





دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده‌ی شیمی

گروه شیمی فیزیک

عنوان:

مدلسازی خطی و غیر خطی برای پیش بینی انبساط پذیری هم‌فشار (α_p) سیالات آلی با

استفاده از استراتژی CDFS

دانشجو:

زهرا ابراهیمی

استاد راهنما:

دکتر زهرا کلانتر

استاد مشاور:

دکتر ناصر گودرزی

پایان‌نامه‌ی ارشد جهت اخذ درجه‌ی کارشناسی ارشد

بهمن ۱۳۹۲

دانشگاه صنعتی شاهرود

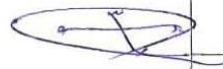
دانشکده : شیمی
گروه : شیمی فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد خانم زهرا ابراهیمی
تحت عنوان:

مدلسازی خطی و غیرخطی برای پیش بینی انبساط پذیری همفشار (α_p) سیالات آلی با استفاده از استراتژی CDFS

در تاریخ ۹۲/۱۱/۲۸ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد شیمی فیزیک مورد ارزیابی و با درجه
مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید مشاور	امضاء	اساتید راهنما
	نام و نام خانوادگی : ناصر گودرزی		نام و نام خانوادگی : زهرا کلاتر
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی :

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور
	نام و نام خانوادگی :		نام و نام خانوادگی : حسین نیکوفرد
	اسماعیل سلیمانی		نام و نام خانوادگی : زینب موسوی تکیه
			نام و نام خانوادگی :
			نام و نام خانوادگی :

بی شمارند آنان که در به شمر رسیدن این تحقیق یاری ام کردند

نهایت تشکر و قدرانی من، تقدیم آنان باد

تعهد نامه

اینجانب زهرا ابراهیمی دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی فیزیک دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه مدلسازی خطی و غیرخطی برای پیش بینی انبساط پذیری هم فشار (α_p) سیالات آلی با استفاده از استراتژی CDFS تحت راهنمایی دکتر زهرا کلانتر متعهد می‌شوم.

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

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

چکیده

هدف اصلی این تحقیق، ایجاد مدل ارتباط کمی ساختار-خاصیت (QSPR) برای پیش‌بینی ضریب انبساط‌پذیری هم‌فشار ترکیبات آلی است. شمار زیادی توصیف‌گر توسط نرم‌افزار دراگون محاسبه شدند و بهترین توصیف‌گرها از میان این توصیف‌گرهای محاسبه شده، با روش اتحاد جداسازی داده و انتخاب خاصیت (CDFS) انتخاب شد. در راهبرد CDFS داده‌ها چندین بار دسته‌بندی شد و هر بار با استفاده از روش رگرسیون مرحله‌ای (SR) انتخاب توصیف‌گر انجام گرفت. مدل‌های به دست آمده از نظر تشابه و عدم تشابه توصیف‌گرها مقایسه شدند. مدل نهایی مدلی است که توصیف‌گرهای آن در میان مدل‌های به دست آمده مشترک است. ۶ توصیف‌گر با روش CDFS انتخاب شدند. توصیف‌گرهای انتخاب شده با روش انتخاب توصیف‌گر، به همراه متغیرهای تجربی دما و فشار به عنوان ورودی برای ایجاد مدل رگرسیون خطی چندگانه (MLR)، شبکه‌ی عصبی مصنوعی (ANN) و ماشین بردار پشتیبان (SVM) ارائه شدند. عملکرد هر مدل توسط سری تست ارزیابی شد. نتایج نشان می‌دهد که ماشین بردار پشتیبان می‌تواند ارتباط انبساط‌پذیری هم‌فشار و توصیف‌گرهای ساختاری را به خوبی پیش‌بینی کند. مقدار میانگین مربعات خطا برای سری تست $8/4 \times 10^{-5}$ به دست آمد. همچنین عملکرد مدل‌های غیرخطی با مدل رگرسیون خطی چندگانه مقایسه شد. نتایج برتری مدل غیرخطی نسبت به مدل خطی را نشان می‌دهد.

کلمات کلیدی: انبساط‌پذیری هم‌فشار، اتحاد جداسازی داده و انتخاب خاصیت (CDFS)،

رگرسیون خطی چندگانه (MLR)، شبکه‌ی عصبی مصنوعی (ANN)، ماشین بردار پشتیبان (SVM)

عنوان مقالات مستخرج از این پایان نامه که در شانزدهمین کنگره‌ی شیمی ایران، دانشگاه یزد

ارائه شده است:

- ✓ **Quantitative Structure-Property Relationship for the Prediction of Isobaric Expansivity of Organic Fluids: A combined Data Splitting-Feature Selection Strategy**

- ✓ **A New Neural Network-Group Contribution Method for Estimation of Isobaric Expansivity of Organic Compounds**

فهرست مطالب

۱	فصل اول
۳	۱-۱- ضریب انبساط پذیری گرمایی هم فشار و اهمیت آن
۴	۲-۱- روش اندازه گیری ضریب انبساط پذیری هم فشار
۴	۱-۲-۱- اندازه گیری α_p با استفاده از اندازه گیری دانسیته
۵	۲-۲-۱- اندازه گیری مستقیم α_p با روش کالریمتری
۸	۳-۱- مروری بر روش های پیش بینی α_p
۸	۱-۳-۱- پیش بینی α_p با استفاده از معادله ی حالت
۱۰	۲-۳-۱- پیش بینی α_p با استفاده از شبکه ی عصبی موجک
۱۱	فصل دوم
۱۳	۱-۲- کمومتری کس
۱۴	۲-۲- رابطه ی ساختار - خاصیت و رابطه ی ساختار - فعالیت
۱۵	۱-۲-۲- فراهم کردن سری داده ها
۱۵	۲-۲-۲- محاسبه ی توصیف گر ها
۱۶	۱-۲-۲-۲- رسم ساختار مولکول ها
۱۷	۳-۲-۲- انتخاب مفیدترین زیر مجموعه از توصیف گر ها
۱۷	۱-۳-۲-۲- کاهش تعداد توصیف گر ها
۱۸	۲-۳-۲-۲- انتخاب بهترین توصیف گر ها
۱۸	الف- دسته بندی داده ها
۲۰	ب- انتخاب بهترین توصیف گر توسط راهبرد CDFS
۲۱	۴-۲-۲- ایجاد مدل QSPR
۲۱	۱-۴-۲-۲- مدلسازی به روش رگرسیون خطی چندگانه (MLR)
۲۲	۲-۴-۲-۲- شبکه ی عصبی مصنوعی (ANN)
۲۲	الف- ساختار شبکه ی عصبی مصنوعی
۲۴	ب- انواع شبکه از نظر ارتباطات بین نرونی
۲۶	ج- آموزش شبکه
۲۷	۳-۴-۲-۲- ماشین برداری پشتیبان (SVM)
۲۸	الف- طبقه بندی خطی دو کلاسه با ماشین های برداری پشتیبان
۳۲	ب- طبقه بندی خطی سیستم های دو کلاسه با ایده ی حاشیه ی نرم
۳۴	ج- طبقه بندی غیر خطی با ماشین های برداری پشتیبان
۳۵	د- بردار پشتیبانی رگرسیونگر برای سیستم های خطی
۳۸	ه- بردار پشتیبان رگرسیونگر برای سیستم های غیر خطی
۴۰	۵-۲-۲- ارزیابی قدرت پیش بینی مدل
۴۳	فصل سوم

۴۵	۱-۳-۱ مدل سازی ضریب انبساط پذیری هم فشار سیالات آلی با روش های خطی و غیر خطی
۴۵	۳-۱-۱ انتخاب سری داده ها
۴۵	۳-۱-۲ محاسبه ی توصیف گر ها
۴۸	۳-۱-۳ کاهش تعداد توصیف گر ها
۴۸	۳-۱-۴ نرمال کردن داده ها
۴۸	۳-۱-۵ دسته بندی داده ها
۵۰	۳-۱-۶ انتخاب بهترین توصیف گر با استفاده از راهبرد CDFS
۵۴	۳-۱-۷ طراحی و بهینه سازی شبکه های عصبی مصنوعی مختلف با توصیف گر های انتخابی CDFS
۶۰	۳-۱-۸ مدل سازی با روش غیر خطی ماشین های بردار پشتیبان (SVM)
۶۲	۳-۱-۹ ارزیابی مدل ها
۶۲	۳-۱-۹-۱ ارزیابی مدل ها با استفاده از نمودار برگشتی و پارامترهای آماری
۶۶	۳-۱-۹-۲ ارزیابی مدل ها با استفاده از نمودار خطای باقیمانده
۶۸	۳-۱-۹-۳ ارزیابی مدل ها با استفاده از اعتبار سنجی بیرونی
۷۱	۳-۱-۹-۴ ارزیابی مدل شبکه ی عصبی مصنوعی با استفاده از آزمون Y- تصادفی
۷۱	۳-۱-۱۰ بررسی توصیف گر های وارد شده در مدل انبساط پذیری گرمایی
۷۱	۳-۱-۱۰-۱ توصیف گر های 2D-autocorrelation
۷۳	۳-۱-۱۰-۲ توصیف گر های 3D-MORSE
۷۴	۳-۱-۱۰-۳ توصیف گر های GETAWAY
۷۵	۳-۱-۱۱ نتیجه گیری
۷۶	۳-۱-۱۲ آینده نگری
۷۷	پیوست
۱۰۷	مراجع

فهرست جدول‌ها

۴	جدول (۱-۱). ضریب انبساط‌پذیری هم‌فشار (α_p)
۳۶	جدول (۱-۲) - توابع کرنل در فضای ویژگی
۴۳	جدول (۱-۳) - گستره‌ی دما و فشار و تعداد نقطه داده‌ی استفاده شده در مدل‌سازی برای سیالات آلی مختلف، به همراه مرجع مورد استفاده برای هر یک از آنها
۵۱	جدول (۲-۳) - توصیف‌گرهای ۱۶ مدل به دست آمده
۵۱	جدول (۳-۳) - توصیف‌گرهای مولکولی انتخاب شده با راهبرد CDFS
۵۲	جدول (۴-۳) - نام و مقدار توصیف‌گرهای مولکولی انتخابی روش CDFS برای هر مولکول
۵۴	جدول (۵-۳) - مقادیر ضریب همبستگی هر توصیف‌گر با انبساط‌پذیری هم‌فشار
۵۹	جدول (۶-۳) - توابع و پارامترهای بهینه‌ی شبکه‌ی عصبی با توصیف‌گرهای حاصل از روش CDFS
۶۰	جدول (۷-۳) - توابع و پارامترهای بهینه شده‌ی شبکه‌ی عصبی با استفاده از توصیف‌گرهای CDFS
۶۱	جدول (۸-۳) - مقادیر بهینه‌سازی پارامترهای CDFS-SVM
۶۵	جدول (۹-۳) - پارامترهای آماری روش‌های CDFS-MLR، CDFS-ANN و CDFS-SVM
۶۹	جدول (۱۰-۳) - پارامترهای آماری روش‌های CDFS-MLR، CDFS-ANN و CDFS-SVM برای تست بیرونی
۷۰	جدول (۱۱-۳) - مقادیر R^2 با روش Y- تصادفی برای سری ارزیابی و سری تست روش CDFS-ANN
۷۳	جدول (۱۲-۳) - مقدار برخی توصیف‌گرهای محاسبه شده با Dragon برای بوتانول، هپتانول، نونانول و آن دکانول

فهرست شکل‌ها

- شکل (۱-۱) - نمای کلی از یک کالریومتر اندازه‌گیری انبساط‌پذیری گرمایی ۷
- شکل (۱-۲) - مراحل مدل‌سازی QSPR ۱۵
- شکل (۲-۲) - ساختار یک نرون محاسباتی ۲۴
- شکل (۳-۲) - ساختار یک شبکه‌ی سه لایه ۲۵
- شکل (۴-۲): خط جداساز بهینه با حداکثر مقدار حاشیه ۲۸
- شکل (۵-۲) - نمایش بردارهای پشتیبان روی ابرصفحه‌های موازی مرزی ۲۹
- شکل (۶-۲) - صفحه‌ی جداساز و حاشیه‌ها ۳۱
- شکل (۷-۲) - سیستم‌های خطی جدا ناپذیر با میزان خطای ϵ ۳۳
- شکل (۸-۲) - داده‌های ورودی ارجاع داده شده به فضای بالاتر ۳۴
- شکل (۹-۲) - تابع حساسیت به مقدار ϵ ۳۷
- شکل (۱۰-۲) - مدل ارائه شده توسط ماشین برداری برای سیستم غیرخطی ۳۹
- شکل (۱-۳) - پراکندگی مولکول‌ها روی نمودار PCA ۴۹
- 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 که مینیمم مقدار آن را بهتر نشان می‌دهد، بر حسب بردار مرجع برای تابع انتقال لگاریتم سیگموئید و الگوریتم آموزشی تنظیم‌بازین برای روش ۵۵
- 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 که مینیمم مقدار آن را بهتر نشان می‌دهد، بر حسب بردار مرجع برای تابع انتقال لگاریتم سیگموئید و الگوریتم آموزشی لوبنرگ-مارکوارت برای روش CDFS-ANN ۵۶
- 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 که مینیمم مقدار آن را بهتر نشان می‌دهد، بر حسب بردار مرجع برای تابع انتقال تانژانت سیگموئید و الگوریتم آموزشی لوبنرگ-مارکوارت برای روش CDFS-ANN ۵۷
- 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 که مینیمم مقدار آن را بهتر نشان می‌دهد، بر حسب بردار مرجع برای تابع انتقال تانژانت سیگموئید و الگوریتم آموزشی تنظیم‌بازین برای روش CDFS-ANN ۵۸
- شکل (۶-۳) - نمودار میانگین مربعات خطای سری ارزیابی بر حسب تغییرات مومنتوم ۵۹
- شکل (۷-۳) - نمودار برگشتی حاصل از CDFS-MLR برای (الف) سری ارزیابی، (ب) سری تست درونی ۶۳
- شکل (۸-۳) - نمودار برگشتی حاصل از CDFS-ANN برای (الف) سری ارزیابی، (ب) سری تست درونی ۶۴
- شکل (۹-۳) - نمودار برگشتی حاصل از CDFS-SVM برای سری تست درونی ۶۵
- شکل (۱۰-۳) - نمودار خطای باقیمانده بر حسب مقادیر تجربی انبساط‌پذیری گرمایی برای (الف) سری ارزیابی، (ب) سری تست درونی در مدل CDFS-MLR ۶۵
- شکل (۱۱-۳) - نمودار خطای باقیمانده بر حسب مقادیر تجربی ضریب انبساط‌پذیری گرمایی برای (الف) سری ارزیابی، (ب) سری تست درونی در مدل CDFS-ANN ۶۷
- شکل (۱۲-۳) - نمودار خطای باقیمانده بر حسب مقادیر تجربی ضریب انبساط‌پذیری گرمایی سری تست درونی در مدل CDFS-SVM ۶۸
- شکل (۱۳-۳) - نمودار برگشتی حاصل از CDFS-MLR برای سری تست بیرونی ۶۹
- شکل (۱۴-۳) - نمودار برگشتی حاصل از CDFS-ANN برای سری تست بیرونی ۷۰

فصل اول

مقدمه

۱-۱ ضریب انبساط پذیری گرمایی هم فشار^۱ و اهمیت آن

کارایی یک مایع برای استفاده در فرایندهای صنعتی، به خواص ترمودینامیکی آن وابسته است. یکی از خواص ترمودینامیکی مهم که برای توصیف یک مایع به کار می‌رود، ضریب انبساط پذیری گرمایی هم فشار می‌باشد که به اختصار به آن ضریب انبساط پذیری می‌گویند و با α_p نشان داده می‌شود. استفاده از موادی که انبساط گرمایی آن‌ها به خوبی قابل کنترل است، در زمینه‌های مختلف مثل صنایع زیست‌دارویی، نوری، مهندسی مواد و الکترونیک در حال گسترش است. به طور مثال در مواد مرکبی مثل کامپوزیت‌ها که بین اجزای آن، تماس وجود دارد، عدم تطابق انبساط پذیری آن‌ها می‌تواند منجر به تنش شود. در نتیجه داده‌های دقیق انبساط پذیری گرمایی می‌تواند به انتخاب موادی که در برابر تنش گرمایی مقاوم هستند، کمک کند. همچنین برای محیط‌هایی که دارای تغییرات دمایی شدید هستند، استفاده از موادی که دارای انبساط پذیری گرمایی ناچیز هستند، مورد نیاز است [۱].

ضریب انبساط پذیری با رابطه‌ی (۱-۱) بیان می‌شود:

$$\alpha_p = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \quad (1-1)$$

که در این رابطه، V حجم، T دما و p فشار است. دیمانسیون ضریب انبساط پذیری، عکس دما است و بر حسب یکای K^{-1} بیان می‌شود.

ضریب انبساط پذیری هم فشار، تغییر حجم نسبت به دما، در فشار ثابت را نشان می‌دهد. α_p

بزرگ به معنی تغییر حجم زیاد نمونه در برابر دماست. بعضی از مقادیر تجربی α_p در جدول (۱-۱)

درج شده‌اند [۲].

¹ Isobaric Thermal Expansivity

جدول (۱-۱). ضریب انبساط پذیری هم فشار (α_p)

$\alpha_p / 10^{-4} \text{ K}^{-1}$	ماده
۱۲/۴	بنزن
۰/۰۳۰	الماس
۰/۸۶۱	سرب
۲/۱	آب

۱-۲- روش اندازه گیری ضریب انبساط پذیری هم فشار

متداول ترین روش ها از میان روش های اندازه گیری α_p ، روشی بر اساس اندازه گیری دانسیته و نیز روش اندازه گیری مستقیم α_p با استفاده از کالریمتری است. روش اول، به اندازه گیری دانسیته نیاز دارد که همیشه، خصوصاً در فشارهای بالا امکان پذیر نیست. در روش دوم، انبساط پذیری هم فشار مستقیماً اندازه گیری می شود. به همین دلیل، وابستگی دانسیته به دما، نمی تواند باعث خطاهای احتمالی شود [۳].

۱-۲-۱- اندازه گیری α_p با استفاده از اندازه گیری دانسیته

با استفاده از دانسیته ی اندازه گیری شده (ρ) و رابطه ی زیر، حجم سیالات محاسبه می شود:

$$V = \frac{m}{\rho} \quad (2-1)$$

سپس مقدار V به دست آمده، در یک چند جمله ای بر حسب دما و فشار، برازش می یابد. پس

از آن α_p بر اساس رابطه ی (۱-۱) محاسبه می گردد.

هم چنین می توان با مشتق گیری از رابطه ی دانسیته، α_p را محاسبه کرد. با استفاده از رابطه ی

(۲-۱) و تعریف ضریب انبساط پذیری هم فشار (رابطه ی (۱-۱))، می توان عبارت α_p را به صورت زیر

نوشت:

$$\alpha_p = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \quad (3-1)$$

داده‌های حاصل از اندازه‌گیری دانسیته در یک معادله‌ی چند جمله‌ای، بر حسب دما و فشار،

برازش می‌یابد. سپس α_p با مشتق‌گیری از رابطه‌ی دانسیته، محاسبه می‌شود [۴-۶].

۲-۲-۱- اندازه‌گیری مستقیم α_p با روش کالریتری

مستقیم‌ترین روش اندازه‌گیری انبساط‌پذیری گرمایی، روش کالریتری است. اساس این روش،

اندازه‌گیری و ثبت گرمای مبادله شده، در اثر تغییر فشار است.

دیفرانسیل آنتالپی نسبت به دو متغیر p و T برای یک مول ماده، به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$dH_m(p, T) = \left(\frac{\partial H_m}{\partial p} \right)_T dp + \left(\frac{\partial H_m}{\partial T} \right)_p dT \quad (4-1)$$

همچنین طبق روابط ماکسول برای dH می‌توان نوشت:

$$dH_m(p, T) = dq + V_m dp \quad (5-1)$$

زمانی که دما ثابت باشد، معادلات (۴-۱) و (۵-۱) به صورت زیر بازآرایی می‌شوند:

$$dq = \left[\left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)_T - V_m \right] dp \quad (6-1)$$

با توجه به این که:

$$\left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)_T - V_m = \left(\frac{\partial S}{\partial p} \right)_T T = - \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p T \quad (7-1)$$

بنابراین، رابطه‌ی (۶-۱) به صورت زیر درمی‌آید:

$$dq = - \left(\frac{\partial V_m}{\partial T} \right)_p T dp \quad (8-1)$$

برای n مول از ماده‌ی خالص، در طول انقباض ایزوترم، مقدار dQ گرما مبادله می‌شود. بنابراین

رابطه‌ی (۸-۱) برای n مول ماده می‌شود:

$$dQ = -n \left(\frac{\partial V_m}{\partial T} \right)_p T dp = - \frac{V}{V_m} \left(\frac{\partial V_m}{\partial T} \right)_p T dp = - \alpha_p V T dp \quad (9-1)$$

در نتیجه

$$\alpha_p = -\frac{1}{VT} \frac{dQ}{dp} \quad (10-1)$$

در این روش، در دمای ثابت، بر سیستم فشار اعمال می‌شود و گرمای مبادله شده بین سیستم و محیط اندازه‌گیری می‌شود. برای اعمال فشار، دو شیوه‌ی متفاوت وجود دارد: روش گام به گام^۱ و روش پویشی^۲.

در روش گام به گام، یک افزایش فشار Δp اعمال می‌شود و با انتگرال‌گیری از سیگنال کالریمتری بر حسب زمان، تمام گرمای درگیر در واکنش، محاسبه می‌شود. بنابراین رابطه‌ی (۱۰-۱) به صورت زیر درمی‌آید:

$$\alpha_p = -\frac{1}{VT} \frac{Q}{\Delta p} \quad (11-1)$$

در روش پویشی، تغییرات فشار نسبت به زمان با شیب $\frac{dp}{dt}$ اعمال می‌شود. شار گرمایی ثابت شده و ضریب انبساط‌پذیری گرمایی از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$\alpha_p = -\frac{1}{VT} \frac{dQ/dt}{dp/dt} \quad (12-1)$$

در شکل (۱-۱) نمایی از یک کالریمتر اندازه‌گیری انبساط‌پذیری دیده می‌شود. سیلندرهای اندازه‌گیری در حمام آب معلق شده یا توسط یک پوشش احاطه می‌شود. هر سیلندر شامل یک جفت سل اندازه‌گیری است. یک سل حاوی نمونه و سل دیگر خالی است که به عنوان مرجع دمایی در نظر گرفته می‌شود. تنها، سل حاوی نمونه به منبع فشار متصل است. نمونه وارد سل نمونه، در کالریمتر می‌شود. وقتی در دمای موردنظر، تعادل گرمایی حاصل شد، تغییر فشار اعمال می‌شود. در نتیجه‌ی این تغییر فشار، شار گرمایی رخ می‌دهد که توسط جریان‌سنج^۳ نزدیک سل حاوی نمونه ثبت می‌گردد. با اندازه‌گیری گرما و با مشخص بودن مقدار دما و حجم نمونه، مقدار ضریب انبساط‌پذیری از رابطه‌ی (۱۰-۱) محاسبه می‌گردد.

¹ Stepwise
² Scanning
³ Flowmeter

با محاسبات مشابه، سهم گرمایی خود سل نیز از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

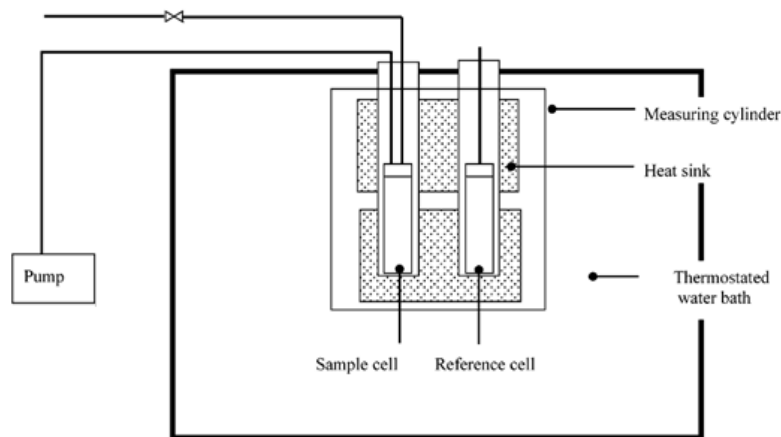
$$dQ_v = -\alpha_{p,v} V T dp \quad (13-1)$$

در نهایت، گرمای کلی مبادله شده در اثر تغییر فشار می‌شود:

$$dQ = -\alpha_p V T dp - dQ_v = -(\alpha_p - \alpha_{p,v}) V T dp \quad (14-1)$$

بنابراین [۷-۹]:

$$\alpha_p = \alpha_{p,v} - \frac{1}{VT} \frac{dQ}{dp} \quad (15-1)$$



شکل (۱-۱) نمای کلی از یک کالریمتر اندازه‌گیری انبساط‌پذیری گرمایی

برای دستیابی به نتایج بهتر می‌توان از آب و هگزان برای کالیبراسیون نیز استفاده کرد. در

صورتی که سل با آب پر شود، شار گرمایی به وجود آمده در اثر تغییرات فشار به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$f^w = \left(\frac{dQ^w}{dt} + \frac{dQ^c}{dt} \right) (1 - \gamma) \quad (16-1)$$

که w اشاره به آب، و c اشاره به سل دارد. اتلاف حرارتی جداره‌ها نیز با γ نشان داده شده است. در

صورتی که سل با هگزان پر شود، رابطه‌ای مشابه با رابطه‌ی (۱۶-۱) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$f^h = \left(\frac{dQ^h}{dt} + \frac{dQ^c}{dt} \right) (1 - \gamma) \quad (17-1)$$

که در آن h نشان‌دهنده‌ی هگزان است. برای مایع مجهول x نیز داریم:

$$f^x = \left(\frac{dQ^x}{dt} + \frac{dQ^c}{dt} \right) (1-\gamma) \quad (18-1)$$

با ادغام رابطه‌ی (۱۲-۱) با روابط (۱۶-۱) تا (۱۸-۱) و قرار دادن $\mu = \frac{dp}{dt}$ داریم:

$$f^w = \mu \left(T V \alpha_p^w + \frac{dQ^c}{dt} \right) (1-\gamma) \quad (19-1)$$

$$f^h = \mu \left(T V \alpha_p^h + \frac{dQ^c}{dt} \right) (1-\gamma) \quad (20-1)$$

$$f^x = \mu \left(T V \alpha_p^x + \frac{dQ^c}{dt} \right) (1-\gamma) \quad (21-1)$$

با ادغام و بازآرایی معادلات (۱۹-۱) تا (۲۱-۱) رابطه‌ی (۲۲-۱) حاصل می‌گردد:

$$\alpha_p^x = \alpha_p^w + \frac{f^w - f^x}{f^w - f^h} (\alpha_p^h - \alpha_p^w) \quad (22-1)$$

طبق رابطه‌ی (۲۲-۱)، مقدار انبساط‌پذیری گرمایی یک مایع مجهول، می‌تواند از دو آزمایش

کالیبراسیون و از مقدار α_p دو مایع استاندارد به دست آید [۹].

