii", **J. Phys. Chem.**, 68, pp 441.

[21]. Hermann R. B., (1972), "Physico-Chemical and Computational Approaches to Drug Discovery", **J. Phys. Chem.**, 76, pp 2754.

[22]. Todeschini R. and Consonni V., (2000), "**Handbook of Molecular Descriptors**", Wiley-VCH., pp 668.

[23]. HyperChem 7.0 Toronto, Canada:HyperCube Inc, <http://www.hyper.com/>

[۲۴]. لواین ای. ان، (۱۳۸۷)، "شیمی کوانتومی"، اسلامپورغ، پارسافرغ، مقاری ع، نجفی پ، جلد سوم، چاپ اول، موسسه انتشارات فاطمی.

[25]. Coakes S. J., (2005) "**SPSS Analysis Without Anguish**", John Wiley & Sons.

[۲۶]. اشرفی م، (۱۳۸۹)، پایان نامه ارشد، "مطالعه ارتباط کمی ساختار-فعالیت مشتقات تیوکرباماتها به عنوان دسته ی جدیدی از بازدارنده های غیر نوکلئوزیدی HIV"، دانشکده علوم، دانشگاه صنعتی شاهرود.

[27]. Hemmateenejad B., Javadnia K., Elyasi M., (2007), "Quantitative structure–retention relationship for the Kovats retention indices of a large set of terpenes: A combined data splitting-feature selection strategy", **Anal. Chim. Acta.**, 72, pp 592.

[۲۸]. راشدی ع، (۱۳۸۶)، پایان نامه ارشد، "الگوریتم جستجوی گرانشی"، دانشکده مهندسی برق، دانشگاه شهید باهنر کرمان.

[29]. Mitchell M., (1999), "**AN introduction to Genetic Algorithms**", Cambridge, Massachusetts.

- [30]. Randy S. E., (2004), "**Practical Genetic Algorithms**", John Wiley & Sons.
- [31]. Coley D. A., (1999), "**An Introduction to Genetic Algorithms for Scientists and Engineers**", World Scientific.
- [32]. Hassan M. N. and Jurs P. C., (1990), "Advances in Quantative Structure - Property Relationships", **J. Anal. Chem.**, 62, pp 2318.
- [33]. Krogh A., (2008), "**What are artificial neural networks?**", <http://www.nature.com/naturebiotechnology>, Nature Publishing Group.
- [34]. Rojas, R. (1996), "**Neural Networks: A Systematic Introduction**". Springer.
- [۳۵]. مهناج م، (۱۳۸۷)، "مبانی شبکه های عصبی (هوش محاسباتی)" جلد اول، چاپ پنجم، مرکز نشر دانشگاه امیر کبیر، تهران.
- [36]. Mc Culloch W. W. and Pitts W., (1943), "**A Logical Calculus of the Ideas Imminent in Nervous Activity**", Bull. Match. Biophys., 5, pp 115.
- [37] Rosenblatt F., (1958), "**The Perceptron: A Probabilistic Model for Information Storage and Organization in the brain**" , Cornel Aeronautical Lab, Psychological Review, 65, pp 386.
- [۳۸]. کیا م، (۱۳۸۷)، "شبکه های عصبی در MATLAB"، چاپ دوم، انتشارات کیان رایانه سبز.
- [۳۹]. غضنفری م، کاظمی ز، (۱۳۸۲)، "اصول و مبانی سیستم های خیره"، مرکز انتشارات دانشگاه علم و صنعت ایران.
- [۴۰]. یزدان دوست ح، (۱۳۹۰)، پایان نامه ارشد، "پیش بینی شاخص بازداری تعدادی روغن های ضروری با استفاده از روش های QSPR خطی و غیر خطی"، دانشکده علوم، دانشگاه صنعتی شاهرود.