۱-۳-۳- مروری بر روش‌های پیش‌بینی α_p

۱-۳-۳-۱- پیش‌بینی α_p با استفاده از معادله‌ی حالت

در سال ۲۰۰۵، پارسافر و کلانتر، با ادغام معادله‌ی حالت^۱ LIR و تئوری سهم گروه، معادله‌ی

حالت جدیدی را برای پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی برخی سیالات آلی چگال ارائه دادند. معادله‌ی

ارائه شده توسط این گروه که معادله‌ی حالت^۲ MLIR نام گرفت، به صورت زیر است:

$$\frac{\left(\frac{Z}{n} - 1 \right)}{\rho^2} = A' + B' \rho^2 \quad (23-1)$$

¹ Linear Isotherm Regularity (LIR)

² Modified Linear Isotherm Regularity (MLIR)

که در آن $A' = A_m n^2$ ، $B' = B_m n^2$ ، $Z = \frac{P}{\rho RT}$ فاکتور تراکم‌پذیری، n تعداد گروه‌های کربنی، A_m

و B_m پارامترهای معادله‌ی حالت به ازای یک گروه کربنی هستند. با داشتن معادله‌ی حالت و استخراج رابطه‌ی فشار از آن، به صورت زیر [۱۰]:

$$p = n\rho RT + n^3 \rho^3 RT A_m + n^5 \rho^5 RT B_m \quad (24-1)$$

می‌توان α_p را از رابطه‌ی زیر به دست آورد:

$$\alpha_p = \frac{n\rho R + n^3 \rho^3 R (A_m + A'_m T) + n^5 \rho^5 R (B_m + B'_m T)}{n\rho RT + 3n^3 \rho^3 RT A_m + 5n^5 \rho^5 RT B_m} \quad (25-1)$$

آنها با استفاده از رابطه‌ی فوق، α_p ی آلکان‌های خطی مختلف را بر حسب دما در فشار اتمسفر پیش‌بینی کردند که مقادیر محاسبه شده در توافق خوبی با مقادیر تجربی بودند.

گوهرشادی و همکارانش نیز در سال ۲۰۰۵، معادله‌ی حالت جدیدی به نام GMAEoS¹ برای

پیش‌بینی دانسیته و سایر خواص ترمودینامیکی سیالات قطبی و غیر قطبی ارائه کردند [۱۱و۱۲].

عبارت ریاضی این معادله به صورت زیر داده شده است:

$$(2Z - 1)V_m^3 = A(T) + B(T)\rho \quad (26-1)$$

که در آن

$$A(T) = A_0 - \frac{2A_1}{RT} + \frac{2A_2 \ln T}{R} \quad (27-1)$$

$$B(T) = B_0 - \frac{2B_1}{RT} + \frac{2B_2 \ln T}{R} \quad (28-1)$$

و $Z = \frac{P}{\rho RT}$ فاکتور تراکم‌پذیری و A_0 تا A_2 ، B_0 تا B_2 ثابت هستند. با بازنویسی معادله‌ی (۲۶-۱)

به صورت زیر

$$p = \left(\frac{B_0 RT}{2} - B_1 + T B_2 \ln T \right) \rho^5 + \left(\frac{A_0 RT}{2} - A_1 + A_2 T \ln T \right) \rho^4 + \frac{\rho RT}{2} \quad (29-1)$$

عبارت ضریب انبساط‌پذیری به شکل رابطه‌ی (۳۰-۱) استخراج شده است:

$$(30-1)$$

¹ Goharshadi – Morsali – Abbaspour Equation of State (GMA-EoS)

$$\alpha_p = \frac{(2B_1 + 2B_2 T) \rho^5 + (2A_1 + 2A_2 T) \rho^4 + 2p}{5\rho^5 (RT^2 B_0 - 2B_1 T + 2T^2 B_2 \ln T) + 4\rho^4 (A_0 RT^2 - 2A_1 T + 2A_2 T^2 \ln T) + RT^2 \rho}$$

با استفاده از معادله‌ی حالت GMA و رابطه‌ی (۳۰-۱)، α_p برای هیدروفلوئورواترها [۱۱]، چند گلیکول اتر [۱۳] و مایعاتی مثل آرگون، کریپتون، زنون، متانول، اتیلن و تتراهیدروفوران محاسبه شده است.

۱-۳-۲- پیش‌بینی α_p با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک

در سال ۲۰۰۵ پارساfer و کلانتر با استفاده از مدل شبکه عصبی موجک α_p را برای آلکان‌های خطی مختلف پیش‌بینی کردند [۱۴]. در این مدل ۳ ورودی برای طراحی شبکه به کار رفته است که شامل دما، تعداد گروه متیل و تعداد گروه متیلن است. پس از آموزش شبکه و تعیین پارامترهای بهینه‌ی آن، از شبکه‌ی بهینه شده برای پیش‌بینی α_p ی آلکان‌های خطی استفاده شده است. متوسط خطای نسبی در پیش‌بینی α_p ی آلکان‌های خطی بر حسب دما در فشار اتمسفر حدود ۱٪ گزارش شده است.

فصل دوم

کمومتریکس

۲-۱- کمومتریکس

واژه‌ی کمومتریکس توسط اسوانت ولد^۱ سوئدی و بروس کووالسکی^۲ آمریکایی در سال ۱۹۷۲ مطرح شد [۱۵]. استوانت ولد، واژه‌ی «کمومتریکس» را به این منظور به کار برد: «استخراج اطلاعات شیمیایی، از داده‌های تولید شده در آزمایش‌های شیمیایی». این امر، نیازمند به کارگیری آنالیز عددی، آمار و به طور کلی، ریاضیات کاربردی است. در کمومتریکس، مسئله‌ی اصلی، بیان ساختار شیمیایی به صورت عبارت ریاضی است. بنابراین، کمومتریکس، از شیمی، جداشدنی نیست و حتی می‌تواند به عنوان شاخه‌ای جداگانه از شیمی مطرح شود و باید به صورت بخش جداشدنی از شیمی باقی بماند [۱۶].

در سال ۱۹۷۴، تاسیس جامعه‌ی بین‌المللی کمومتریکس^۳، باعث گسترش کمومتریکس شد [۱۵].

بهترین تعریف کمومتریکس به صورت زیر است:

شاخه‌ای از شیمی که از روش‌های آماری و ریاضی به منظور طراحی یا انتخاب فرایندهای بهینه و فراهم کردن بیشترین اطلاعات شیمیایی با آنالیز داده‌های شیمیایی استفاده می‌کند. رشد کمومتریکس شدیداً، به استفاده از کامپیوترها در شیمی بستگی دارد. با در دسترس قرار گرفتن کامپیوترهای شخصی در شروع ۱۹۸۰، دوره‌ی جدیدی در پردازش و تفسیر اطلاعات آغاز شد و پیشرفت‌های حاصل در کامپیوترها و نرم‌افزارها، سهولت و پیشرفت در کمومتریکس را در پی داشت [۱۵].

¹ Svante Wold

² Bruce R Kowalski

³ International Chemometrics Society

۲-۲- رابطه‌ی ساختار - خاصیت^۱ و رابطه‌ی ساختار - فعالیت^۲

ساختار شیمیایی و خواص مواد، نه فقط برای شیمی‌دانان، بلکه برای همه‌ی دانشمندان بسیار دارای اهمیت است. زیرا ساختار شیمیایی می‌تواند بر خواص فیزیکو-شیمیایی مولکول‌ها تاثیر بگذارد [۱۷]. یکی از شاخه‌های کمومتریکس که تاثیر ساختار مولکول بر خواص آن را، بررسی می‌کند، روش‌های ارتباط کمی ساختار- فعالیت (QSAR) و ساختار- خاصیت (QSPR) است.

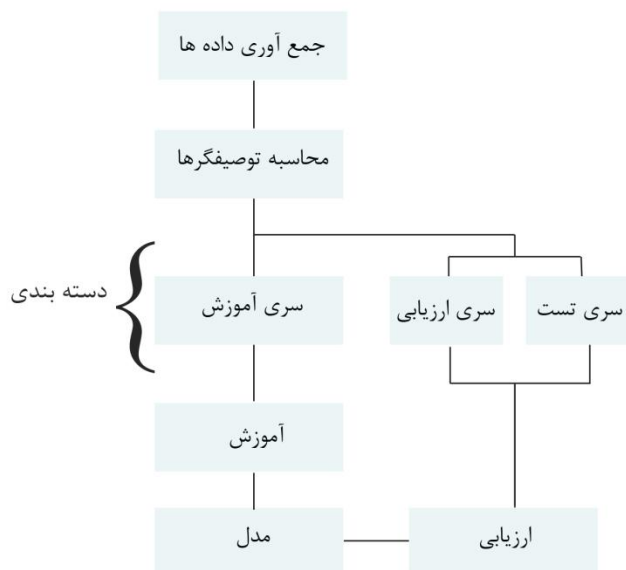
رابطه‌ی ساختار- خاصیت/ساختار-فعالیت، روش مناسبی برای توصیف سیستم‌های پیچیده است. هدف اصلی QSPR برقراری ارتباط بین خواص فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی یک ماده با توصیف‌کننده‌های مولکولی است. این توصیف‌کننده‌های مولکولی از ساختار مولکولی محاسبه می‌گردند [۱۷]. این مدل‌ها چنین فرض می‌کنند که ساختارهای مشابه، فعالیت‌های مشابه دارند بنابراین، امکان پیش‌بینی فعالیت از روی ساختار وجود دارد [۱۸]. راهبرد اصلی QSPR یافتن بهترین رابطه‌ی کمی است که می‌تواند برای پیش‌بینی خواص، استفاده شود. QSPR با پیشرفت نرم‌افزارها بیشتر مورد توجه قرار گرفته است، زیرا به شیمی‌دانان اجازه داد که اثر ساختار مولکولی بر خاصیت را درک کنند و ساختار بهینه را پیش‌بینی و طراحی کنند [۱۷].

مراحل اصلی مدلسازی QSPR و ارزیابی شامل مراحل زیر است:

- فراهم کردن سری داده‌ها
 - محاسبه‌ی توصیف‌گرها
 - انتخاب مفیدترین زیرمجموعه از توصیف‌گرها
 - ایجاد مدل QSPR
 - ارزیابی مدل
 - پیش‌بینی خاصیت مورد نظر
- این مراحل در شکل (۲-۱) مشاهده می‌شود.

¹ Quantitative Structure Property Relationships (QSPR)

² Quantitative Structure Activity Relationships (QSAR)



شکل (۱-۲) مراحل مدل سازی QSPR

۱-۲-۲-۲-۱- فراهم کردن سری داده‌ها

مدل QSPR با جمع‌آوری داده‌ها برای خاصیت موردنظر شروع می‌شود، که البته دقت داده‌ها بسیار مهم است. هر چه داده‌ها معتبرتر و سری داده‌ها وسیع‌تر باشد، مدل به دست آمده کارایی بیشتری دارد [۱۸].

۲-۲-۲-۲-۲- محاسبه‌ی توصیف‌گرها

توصیف‌گرها مقادیر عددی هستند که ویژگی‌های مختلف ساختاری و الکترونی مولکول‌ها را به طور کمی نشان می‌دهند. به عبارت دیگر هر توصیف‌گر، بیانگر خصوصیت ویژه‌ای از مولکول است که ممکن است بر خاصیت مورد نظر مؤثر باشد. این توصیف‌گرها به دو گروه کلی توصیف‌گرهای تجربی و تئوری تقسیم‌بندی می‌شوند. توصیف‌گرهای تجربی بر اساس اندازه‌گیری‌های تجربی به دست می‌آیند. در حالی که توصیف‌گرهای تئوری با استفاده از ساختار مولکول و بدون نیاز به داده‌های تجربی محاسبه می‌شوند و برای هر مولکول واقعی و یا فرضی که هنوز سنتز نشده‌اند، در دسترس می‌باشند.

۲-۲-۱- رسم ساختار مولکول‌ها

اگر ساختار مولکول‌ها به صورت صورت‌بندی با حداقل انرژی نباشد، مقادیر غیرصحیحی برای توصیف‌گرها ایجاد می‌شود. بنابراین باید ساختار هندسی ترکیب بهینه شود؛ یعنی مختصاتی از ساختار ترکیب به دست آید که در آن مختصات، انرژی مولکول حداقل باشد. این کار توسط شیمی محاسباتی انجام می‌شود. روش‌هایی که در شیمی محاسباتی برای بهینه‌سازی ساختار مولکول مورد استفاده قرار می‌گیرند روش مکانیک مولکولی و روش مکانیک کوانتومی است.

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

در مکانیک کوانتومی از معادله‌ی شرودینگر برای محاسبه‌ی انرژی مولکول استفاده می‌شود و نسبت به روش مکانیک مولکولی دارای صحت بیشتری است. زیرا اثرات الکترونی اعمال شده روی مولکول را نیز در محاسبات وارد می‌کند. از جمله روش‌های کوانتومی می‌توان به روش‌های آغازین و روش‌های نیمه تجربی اشاره کرد.

در روش‌های آغازین از هیچ داده‌ی تجربی استفاده نمی‌شود، بلکه ثابت‌هایی مانند جرم الکترون، ثابت پلانک، ثابت سرعت و بار الکترون به کار گرفته می‌شوند و محاسبه‌ی انرژی مولکول از حل معادله‌ی شرودینگر با استفاده از یک سری تقریب به دست می‌آید. در این روش چون کل الکترون‌ها را در محاسبات وارد می‌کنند، محاسبات پیچیده‌تر شده و به وقت بیشتری نیاز است.

در روش‌های نیمه تجربی، برخلاف روش‌های آغازین، فقط الکترون‌های لایه‌ی ظرفیت را در محاسبات وارد می‌کنند. در نتیجه زمان محاسبات در این روش‌ها کوتاه‌تر از روش‌های آغازین است و

می‌تواند برای مولکول‌های بزرگتر به کار رود. [۱۹]. روش‌های نیمه تجربی مختلفی وجود دارد که در این تحقیق، ساختار مولکول پس از رسم شدن در نرم‌افزار Hyperchem، با استفاده از روش نیمه تجربی کوانتومی AM1^۱ در این نرم‌افزار بهینه گردید.

۲-۳- انتخاب مفیدترین زیر مجموعه از توصیف‌گرها

ساختار خروجی نرم‌افزار Hyperchem به عنوان ورودی به نرم‌افزار Dragon ارائه می‌شود. در این نرم‌افزار برای هر مولکول ۱۴۸۱ توصیف‌گر محاسبه می‌شود. در مرحله‌ی بعد باید یک سری از توصیف‌گرها حذف گردند، سپس از میان توصیف‌گرهای باقیمانده، تعدادی توصیف‌گر برای ساختن مدل انتخاب گردد.

۲-۳-۱- کاهش تعداد توصیف‌گرها

وجود تعدادی توصیف‌گر بی‌اثر و نیز توصیف‌گرهایی که همبستگی بالا دارند، در مجموعه‌ای از توصیف‌گرها، قابل انتظار است. زمانی که توصیف‌گرها کمترین همبستگی را با هم داشته باشند مدل مفیدتری حاصل می‌شود [۱۸]. بنابراین ابتدا باید توصیف‌گرهای بی‌اثر کنار گذاشته شوند. این توصیف‌گرها که کمترین اطلاعات را در مورد خواص شیمیایی و بیولوژیکی دارند آن‌هایی هستند که برای تمام مولکول‌ها، مقدار ثابت، تقریباً ثابت و یا صفر داشته باشند. هم‌چنین توصیف‌گرهایی که کمتر از ۱۰٪ مقادیر غیر صفر و یا بیش از ۹۰٪ مقادیر یکسان داشته باشند، کنار گذاشته می‌شوند. در مرحله‌ی بعد باید توصیف‌گرهایی که همبستگی بالایی دارند، حذف گردند. به این منظور مقدار ضریب همبستگی^۲ (r) برای توصیف‌گرها، محاسبه شده و توصیف‌گرهایی که مقدار r آن‌ها بیش

^۱ Austin Model 1

^۲ Correlation Coefficients

از ۰/۹ باشد مشخص می‌شود. آنگاه از میان آن‌ها توصیف‌گری که کمترین همبستگی را با خاصیت موردنظر دارد حذف می‌گردند [۱۹].

پس از حذف توصیف‌گرهای بی‌اثر و توصیف‌گرهای با همبستگی بالا، با به کارگیری روش‌های انتخاب توصیف‌گر می‌توان توصیف‌گرهای بهینه را از میان توصیف‌گرهای باقیمانده انتخاب کرد.

۲-۲-۳-۲- انتخاب بهترین توصیف‌گرها

با حذف توصیف‌گرهای بی‌اثر و توصیف‌گرهای با همبستگی بالا که در مرحله‌ی قبل انجام شد، تعداد توصیف‌گرها کاهش یافته است، اما هنوز تعداد آن‌ها برای ساختن یک مدل مناسب، زیاد است. بنابراین با به کارگیری روش‌های انتخاب توصیف‌گر، توصیف‌گرهایی که بیشترین تاثیر را در مقدار خاصیت موردنظر دارند، از میان توصیف‌گرهای باقی‌مانده انتخاب خواهند شد. در این تحقیق از روش اتحاد جداسازی داده و انتخاب خاصیت (CDFS)^۱ استفاده شده است. پیش از انتخاب بهترین توصیف‌گرها با روش CDFS، تمامی داده‌ها باید دسته‌بندی گردد. بنابراین ابتدا، روش دسته‌بندی داده‌ها و سپس روش انتخاب توصیف‌گر شرح داده خواهد شد.

الف - دسته‌بندی داده‌ها

سری داده‌ها باید به سه زیرمجموعه تقسیم شوند. اولین زیرمجموعه، سری آموزش نام دارد که رگرسیون مرحله‌ای^۲ بر روی آن انجام شده تا مدل‌های مختلفی به دست آیند. دومین زیرمجموعه سری ارزیابی است که مدل‌های به دست آمده از سری آموزش توسط آن ارزیابی شده و به این ترتیب توصیف‌گرهای بهینه برای ساخت مدل خطی و غیرخطی تعیین می‌شوند. زیرمجموعه‌ی سوم سری

1 Combined Data Splitting-Feature Selection Strategy

2 Stepwise Regression

تست یا آزمایش نام دارد که در طول فرایند مدل‌سازی کاربرد نداشته و از آن برای مقایسه‌ی مدل‌های متفاوت استفاده می‌شود [۲۰].

دسته‌بندی داده‌ها می‌تواند به دو صورت تصادفی و دسته‌بندی با روش تحلیل مولفه‌های اساسی انجام گیرد. هدف اصلی تحلیل مولفه‌های اساسی^۱ (PCA)، کاهش بُعد تعداد زیادی از متغیرهای وابسته به هم است، در حالی که تنوع موجود در سری داده‌ها حفظ خواهد شد. این امر با تبدیل مولفه‌های اساسی به یک سری جدید از متغیرها که به هم وابسته نیستند، امکان‌پذیر است [۲۱].

در PCA، توصیف‌گرها به یک سیستم مختصات جدید منتقل می‌شوند به طوری که اولین مولفه‌ی اساسی استخراج شده بیشترین مقدار پراکندگی داده‌ها را در کل مجموعه‌ی داده‌ها در نظر می‌گیرد. این امر بدان معنی است که اولین مولفه، حداقل با تعدادی از متغیرها همبسته است. دومین مولفه‌ی 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 [۲۲]. به همین دلیل، پس از محاسبه‌ی مولفه‌های اساسی، یک نمودار رسم می‌شود که محورهای آن مولفه‌ی اول و مولفه‌ی دوم هستند. نقاط محیطی این نمودار، به عنوان نقاط سری آموزش انتخاب می‌شوند. نقاط سری ارزیابی و تست از میان نقاط باقیمانده گزینش می‌شود.

^۱ Principal Component Analysis

ب- انتخاب بهترین توصیف‌گر توسط راهبرد CDFS

همان طور که در بخش ۲-۲-۳-۲-الف گفته شد، برای ایجاد یک مدل QSPR سری داده‌ها باید دسته‌بندی شود و بر اساس این دسته‌بندی بهترین توصیف‌گرها انتخاب شود. تمام مراحل ساخت مدل، خصوصاً فرایند انتخاب بهترین توصیف‌گرها، با استفاده از این دسته‌بندی انجام می‌شود بنابراین، عملکرد مدل نهایی شدیداً به دسته‌بندی اولیه داده‌ها وابسته است. روش معمول برای انتخاب توصیف‌گرها روش رگرسیون مرحله‌ای است. در روش رگرسیون مرحله‌ای تعدادی مدل خطی ساخته می‌شود که متغیرهای آن با روش مرحله‌ای^۱ وارد این مدل‌ها شده است. در روش مرحله‌ای، 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 صورتی که مدل از نظر آماری بی‌معنا باشد، متغیر به کار رفته در آن مدل حذف می‌شود. سپس مدل سه متغیری ساخته می‌شود و دوباره پارامترهای آماری آن مورد بررسی قرار می‌گیرد. این کار تا جایی ادامه می‌یابد که تعداد توصیف‌گرهای مناسب انتخاب شوند. پس از محاسبه‌ی پارامترهای آماری هر مدل، مدل بهینه انتخاب می‌گردد. توصیف‌گرهای این مدل بهینه، به عنوان بهترین توصیف‌گرها، در مراحل بعدی مورد استفاده قرار می‌گیرند. اما این روش، گزینه‌ی مناسبی برای انتخاب متغیرها نیست. زیرا مدل‌های ارائه شده با این روش، مدل‌های تصادفی و شانسی است. این پدیده خصوصاً زمانی رخ می‌دهد که نسبت تعداد نمونه‌ها (یا مولکول‌ها) به تعداد متغیرهای اصلی (یا توصیف‌گرها) بسیار کم باشد [۲۳ و ۲۴].

برای رفع این مشکل و دستیابی به مدلی که مستقل از تاثیر نحوه‌ی دسته‌بندی داده‌ها باشد، روش جدیدی با نام راهبرد CDFS ارائه شده است. در این روش، قبل از آغاز کار ابتدا یک سری از نقاط به عنوان سری تست کنار گذاشته می‌شوند. داده‌های باقی‌مانده چندین بار، و به صورت تصادفی به دو دسته‌ی ارزیابی و آموزش تقسیم‌بندی می‌شود. برای هر دسته‌بندی باید تمام مراحل مدل‌سازی انجام شده و بهترین مدل برای آن دسته تعیین گردد. بنابراین اگر تعداد دفعات دسته‌بندی داده‌ها n

¹ Stepwise Method

باشد، در نهایت n مدل بهینه به دست می‌آید. سپس توصیف‌گرهای تمام مدل‌های بهینه با هم مقایسه می‌شوند. توصیف‌گرهایی که در بیش از ۵۰٪ مدل‌ها تکرار شده‌اند به عنوان بهترین توصیف‌گرها انتخاب شده و برای مدل‌سازی به روش خطی یا غیر خطی استفاده می‌شوند.

۲-۲-۴- ایجاد مدل QSPR

هدف اصلی مدل‌های QSPR این است که بین توصیف‌گرهای مولکولی یک ترکیب و خواص فیزیکی یا شیمیایی آن، یک رابطه‌ی کمی برقرار کند. این رابطه‌ی ریاضی می‌تواند با استفاده از روش‌های خطی مثل رگرسیون خطی چندگانه و یا روش‌های غیرخطی مثل شبکه‌ی عصبی انجام گیرد. [۲۵]. در این پایان‌نامه از روش رگرسیون خطی چندگانه^۱ (MLR)، شبکه‌ی عصبی مصنوعی^۲ (ANN) و ماشین بردار پشتیبان^۳ (SVM) برای مدل‌سازی استفاده شده است. لذا در ادامه این روش‌ها توضیح داده خواهد شد.

۲-۲-۴-۱- مدل‌سازی به روش رگرسیون خطی چندگانه (MLR)

رگرسیون خطی، یکی از روش‌های رایج برای انتخاب توصیف‌گر و نیز مدل‌سازی، در مطالعات QSPR/QSAR است. در مدل رگرسیون خطی ساده، خاصیت مورد نظر Y به یک خاصیت مولکولی X وابسته است. رگرسیون خطی یک پارامتری، به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X \quad (1-2)$$

که β_0 مقدار ثابت است.

خاصیت Y ممکن است که به صورت خطی با چندین توصیف‌گر مولکولی بستگی داشته باشد.

در این صورت رگرسیون خطی چندگانه به صورت زیر نوشته می‌شود:

¹ Multiple Liner Regression

² Artificial Neural Network

³ Support Vector Machine

$$Y = \beta_0 + \beta_1 X_1 + \beta_2 X_2 + \beta_3 X_3 + \dots + \beta_k X_k \quad (2-2)$$

که در آن β_1 تا β_k ، ضرایب هم‌ارز توصیف‌گرهای X_1 تا X_k هستند. مقدار ضرایب، مقدار اثر توصیف‌گر هم‌ارز خود را بر خاصیت مورد نظر آشکار می‌سازد. ضریب مثبت نشان‌دهنده‌ی آن است که توصیف‌گر مولکولی بر خاصیت مورد نظر اثر مثبت دارد در حالی که ضریب منفی نشان‌دهنده‌ی سهم منفی توصیف‌گر است [۱۸ و ۲۵].

۲-۲-۴-۲- شبکه‌ی عصبی مصنوعی (ANN)

شبکه‌ی عصبی مصنوعی (ANN) الهام گرفته از ساختار، فرایند پردازش و روش آموزش یک مغز بیولوژیک است و تلاش می‌کند که شبکه‌ی عصبی زیستی را تقلید کند. در شبکه‌ی عصبی، عناصر پردازش مشابه سلول زیستی می‌باشند و بین آن‌ها اتصالات وزن‌دار شده موجود است [۱۸]. برای ساختن اکثر مدل‌های ANN باید داده‌های ورودی و خروجی موجود باشد. در علم آمار، داده‌های ورودی، متغیرهای مستقل و داده‌های خروجی متغیر وابسته نامیده می‌شود [۲۶]. در ادامه توضیحات مختصری در مورد شبکه‌ی عصبی مصنوعی ارائه شده است.

الف- ساختار شبکه‌ی عصبی مصنوعی

مهم‌ترین جزء تشکیل‌دهنده‌ی یک شبکه‌ی عصبی، نرون می‌باشد. نرون یک واحد محاسباتی- پردازشی است که در حقیقت مدل ساده شده‌ای از نرون طبیعی است. نرون از تعدادی ورودی، یک خروجی، وزن‌های مربوط به ایجاد سیگنال تحریک و تابع تحریک تشکیل شده است. ارتباط بین خروجی و سیگنال تحریک در قسمتی به نام تابع تحریک به وجود می‌آید. بنابراین یک نرون از دو بخش تشکیل شده است: بخش اول وظیفه‌ی دریافت ورودی‌ها، وزن‌دهی آن‌ها و محاسبه‌ی مجموع آن‌ها به عنوان سیگنال تحریک را به عهده دارد و بخش دوم وظیفه‌ی اعمال تابع تحریک روی

سیگنال تحریک و ساختن پیام خروجی نرون به لایه‌ی بعد و یا خروجی شبکه را به عهده دارد. شکل (۲-۲) ساختمان یک نرون محاسباتی را نشان می‌دهد.

علاوه بر تمام ورودی‌های وزن‌دار، ورودی دیگری نیز در نظر گرفته شده و آن عدد یک است. این عدد یک، در پیش‌قدر^۱ ضرب شده و با حاصل ضرب ورودی‌ها در وزن‌ها جمع می‌شود تا ورودی خالص را ایجاد کند.

$$n = \mathbf{Wp} + b = w_{1,1}p_1 + w_{1,2}p_2 + \dots + w_{1,R}p_R + b \quad (۳-۲)$$

سپس تابع انتقال روی این ورودی خالص n اثر می‌کند و خروجی نرون را ایجاد می‌کند.

$$a = f(n) = f(\mathbf{Wp} + b) \quad (۴-۲)$$

این پیش‌قدر شبیه یک وزن است با این تفاوت که روی ورودی ثابت یک عمل می‌کند و مزیت آن افزودن یک متغیر اضافی به شبکه است. از این رو، شبکه‌ای که پیش‌قدر دارد قوی‌تر از شبکه‌ی فاقد پیش‌قدر می‌باشد. به علاوه، یک نرون بدون پیش‌قدر همیشه در اثر ورودی صفر، خروجی را صفر می‌دهد که این حالت مطلوب نیست و با اعمال پیش‌قدر برطرف می‌شود.

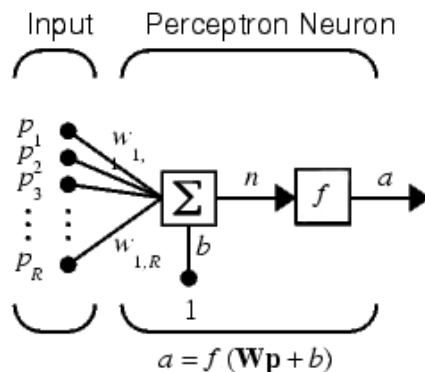
توابع انتقال به کار رفته در شبکه‌های عصبی می‌توانند نسبت به n خطی و یا غیرخطی باشند. البته برای مقاصد مختلف؛ توابع انتقال متفاوت به کار می‌روند. بعضی از این توابع دارای خروجی‌های منطقی (۰ و ۱) و یا (۱ و -۱) و برخی دیگر خروجی پله‌ای دارند. بعضی دیگر نیز خروجی پیوسته‌ای در یک محدوده‌ی مشخص دارند. در اکثر شبکه‌های مصنوعی بیشتر از توابع انتقال پیوسته استفاده می‌شود تا از توابع گسسته. سه مورد از معروف‌ترین توابع انتقال عبارتند از: تابع انتقال آستانه‌ای حدی^۲، تابع انتقال خطی^۳ و تابع انتقال سیگموئید^۴.

^۱ Bias

^۲ Hard Limit Transfer Function

^۳ Linear Transfer Function

^۴ Log-Sigmoid Transfer Function



شکل (۲-۲) - ساختار یک نرون محاسباتی

در اکثر موارد، یک نرون تنها، برای حل مسائل کافی نیست. به همین دلیل از تعداد زیادی نرون استفاده می‌شود که به موازات هم کار می‌کنند. به این نرون‌های موازی، یک لایه می‌گویند. در حالت کلی در شبکه‌های عصبی سه نوع لایه‌ی نرونی وجود دارد: لایه‌ی ورودی، لایه‌های پنهان و لایه‌ی خروجی. لایه‌ی ورودی، وظیفه‌ی دریافت اطلاعات را دارد. لایه‌ی خروجی، خروجی شبکه را نشان می‌دهد. سایر لایه‌هایی که بین لایه‌ی ورودی و لایه‌ی خروجی قرار دارند، لایه‌های پنهان نامیده می‌شوند. شکل (۲-۳)، یک شبکه‌ی سه لایه مشاهده می‌شود.

ب- انواع شبکه از نظر ارتباطات بین نرونی

شبکه‌های عصبی مصنوعی بر اساس شیوه‌ی پردازش اطلاعات در آن‌ها، به دو دسته‌ی کلی تقسیم می‌شوند: شبکه‌های پیش‌خور^۱ و شبکه‌های پس‌خور^۲.

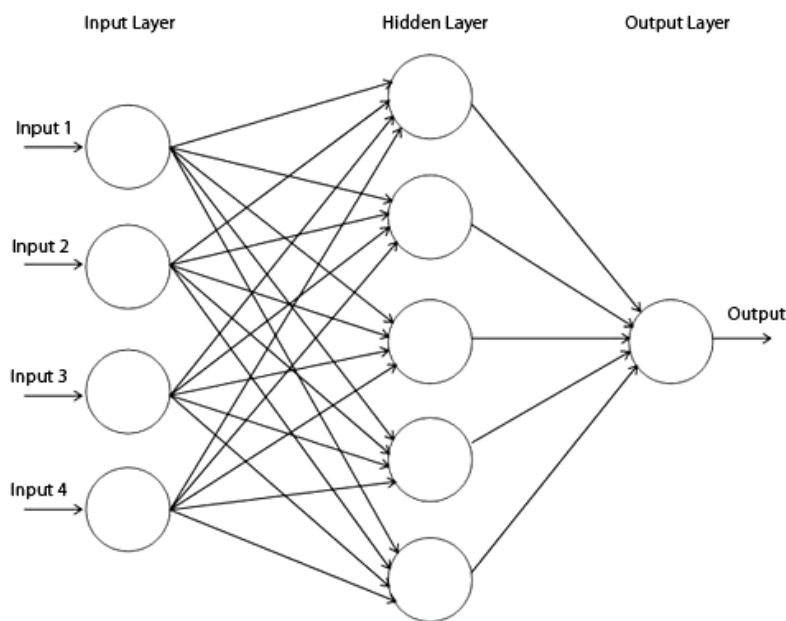
در شبکه‌های پیش‌خور، هر نرون در هر لایه به کلیه‌ی نرون‌های لایه‌ی مجاور و بعدی متصل می‌شود اما هیچ سیگنالی از نرون به خودش و یا به نرون‌های لایه‌ی قبلی برنمی‌گردد. همچنین برش اتصالات بین نرون‌ها در طول لایه‌ها مجاز نمی‌باشد. بنابراین در این شبکه‌ها، خروجی هر نرون چه به

¹ Feed Forward

² Feed Back

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

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



شکل (۲-۳) - ساختار یک شبکه‌ی سه لایه

ج - آموزش شبکه

شبکه‌های عصبی مصنوعی می‌توانند آموزش ببینند و یاد بگیرند. به طور کلی دو نوع یادگیری برای شبکه‌ها وجود دارد: آموزش با ناظر^۱ و آموزش بدون ناظر^۲.

در یادگیری با ناظر، در هر مرحله از تکرار الگوریتم یادگیری، جواب واقعی سیستم یادگیرنده وجود دارد. لذا الگوریتم یادگیری به خطای یادگیری؛ یعنی تفاوت بین مقدار واقعی و مقدار پیش‌بینی شده دسترسی دارد. در اکثر شبکه‌های عصبی از این نوع یادگیری استفاده می‌شود.

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

رفتار سیستم‌های آموزش‌پذیر توسط الگوریتم‌های برگشتی بیان می‌شود که به این الگوریتم‌ها قوانین یادگیری می‌گویند. انواع مختلفی از قوانین یادگیری برای شبکه‌های عصبی وجود دارند که یادگیری عملکردی^۳ یکی از آن‌ها است. در این نوع یادگیری، پارامترهای شبکه (وزن‌ها و پیش‌قدرها) به نحوی تنظیم می‌شوند که عملکرد شبکه بهینه شود. منظور از بهینه کردن عملکرد شبکه، حداقل شدن خطایی است که بین مقادیر تجربی و پاسخ شبکه وجود دارد.

برای بهینه‌سازی عملکرد شبکه، ابتدا باید یک شاخص عملکرد پیدا کرد. شاخص عملکرد، معیاری برای بیان عملکرد شبکه است و با عملکرد شبکه، رابطه‌ی عکس دارد. یعنی هر چه عملکرد شبکه بهتر باشد، مقدار شاخص عملکرد کوچکتر خواهد بود و بالعکس. شاخص عملکرد در بیشتر الگوریتم‌ها متوسط مربعات خطا (MSE)^۴ است. شاخص عملکرد را اصطلاحاً تابع هدف یا تابع خطا نیز

¹ Supervised learning

² Unsupervised learning

³ Performance Learning

⁴ Mean Square Error

می‌گویند، یعنی تابعی که کمینه کردن آن مورد نظر است. در مرحله‌ی بعد، باید پارامترهای شبکه برای کاهش مقدار شاخص عملکرد تنظیم گردد [۱۴].

برای بهینه‌سازی عملکرد شبکه، روش‌های مختلفی وجود دارد که از آن جمله می‌توان به الگوریتم‌های آموزشی لونبرگ-مارکوارت و تنظیم بایزین اشاره کرد. در این پایان‌نامه از این دو الگوریتم به منظور بهینه‌سازی عملکرد شبکه استفاده شده است.

۲-۲-۴-۳- ماشین برداری پشتیبان (SVM)

ماشین‌های بردار پشتیبان (SVM) یکی از روش‌های یادگیری با ناظر هستند. این روش از جمله روش‌های نسبتاً جدیدی است که در سال‌های اخیر کارایی خوبی نسبت به روش‌های قدیمی‌تر مثل شبکه‌های عصبی برای طبقه‌بندی، نشان داده است.

از الگوریتم‌های آموزش دیده توسط ماشین‌های برداری پشتیبان می‌توان برای موارد زیر استفاده

نمود:

۱- طبقه‌بندی برای سیستم‌های خطی و غیرخطی، که این سیستم‌ها ممکن است به صورت دو کلاسه یا چند کلاسه باشند.

۲- آنالیز رگرسیون برای سیستم‌های خطی و غیر خطی

ماشین‌های برداری پشتیبان در مقایسه با شبکه‌های عصبی دارای دو مزیت عمده هستند که

همین امر موجب توجه خاص محققین به این ماشین‌های فراگیر شده است:

۱- قابلیت مدل‌سازی توسط SVM با تعداد داده‌های کم نسبت به شبکه‌های عصبی بیشتر است.

۲- تئوری قوی ماشین بردار پشتیبان قابلیت تعمیم بالایی به آن داده و از قرار گرفتن آن در

بهینه‌ی محلی جلوگیری می‌کنند. در آموزش شبکه‌های عصبی از حداقل‌سازی خطای تجربی برای

یافتن بهترین مدل استفاده می‌کنند؛ یعنی، شبکه خطای داده‌های آموزشی را حداقل می‌کند اما در

SVM از حداقل سازی خطای ساختاری برای یافتن بهترین مدل استفاده می‌شود که در آن خطای تعمیم حداقل می‌شود.

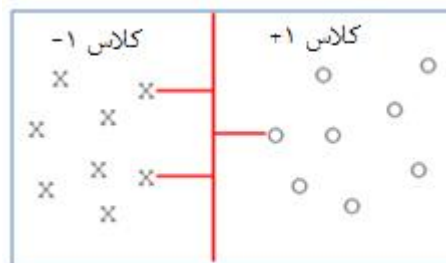
به منظور سادگی در فهم، برای بیان تئوری ماشین برداری پشتیبان از ساده‌ترین حالت ممکن، یعنی دسته بندی دو کلاسه در حالت جدایی پذیر به صورت خطی شروع می‌کنیم.

الف - طبقه بندی خطی دو کلاسه با ماشین های برداری پشتیبان

فرض کنید دو دسته داده‌ی آموزشی که به صورت خطی از هم جداپذیر باشند در اختیار داریم. برای این داده‌ها تعداد زیادی خط جدا کننده وجود دارد که قادر هستند داده‌ها را به صورت خطی جدا کنند اما همان‌طور که در شکل (۲-۴) نشان داده شده است، تنها یکی از آن‌ها دارای ماکزیمم فاصله بین خط جدا کننده و نزدیک‌ترین نقاط آموزشی در هر طرف خط هستند که به آن خط جداساز بهینه می‌گویند. به طور کلی این داده‌ها به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$D = \{(X_i, y_i) | x_i \in R^n, y_i \in [-1, 1]\}_{i=1}^n \quad (۲-۵)$$

که در آن X_i یک بردار حقیقی n بعدی است و y_i برابر ۱ و -۱ است و نشان می‌دهد که هر یک از نقاط x_i به کدام طبقه تعلق دارند. هدف پیدا کردن ابرصفحه‌ی جدا کننده^۱ با بیشترین فاصله از نقاط حاشیه‌ای است که نقاط با $y_i = +1$ را از نقاط با $y_i = -1$ جدا کند.

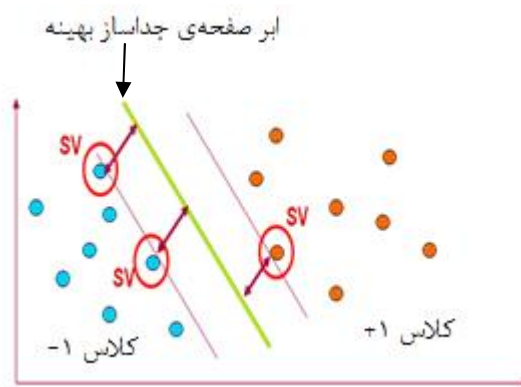


شکل (۲-۴): خط جداساز بهینه با حداکثر مقدار حاشیه

^۱ -Separating hyperplane

به نزدیک‌ترین داده‌های آموزشی به ابرصفحه‌ی جداساز بهینه که در واقع روی ابرصفحه‌های موازی مرزی قرار گرفته‌اند، بردارهای پشتیبان^۱ می‌گویند. این داده‌ها که در شکل (۵-۲) با SV نشان داده شده‌اند، معیاری هستند که ماشین برداری پشتیبان از آن‌ها برای طبقه‌بندی صحیح داده‌ها استفاده می‌کند در حالت دو بعدی معادله‌ی این خط به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$W_1X_1+W_2X_2+b=0 \quad (۶-۲)$$



شکل (۵-۲): نمایش بردارهای پشتیبان روی ابرصفحه‌های موازی مرزی

اکنون موضوع دسته‌بندی خطی داده‌ها را به فضای n بعدی گسترش می‌دهیم. در این فضا هدف، جداسازی نقاط دو دسته توسط یک ابرصفحه‌ی جداساز $(n-1)$ بعدی است. در این حالت معادله‌ی ابرصفحه‌ی جداکننده با رابطه‌ی زیر بیان می‌شود:

$$\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} + b = 0 \quad (۷-۲)$$

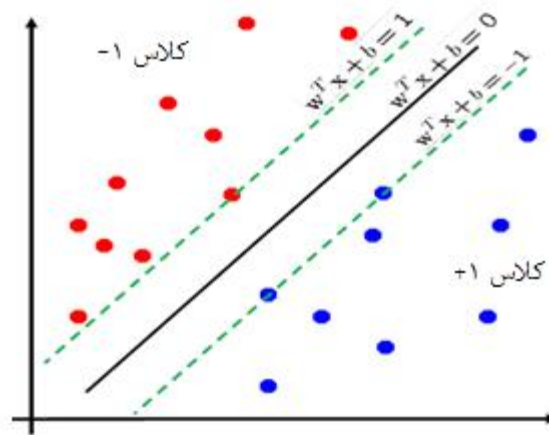
که در آن بردار نرمال ابر صفحه‌ی جداساز بهینه و b عرض از مبدأ آن است. علامت " " بین بردارهای \mathbf{X} و \mathbf{W} به معنی ضرب داخلی این دو بردار بوده و علامت T بالای بردار \mathbf{W} ، ترانهاده‌ی این بردار می‌باشد [۲۷].

باید \mathbf{W} و b به گونه‌ای پیدا شوند که اولاً، نمونه‌های آموزشی بدون اشتباه در کلاس خود دسته‌بندی شوند ثانیاً، فاصله‌ی بین نزدیک‌ترین نقاط هر کلاس داده تا ابرصفحه‌ی جداساز، ماکزیمم

^۱ -Support vectors (SV)

باشد؛ یعنی، حداکثر حاشیه‌ی ممکن بین ابرصفحه‌های مرزی موازی که داده‌ها را از هم جدا می‌کنند ایجاد شود. این موضوع به صورت ریاضی چنین بین می‌شود:

$$\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} + b = \pm 1 \quad 1 \leq i \leq n \quad (8-2)$$



شکل (۶-۲) - صفحه‌ی جداساز و حاشیه‌ها

فاصله بین دو ابرصفحه‌ی مرزی را می‌توان به کمک هندسه به صورت زیر به دست آورد:

$$d = \frac{|(\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} + b - 1) - (\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} + b + 1)|}{\|\mathbf{W}\|} = \frac{2}{\|\mathbf{W}\|} \quad (9-2)$$

براساس این رابطه اگر تابع $\frac{2}{\|\mathbf{W}\|}$ را با در نظر گرفتن قید (۱۰-۲) ماکزیم کنیم حاشیه‌ی مورد نظر ماکزیم خواهد شد.

$$y_i (\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} + b) \geq 1 \quad 1 \leq i \leq n \quad (10-2)$$

اما حل این مسئله‌ی بهینه‌سازی به دلیل وابستگی به $\|\mathbf{W}\|$ سخت است، لذا برای سادگی کار می‌توان

بدون تغییر در مسئله به جای تابع $\frac{2}{\|\mathbf{W}\|}$ ، تابع $\frac{1}{2}\|\mathbf{W}\|$ را با در نظر گرفتن قید (۱۰-۲) مینیمم کرد

که این تابع به صورت $\frac{1}{2}\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{W}$ نوشته می‌شود.

برای حل این مسئله از روش ضرایب لاگرانژ استفاده می‌شود. تابع لاگرانژ برای این مسئله به

صورت زیر نوشته می‌شود :

$$L_p(\mathbf{W}, b, \alpha) = \frac{1}{2} \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{W} - \sum_{i=1}^n \alpha_i [y_i (\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X}_i + b) - 1] \quad (11-2)$$

که در آن α_i ها ضرایب نامعین لاگرانژ هستند. اکنون هدف مینیمم‌سازی تابع لاگرانژ با در نظر گرفتن $\alpha_i > 0$ است. اگر از رابطه‌ی (11-2) نسبت به b و \mathbf{W} مشتق بگیریم و مساوی صفر قرار دهیم مقدار

بهینه‌ی \mathbf{W} به دست می‌آید.

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}} = 0 \Rightarrow \mathbf{W} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \mathbf{X}_i y_i \quad (12-2)$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0 \quad (13-2)$$

حال اگر مقدار \mathbf{W} به دست آمده از مشتقات جزئی رابطه‌ی (12-2) را در خود رابطه‌ی (11-2)

قرار دهیم معادله‌ی اساسی ماشین‌های برداری به صورت زیر به دست خواهد آمد:

$$L_d(\alpha) = \sum_{i=1}^N \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N y_i y_j \alpha_i \alpha_j \mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_j \quad (14-2)$$

بنابراین هدف در ماشین‌های برداری حل معادله‌ی (14-2) با توجه به دو محدودیت (15-2) و (16-2) می‌باشد:

$$\alpha_i \geq 0 \quad (15-2)$$

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0 \quad (16-2)$$

مقدار بهینه‌ی b نیز به کمک قید زیر به دست می‌آید:

$$\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X}_i + b = \frac{1}{y_i} = y_i \Rightarrow b = y_i - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X}_i \quad (17-2)$$

البته بهتر است که با متوسط‌گیری روی همه‌ی بردارهای پشتیبان، مقدار بهینه‌ی b را محاسبه کرد تا در عمل الگوریتم مقاوم‌تری به دست آید:

$$b = \frac{1}{N_{SV}} \sum_{i=1}^{N_{SV}} (y_i - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X}_i) \quad (18-2)$$

با حل مسئله‌ی بهینه‌سازی (۲-۱۴) و استفاده از رابطه‌ی (۲-۱۸) می‌توان به بهینه‌ترین ابرصفحه‌ی جداساز دست یافت و سپس از این ابرصفحه جداساز برای طبقه‌بندی نمونه‌های جدید استفاده نمود [۲۷-۳۰].

ب- طبقه‌بندی خطی سیستم‌های دو کلاسه با ایده‌ی حاشیه‌ی نرم

گاهی اوقات در سیستم‌های خطی همان‌طور که در شکل (۲-۷) نشان داده شده است، داده‌هایی حضور دارند که در کلاس اشتباه طبقه‌بندی شده‌اند. در این حالت با استثناء در نظر گرفتن این داده‌های اشتباه، می‌توان داده‌های آموزشی را به صورت خطی از هم جدا کرد. برای چنین شرایطی ایده‌ی حاشیه‌ی نرم توسط وپنایک^۱ و کورتینا^۲ در سال ۱۹۹۵ مطرح شد. در این روش یک متغیر ξ_i معرفی می‌شود که میزان خطای طبقه‌بندی اشتباه برای هر داده‌ی X_i را نشان می‌دهد. در این حالت تابع هدف که با توجه به دو قید (۲-۲۰) و (۲-۲۱) بهینه شده، به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\text{Min}_{\mathbf{W}, b} = \frac{1}{2} \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{W} + C \sum_{i=1}^N \xi_i \quad (19-2)$$

$$y_i (\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X}_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad (20-2)$$

$$F(\xi) = \sum_{i=1}^N \xi_i \quad (21-2)$$

که در رابطه‌ی فوق C ضریب تنظیم جهت ماکزیمم کردن حاشیه‌ها و مینیمم کردن خطاست. با در نظر گرفتن ضرایب لاگرانژ α و β که بزرگتر از صفر هستند می‌توان تابع لاگرانژ را چنین نوشت:

$$L_p(\mathbf{W}, b, \xi, \alpha, \beta) = \frac{1}{2} \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{W} + C \sum_{i=1}^N \xi_i - \sum_{i=1}^N \alpha_i \{y_i (\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X}_i + b) - 1 + \xi_i\} - \sum_{i=1}^N \beta_i \xi_i \quad (22-2)$$

¹ -Vapnik

² -Cortinna

اگر از رابطه‌ی (۲۲-۲) نسبت به W ، b و ξ_i مشتق گرفته و مساوی صفر قرار داده شود، مقادیر زیر به دست می‌آیند:

$$\frac{\partial L}{\partial W} = 0 \Rightarrow W = \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i X_i \quad (۲۳-۲)$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0 \quad (۲۴-۲)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi} = 0 \Rightarrow \alpha_i + \beta_i = C \quad (۲۵-۲)$$

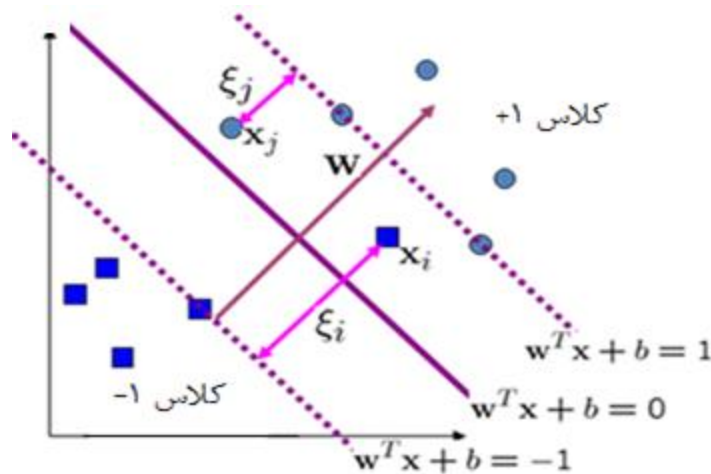
با قرار دادن این روابط در رابطه (۲۲-۲)، معادله‌ی اساسی ماشین‌های برداری در حالت خطی جداناپذیر به دست می‌آید که به صورت معادله‌ی زیر خواهد بود:

$$L_d(\alpha) = \sum_{i=1}^N \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N y_i y_j \alpha_i \alpha_j X_i^T X_j \quad (۲۶-۲)$$

در این حالت هدف حل معادله‌ی (۲۶-۲) با توجه به دو محدودیت (۲۷-۲) و (۲۸-۲) می‌باشد:

$$0 \leq \alpha_i \leq C \quad (۲۷-۲)$$

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0 \quad (۲۸-۲)$$

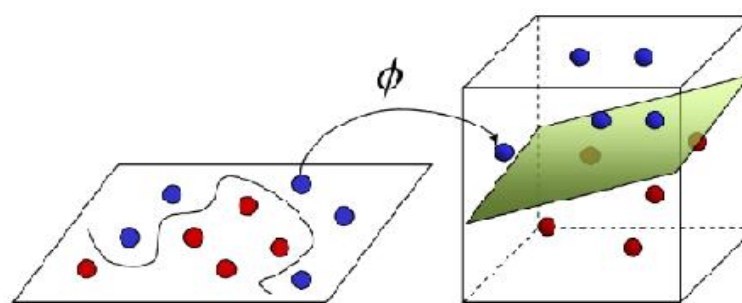


شکل (۷-۲): سیستم‌های خطی جدا ناپذیر با میزان خطای ξ

همان‌گونه که مشاهده می‌شود، تابع هدف سیستم‌های جداناپذیر خطی مشابه با سیستم‌های جداناپذیر خطی است با این تفاوت که ضرایب لاگرانژ α_i دارای کران بالای C هستند. در این حالت پارامتر C نیز که قابلیت کنترل ظرفیت اضافی در طبقه‌بندی کننده را فراهم می‌آورد، باید تعیین شود [۳۳-۳۵].

ج- طبقه بندی غیرخطی^۱ با ماشین‌های برداری پشتیبان

در این حالت که نزدیک‌ترین حالت به موارد واقعی می‌باشد، داده‌های آموزشی به صورت غیرخطی از هم جدا می‌شوند. بردارهای ورودی به فضایی با ابعاد بالاتر که فضای ویژگی^۲ نام دارد نگاشته می‌شود. در این فضای جدید، نگاشت بردار \mathbf{X}_i به صورت $\phi(\mathbf{X}_i)$ نمایش داده می‌شود. سپس در این فضای بالاتر ماشین بردار پشتیبان می‌تواند به جداسازی داده‌ها بپردازد در حالی که فضای ورودی در همان حالت غیرخطی باقی مانده است. شماتیک ساده‌ای از این فرایند در شکل (۸-۲) نشان داده شده است [۲۹].



شکل (۸-۲): داده‌های ورودی ارجاع داده شده به فضای بالاتر

بنابراین روابط موجود در سیستم‌های خطی را باید در فضای بالاتر به صورت زیر بازنویسی کرد:

¹ -Nonlinear classification

² -Feature space

$$\mathbf{W} = \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i \varphi(\mathbf{X}_i) \quad (29-2)$$

$$b = y_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i y_i \varphi(\mathbf{X}_i)^T \cdot \varphi(\mathbf{X}_j) \quad (30-2)$$

به منظور کم کردن حجم محاسبات به دلیل زیاد شدن ابعاد، تئوری مرسر در سال ۱۹۰۰ ضرب داخلی $\varphi(\mathbf{X}_i) \cdot \varphi(\mathbf{X}_j)$ را به صورت تابع کرنل $K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j)$ در فضای ویژگی معرفی کرد که به آن کرنل مرسر می‌گویند [۲۹، ۲۷]. در نتیجه رابطه‌ی (۲-۳۰) به صورت زیر تغییر می‌یابد:

$$b = y_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i y_i K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) \quad (31-2)$$

با استفاده از ترفند کرنل می‌توان معادله‌ی ابرصفحه‌ی جداساز بهینه در سیستم‌های غیرخطی را به صورت معادله‌ی زیر نوشت:

$$d(x) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N y_i \alpha_i K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) + b \quad (32-2)$$

همان‌گونه که مشاهده می‌شود، مقدار معادله‌ی صفحه‌ی جداساز را می‌توان بدون محاسبه $\varphi(\mathbf{X}_i)$ در سیستم‌های غیرخطی به دست آورد و تنها کافیست که از کرنل مناسب برای حل معادله‌ی صفحه استفاده شود [۲۹، ۲۷].