- [41]. Mukesh D., (1996), " Applications of Neural Computing for Process Chemists", **J. Chem. Educ.**, 73, pp 518.
- [42]. Jalali- heravi M., Asadollahi- Baboli M., Shahbazikhah P., (2008), **Eur. J. Med. Chem.**, 43,pp 548.
- [43] Assael M. J., Charitidou E., Nieto de Castro C. A. and Wakeham, (1987), "The Thermal Conductivity of n-Hexane, n-Heptane, and n-Decane by the Transient Hot-Wire Method", **Int. J. Thermophys.**, 8, pp 663.
- [44] Tanaka Y., Itani Y, Kubota H. and Makita T., (1988), "Thermal Conductivity of Five Normal Alkanes in the Temperature Range 283-373 K at Pressures up to 250 MPa", **Int. J. Thermophys.**, 9, pp 331.
- [45] Menashe, J., Wakeham, W. A., (1982), "The Thermal Conductivity of n-nonane and n-undecane at Pressures up to 500 MPa in the Temperature range 35 - 90 degrees centigrade". **Phys. Chem.**, 86, pp 541.
- [46] Mustafaev R. A, (1972), "Experimental study of Thermal Conductivity of n-undecane and n-dodecane at high Temperatures and Pressures", **Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Energ.**,10, pp 77.
- [47] Mustafa M., Sage M. and Wakeham, (1982), "Thermal Conductivity of n-Tridecane at Pressures up to 500 MPa in the Temperature Range 35-75 °C", **Int. J. Thermophys.**, 3, pp 217.
- [48] Mustafaev R. A., (1972), "Experimental investigation of the Thermal Conductivity of n-tetradecane at high Temperatures and Pressures". **Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Neft Gaz.**, 10, pp 20.
- [49] Mustafaev, R. A., (1972), "Experimental study of Thermal Conductivity of pentadecane at high Temperatures and Pressures", **Deposited Doc. Viniti.**, 19, pp 1.
- [50] Mustafaev, R. A., (1973), "Thermal Conductivity of higher n-alkanes in wide

- range of Temperatures and Pressures", **Inzh. Fiz. Zh.**, 24, pp 663.
- [51] Baginskii, A. V., (1986), "Thermophysical properties of n-hexadecane and n-heptadecane in liquid state", **Teplofiz. Svoistva Ind. Veshch. Rastv.**, 60, pp 28.
- [52] Rastorguev, Yu. L., Bogatov, G. F., (1972), "Thermal Conductivity of n-heptadecane and n-octadecane at high Pressures and Temperatures", **Khim. Tekhnol. Topl. Masel.**, 17, pp 13.
- [53] Naziev, Ya. M., Aliev, M. A., (1974), "Study of Thermophysical properties of liquid n-nonadecane at various Temperatures and Pressures", **Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Neft Gaz.**, 10, pp 71.
- [54] Rastorguev, Yu. L., Bogatov, F. G., Grigor'ev, B. A., (1974), "Study of the Thermal Conductivity of the higher n-alkanes", **Khim. Tekhnol. Topl. Masel.**, 19, pp 54.
- [55] Hirsch Felder, J. O., Curtiss, C. F., Bird, R. B., (1964), "**Molecular theory of gases and liquids**", John Wiley & Sons.

## Abstract

The main aim of the present work is to development of a quantitative structure-property relationship (QSPR) method using an artificial neural network for prediction of thermal conductivity of *n*-alkanes over a wide range of temperature and pressure. Improved model for predicting this property were generated using three different methods for descriptor selection: stepwise multiple linear regression (MLR), combined data splitting-feature selection (CDFS) strategy and genetic (GA) algorithm. Then, the selected descriptors using each of these methods were used as input nodes for generating three-layer network.

The data set was divided into three data sets using principle component method: training (798point), validation (201point) and test set (216point).

After training and optimization of the ANNs parameters (weights and biases) and architecture, the performance of the optimized models was evaluated by the test set. The obtained mean square error (MSE) for test set using MLR-ANN, CDFS-ANN and GA-ANN were 1.1757, 1.0411 and 1.1079, respectively. The obtained results showed that all three methods produce excellent nonlinear models, but the model obtained by the CDFS-ANN is somewhat better.

**Keywords:** quantitative structure –property relationship (QSPR), artificial neural network (ANN), thermal conductivity ( $\lambda$ ), multiple linear regression (MLR), combined data splitting-feature selection (CDFS), genetic algorithm (GA)



Shahrood University of Technology  
Faculty of Chemistry  
M.Sc. Thesis in Physical Chemistry

**Quantitative Structure- Property Relationship study of thermal  
conductivity for n-alkanes using linear and nonlinear methods**

**Azam Izadi Yazdan Abadi**

Supervisors:

**Dr. Z. Kalantar**

Advisor:

**Dr. N. Goudarzi**

February 2013