کرنل‌های مختلفی در ریاضیات برای استفاده در فضای ویژگی معرفی شده‌اند که بسته به شرایط، مورد استفاده قرار می‌گیرند. بعضی از این توابع کرنل که در واقع ارتباط دهنده‌ی بین پارامترهای مدل و هدف هستند در جدول (۲-۱) گردآوری شده‌اند [۳۰].

د- بردار پشتیبانی رگرسیونگر برای سیستم‌های خطی

یک روش از SVM برای آنالیز رگرسیون در سال ۱۹۹۶ توسط وپنایک و همکارانش پیشنهاد

جدول (۲-۱): توابع کرنل در فضای ویژگی

نوع طبقه‌بندی	تابع کرنل
خطی	$K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) = (\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_j)^\rho$
چند جمله‌ای از درجه ρ	$K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) = (\mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_j + 1)^\rho$
گوسین یا نمایی	$K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) = e^{-\frac{\ \mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\ ^2}{2\sigma^2}}$
پرسپترون چند لایه	$K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) = \tanh(\gamma \mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_j + \mu)$
دریکله برای مسائل شرایط مرزی	$K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) = \frac{\sin((n+1/2)(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j))}{2 \sin((\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)/2)}$

شد که این روش بردار پشتیبانی رگرسیونگر (SVR) نامیده می‌شود. هدف SVR پیدا نمودن تابعی است که بر داده با کمترین انحراف از کمیتی مانند ε برای هر جفت \mathbf{X}_i, y_i برازش یابد. به عبارت دیگر، تابع رگرسیون در این حالت یک ابر صفحه جداساز است که بر روی داده‌ها با در نظر گرفتن کمترین مربع خطا بین ابر صفحه و داده‌ها، برازش می‌یابد. بنابراین تابع رگرسیون به صورت زیر بیان می‌شود.

$$f(x) = \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} + b \quad (۲-۳۳)$$

در این جا نیز تلاش می‌شود که کمترین مقدار ممکن برای $\|\mathbf{W}\|$ با توجه به دو قید (۲-۳۴) و (۲-۳۵) به دست آید.

$$y_i - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} - b \leq \varepsilon \quad (۲-۳۴)$$

$$y_i + \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} + b \leq \varepsilon \quad (۲-۳۵)$$

برخی مواقع، برخی خطاها ممکن است از مقدار ε بیشتر باشد، بنابراین برای این حالت تابع حساسیت

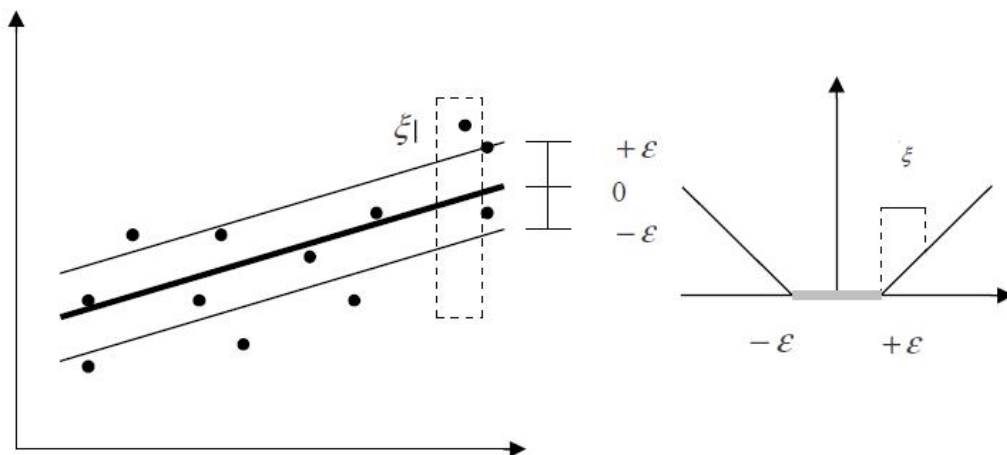
ε^2 یا متغیر ξ_i معرفی می‌شود که به صورت زیر بیان می‌شود:

¹ - Support Vector Regression

² - ε -insensitivity

$$|\xi| = \begin{cases} 0 & \text{if } |\xi| < \varepsilon \\ |\xi| - \varepsilon & \text{otherwise} \end{cases} \quad (36-2)$$

شکل (۹-۲) به صورت شماتیکی این حالت را بیان می کند.



شکل (۹-۲): تابع حساسیت به مقدار ε .

بنابراین رگرسیون خطی برای ماشین‌های برداری می‌تواند به صورت تابع اولیه (۳۷-۲) نوشته

شود که در آن هدف، مینیمم‌سازی خطای کلی و $\|\mathbf{W}\|$ با توجه به قیدهای (۳۸-۲)، (۳۹-۲) و

(۴۰-۲) است.

$$L_p = \frac{1}{2} \|\mathbf{W}\| + C \sum_{i=1}^N (\xi_i + \xi'_i) \quad (37-2)$$

$$y_i - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} - b \leq \xi_i + \varepsilon \quad (38-2)$$

$$y_i + \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} + b \leq \xi'_i + \varepsilon \quad (39-2)$$

$$\xi_i, \mathbf{X}_i \geq 0 \quad (40-2)$$

در این نوع از مدل‌های رگرسیون، تابع هدف مجموع مقادیر خطا را مینیمم خواهد ساخت و تنها نمونه‌هایی مورد استفاده قرار خواهند گرفت که خطای آن‌ها بیش از ε باشد، بنابراین راه‌حل، تابعی از این نمونه‌ها خواهد بود.

برای حل مسئله بهینه‌سازی دارای محدودیت (۲-۳۷)، باید از بهینه‌سازی لاگرانژ برای تبدیل این معادله به یک معادله بدون محدودیت استفاده نمود. با در نظر گرفتن تابع لاگرانژ و مشتق‌گیری از تابع هدف بدون محدودیت نسبت به دو پارامتر W و b ، دو معادله به صورت (۲-۴۱) و (۲-۴۲) به دست می‌آیند.

$$W = \sum_{i=1}^N (\alpha_i - \alpha'_i) X_i \quad (۲-۴۱)$$

$$\sum_{i=1}^N (\alpha_i - \alpha'_i) = 0 \quad (۲-۴۲)$$

با قرار دادن رابطه‌ی به دست آمده از معادله‌ی (۲-۴۱) برای مقدار W ، در معادله‌ی به دست آمده از تابع لاگرانژ، معادله‌ی اساسی ماشین‌های برداری رگرسیونگر به صورت معادله‌ی زیر نوشته خواهد شد:

$$L_d = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\alpha_i - \alpha'_i) X_i^T \cdot X_j (\alpha_i - \alpha'_i) + \sum_{i=1}^N ((\alpha_i - \alpha'_i) y_i - (\alpha_i + \alpha'_i) \varepsilon) \quad (۲-۴۳)$$

با توجه به این که :

$$0 \leq (\alpha_i - \alpha'_i) \leq C \quad (۲-۴۴)$$

۵- بردار پشتیبان رگرسیونگر برای سیستم‌های غیرخطی

همان‌گونه که در بحث برداری پشتیبان رگرسیونگر در سیستم‌های خطی بیان شد، مقدار بهینه

W از رابطه‌ی $W = \sum_{i=1}^N (\alpha_i - \alpha'_i) X_i$ به دست می‌آید که این رابطه در سیستم‌های غیرخطی تبدیل

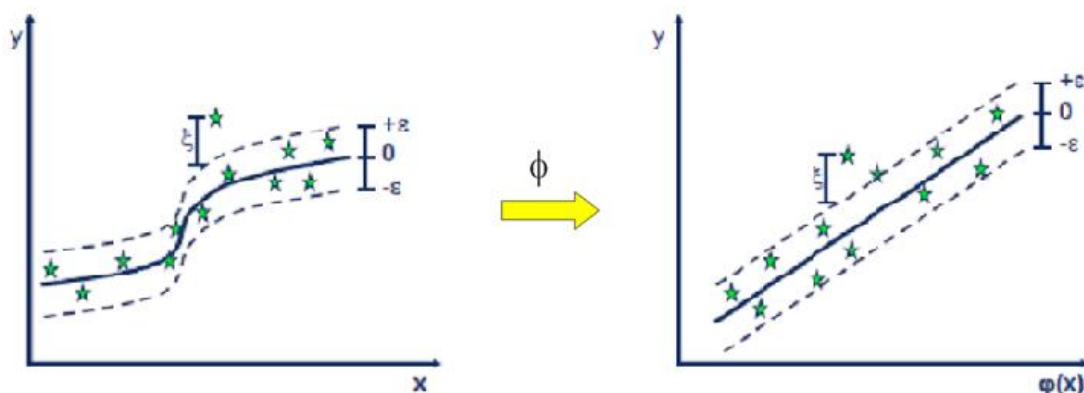
به رابطه‌ی $W = \sum_{i=1}^N (\alpha_i - \alpha'_i) \rho(X_i)$ می‌شود. مسئله‌ای که در این حالت ایجاد می‌شود، همان

مشکلی است که در سیستم‌های غیرخطی وجود دارد و آن بردن به فضای بالاتر و به دست آوردن مقدار $\varphi(\mathbf{X}_i)$ است که مقدار آن ناشناخته است. در این شرایط مانند حالت طبقه‌بندی داده‌ها از حقه‌ی کرنل استفاده می‌شود تا بتوان بدون محاسبه‌ی مقدار $\varphi(\mathbf{X}_i)$ و تنها با استفاده از کرنل‌های موجود، بهینه‌ترین مدل ریاضی را بر داده‌ها برازش نمود. براساس مطالب بیان شده، رابطه‌ی صفحه‌ی جداساز در سیستم‌های غیرخطی به صورت $y_i = \sum_{i=1}^N \mathbf{W}^T \varphi(\mathbf{X}_i) + b$ بیان می‌گردد. با قراردادن رابطه‌ی به دست آمده برای \mathbf{W} در رابطه‌ی صفحه، می‌توان معادله‌ی اساسی (۲-۴۵) را برای ماشین‌های برداری رگرسیونگر در سیستم‌های غیرخطی به صورت زیر معرفی نمود.

$$y_i = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\alpha_i - \alpha'_i) \varphi(\mathbf{X}_i)^T \varphi(\mathbf{X}_j) + b = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\alpha - \alpha'_i) K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) + b \quad (۲-۴۵)$$

با در نظر گرفتن رابطه‌ی (۲-۴۵) نیازی به محاسبه مقدار $\varphi(\mathbf{X}_i)$ نیست و مقدار b از این رابطه محاسبه می‌شود [۲۷، ۲۹].

عملکرد ماشین‌های برداری پشتیبان در قیاس با مدل‌های دیگری که در سیستم‌های غیرخطی وجود دارد، حاکی از قدرت و عملکرد بالای این ماشین‌ها در اکثر سیستم‌های به کار گرفته شده، خصوصاً در سیستم‌های غیرخطی است. مدل ریاضی ارائه شده توسط ماشین برداری برای یک رگرسیون غیرخطی در شکل (۲-۱۰) نشان داده شده است.



شکل (۲-۱۰): مدل ارائه شده توسط ماشین برداری برای سیستم غیرخطی

۲-۲-۵- ارزیابی قدرت پیش‌بینی مدل

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

ضریب تعیین^۱: به عنوان یک شاخص برای بیان دقت خط رگرسیون برآورد شده، به کار می‌رود و نشان‌دهنده‌ی نسبت تغییرات متغیر وابسته توضیح داده شده توسط متغیر مستقل است. به عنوان مثال R^2 برابر با ۰/۹۲۴۳ نشان می‌دهد که ۹۲/۴۳ درصد تغییرات در متغیر وابسته می‌تواند توسط متغیر مستقل توضیح داده شود. رابطه‌ی ریاضی مربوط به ضریب تعیین به صورت زیر است:

$$R^2 = \frac{SSR}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST} \quad (۴۶-۲)$$

که SSR طبق رابطه‌ی (۲-۴۷)، بیانگر مجموع مربعات انحراف مقادیر پیش‌بینی شده‌ی متغیر وابسته از میانگین مقادیر آن است

$$SSR = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \quad (۴۷-۲)$$

و طبق رابطه‌ی (۲-۴۸) نشانگر مجموع مربعات انحراف مقادیر واقعی متغیر وابسته از میانگین مقادیر آن است

$$SST = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (۴۸-۲)$$

که در این روابط، \hat{y}_i مقدار پیش‌بینی شده‌ی متغیر وابسته، y_i مقدار واقعی متغیر وابسته و \bar{y} در هر رابطه، میانگین مقادیر متغیر وابسته است.

¹ Determination coefficient

SSE نیز مبین مجموع مربعات انحراف مقادیر واقعی متغیر وابسته از مقادیر پیش‌بینی شده

برای آن است

$$SSE = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (49-2)$$

بنابراین با توجه به روابط فوق می‌توان نوشت

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (50-2)$$

طبق رابطه‌ی (۵۰-۲)، اگر تمام مشاهدات بر روی خط برازش شده قرار گرفته باشند، یعنی به

ازای تمام نقاط $y_i = \hat{y}_i$ باشد، مقدار R^2 برابر یک می‌شود و هر گونه انحرافی از این حالت باعث

می‌شود که مقدار R^2 از یک کوچکتر شود.

آماره‌ی F : آزمون F یا آزمون فیشر در واقع آزمون معنی‌دار بودن آماری در تحلیل رگرسیون

ساده و چند متغیره است و برابر با نسبت میانگین مربعات رگرسیون (MSR) به میانگین مربعات

باقیمانده‌ها (MSE) است. بیان ریاضی آن به صورت زیر می‌باشد:

$$F = \frac{MSR}{MSE} = \frac{SSR/df_m}{SSE/df_{res}} \quad (51-2)$$

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

df_m درجه آزادی مدل، p تعداد متغیرهای مستقل مدل، n تعداد کل ترکیبات مربوط به مدل، df_{res}

درجه آزادی باقیمانده‌ها است.

میانگین مربع خطاها^۱: آماره‌ی MSE نیز از رابطه‌ی (۵۲-۲) به دست می‌آید:

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n} \quad (52-2)$$

مجموع مربع باقیمانده‌ها^۲ (PRESS):

$$PRESS = \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (53-2)$$

خطای مطلق میانگین^۱ (MAE):

^۱ Mean Square Error

^۲ Predictive Residual Sum of Squares

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |y_i - \hat{y}_i|}{n} \quad (54-2)$$

خطای نسبی پیش‌بینی^۲ (REP):

$$REP = \frac{100}{\bar{y}} \times \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}} \quad (55-2)$$

میانگین قدر مطلق انحراف^۳ (AAD):

$$AAD = \frac{\sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right|}{n} \times 100 \quad (56-2)$$

خطای استاندارد پیش‌بینی^۴ (SEP):

$$SEP = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{N}} \quad (57-2)$$

میانگین انحراف^۵ (Bias):

$$Bias = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)}{N} \times 100 \quad (58-2)$$

ماکزیمم انحراف^۶ (Dmax):

$$D \max = \max \left(100 \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \right) \quad (59-2)$$

¹ Mean Absolute Error
² Relative Error of Prediction
³ Absolute Average Percent Deviation
⁴ Standard Error off Prediction
⁵ Average Deviation
⁶ Maximum Deviation

فصل سوم

بخش محاسبات

۳-۱- مدل سازی ضریب انبساط پذیری هم فشار سیالات آلی با روش های خطی و غیر خطی

در این پایان نامه از یک روش خطی و دو روش غیرخطی برای پیش بینی ضریب انبساط پذیری گرمایی سیالات آلی مختلف، در گستره وسیعی از دما و فشار استفاده شده است. آنچه در این فصل آمده است مراحل مدل سازی برای پیش بینی α_p است.

۳-۱-۱ انتخاب سری داده ها

به منظور پیش بینی ضریب انبساط پذیری گرمایی هم فشار، داده های مربوط به ۶۴ مولکول در گستره وسیعی از دما و فشار جمع آوری شد که تعداد مجموع داده های این مولکول ها، ۵۴۹۰ نقطه می باشد. نام این ترکیبات، محدوده ی دما و فشار آنها، تعداد نقاط مورد استفاده از هر ترکیب و مرجع مربوطه در جدول (۳-۱) آمده است.

۳-۱-۲ محاسبه ی توصیف گر ها

ساختار هر مولکول در نرم افزار Hyperchem رسم و سپس به روش نیمه تجربی AM1 بهینه شد. خروجی این نرم افزار به عنوان ورودی نرم افزار Dragon مورد استفاده قرار گرفت که در این نرم افزار برای هر مولکول، ۱۴۸۱ توصیف گر محاسبه گردید. سپس دو متغیر تجربی دما و فشار که انبساط پذیری گرمایی به آنها وابسته است، نیز به این توصیف گر ها افزوده شد.

جدول (۳-۱) - گستره‌ی دما و فشار و تعداد نقطه داده‌ی استفاده شده در مدل‌سازی برای سیالات آلی مختلف، به همراه مرجع مورد استفاده برای هر یک از آن‌ها

شماره	نام ترکیب	گستره‌ی دما (k)	گستره‌ی فشار (Mpa)	تعداد داده استفاده شده در مدل‌سازی	مرجع
۱	استیک اسید	۲۹۳/۱۵-۳۲۳/۱۵	۰/۱-۲۵	۷۰	[۳۱]
۲	پروپانوئیک اسید	۲۹۳/۱۵-۳۲۳/۱۵	۰/۱-۲۵	۷۰	[۳۱]
۳	بوتانوئیک اسید	۲۹۳/۱۵-۳۲۳/۱۵	۰/۱-۲۵	۷۰	[۳۱]
۴	پنتانوئیک اسید	۲۹۳/۱۵-۳۲۳/۱۵	۰/۱-۲۵	۷۰	[۳۱]
۵	هگزانوئیک اسید	۲۹۳/۱۵-۳۲۳/۱۵	۰/۱-۲۵	۷۰	[۳۱]
۶	هپتانوئیک اسید	۲۹۳/۱۵-۳۲۳/۱۵	۰/۱-۲۵	۷۰	[۳۱]
۷	اکتانوئیک اسید	۲۹۳/۱۵-۳۲۳/۱۵	۰/۱-۲۵	۷۰	[۳۱]
۸	دکانوئیک اسید	۳۴۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۰/۱-۹	۳۶	[۳۱]
۹	دودکانوئیک اسید	۳۴۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۰/۱-۹	۳۶	[۳۱]
۱۰	تترادکانوئیک اسید	۳۵۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۰/۱-۹	۳۰	[۳۲]
۱۱	هگزادکانوئیک اسید	۳۵۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۰/۱-۹	۳۰	[۳۲]
۱۲	متان	۹۵-۱۹۰	۰/۱-۱۵۰	۱۰۹	[۳۳]
۱۳	اتان	۹۵-۳۰۵	۰/۱-۷۰	۲۰۴	[۳۳]
۱۴	پروپان	۹۰-۳۶۵	۰/۱-۱۰۰	۵۱۷	[۳۳]
۱۵	بوتان	۱۳۵-۴۲۵	۰/۱-۶۵	۳۲۲	[۳۳]
۱۶	پنتان	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۴۰	۱۵	[۳۴]
۱۷	هگزان	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۴۰	۱۵	[۳۴]
۱۸	هپتان	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۴۰	۱۵	[۳۴]
۱۹	اکتان	۲۹۸/۰۳-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۱۲۶/۵۱	۴۰	[۳۳]
۲۰	نونان	۲۸۸/۱۵-۳۱۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۵۶	[۳۵]
۲۱	دکان	۲۸۸/۱۵-۳۱۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۵۶	[۳۵]
۲۲	آن‌دکان	۲۸۸/۱۵-۳۱۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۵۶	[۳۵]
۲۳	دودکان	۲۹۳/۱۵-۴۳۳/۱۵	۰/۱-۱۴۰	۱۱۲	[۳۶]
۲۴	تری‌دکان	۲۸۸/۱۵-۳۱۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۵۶	[۳۵]
۲۵	تترادکان	۲۹۳/۱۵-۴۳۳/۱۵	۰/۱-۱۴۰	۵۹	[۳۷]
۲۶	پنتادکان	۱۵.۲۹۸-۳۴۸/۱۵	۵-۵۵	۶۶	[۳۸]
۲۷	هگزادکان	۳۰.۳/۱۵-۳۳۳/۱۵	۰/۱	۳۱	[۳۹]
۲۸	۲-آمینوبوتان	۲۹۳/۱۵-۴۰.۳/۱۵	۰/۱-۱۴۰	۱۷۰	[۴۰]
۲۹	۱-پنتیل آمین	۲۹۳/۱۵-۳۵۳/۱۵	۰/۱-۱۴۰	۱۰۵	[۴۱]
۳۰	۱-هگزیل آمین	۲۹۳/۱۵-۳۵۳/۱۵	۰/۱-۱۴۰	۱۰۵	[۴۱]
۳۱	۲-آمینواکتان	۲۹۳/۱۵-۴۰.۳/۱۵	۰/۱-۱۴۰	۱۸۰	[۴۰]

ادامه‌ی جدول (۱-۳)

شماره	نام ترکیب	گستره‌ی دما (k)	گستره‌ی فشار (Mpa)	تعداد داده استفاده شده در مدل‌سازی	مرجع
۳۲	۱و۲-اتان دی اول	۲۷۸/۱۵-۳۵۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۱۲۶	[۴۲]
۳۳	۱و۲-پروپان دی اول	۳۰۸/۱۵-۳۵۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۷۳	[۴۲]
۳۴	۱و۲-بوتان دی اول	۲۷۸/۱۵-۳۵۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۱۲۶	[۴۲]
۳۵	۱و۴-بوتان دی اول	۲۹۳/۱۵-۴۳۳/۱۵	۰/۱-۶۰	۳۴	[۴۳]
۳۶	۲-متیل-۲و۴پنتان دی اول	۲۹۳/۱۵-۴۳۳/۱۵	۰/۱-۱۰۰	۶۶	[۴۴]
۳۷	پروپیل استات	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۳	۰/۱-۱۵۰	۳۶	[۴۵]
۳۸	۱-متیل اتیل استات	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۳	۰/۱-۱۵۰	۳۶	[۴۵]
۳۹	اتیل پروپیونات	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۳	۰/۱-۱۵۰	۳۶	[۴۶]
۴۰	اتیل پنتانوات	۳۰۳/۱۵-۳۵۳/۱۵	۰/۱-۳۵	۴۴	[۴۷]
۴۱	بوتیل استات	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۳	۰/۱-۱۵۰	۳۶	[۴۵]
۴۲	اتیل بوتیرات	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۳	۰/۱-۱۵۰	۳۶	[۴۶]
۴۳	پنتیل استات	۲۹۸/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۵	۲۴۰	[۴۸]
۴۴	بوتان-۲-اون	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۳	۰/۱-۱۵۰	۳۰	[۴۹]
۴۵	پنتان-۲-اون	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۳	۰/۱-۱۰۰	۲۷	[۵۰]
۴۶	پنتان-۳-اون	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۵	۰/۱-۱۵۰	۳۰	[۵۱]
۴۷	۴-متیل-پنتان-۲-اون	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۳	۰/۱-۱۵۰	۵۴	[۵۰]
۴۸	هگزان-۲-اون	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۳	۰/۱-۱۵۰	۳۰	[۵۰]
۴۹	اتانول	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۱۲۶	[۵۲]
۵۰	۱-پروپانول	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۱۲۶	[۵۲]
۵۱	۱-بوتانول	۲۷۸/۱۵-۳۳۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۱۲۶	[۵۲]
۵۲	۲-متیل-۱-بوتانول	۲۹۳/۱۵-۳۳۸/۱۵	۰/۱-۱۰۰	۶۶	[۵۳]
۵۳	۲-اتیل-۱-بوتانول	۲۹۳/۱۵-۳۱۸/۱۵	۰/۱-۱۰۰	۵۹	[۵۴]
۵۴	۲-پنتانول	۲۷۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۵-۵۵	۸۸	[۵۵]
۵۵	۳-پنتانول	۲۷۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۵-۵۵	۸۸	[۵۵]
۵۶	۱-پنتانول	۲۷۸/۱۵-۳۵۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۱۲۶	[۵۲]
۵۷	۲-هگزانول	۳۱۳/۱۳-۳۶۲/۷۳	۱/۰۱-۲۲/۰۱	۱۳۲	[۵۶]
۵۸	۱-هگزانول	۲۷۸/۱۵-۳۵۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۱۲۶	[۵۲]
۵۹	۲-هپتانول	۳۱۳/۱۳-۳۶۲/۷۳	۰/۹۷۱-۲۲/۰۶۳	۱۳۲	[۵۷]
۶۰	۱-هپتانول	۲۹۳/۱۵-۳۳۸/۱۵	۰/۱-۱۰۰	۶۶	[۵۸]
۶۱	۱-اکتانول	۲۹۳/۱۵-۳۳۸/۱۵	۰/۱-۱۰۰	۶۶	[۵۸]
۶۲	۱-نونانول	۲۹۳/۱۵-۳۳۸/۱۵	۰/۱-۷۰	۴۷	[۵۸]
۶۳	۱-دکانول	۲۹۳/۱۵-۳۳۸/۱۵	۰/۱-۷۰	۴۷	[۵۸]
۶۴	۱-آن دکانول	۲۹۸/۱۵-۳۵۸/۱۵	۰/۱-۶۰	۹۸	[۵۲]

۳-۱-۳- کاهش تعداد توصیف‌گرها

ابتدا توصیف‌گرهایی که برای تمامی مولکول‌ها دارای مقادیر ثابت هستند از مجموعه‌ی توصیف‌گرها حذف شدند. سپس از میان توصیف‌گرها با همبستگی بالا، آن توصیف‌گرها، که کمترین همبستگی را با انبساط‌پذیری هم‌فشار داشتند کنار گذاشته شد. این مرحله توسط برنامه‌ای نوشته شده در نرم‌افزار MATLAB انجام شد. پس از انجام این مراحل، از مجموع ۱۴۸۳ توصیف‌گر تعداد ۱۱۰ توصیف‌گر باقی ماند.

۳-۱-۴- نرمال کردن داده‌ها

بر روی ۱۱۰ توصیف‌گر باقیمانده فرایند نرمال کردن داده‌ها^۱ انجام شد. در این مرحله مقادیر توصیف‌گرها بارابطه‌ی زیر به نحوی استاندارد شدند که دارای مقدار میانگین صفر و انحراف معیار یک باشند.

$$Z = \frac{X - \mu}{\sigma} \quad (1-3)$$

که در آن، Z ، مقادیر استاندارد شده‌ی داده‌ها، X داده‌های ورودی، μ میانگین هر توصیف‌گر و σ انحراف استاندارد هر توصیف‌گر است. این عمل باعث می‌شود دامنه‌ی تغییرات هر توصیف‌گر تاثیر کاذب بر میزان اهمیت آن ایجاد نکند.

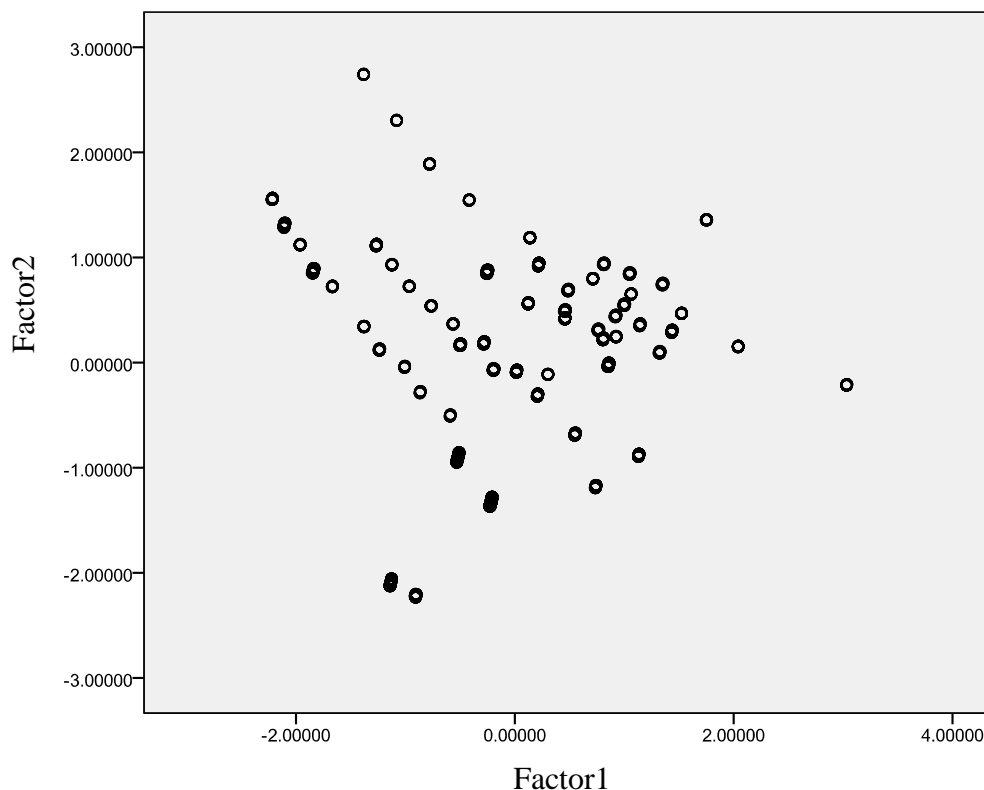
۳-۱-۵- دسته‌بندی داده‌ها

پس از کاهش تعداد توصیف‌گرها، طی مراحل قبل، توصیف‌گرهایی که منجر به مدل بهتر می‌شود، انتخاب شد. برای این منظور، ابتدا داده‌ها دسته‌بندی شده و سپس از روش‌های انتخاب توصیف‌گرهای بهینه استفاده شد. برای دسته‌بندی داده‌ها روش تحلیل مولفه‌های اساسی (PCA)

¹ Autoscaling procedure

مورد استفاده قرار گرفت. برای این کار، مولفه‌های اساسی برای مجموعه‌ی توصیف‌گرها در نرم‌افزار SPSS به دست آمد و سپس نموداری از مولفه‌ی اول بر حسب مولفه‌ی دوم رسم شد. نقاط محیطی این نمودار، در سری آموزش قرار گرفتند. نقاط باقی‌مانده نیز به صورت تصادفی در دو سری ارزیابی و تست درونی جای گرفتند. شکل (۱-۳) پراکندگی داده‌ها را روی نمودار PCA نشان می‌دهد.

لازم به تذکر است که از ابتدا و قبل از دسته‌بندی، داده‌های ۷ ترکیب شامل هپتانوئیک اسید، دکان، هگزادکان، ۱-۲ پروپان دی اول، اتیل پنتانوات، پنتان-۲-اون و ۲-اتیل-۱-بوتانول از کل مراحل مدل‌سازی کنار گذاشته شدند تا در نهایت بتوان از آن‌ها به عنوان سری تست بیرونی استفاده نمود. بنابراین دسته‌بندی داده‌ها به سه سری آموزش، ارزیابی و تست درونی روی ۵۱۳۰ نقطه از ۵۷ مولکول باقیمانده انجام شد؛ که در نهایت، تعداد ۳۷۴۷ نقطه در سری آموزش، ۷۰۰ نقطه در سری ارزیابی و ۶۸۳ نقطه در سری تست قرار گرفتند.



شکل (۱-۳) - پراکندگی مولکول‌ها روی نمودار PCA

۳-۱-۶- انتخاب بهترین توصیف‌گر با استفاده از راهبرد CDFS

پس از دسته‌بندی داده‌ها، از راهبرد CDFS برای انتخاب بهترین توصیف‌گرها از میان ۱۱۰ توصیف‌گر باقی‌مانده استفاده شد.

در انتخاب توصیف‌گرها به روش رگرسیون مرحله‌ای، مدل نهایی به شدت تحت تاثیر دسته‌بندی داده‌ها است. راهبرد CDFS نسبت به روش رگرسیون مرحله‌ای این مزیت را دارد که اثر دسته‌بندی بر مدل نهایی را کاهش می‌دهد. در این روش، ابتدا نقاطی که به عنوان سری تست درونی انتخاب شده بودند، کنار گذاشته می‌شوند. سپس داده‌های باقی‌مانده با ۱۶ دسته‌بندی مختلف به دو دسته‌ی آموزش و ارزیابی تقسیم شدند. در مرحله‌ی بعد روش رگرسیون مرحله‌ای برای مدل‌سازی سری‌های آموزش هر یک از دسته‌بندی‌ها انجام شده و مدل بهینه براساس پارامترهای آماری سری ارزیابی مربوطه انتخاب گردید. در مجموع ۱۶ مدل بهینه به دست آمد که توصیف‌گرهایی که در ۵۰٪ مدل‌ها تکرار شده باشند به عنوان توصیف‌گرهای نهایی انتخاب شدند. توصیف‌گرهای هر مدل در جدول (۲-۳) آمده‌اند که با توجه به آن‌ها تعداد ۶ توصیف‌گر انتخاب شدند. نشان، نام کامل و اثر متوسط این توصیف‌گرها در جدول (۳-۳) و مقدار آن برای هر مولکول در جدول (۴-۳) گزارش شده است.

مدل رگرسیون خطی چندگانه با استفاده از توصیف‌گرهای CDFS (CDFS-MLR) برای سری

آموزش به صورت زیر به دست آمد:

$$\alpha_p = -5.387 + 1.396 \text{ GATS1v} - 0.005 p + 2.663 \text{ Mor 22m} + 0.002 T + 0.388 \text{ HATSp} + 2.484 \text{ RTp} \quad (2-3)$$

جدول (۳-۲) - توصیف‌گرهای ۱۶ مدل به دست آمده

شماره	توصیف‌گرها	تعداد توصیف‌گر
۱	GATS1v, p, Mor22m, T, HATSP, RTp, SHp2, GATS1m, LDip, Mor20v	۱۰
۲	GATS1v, p, T, Mor29m, Mor22m, Mor26p, E2u, MATS4p, R2u_A, MATS4m, LDip, X2AV	۱۲
۳	GATS1v, p, T, Mor18v, E2u, LDip, MS, GATS3e	۸
۴	GATS1v, p, Mor22m, HATSp, T, E2m, X2Av, MATS4m	۸
۵	GATS1v, p, Mor22m, T, RTp, MATS2p, E1u, Mor29v	۸
۶	GATS1v, p, Mor22m, T, RTp, MATS2p, E1u, Mor29v	۸
۷	GATS1v, p, Mor22m, T, HATSp, Mor18v, RPCG, LDip	۸
۸	GATS1v, p, Mor22m, T, HATSp, RTp, Mor18v, SHP2	۸
۹	GATS1v, p, MATS2p, T, X1AV, Mor13m, Mor23m, LDip, MS	۹
۱۰	GATS1v, p, Mor22m, HATSp, T	۵
۱۱	GATS1v, p, Mor22m, T, HATSp, RTp, SHp2, GATS1m	۸
۱۲	GATS1v, p, Mor22m, T, HATSp, RTp, SHp2	۷
۱۳	GATS1v, p, Mor22m, T, RTp, MATS2p, E1u, Mor29v	۸
۱۴	GATS1v, p, Mor22m, T, Mor26p, Mor16p	۶
۱۵	GATS1v, p, T, Mor18v, E2u, R3m, LDip, MS	۸
۱۶	GATS1v, p, Mor22m, T, HATSp, RTp, Mor18v, SHp2, RPCG, LDip, R2m_A	۱۱

جدول (۳-۳) - توصیف‌گرهای مولکولی انتخاب شده با راهبرد CDFS

شماره	نشان	گروه	اثر متوسط	نام کامل
۱	GATS1v	2D autocorrelation	۸۷/۸۸	Geary autocorrelation of lag 1 weighted by Vander Waals volume
۲	p	experimental	-۴۸/۹۶۱	pressure
۳	Mor22m	3D-MoRSE	۴۳/۴۵۵	Signal22/weighted by mass
۴	T	experimental	۳۴/۳۳۲	temperature
۵	HATSp	GETAWAY descriptors	۱۶/۰.۳۳	Leverage-weighted total index/weighted by polarizability
۶	RTp	GETAWAY descriptors	۱۳/۵۵۲	R total index/ weighted by polarizability

جدول (۳-۴) - نام و مقدار توصیف‌گرهای مولکولی انتخابی روش CDFS برای هر مولکول

	نام مولکول	توصیف‌گرها			
		GATS1v	Mor22m	HATSp	RTp
۱	استیک اسید	۳/۰۴۳	۰/۰۷	۱/۵۸۷	۰/۲۳۳
۲	پروپانویک اسید	۳/۰۲۸	۰/۱۲	۱/۶۹۸	۰/۲۲۱
۳	بوتانویک اسید	۳/۰۲۱	۰/۱۶	۱/۷۳۶	۰/۱۸۹
۴	پنتانویک اسید	۳/۰۱۷	۰/۱۴	۱/۷۷۷	۰/۱۹۳
۵	هگزانویک اسید	۳/۰۱۴	۰/۱۳	۱/۷۹۹	۰/۱۷۱
۶	اکتانویک اسید	۳/۰۱۱	۰/۱۷	۱/۷۲۴	۰/۱۵۱
۷	دکانویک اسید	۳/۰۰۸	۰/۲۱	۱/۵۱۱	۰/۱۳۴
۸	دودکانویک اسید	۳/۰۰۷	۰/۲۲	۱/۳۲۹	۰/۱۱۹
۹	تترادکانویک اسید	۳/۰۰۶	۰/۲۶	۱/۱۹۶	۰/۱۰۹
۱۰	هگزادکانویک اسید	۳/۰۰۵	۰/۳۰	۱/۰۹۵	۰/۱۰۱
۱۱	متان	۵/۰۰۰	۰/۰۱	۱/۲۹۳	۰/۱۷۸
۱۲	اتان	۴/۰۰۰	۰/۰۱	۱/۴۷۵	۰/۲۱۷
۱۳	پروپان	۳/۶۶۷	۰/۰۳	۱/۶۳۹	۰/۲۱۹
۱۴	بوتان	۳/۵۰۰	۰/۰۵	۱/۶۸۴	۰/۱۹۹
۱۵	پنتان	۳/۴۰۰	۰/۰۵	۱/۷۳۵	۰/۱۹۵
۱۶	هگزان	۳/۳۳۳	۰/۰۶	۱/۷۵۸	۰/۱۷۸
۱۷	هپتان	۳/۲۸۶	۰/۰۸	۱/۷۸۴	۰/۱۷۰
۱۸	اکتان	۳/۲۵۰	۰/۱۰	۱/۷۳۱	۰/۱۵۶
۱۹	نونان	۳/۲۲۲	۰/۱۲	۱/۶۲۴	۰/۱۴۹
۲۰	آن‌دکان	۳/۱۸۲	۰/۱۵	۱/۴۱۵	۰/۱۳۱
۲۱	دودکان	۳/۱۶۷	۰/۱۶	۱/۳۳۳	۰/۱۲۲
۲۲	تری‌دکان	۳/۱۵۴	۰/۱۸	۱/۲۵۹	۰/۱۱۷
۲۳	تترادکان	۳/۱۴۳	۰/۲۰	۱/۱۹۸	۰/۱۰۹
۲۴	پنتادکان	۳/۱۳۳	۰/۲۲	۱/۱۴۴	۰/۱۰۵
۲۵	آمینوبوتان	۳/۲۵۸	۰/۰۸	۱/۷۷۴	۰/۱۹۶
۲۶	۱-پنتیل آمین	۳/۲۰۶	۰/۰۴	۱/۷۰۶	۰/۱۸۳
۲۷	۱-هگزیل آمین	۳/۱۷۱	۰/۰۵	۱/۷۳۱	۰/۱۷۱
۲۸	۲-آمینواکتان	۳/۱۲۸	۰/۱۵	۱/۷۵۵	۰/۱۵۳
۲۹	۱و۲-اتان دی‌اول	۳/۴۲۵	-۰/۱۱	۱/۵۰۲	۰/۱۵۸
۳۰	۱و۲-بوتان دی‌اول	۳/۲۰۳	-۰/۰۱	۱/۶۷۹	۰/۱۹۲
۳۱	۱و۴-بوتان دی‌اول	۳/۲۰۳	-۰/۰۱	۱/۶۱۲	۰/۱۴۳
۳۲	۲-متیل-۲و۴پنتان دی‌اول	۳/۱۳۲	-۰/۰۱	۱/۹۲۲	۰/۱۷۲

ادامه‌ی جدول (۳-۴)

	نام مولکول	GATS1v	Mor22m	HATSp	RTp
۳۳	پروپیل استات	۳/۴۳۴	-۰/۰۱	۱/۸۲۹	۰/۲۲۰
۳۴	۱-متیل اتیل استات	۳/۴۳۴	-۰/۰۱	۲/۰۰۵	۰/۲۲۲
۳۵	اتیل پروپیونات	۳/۴۳۴	-۰/۰۱	۱/۸۰۲	۰/۲۰۴
۳۶	بوتیل استات	۳/۳۶۲	۰/۰۲	۱/۸۵۳	۰/۲۱۵
۳۷	اتیل بوتیرات	۳/۳۶۲	-۰/۰۱	۱/۹۶۶	۰/۲۰۸
۳۸	پنتیل استات	۳/۳۱۰	۰/۰۲	۱/۷۶۹	۰/۱۹۸
۳۹	بوتان-۲-اون	۳/۱۸۱	۰/۰۹	۱/۷۵۰	۰/۲۱۴
۴۰	پنتان-۳-اون	۳/۱۴۵	۰/۱۴	۱/۷۶۷	۰/۲۰۰
۴۱	۴-متیل-پنتان-۲-اون	۳/۱۲۰	۰/۱۴	۱/۸۲۱	۰/۱۹۴
۴۲	هگزان-۲-اون	۳/۱۲۰	۰/۱۱	۱/۹۷۹	۰/۲۰۱
۴۳	اتانول	۳/۷۱۱	-۰/۰۶	۱/۵۰۷	۰/۲۱۸
۴۴	۱-پروپانول	۳/۴۷۱	-۰/۰۱	۱/۵۹۹	۰/۲۱۱
۴۵	۱-بوتانول	۳/۳۵۲	۰/۰۲	۱/۶۴۴	۰/۱۹۴
۴۶	۲-متیل-۱-بوتانول	۳/۲۸۰	۰/۰۶	۱/۸۱۶	۰/۱۸۴
۴۷	۲-پنتانول	۳/۲۸۰	۰/۰۲	۱/۷۵۰	۰/۱۸۹
۴۸	۳-پنتانول	۳/۲۸۰	۰/۰۴	۱/۸۴۵	۰/۲۰۳
۴۹	۱-پنتانول	۳/۲۸۰	۰/۰۲	۱/۶۹۲	۰/۱۸۷
۵۰	۲-هگزانول	۳/۲۳۳	۰/۰۵	۱/۷۸۴	۰/۱۷۵
۵۱	۱-هگزانول	۳/۲۳۳	۰/۰۲	۱/۷۱۹	۰/۱۷۳
۵۲	۲-هپتانول	۳/۱۹۹	۰/۰۶	۱/۸۰۲	۰/۱۶۷
۵۳	۱-هپتانول	۳/۱۹۹	۰/۰۳	۱/۷۲۵	۰/۱۶۵
۵۴	۱-اکتانول	۳/۱۷۴	۰/۰۵	۱/۶۶۴	۰/۱۵۲
۵۵	۱-نونانول	۳/۱۵۴	۰/۰۸	۱/۵۶۴	۰/۱۴۵
۵۶	۱-دکانول	۳/۱۳۸	۰/۱	۱/۴۶۶	۰/۱۳۴
۵۷	۱-آن دکانول	۳/۱۲۶	۰/۱۱	۱/۳۷۴	۰/۱۲۸

۳-۱-۷- طراحی و بهینه‌سازی شبکه‌های عصبی مصنوعی مختلف با

توصیف‌گرهای انتخابی CDFS

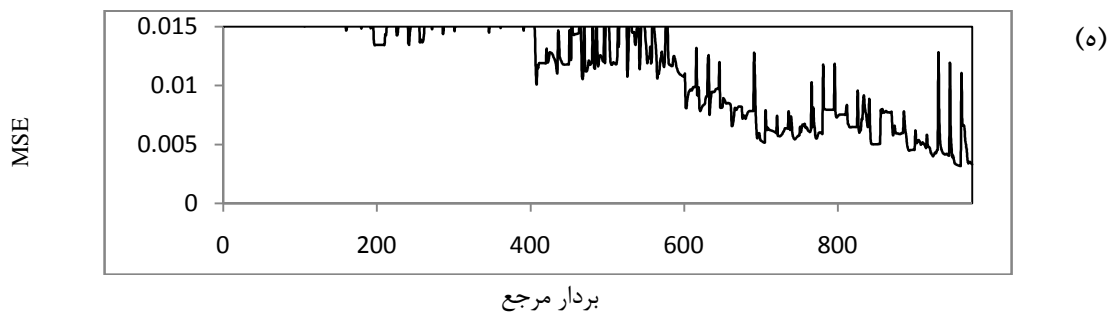
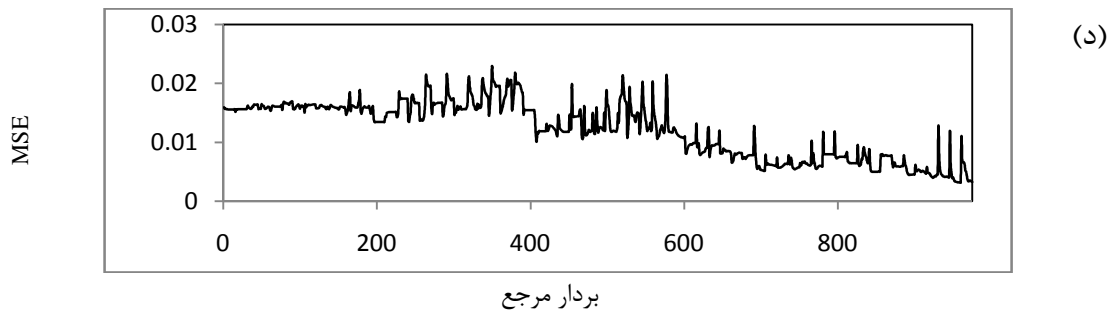
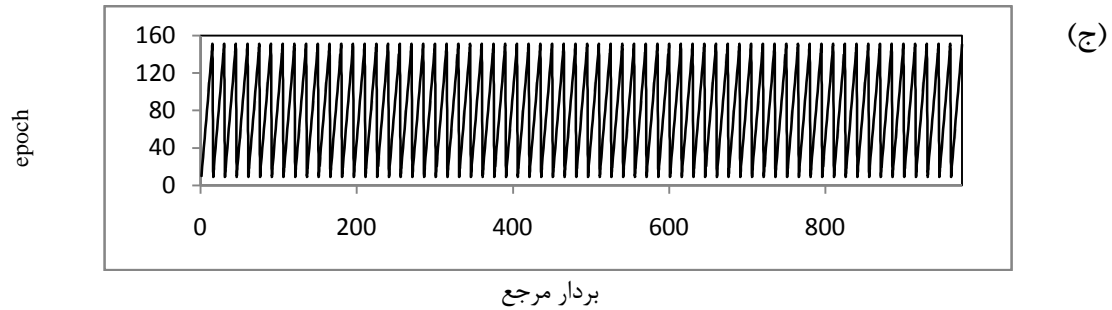
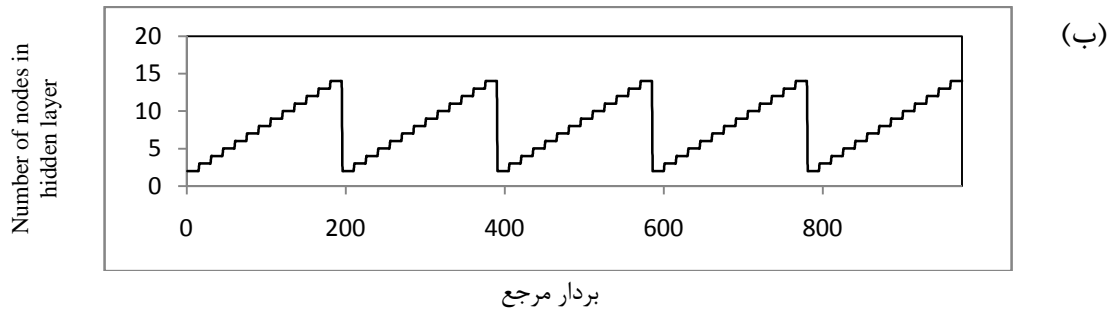
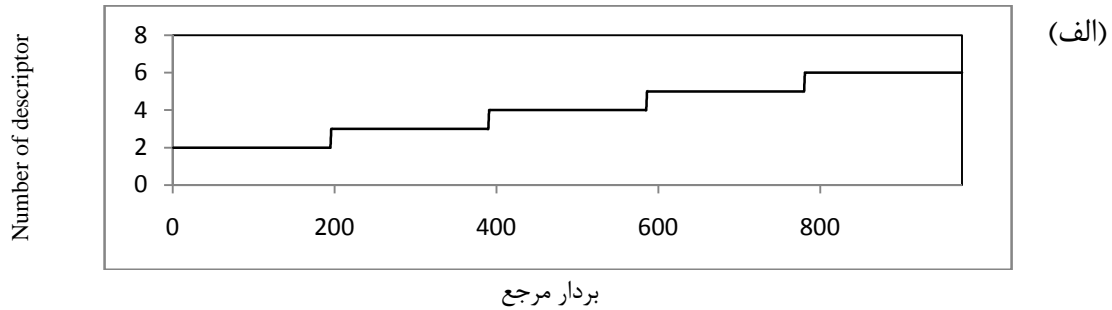
توصیف‌گرهای انتخاب شده‌ی نهایی با روش CDFS، برای مدل‌سازی غیرخطی به عنوان ورودی به شبکه‌ی عصبی مصنوعی ارائه شد. برای این منظور شبکه‌هایی با دو الگوریتم آموزشی لونیبرگ-مارکواریت و تنظیم بایزین، توابع انتقال لگاریتم سیگموئید و تانژانت سیگموئید طراحی شدند. در این شبکه‌ها باید تعداد نرون‌های لایه‌ی پنهان، تعداد ورودی شبکه، تعداد دور آموزشی، نوع تابع آموزشی و نوع تابع انتقال برای شبکه‌ی عصبی مصنوعی بهینه گردند. مقدار بهینه‌ی هر یک از این پارامترها زمانی است که میانگین مربع خطا دارای کمترین مقدار باشد.

ترتیب قرار گرفتن توصیف‌گرهای انتخابی در ماتریس ورودی با روش مرتب‌سازی CR تعیین شد. مقادیر ضریب همبستگی هر توصیف‌گر با انبساط‌پذیری هم‌فشار در جدول (۳-۵) نشان داده شده است.

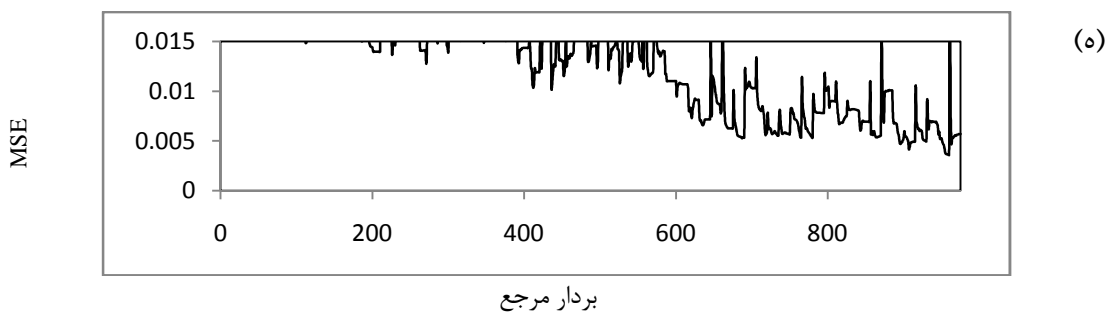
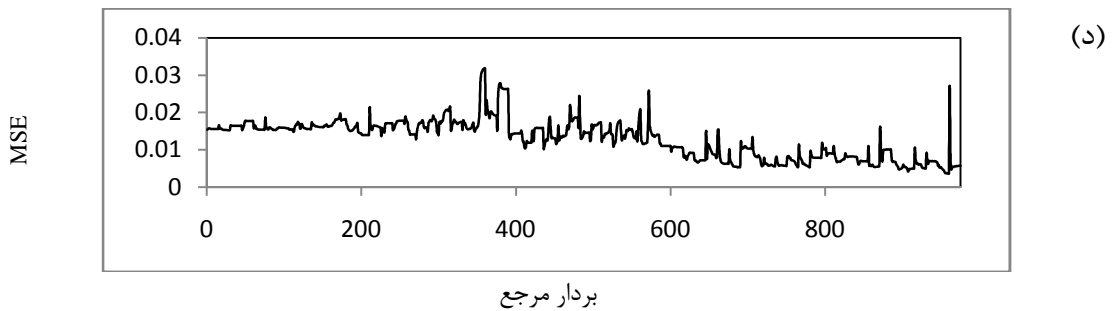
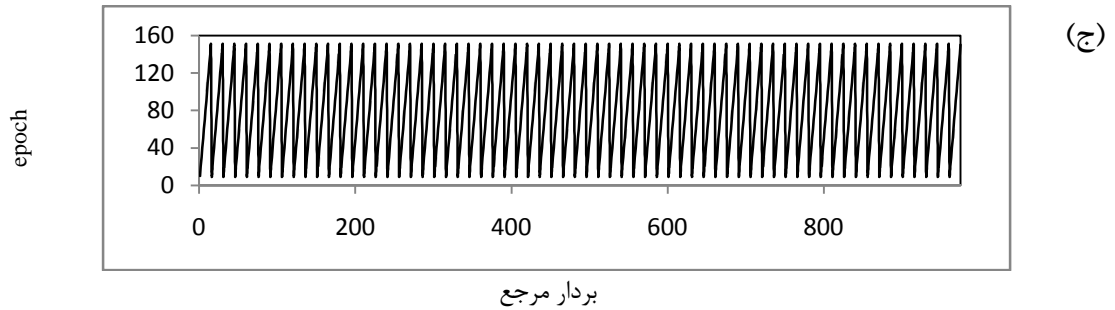
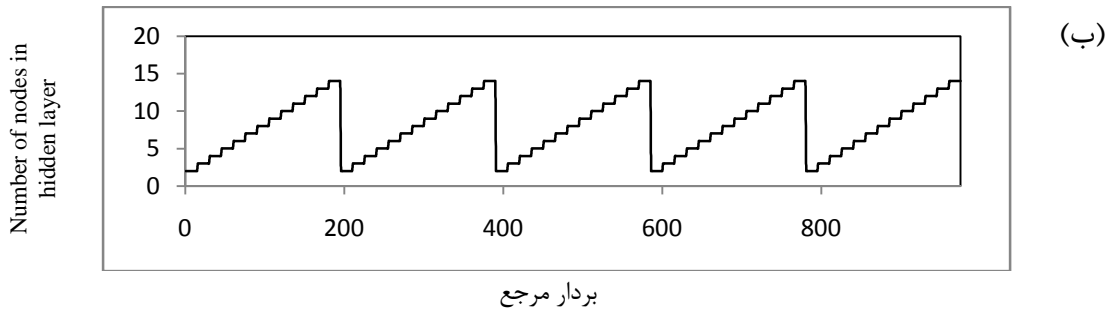
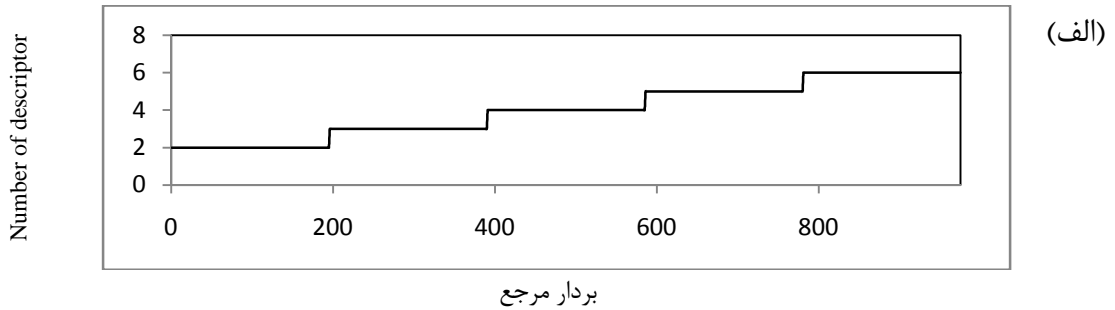
جدول (۳-۵)-مقادیر ضریب همبستگی هر توصیف‌گر با انبساط‌پذیری هم‌فشار

توصیف‌گرهای ورودی	GATS1v	p	T	RTp	Mor22m	HATSp
ضریب همبستگی	۰/۶۹۱	-۰/۳۱۹	-۰/۳۰۸	۰/۳۱۳	-۰/۱۸۶	-۰/۱۵۵

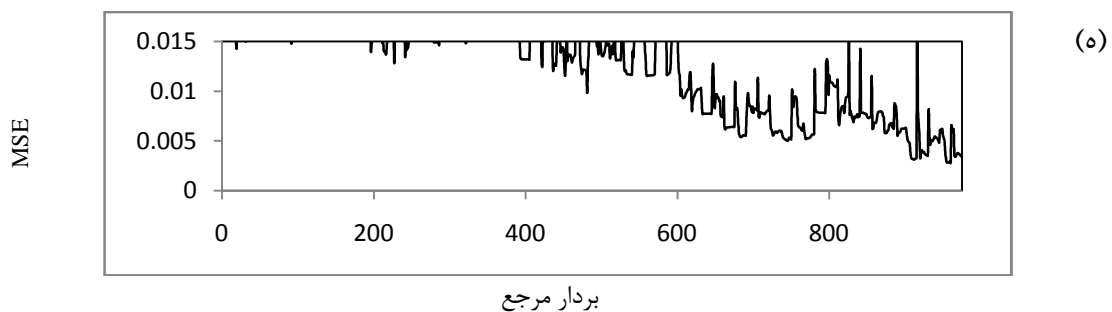
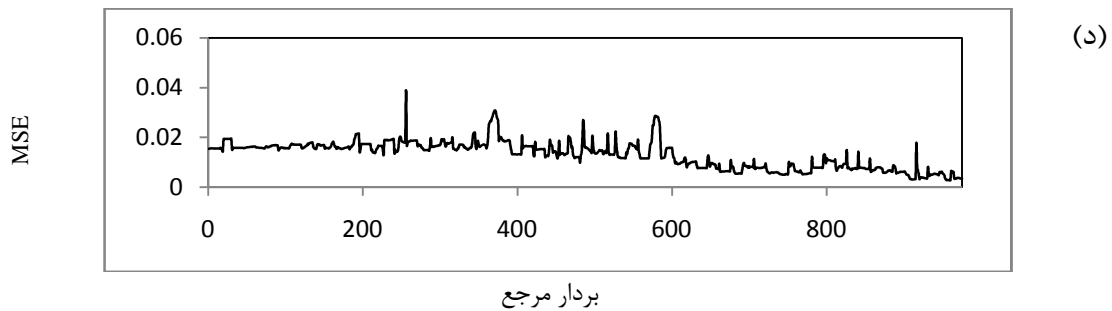
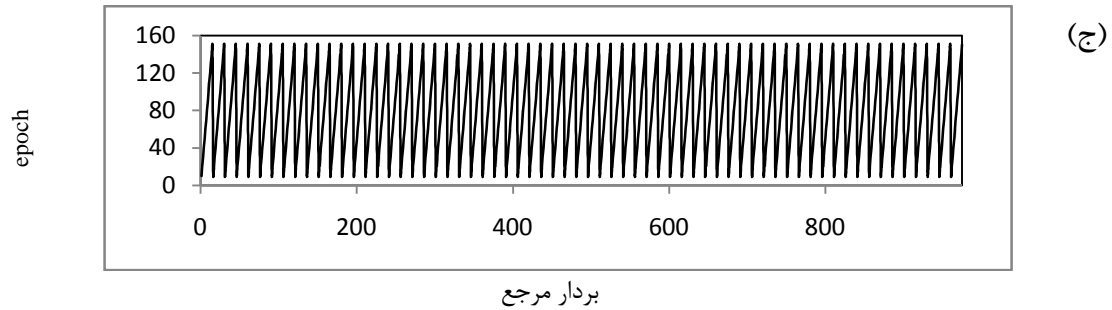
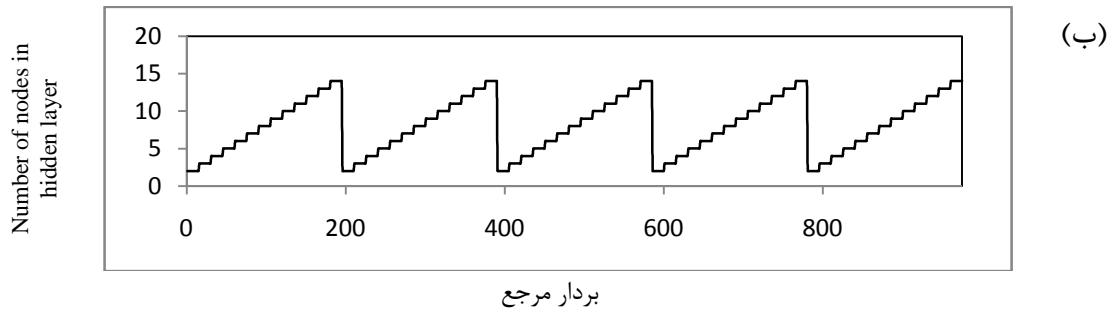
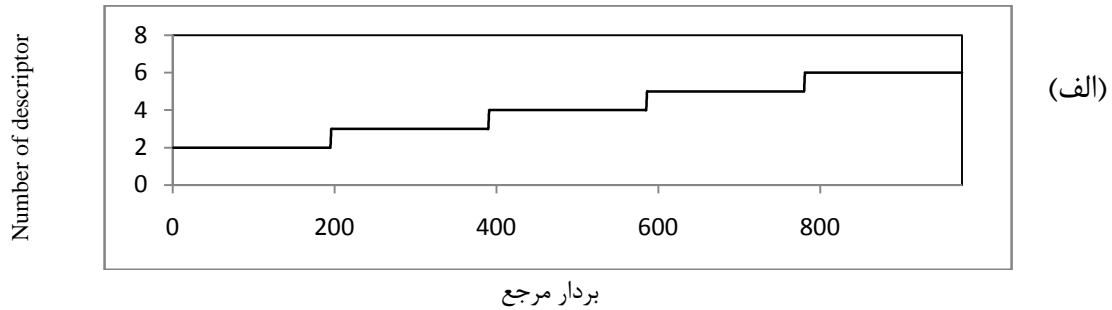
سپس شبکه‌ها با تعداد متفاوت گره در لایه‌ی پنهان از ۲ تا ۱۴ و تعداد دور آموزشی ۱۰ تا ۱۵۰ با گام ۱۰ آموزش داده شد. شبکه‌ی دارای کمترین مقدار MSE برای سری ارزیابی، به عنوان شبکه‌ی بهینه انتخاب گردید. نتایج حاصل از این محاسبات، در شکل‌های (۳-۲) تا (۳-۵) نشان شده است. مقادیر بهینه‌ی پارامترهای شبکه برای هر یک از شبکه‌های بهینه شده در جدول (۳-۶) گزارش شده است.



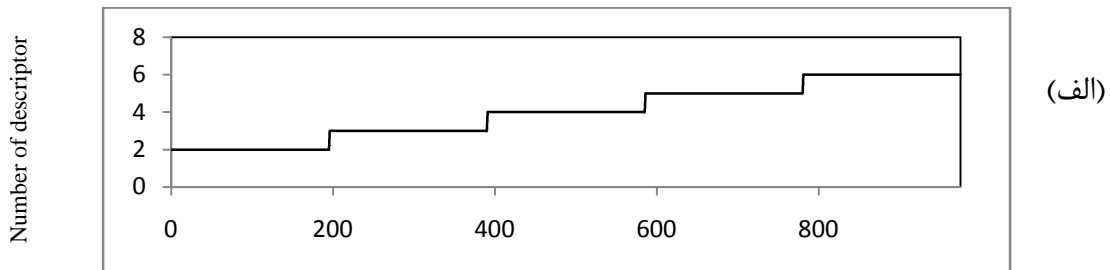
شکل (۳-۲) - نمودارهای (الف) تعداد توصیف‌گر، (ب) تعداد نرون لایه مخفی، (ج) دور آموزش، (د) MSE سری ارزیابی و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE که مینیمم مقدار آن را بهتر نشان می‌دهد، بر حسب بردار مرجع برای تابع انتقال لگاریتم سیگموئید و الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین برای روش CDFS-ANN



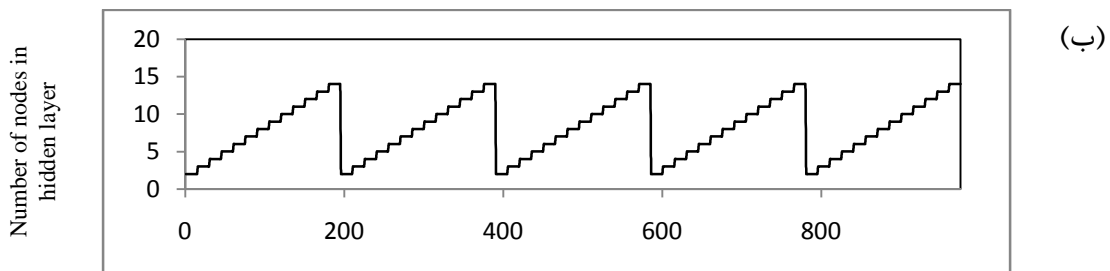
شکل (۳-۳) - نمودارهای (الف) تعداد توصیف‌گر، (ب) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ج) دور آموزش، (د) MSE سری ارزیابی و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE که مینیمم مقدار آن را بهتر نشان می‌دهد، بر حسب بردار مرجع برای تابع انتقال لگاریتم سیگموئید و الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوارت برای روش CDFS-ANN



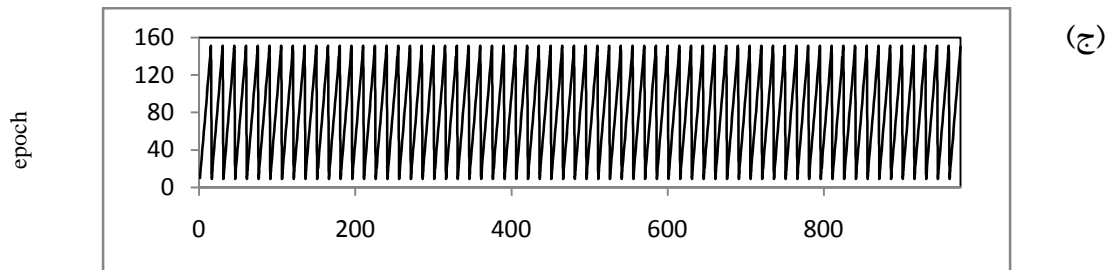
شکل (۳-۴) - نمودارهای (الف) تعداد توصیف‌گر، (ب) تعداد نرون لایه مخفی، (ج) دور آموزش، (د) MSE سری ارزیابی و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE که مینیمم مقدار آن را بهتر نشان می‌دهد، بر حسب بردار مرجع برای تابع انتقال تانژانت سیگموئید و الگوریتم آموزشی لونبرگ-مارکوارت برای روش CDFS-ANN



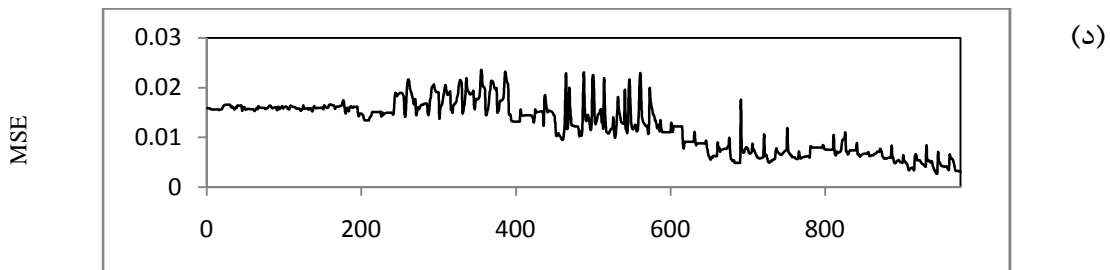
بردار مرجع



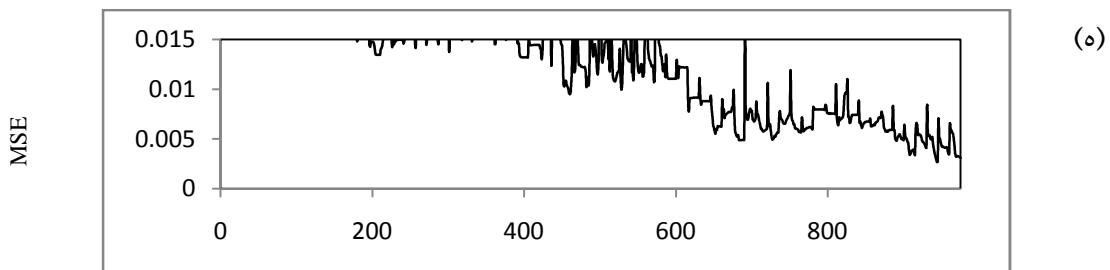
بردار مرجع



بردار مرجع



بردار مرجع



بردار مرجع

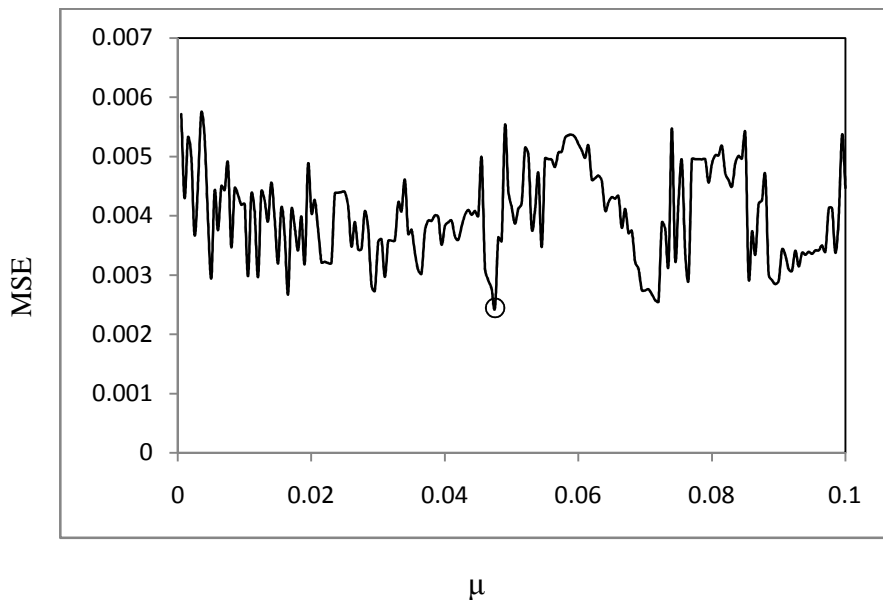
شکل (۳-۵) - نمودارهای (الف) تعداد توصیف‌گر، (ب) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ج) دور آموزش، (د) MSE سری ارزیابی و (ه) ناحیه‌ای از نمودار MSE که مینیمم مقدار آن را بهتر نشان می‌دهد، بر حسب بردار مرجع برای تابع انتقال تانژانت سیگموئید و الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین برای روش CDFS-ANN

جدول (۳-۶) - توابع و پارامترهای بهینه‌ی شبکه‌ی عصبی با توصیف‌گرهای حاصل از روش CDFS

MSE	تعداد دور آموزش	تعداد نرون لایه پنهان	تعداد توصیف‌گر	تابع آموزش	تابع انتقال
۰/۰۰۳۲	۱۴۰	۱۳	۶	تنظیم بایزین	لگاریتم سیگموئید
۰/۰۰۳۶	۱۴۰	۱۳	۶	لونبرگ-مارکوارت	لگاریتم سیگموئید
۰/۰۰۲۷	۱۴۰	۱۲	۶	تنظیم بایزین	تانژانت سیگموئید
۰/۰۰۲۸	۱۱۰	۱۳	۶	لونبرگ-مارکوارت	تانژانت سیگموئید

نتایج موجود نشان می‌دهد که برای سری ارزیابی کمترین مقدار MSE در شبکه‌ای با تابع تانژانت سیگموئید با الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین، تعداد ۱۲ گره در لایه‌ی پنهان و در ۱۴۰ دور آموزش به دست می‌آید.

در شبکه‌ی بهینه تغییرات μ از ۰/۰۰۰۵ تا ۰/۱ با گام ۰/۰۰۰۵ اعمال شد و برای هر مقدار مومنتوم، مقدار میانگین مربعات خطا برای سری ارزیابی محاسبه گردید. نمودار تغییرات MSE بر حسب μ حول نقطه‌ی بهینه در شکل (۳-۶) نشان داده شده است. ممنتوم ۰/۰۴۷۵ دارای کمترین مقدار میانگین مربعات خطا بود و این مقدار به عنوان مقدار ممنتوم بهینه انتخاب شد.



شکل (۳-۶) - نمودار میانگین مربعات خطای سری ارزیابی بر حسب تغییرات ممنتوم

توابع و پارامترهای بهینه شده‌ی شبکه‌ی عصبی با استفاده از توصیف‌گرهای انتخابی به روش CDFS در جدول (۷-۳) گزارش شده است.

جدول (۷-۳) - توابع و پارامترهای بهینه شده‌ی شبکه‌ی عصبی با استفاده از توصیف‌گرهای CDFS

trainbr	تابع آموزش
tansig	تابع انتقال لایه‌ی پنهان
pureline	تابع انتقال لایه‌ی خروجی
۱۲	تعداد نرون لایه‌ی پنهان
۶	تعداد متغیرهای ورودی
۱۴۰	تعداد دورهای آموزش
۰/۰۴۸۰	پارامتر μ
۰/۰۰۲۴	مقدار MSE سری ارزیابی

۳-۱-۸ - مدل سازی با روش غیرخطی ماشین‌های بردار پشتیبان (SVM)

روش غیرخطی دیگر برای پیش‌بینی انبساط‌پذیری هم‌فشار، روش ماشین‌های بردار پشتیبان است. برای انجام این روش، داده‌ها به دو دسته‌ی آموزش و تست تقسیم شدند. داده‌های سری تست همان داده‌های سری تست در روش شبکه‌ی عصبی مصنوعی است. برای آموزش ماشین برداری پشتیبان باید پارامترهای آن شامل تابع حساسیت وپنایک، پارامتر موازنه‌ی C و پارامتر کرنل بهینه گردد. بنابراین تابع حساسیت وپنایک در بازه‌ی ۰/۰۰۰۰۱ تا ۰/۱، پارامتر موازنه‌ی C در بازه‌ی ۱ تا ۱۰۰۰ و پارامتر کرنل در بازه‌ی ۰/۰۰۱ تا ۱۰۰۰۰۰ انتخاب گردید. لازم به ذکر است که در ماشین برداری پشتیبانی که در این تحقیق استفاده شد نوع کرنل، کرنل گوسین می‌باشد. پس از اجرای برنامه مقدار بهینه‌ی پارامترها بر اساس کمترین مقدار MSE برای سری تست انتخاب شدند. نتایج حاصل در جدول (۸-۳) گزارش شده است.

جدول (۸-۳) - مقادیر بهینه سازی پارامترهای CDFS-SVM

تابع حساسیت وپنایک	پارامتر موازنه‌ی C	پارامتر کرنل	MSE
۰/۱	۱۰	۰/۰۰۱	$۱/۹۱۶۷ \times ۱۰^{-۲}$
۰/۱	۱۰	۰/۰۱	$۱/۵۳۹۰ \times ۱۰^{-۲}$
۰/۱	۱۰	۰/۱	$۱/۲۱۱۶ \times ۱۰^{-۲}$
۰/۱	۱۰	۱	$۵/۶۸۷۴ \times ۱۰^{-۳}$
۰/۱	۱۰	۱۰	$۹/۷۳۲۸ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱۰	۱۰۰	$۲/۱۳۴۹ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱۰	۱۰۰۰	$۱/۳۱۳۸ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱۰	۱۰۰۰۰	$۱/۰۴۰۰ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱۰	۱۰۰۱۰	$۱/۰۹۴۸ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱۰	۱۰۰۳۰	$۱/۰۶۷۴ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱۰	۱۰۰۹۰	$۱/۰۱۲۷ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱۰	۱۰۱۰۰	$۱/۰۹۴۸ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱۰	۱۱۰۰۰	$۱/۱۴۹۵ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱۰	۱۰۰۰۰۰	$۲/۳۵۳۸ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱	۱۰۰۹۰	$۱/۲۵۹۰ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۵	۱۰۰۹۰	$۱/۰۴۰۰ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱۰	۱۰۰۹۰	$۱/۰۱۲۷ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱۰۰	۱۰۰۹۰	$۱/۰۹۴۸ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۱	۱۰۰۰	۱۰۰۹۰	$۱/۰۹۴۸ \times ۱۰^{-۴}$
۰/۰۱	۱۰	۱۰۰۹۰	$۸/۴۸۴۷ \times ۱۰^{-۵}$
۰/۰۰۱	۱۰	۱۰۰۹۰	$۸/۴۸۴۷ \times ۱۰^{-۵}$
۰/۰۰۰۱	۱۰	۱۰۰۹۰	$۸/۲۱۱۰ \times ۱۰^{-۵}$
۰/۰۰۰۰۱	۱۰	۱۰۰۹۰	$۸/۴۸۴۷ \times ۱۰^{-۵}$

نتایج جدول (۸-۳) نشان می‌دهد که ماشین برداری پشتیبان با مقادیر ۰/۰۰۰۱، ۱۰ و ۱۰۰۹۰ به ترتیب برای تابع حساسیت وپنایک، پارامتر موازنه‌ی C و پارامتر کرنل به عنوان ماشین بهینه برای پیش‌بینی انبساط‌پذیری هم‌فشار می‌باشد.

۳-۱-۹- ارزیابی مدل‌ها

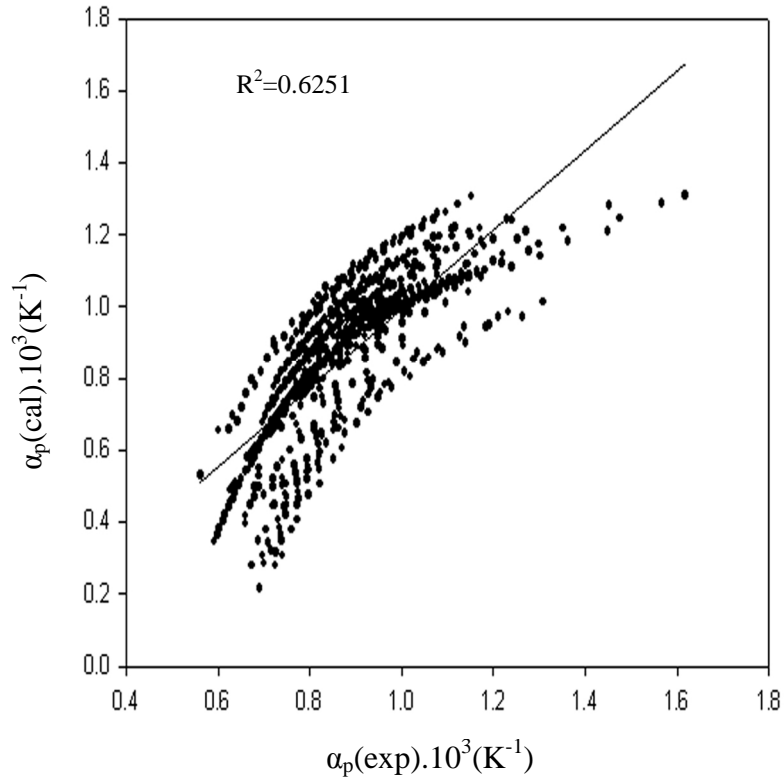
در مراحل قبل، مدل‌های خطی و غیرخطی برای پیش‌بینی انبساط‌پذیری هم‌فشار به دست آمد. ورودی این مدل‌ها، توصیف‌گرهای مولکولی تئوری بود که با روش CDFS انتخاب شده بودند. در این مرحله، توانایی این مدل‌ها در پیش‌بینی انبساط‌پذیری گرمایی هم‌فشار با استفاده از داده‌های سری تست مورد بررسی قرار گرفت که در ادامه نتایج حاصل از این بررسی‌ها گزارش شده است.

۳-۱-۹-۱- ارزیابی مدل‌ها با استفاده از نمودار برگشتی و پارامترهای

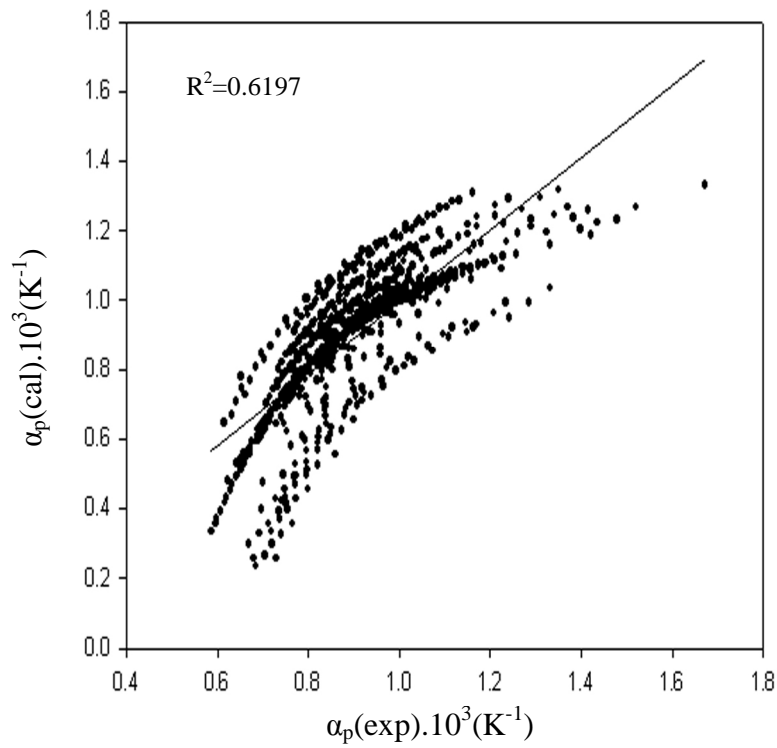
آماري

در نمودار برگشتی، مقادیر پیش‌بینی شده‌ی انبساط‌پذیری گرمایی بر حسب مقادیر تجربی آن رسم می‌شود و سپس مقدار ضریب تعیین محاسبه می‌شود. هر چه مقدار ضریب تعیین به یک نزدیک‌تر باشد، مدل ساخته شده، مدل بهتری است. نمودارهای برگشتی برای سری ارزیابی و سری تست درونی برای هر روش در شکل‌های (۳-۷) تا (۳-۹) ارائه شده است. هم‌چنین پارامترهای آماری برای مدل‌های خطی و غیرخطی ساخته شده برای سری ارزیابی و سری تست درونی محاسبه و نتایج در جدول (۳-۹) گزارش شده است. نمودار برگشتی روش خطی رفتار خطی بودن نشان نمی‌دهد و مقدار ضریب تعیین آن نسبت به دو روش غیرخطی کمتر است. این مسئله نشان می‌دهد که بین پارامتر انبساط‌پذیری هم‌فشار و توصیف‌گرهای انتخابی به روش CDFS رابطه‌ی خطی وجود ندارد. ضریب تعیین روش ماشین بردارهای پشتیبان بیشتر از ضریب تعیین روش شبکه‌ی عصبی مصنوعی است. هم‌چنین نمودار برگشتی روش ماشین بردار پشتیبان و پارامترهای آماری جدول (۳-۹) نشان‌دهنده‌ی برتری ماشین بردارهای پشتیبان به شبکه‌ی عصبی مصنوعی در پیش‌بینی انبساط‌پذیری هم‌فشار است.

(الف)

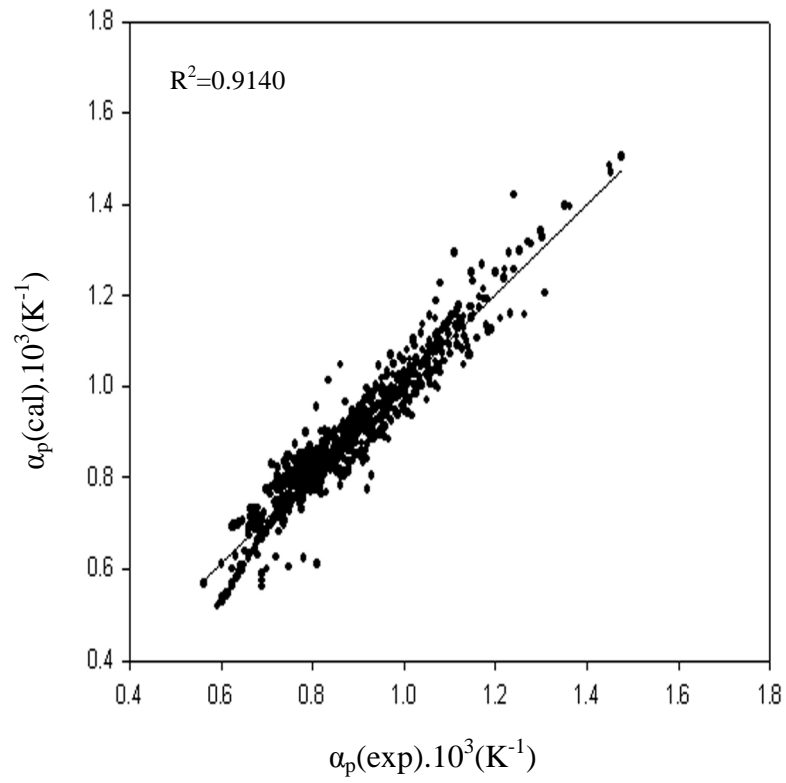


(ب)

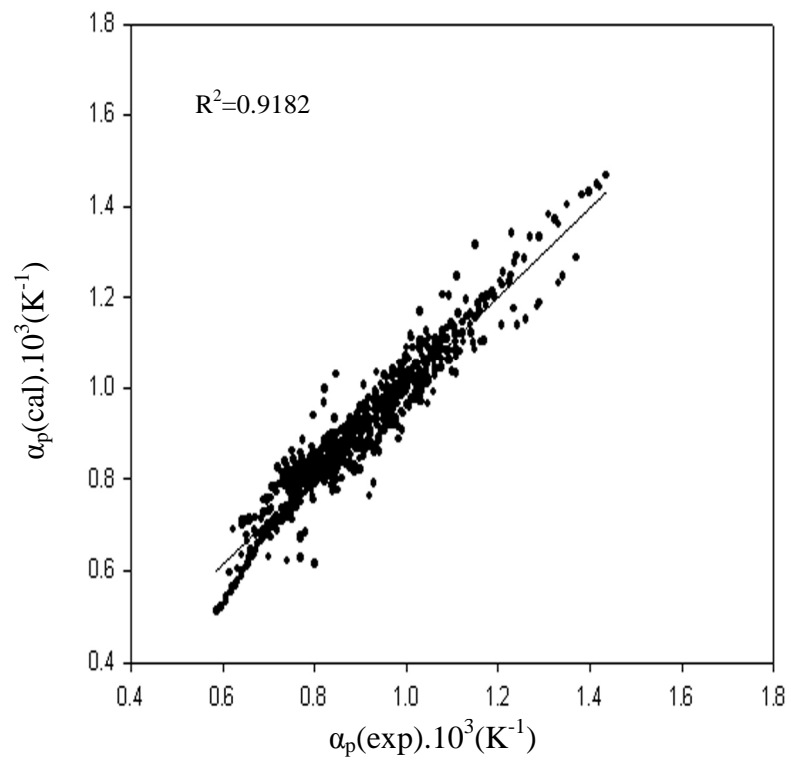


شکل (۷-۳) - نمودار برگشتی حاصل از CDFS-MLR برای (الف) سری ارزیابی، (ب) سری تست درونی

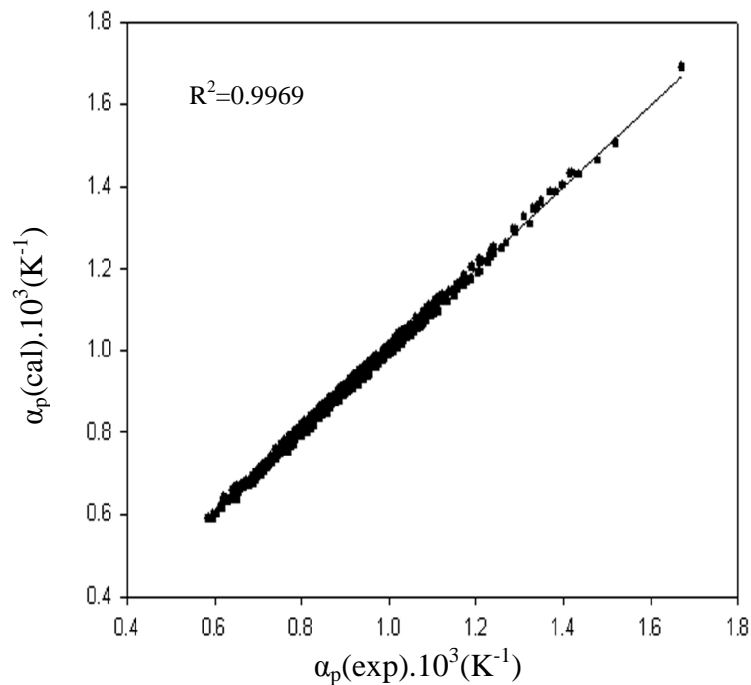
(الف)



(ب)



شکل (۸-۳) - نمودار برگشتی حاصل از CDFS-ANN برای (الف) سری ارزیابی، (ب) سری تست درونی



شکل (۳-۹) - نمودار برگشتی حاصل از CDFS-SVM برای سری تست درونی

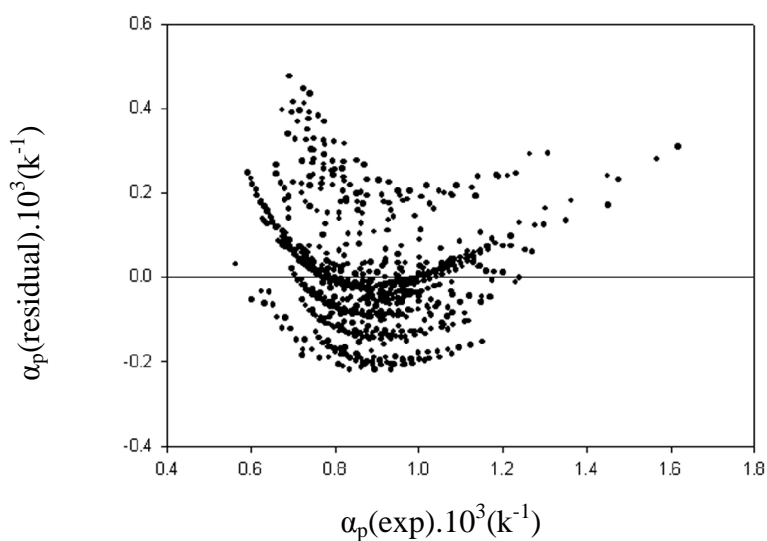
جدول (۳-۹) - پارامترهای آماری روش‌های CDFS-MLR، CDFS-ANN و CDFS-SVM

		CDFS- MLR	CDFS-ANN	CDFS-SVM
R^2	سری ارزیابی	۰/۶۲۵۱	۰/۹۱۴۰	-
	سری تست	۰/۶۱۹۷	۰/۹۱۸۲	۰/۹۹۶۹
MSE	سری ارزیابی	۰/۰۱۸۴	۰/۰۰۲۲	-
	سری تست	۰/۰۱۷۵	۰/۰۰۲۱	$۸ / ۴۸۴۷ \times 10^{-۵}$
ADD	سری ارزیابی	۱۲/۱۲۳۳	۴/۱۸۶۸	-
	سری تست	۱۱/۴۳۸۷	۴/۰۸۱۶	۰/۸۰۶۶
PRESS	سری ارزیابی	۱۲/۸۷۵۷	۱/۵۱۸۳	-
	سری تست	۱۱/۹۴۲۰	۱/۴۴۸۸	۰/۰۵۳۲
SEP	سری ارزیابی	۰/۱۳۵۶	۰/۰۴۶۹	-
	سری تست	۰/۱۳۲۳	۰/۰۴۵۸	۰/۰۰۹۲
MAE	سری ارزیابی	۰/۱۰۱۸	۰/۰۳۶۰	-
	سری تست	۰/۰۹۸۴	۰/۰۳۵۸	۰/۰۰۷۳
REP	سری ارزیابی	۱۵/۲۲۵۸	۵/۲۷۷۹	-
	سری تست	۱۴/۵۷۱۶	۵/۰۶۸۸	۰/۰۰۹۷
Bias	سری ارزیابی	۰/۰۲۴۵	-۰/۸۵۳۴	-
	سری تست	۱/۴۳۳۸	-۰/۸۰۷۰	-۰/۲۳۷۹
Dmax	سری ارزیابی	۶۸/۸۶	۲۴/۶۹	-
	سری تست	۶۵/۵۳	۲۲/۹۸	۲/۶۴۸

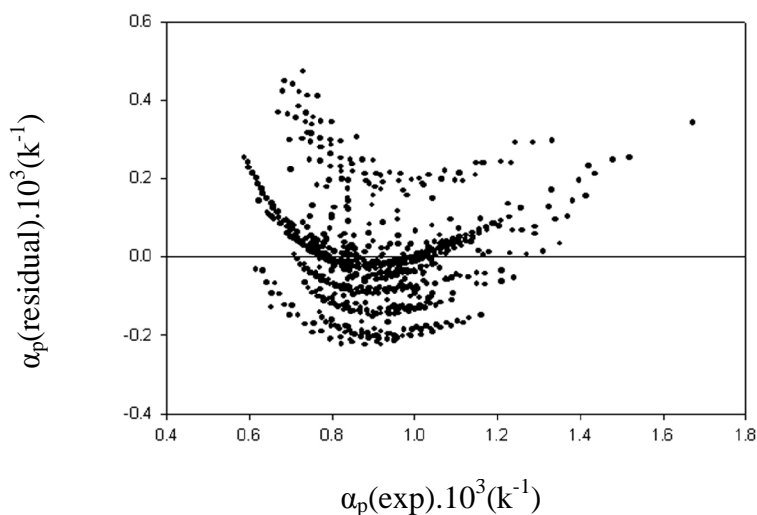
۳-۱-۹-۲- ارزیابی مدل‌ها با استفاده از نمودار خطای باقیمانده

اختلاف مقادیر پیش‌بینی شده و مقادیر تجربی، خطای باقیمانده نامیده می‌شود. پراکندگی یکنواخت نقاط، حول محور افقی که بیانگر خطای باقیمانده‌ی صفر است، نشان‌دهنده‌ی آن است که خطای سیستماتیک در مدل‌سازی وجود ندارد. نمودار خطای باقیمانده بر حسب مقادیر تجربی، برای مدل‌های خطی و غیر خطی در شکل (۳-۱۰) تا شکل (۳-۱۲)، نشان داده شده است.

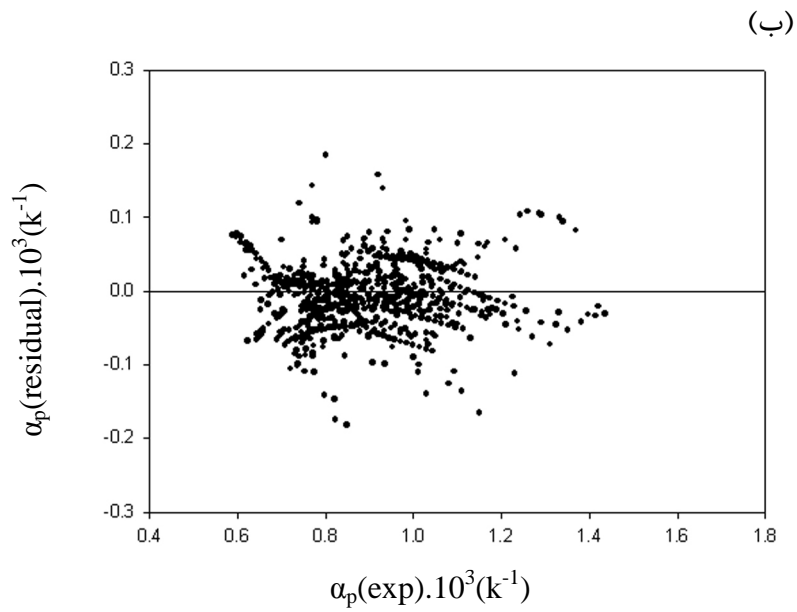
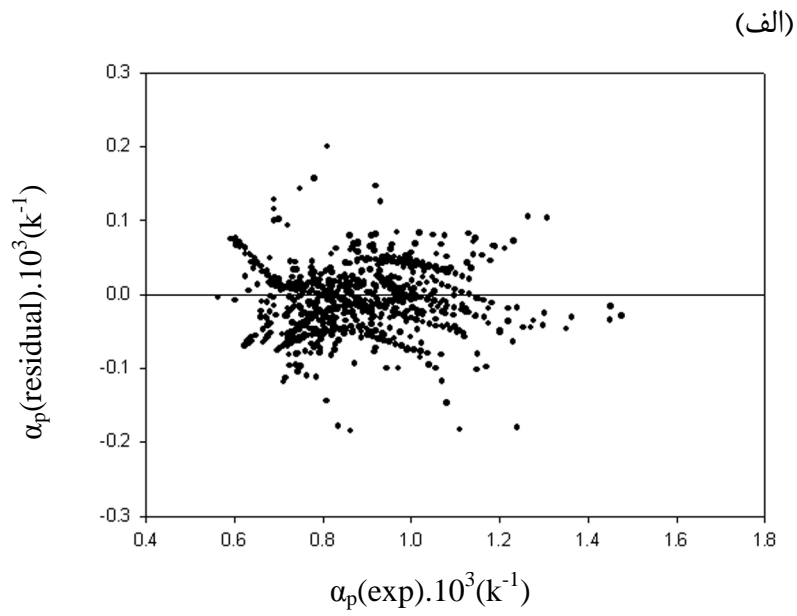
(الف)



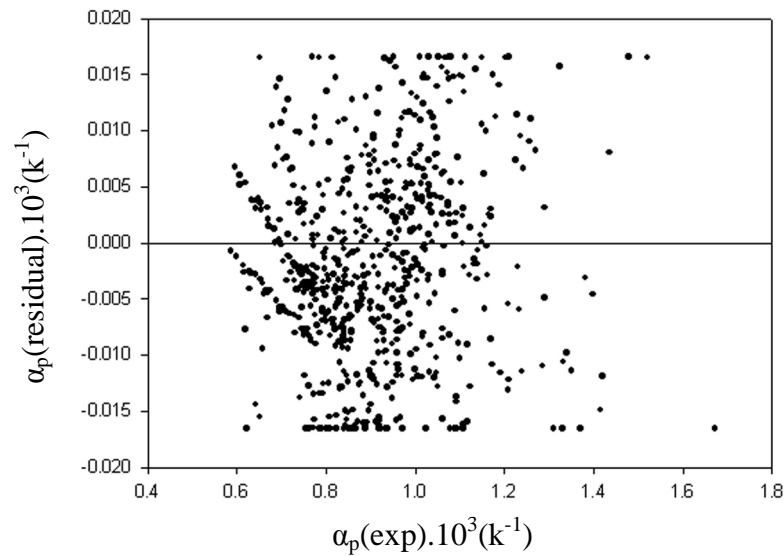
(ب)



شکل (۳-۱۰) - نمودار خطای باقیمانده بر حسب مقادیر تجربی انبساط‌پذیری گرمایی برای (الف) سری ارزیابی، (ب) سری تست درونی در مدل CDFS-MLR



شکل (۳-۱۱) - نمودار خطای باقیمانده بر حسب مقادیر تجربی ضریب انبساط پذیری گرمایی برای (الف) سری ارزیابی، (ب) سری تست درونی در مدل CDFS-ANN



شکل (۳-۱۲) - نمودار خطای باقیمانده بر حسب مقادیر تجربی ضریب انبساط پذیری گرمایی سری تست درونی در مدل CDFS-SVM

مقایسه‌ی نمودارهای برگشتی روش خطی و روش غیرخطی نشان می‌دهد گستره‌ی خطای باقیمانده در روش‌های خطی بیشتر از گستره‌ی خطای باقیمانده در روش‌های غیرخطی است. از بین دو روش غیرخطی نیز مقدار خطای مطلق باقیمانده بین مقادیر تجربی و محاسباتی در روش ماشین بردار پشتیبان کمتر و در بازه‌ی ۰/۰۲۰ تا -۰/۰۲۰ است. بنابراین نمودار خطای باقیمانده نیز برتری ماشین بردار پشتیبان را تایید می‌کند.

۳-۱-۹-۳- ارزیابی مدل‌ها با استفاده از اعتبار سنجی بیرونی

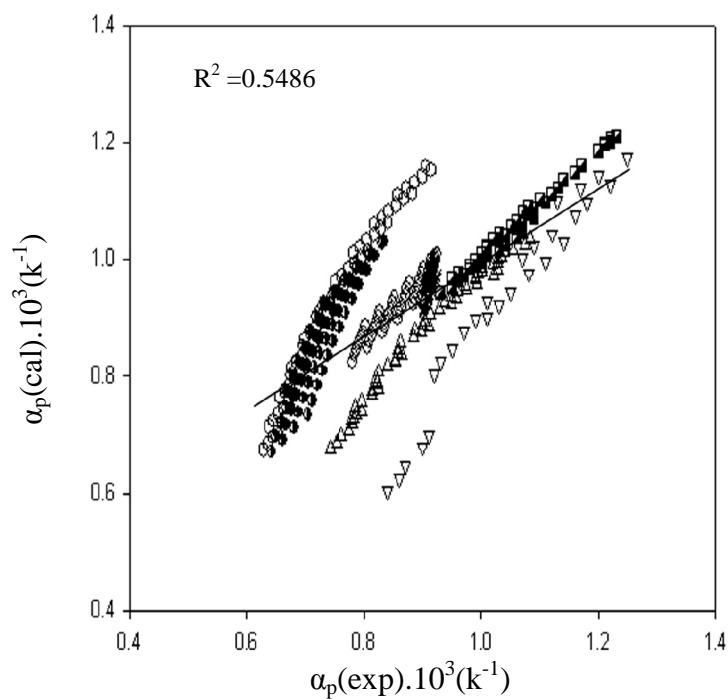
در این قسمت، مقدار متغیر وابسته؛ یعنی انبساط‌پذیری هم‌فشار، برای تعدادی مولکول که در هیچ یک از مراحل مدل‌سازی دخالت نداشتند، توسط مدل‌های ساخته شده محاسبه شده و سپس نمودار برگشتی برای آن‌ها رسم شد. نتایج این بخش، در جدول (۳-۱۰) و شکل‌های (۳-۱۳) تا (۳-۱۵) نشان داده شده است.

جدول (۱۰-۳) - پارامترهای آماری روش‌های CDFS-ANN ، CDFS-MLR و CDFS-SVM برای تست بیرونی

	CDFS-MLR	CDFS-ANN	CDFS-SVM
R^2	۰/۵۴۸۶	۰/۷۵۷۲	۰/۹۹۵۳
MSE	۰/۰۱۱۹	۰/۰۰۵۰	$۱/۱۷۰۰ \times ۱۰^{-۴}$

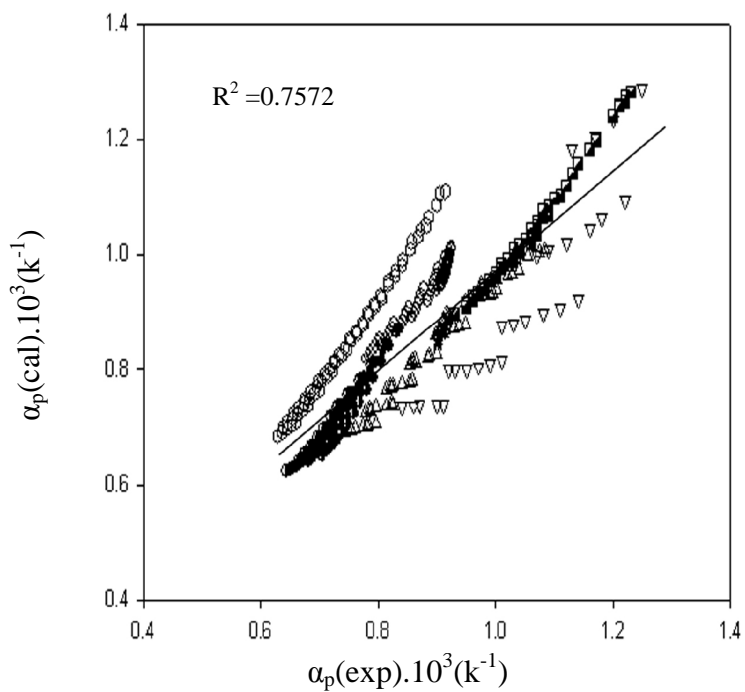
نتایج موجود در جدول (۱۰-۳) نشان می‌دهد که ماشین بردار پشتیبان با مقدار R^2 بیشتر و MSE کمتر کارایی بهتری را در پیش‌بینی α_p ترکیبات آلی دارد.

- heptanoic acid
- △ decan
- × hexadecan
- ◆ 1,2propanediol
- ethylpentanoate
- ▽ pentan-2-one
- 2-ethyl-1-butanol



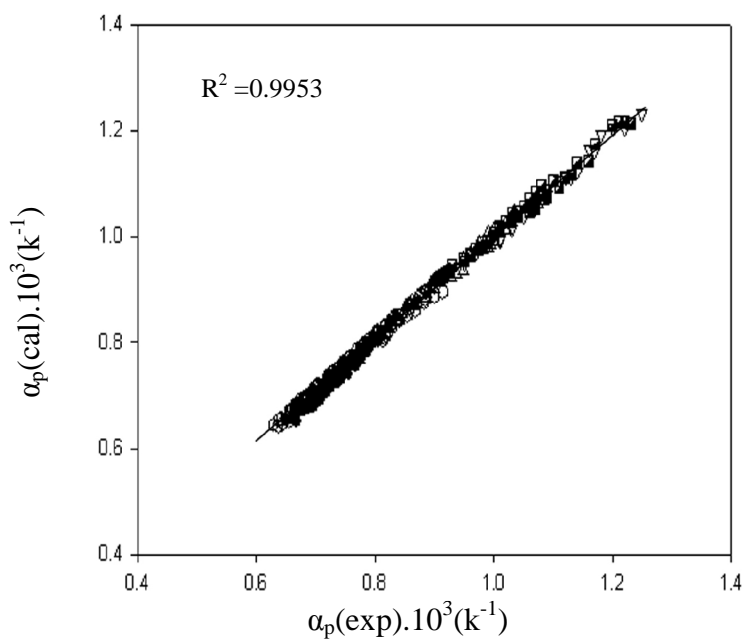
شکل (۱۳-۳) - نمودار برگشتی حاصل از CDFS-MLR برای سری تست بیرونی

- heptanoic acid
- △ decan
- × hexadecan
- ◆ 1,2propanediol
- ethylpentanoate
- ▽ pentan-2-one
- 2-ethyl-1-butanol



شکل (۳-۱۴) - نمودار برگشتی حاصل از CDFS-ANN برای سری تست بیرونی

- heptanoic acid
- △ decan
- × hexadecan
- ◆ 1,2propanediol
- ethylpentanoate
- ▽ pentan-2-one
- 2-ethyl-1-butanol



شکل (۳-۱۵) - نمودار برگشتی حاصل از CDFS-SVM برای سری تست بیرونی

۳-۱-۹-۴- ارزیابی مدل شبکه‌ی عصبی مصنوعی با استفاده از آزمون

Y- تصادفی

در روش Y- تصادفی، به جای مقادیر واقعی انبساط‌پذیری هم‌فشار، مقادیر تصادفی به شبکه‌ی عصبی مصنوعی ارائه شد. سپس مقدار ضریب تعیین (R^2) برای سری ارزیابی و تست محاسبه شد. نتیجه‌ی این آزمون برای روش CDFS-ANN در جدول (۳-۱۰) ارائه شده است.

جدول (۳-۱۱)- مقادیر R^2 با روش Y- تصادفی برای سری ارزیابی و سری تست روش CDFS-ANN

شماره تکرار آزمون	CDFS-ANN	
	R^2 ارزیابی	R^2 تست
۱	۰/۰۲۳۶	۰/۰۰۰۲
۲	۰/۰۴۸۸۹	۰/۰۲۵۵
۳	۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۱۳
۴	۰/۰۴۴۵	۰/۰۱۷۶
۵	۰/۰۰۱۵	۰/۰۰۰۳
۶	۰/۳۲۷۴	۰/۰۰۱۲
۷	۰/۴۵۴۸	۰/۰۷۵۰
۸	۰/۰۲۳۳	۰/۰۰۱۸
۹	۰/۰۰۰۰	۰/۰۰۴۰
۱۰	۰/۱۳۶۳	۰/۰۱۲۸

مقادیر نامطلوب ضریب تعیین نشان می‌دهد که در مدل حاصل ارتباط شانس وجود نداشته

است.

۳-۱-۱۰- بررسی توصیف‌گرهای وارد شده در مدل انبساط‌پذیری گرمایی

در این قسمت به بررسی اجمالی توصیف‌گرهای تئوری انتخاب شده با راهبرد CDFS می‌پردازیم. این توصیف‌گرها شامل GATS1v, Mor22m, HATSp و RTp هستند.

۳-۱-۱۰-۱- توصیف‌گرهای 2D-autocorrelation

این توصیف‌گرها با نام توصیف‌گرهای دو بعدی خود ارتباطی، از گراف مولکولی و از طریق محاسبه‌ی مجموع وزن اتم‌های انتهایی کل مسیرها با طول مسیر مورد نظر به دست می‌آیند. یک زیر مجموعه از این توصیف‌گرها، توصیف‌گرهای خودهمبستگی گری^۱ هستند که طبق رابطه‌ی (۳-۳) به دست می‌آیند.

$$GATS\ dw = \frac{1/2\Delta \sum_{i=1}^A \sum_{j=1}^A \delta_{ij} (w_i - w_j)^2}{1/(A-1) \sum_{i=1}^A (w_i - \bar{w})^2} \quad (3-3)$$

که در این رابطه، نشان d به فاصله‌ی توپولوژیکی، w به وزن، δ_{ij} دلتای کرونکر، Δ به مجموع دلتای کرونکر، w_i و w_j وزن‌های اتم‌های i و j و \bar{w} میانگین وزن روی مولکول اشاره می‌کند. توصیف‌گر GATS1v جزء توصیف‌گرهای دوبعدی خود ارتباطی است که در آن بیانگر فاصله‌ی توپولوژیکی ۱ و وزن دار شدن این توصیف‌گر با حجم و اندروالس است.

در جدول (۳-۱۲) مقدار توصیف‌گرهای انتخابی و چند توصیف‌گر دیگر برای ۴ مولکول به عنوان نمونه، مشاهده می‌شود. بر اساس رابطه‌ی (۱-۱) انبساط‌پذیری هم‌فشار با حجم رابطه‌ی عکس دارد؛ یعنی کاهش حجم باعث افزایش مقدار α_p می‌شود. با توجه به اینکه اثر متوسط توصیف‌گر GATS1v بر انبساط‌پذیری گرمایی مقداری مثبت است، افزایش اثر آن باعث افزایش مقدار انبساط‌پذیری گرمایی می‌شود و این ناشی از آن است که مقدار این توصیف‌گر با حجم رابطه‌ی عکس

¹ Geary Autocorrelation

دارد (جدول (۳-۱۲))؛ یعنی افزایش مقدار GATS1v به علت کاهش مقدار حجم باعث افزایش مقدار α_p می‌شود.

جدول (۳-۱۲) - مقدار برخی توصیف‌گرهای محاسبه شده با Dragon برای بوتانول، هپتانول، نونانول و آن دکانول

نام مولکول	GATS1v	Mor22m	HATSp	RTp	MW ^۲	SV ^۱
بوتانول	۳/۳۵۲	۰/۰۱۶	۱/۶۴۴	۰/۱۹۴	۷۴/۱۴	۷/۵
هپتانول	۳/۱۹۹	۰/۰۲۸	۱/۷۲۵	۰/۱۶۵	۱۱۶/۲۳	۱۲/۲۹
نونانول	۳/۱۵۴	۰/۰۷۵	۱/۵۶۴	۰/۱۴۵	۱۴۴/۲۹	۱۵/۴۹
آن دکانول	۳/۱۲۶	۰/۱۰۸	۱/۳۷۴	۰/۱۲۸	۱۷۲/۳۵	۱۸/۶۸

۳-۱-۱۰-۲- توصیف‌گرهای 3D-MORSE

توصیف‌گرهای 3D-MORSE ساختار سه بعدی مولکول را بر اساس پراش الکترونی ارائه می‌دهند. رابطه‌ی این توصیف‌گرها در رابطه‌ی (۳-۴) بیان شده است.

$$MOR(s, w) = I(s, w) = \sum_{i=2}^n \sum_{j=1}^{i-1} w_i w_j \sin(sr_{ij}) / sr_{ij} \quad (۳-۴)$$

که در این رابطه، $I(s, w)$ شدت الکترون پراکنده شده، w_i و w_j خاصیت اتمی اتم‌های i و j ، r_{ij} فاصله‌ی بین اتم‌ها است. پارامتر s نشان‌دهنده‌ی پراکندگی در جهات مختلف توسط اتم‌ها است.

Mor22m در این دسته قرار می‌گیرد. اثر متوسط این توصیف‌گر در مدل ۴۳/۴۵۵ به دست آمده است که مثبت بودن آن نشان‌دهنده‌ی رابطه‌ی مستقیم این توصیف‌گر با انبساط‌پذیری گرمایی است. اگر رابطه‌ی (۱-۲) در رابطه‌ی (۱-۳) قرار داده شود، مشخص می‌شود که انبساط‌پذیری هم‌فشار با جرم رابطه‌ی مستقیم دارد. اعداد جدول (۳-۱۲) نشان می‌دهد که با افزایش مقدار جرم (MW)،

¹ Sum of Atomic Van Der Waals Volumes

² Molecular Weight

مقدار توصیف‌گر Mor22m افزایش یافته است. به همین دلیل افزایش Mor22m باعث افزایش α_p می‌شود.

۳-۱-۱-۳- توصیف‌گرهای GETAWAY

این توصیف‌گرها خاصیت هندسی و توپولوژیکی مولکول را نشان می‌دهند که از ماتریس تاثیر مولکولی (MIM) محاسبه می‌شوند. ماتریس تاثیر مولکولی H به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$H = M (M^T M) . M^T \quad (۵-۳)$$

که در آن، M ماتریس مختصات مولکولی و T به معنای ماتریس ترانپوز است. یک دسته از توصیف‌گرهای GETAWAY، دسته‌ی HATS می‌باشد. هر یک از توصیف‌گرهای این دسته به صورت HATSkw نمایش داده می‌شود. رابطه‌ی (۶-۳) بیان‌کننده‌ی این دسته از توصیف‌گرهاست.

$$HATS kw = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n (w_i h_{ii}) . (w_j h_{jj}) \delta(k, d_{ij}) \quad (۶-۳)$$

در رابطه‌ی بالا، k فاصله‌ی توپولوژیکی، w یک ویژگی اتم، w_i و w_j مقدار آن خاصیت برای اتم‌های i و j، h_{ii} و h_{jj} عناصر قطری متناظر با اتم‌های i و j در ماتریس H است. توصیف‌گر HATSp که از روش CDFS به دست آمد، در این دسته قرار می‌گیرد. اثر متوسط این توصیف‌گر در مدل، ۱۶/۰۳۳ است که نشان می‌دهد باعث افزایش مقدار انبساط‌پذیری گرمایی می‌شود.

دسته‌ی دیگر، توصیف‌گرهای دسته‌ی RKw هستند. این دسته، از ماتریس تاثیر-فاصله به دست می‌آید که در رابطه‌ی (۷-۳) بیان شده است.

¹ Molecular Influence Matrix

$$RKW = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j>1}^n \left(\frac{\sqrt{h_{ii} \cdot h_{jj}}}{r_{ij}} \right) w_i w_j \cdot \delta(k, d_{ij}) \quad (7-3)$$

در رابطه‌ی (۷-۳) عنصر قطری R_{ij} از رابطه‌ی زیر پیروی می‌کند.

$$R(ij) = \frac{\sqrt{h_{ii} \cdot h_{jj}}}{r_{ij}} \quad \text{for } i \neq j \quad (8-3)$$

توصیف‌گر RTp در این دسته قرار دارد. این توصیف‌گر در مدل دارای اثر متوسط $13/552$ است.

علامت مثبت نشان می‌دهد افزایش اثر این توصیف‌گر منجر به افزایش انبساط‌پذیری گرمایی می‌شود.

۳-۱-۱۱- نتیجه‌گیری

در این پایان‌نامه از روش‌های کمومتریکس برای پیش‌بینی ضریب انبساط‌پذیری گرمایی هم‌فشار (α_p) ترکیبات آلی در گستره‌ی وسیعی از دما و فشار استفاده شده است. از آنجایی که دستیابی به مقادیر α_p با روش‌های تجربی مقرون به صرفه نیست، پیش‌بینی آن با استفاده از کمومتریکس از اهمیت بالایی برخوردار است. برای انتخاب توصیف‌گرهای مناسب از روش CDFS استفاده شد. سپس این توصیف‌گرها برای مدل‌سازی خطی و غیرخطی مورد استفاده قرار گرفت.

نتایج جدول (۳-۹) نشان می‌دهد که روش خطی روش مناسبی برای پیش‌بینی انبساط‌پذیری هم‌فشار نیست. از بین دو روش غیرخطی نیز، ماشین بردارهای پشتیبان با مقدار ضریب تعیین بیشتر و مقدار MSE کمتر، نشان می‌دهد که این مدل قادر به پیش‌گویی بهتر مقدار α_p برای سیالات آلی می‌باشد. هم‌چنین مقایسه‌ی نمودارهای خطای باقیمانده نشان می‌دهد که مقدار خطای مطلق بین مقادیر تجربی و مقادیر محاسباتی برای سری تست درونی و سری تست بیرونی با روش غیرخطی ماشین بردارهای پشتیبان بازه‌ی محدودتری دارد و این به معنای خطای کمتر این روش است. در نتیجه ماشین بردارهای پشتیبان روش کارآمدی برای پیش‌بینی α_p است.

۳-۱-۱۲- آینده نگری

روش خطی مورد استفاده در این پایان نامه روش رگرسیون خطی چندگانه است. می‌توان روش‌های خطی دیگر را برای پیش‌بینی انبساط‌پذیری به کار گرفته و نتایج به دست آمده را مقایسه کرد.

توصیف‌گرهای انتخابی با روش CDFS در این تحقیق، از طریق روش خطی رگرسیون مرحله‌ای به دست آمده است. می‌توان ترکیب CDFS و یک روش غیر خطی مانند الگوریتم ژنتیک را برای انتخاب توصیف‌گرها به کار گرفت.

می‌توان روش‌های دیگری مانند رگرسیون مرحله‌ای و الگوریتم ژنتیک را به جای روش CDFS برای انتخاب بهترین توصیف‌گرها استفاده کرد و نتایج آن را با کار حاضر مقایسه نمود.

پیوست

جدول (۱-پ)- مقادیر تجربی و مقادیر پیش‌بینی شده‌ی انبساط‌پذیری هم‌فشار برای ترکیبات سری تست درونی

پنتانوئیک اسید	(مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۹۶۴۲	۰/۹۹۵۶	۰/۹۶۵۳	۰/۹۶۹۷
۲	۰/۹۵۹۶	۰/۹۹۱۷	۰/۹۵۷۱	۰/۹۹۶۶
۳	۰/۹۳۶۵	۰/۹۷۱۸	۰/۹۱۸۳	۰/۹۴۷۳
۴	۰/۸۴۸۸	۰/۸۹۷۴	۰/۷۹۸۴	۰/۸۴۱۳
۵	۰/۹۷۳۷	۱/۰۰۶۷	۰/۹۷۵۰	۰/۹۷۴۷
۶	۰/۹۷۱۵	۱/۰۰۴۷	۰/۰۷۰۷	۰/۹۷۳۲
۷	۰/۹۶۲۹	۰/۹۹۷۳	۰/۹۵۵۰	۰/۹۶۷۱
۸	۰/۹۱۷۱	۰/۹۵۷۶	۰/۸۸۰۱	۰/۹۲۱۰
۹	۰/۸۵۹۱	۰/۹۰۸۰	۰/۸۰۲۲	۰/۸۴۶۳
۱۰	۰/۹۸۲۶	۱/۰۱۷۳	۰/۹۸۴۸	۰/۹۷۹۴
۱۱	۰/۹۸۰۳	۱/۰۱۵۳	۰/۹۸۰۳	۰/۹۷۸۱
۱۲	۰/۹۵۵۰	۰/۹۹۳۰	۰/۹۳۳۲	۰/۹۵۷۳
۱۳	۰/۸۹۸۰	۰/۹۴۳۴	۰/۸۴۴۷	۰/۸۹۰۲
۱۴	۰/۸۴۰۲	۰/۸۹۳۸	۰/۷۲۲۰	۰/۸۴۰۷
۱۵	۰/۹۹۰۷	۱/۰۲۷۴	۰/۹۹۴۷	۰/۹۸۳۷
۱۶	۰/۹۸۶۳	۱/۰۲۳۴	۰/۹۸۵۴	۰/۹۸۱۱
۱۷	۰/۹۶۴۰	۱/۰۰۳۶	۰/۹۴۲۰	۰/۹۶۲۹
۱۸	۰/۹۰۷۷	۰/۹۵۴۰	۰/۸۵۰۸	۰/۸۹۸۱
۱۹	۰/۸۵۰۶	۰/۹۰۴۴	۰/۷۷۶۵	۰/۸۵۱۸
۲۰	۰/۹۹۹۳	۱/۰۳۸۰	۱/۰۰۶۹	۰/۹۸۷۹
۲۱	۰/۹۸۹۴	۱/۰۲۹۱	۰/۹۸۵۲	۰/۹۷۲۰
۲۲	۰/۹۴۵۲	۰/۹۸۹۴	۰/۹۰۲۰	۰/۹۳۹۷
۲۳	۰/۸۸۹۱	۰/۹۳۹۸	۰/۸۱۷۸	۰/۸۷۶۱
اکتان	(مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۹۰۶۷	۱/۱۰۷۶	۱/۰۰۴۶	۰/۹۱۷۴
۲	۰/۸۴۴۵	۱/۰۵۵۶	۰/۹۳۲۴	۰/۸۴۸۱
۳	۰/۷۹۴۴	۱/۰۰۴۰	۰/۸۷۰۶	۰/۷۹۰۱
۴	۰/۶۵۲۴	۰/۷۸۰۲	۰/۶۷۸۱	۰/۶۳۵۹
۵	۱/۴۲۱۰	۱/۱۸۸۷	۱/۴۴۲۴	۱/۴۳۲۹
آمینوبوتان	(مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۱/۲۲۵۰	۱/۰۹۰۰	۱/۲۳۲۹	۱/۲۱۷۶
۲	۱/۰۸۷۰	۰/۹۹۰۸	۱/۸۳۵	۱/۰۷۲۲
۳	۰/۹۵۹۰	۰/۸۴۲۰	۰/۹۳۲۱	۰/۹۶۹۸
۴	۰/۹۰۰۰	۰/۷۴۲۷	۰/۸۶۶۷	۰/۹۱۴۴
۵	۰/۸۳۹۰	۰/۶۴۳۵	۰/۸۲۴۳	۰/۸۴۷۳
۶	۰/۷۷۵۰	۰/۴۹۴۷	۰/۷۹۷۱	۰/۷۸۱۴
۷	۱/۳۳۱۰	۱/۱۶۰۸	۱/۳۶۰۱	۱/۳۴۷۵
۸	۱/۱۵۹۰	۱/۰۶۱۶	۱/۱۷۲۰	۰/۱۴۹۱

ادامہی جدول (۱-پ)

۹	۱/۰۴۲۰	۰/۹۶۲۴	۱/۰۳۶۷	۱/۰۳۰۸
۱۰	۰/۹۵۹۰	۰/۸۶۳۱	۰/۹۳۹۴	۰/۹۶۸۸
۱۱	۰/۸۹۶۰	۰/۷۶۳۹	۰/۸۷۱۸	۰/۹۱۱۰
۱۲	۰/۸۳۸۰	۰/۶۶۴۷	۰/۸۲۸۸	۱/۸۴۵۲
۱۳	۰/۷۹۶۰	۰/۵۶۵۵	۰/۸۰۶۶	۰/۸۰۲۲
۱۴	۱/۴۷۹۰	۱/۲۳۱۱	۱/۲۸۴۸	۱/۴۶۲۵
۱۵	۱/۲۵۷۰	۱/۱۳۲۴	۱/۱۱۴۶	۱/۲۴۸۰
۱۶	۱/۱۰۶۰	۱/۰۳۳۱	۰/۹۹۲۵	۱/۰۹۱۲
۱۷	۱/۰۰۱۰	۰/۹۳۳۹	۰/۹۰۶۸	۰/۹۹۶۷
۱۸	۰/۹۲۳۰	۰/۸۳۴۷	۰/۸۳۱۲	۰/۹۳۹۵
۱۹	۰/۸۳۷۰	۰/۶۸۵۹	۱/۴۳۰۳	۰/۸۴۶۳
۲۰	۱/۱۸۸۰	۱/۱۰۳۹	۱/۲۱۴۰	۱/۱۷۳۹
۲۱	۱/۰۶۰۰	۱/۰۰۴۷	۱/۰۵۹۷	۱/۰۴۴۴
۲۲	۰/۹۰۰۰	۰/۹۰۵۵	۰/۹۶۰۷	۰/۹۶۷۹
۲۳	۰/۸۹۰۰	۰/۸۰۶۳	۰/۸۷۷۰	۰/۹۰۶۵
۲۴	۰/۸۳۵۰	۰/۷۰۷۱	۰/۸۳۱۷	۰/۸۴۷۹
۲۵	۰/۷۸۷۰	۰/۶۰۷۹	۰/۸۰۹۵	۰/۸۰۰۴
۲۶	۱/۴۳۶۰	۱/۲۲۴۳	۱/۴۶۷۵	۱/۴۲۷۹
۲۷	۱/۲۰۴۰	۱/۱۲۵۱	۱/۲۳۵۴	۱/۱۸۷۵
۲۸	۱/۰۶۷۰	۱/۰۲۵۹	۱/۰۷۰۲	۱/۰۵۰۵۰
۲۹	۰/۹۶۰۰	۰/۹۲۶۷	۰/۹۵۴۳	۰/۹۶۸۷
۳۰	۰/۸۸۸۰	۰/۸۲۷۵	۰/۸۷۶۹	۰/۹۰۴۳
۳۱	۰/۸۰۵۰	۰/۶۷۸۶	۰/۸۱۶۲	۰/۸۲۱۵
۳۲	۰/۷۶۳۰	۰/۵۷۹۴	۰/۸۰۴۱	۰/۷۷۹۵
۳۳	۱/۳۲۴۰	۱/۱۹۵۹	۱/۳۶۹۷	۱/۳۰۸۳
۳۴	۱/۱۳۶۰	۱/۰۹۶۷	۱/۱۶۰۹	۱/۱۲۰۵
۳۵	۱/۰۰۶۰	۰/۹۹۷۵	۱/۰۱۲۳	۱/۰۰۸۰
۳۶	۰/۹۲۰۰	۰/۸۹۸۳	۰/۹۱۱۲	۰/۹۳۶۶
۳۷	۰/۸۵۴۰	۰/۷۹۹۰	۰/۸۴۷۲	۰/۸۷۰۵
۳۸	۰/۸۰۰۰	۰/۶۹۹۸	۰/۸۱۲۴	۰/۸۱۶۶
۳۹	۱/۵۲۰۰	۱/۲۶۶۷	۱/۲۷۷۶	۱/۵۰۳۵
۴۰	۱/۲۳۶۰	۱/۱۶۷۵	۱/۰۸۸۷	۱/۲۲۶۵
۴۱	۱/۰۷۶۰	۱/۰۶۸۳	۰/۹۵۷۳	۱/۰۵۹۵
۴۲	۰/۹۶۲۰	۰/۹۶۹۰	۰/۸۴۲۵	۰/۹۷۳۳
۴۳	۰/۸۵۰۰	۰/۸۲۰۲	۰/۸۰۶۸	۰/۸۶۵۱
۴۴	۰/۷۹۴۰	۰/۷۲۱۰	۰/۷۹۵۳	۰/۸۰۷۵
۴۵	۰/۷۵۳۰	۰/۶۲۱۸	۱/۴۲۴۳	۰/۷۶۴۸
۴۶	۰/۳۸۲۰	۱/۲۳۸۳	۱/۱۸۸۸	۱/۳۸۵۱
۴۷	۱/۱۵۵۰	۱/۱۳۹۱	۱/۰۱۹۹	۱/۱۴۸۸
۴۸	۰/۰۱۵۰	۱/۰۳۹۸	۰/۹۰۶۳	۱/۰۱۷۵

ادامہی جدول (۱-پ)

۴۹	۰/۹۲۰۰	۰/۹۴۰۶	۰/۸۳۶۲	۰/۹۳۶۳
۵۰	۰/۸۴۶۰	۰/۸۴۱۴	۰/۷۹۹۶	۰/۸۵۷۹
۵۱	۰/۷۸۷۰	۰/۷۴۲۲	۰/۷۸۸۴	۰/۷۹۵۰
۵۲	۰/۷۴۶۰	۰/۶۴۳۰	۱/۴۴۸۵	۰/۷۵۱۸
۵۳	۰/۱۶۵۰	۱/۱۶۰۲	۱/۲۰۱۷	۱/۱۶۲۵
۵۴	۰/۰۲۱۰	۱/۰۶۱۰	۱/۰۲۲۳	۱/۰۲۱۲
۵۵	۰/۹۲۱۰	۰/۹۶۱۸	۰/۹۰۲۰	۰/۹۳۶۸
۵۶	۰/۸۴۲۰	۰/۸۶۲۶	۰/۸۲۸۷	۰/۸۵۰۷
۵۷	۰/۷۵۷۰	۰/۷۱۳۸	۰/۷۸۲۶	۰/۷۵۹۲
۵۸	۱/۲۹۰۰	۱/۲۳۱۰	۱/۳۳۲۹	۱/۲۹۴۹
۵۹	۱/۰۷۵۰	۱/۱۳۱۸	۱/۱۱۰۵	۱/۰۶۰۴
۶۰	۰/۹۶۷۰	۱/۰۳۲۶	۰/۹۵۳۴	۰/۹۸۲۶
۶۱	۰/۸۷۸۰	۰/۹۳۳۴	۰/۸۵۳۰	۰/۸۹۰۴
۶۲	۰/۷۹۹۰	۰/۸۳۴۲	۰/۷۹۶۵	۰/۸۰۳۶
۶۳	۰/۷۴۹۰	۰/۷۳۴۹	۰/۷۷۲۷	۰/۷۵۲۷
۶۴	۱/۲۴۲۱	۰/۹۵۰۸	۱/۱۳۹۳	۱/۲۳۵۵
۶۵	۱/۰۷۲۳	۰/۸۵۲۰	۱/۰۴۲۳	۱/۰۵۷۲
۶۶	۰/۹۶۵۵	۰/۷۵۲۸	۰/۹۷۲۲	۰/۹۷۳۳
پنتیل آمین	مقادیر تجربی) $10^3 \times$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۸۹۹۹۱	۰/۶۵۳۶	۰/۹۲۰۲	۰/۹۱۱۰
۲	۰/۸۵۹۷	۰/۵۵۴۴	۰/۸۸۱۱	۰/۸۶۳۳
۳	۰/۷۹۹۵	۰/۴۵۵۲	۰/۸۵۱۹	۰/۸۰۶۵
۴	۰/۷۶۵۷	۰/۳۵۶۰	۰/۸۳۰۵	۰/۷۷۱۳
۵	۰/۷۳۰۰	۰/۲۵۶۸	۰/۸۱۵۵	۰/۷۳۳۴
۶	۱/۱۶۲۲	۰/۹۲۲۸	۱/۱۰۲۱	۰/۱۶۵۱
۷	۱/۰۳۳۳	۰/۸۲۳۶	۱/۰۱۴۳	۱/۰۲۹۹
۸	۰/۹۳۸۹	۰/۷۲۴۴	۰/۹۵۱۵	۰/۹۴۲۷
۹	۰/۸۷۳۱	۰/۶۲۵۲	۰/۹۰۵۶	۰/۸۷۸۹
۱۰	۰/۸۲۱۶	۰/۵۲۶۰	۰/۸۷۱۸	۰/۸۲۶۰
۱۱	۰/۷۷۳۰	۰/۴۲۶۸	۰/۸۴۷۰	۰/۷۷۳۲
۱۲	۰/۷۳۹۸	۰/۳۲۷۵	۰/۸۲۸۸	۰/۷۳۷۱
۱۳	۱/۲۸۵۶	۰/۹۹۳۱	۱/۱۸۰۷	۱/۲۹۶۶
۱۴	۱/۱۰۸۳	۰/۸۹۴۴	۱/۰۶۸۵	۱/۱۰۵۲
۱۵	۰/۹۹۲۷	۰/۷۹۵۲	۰/۹۸۹۷	۰/۹۹۴۰
۱۶	۰/۹۰۷۶	۰/۶۹۶۰	۰/۹۳۳۷	۰/۹۱۹۸
۱۷	۰/۸۴۴۰	۰/۵۹۶۸	۰/۸۹۳۳	۰/۸۴۳۷
۱۸	۰/۷۹۶۱	۰/۴۹۷۵	۰/۸۶۳۹	۰/۷۹۷۰
۱۹	۰/۷۵۴۶	۰/۳۹۸۳	۰/۸۴۲۳	۰/۷۵۱۱
۲۰	۰/۷۲۰۴	۰/۲۹۹۱	۰/۸۲۶۱	۰/۷۱۳۹
۲۱	۱/۲۰۸۳	۰/۹۶۵۲	۱/۱۳۹۴	۱/۲۲۱۴

ادامہی جدول (۱-پ)

۲۲	۱/۰۶۴۲	۰/۸۶۶۰	۱/۰۳۸۱	۱/۰۶۴۵
۲۳	۰/۹۶۱۱	۰/۷۶۶۸	۰/۹۶۷۴	۰/۹۵۸۹
۲۴	۰/۸۷۹۵	۰/۶۶۷۶	۰/۹۱۷۷	۰/۸۸۳۵
۲۵	۰/۸۲۰۹	۰/۵۶۸۳	۰/۸۸۲۱	۰/۸۲۵۱
۲۶	۰/۷۷۱۴	۰/۴۶۹۱	۰/۸۵۶۲	۰/۷۷۱۱
۲۷	۰/۷۳۷۱	۰/۳۶۹۹	۰/۸۳۶۷	۰/۷۳۳۶
۲۸	۱/۳۳۱۶	۱/۰۳۵۵	۱/۲۳۲۱	۱/۳۴۲۲
۲۹	۱/۱۴۶۲	۰/۹۳۶۸	۱/۱۰۱۰	۱/۱۴۵۵
۳۰	۱/۰۲۱۱	۰/۸۳۷۶	۱/۰۰۹۹	۱/۰۱۵۲
۳۱	۰/۸۸۲۷	۰/۶۸۸۷	۰/۹۲۲۷	۰/۸۸۷۶
۳۲	۰/۸۲۰۵	۰/۵۸۹۵	۰/۸۸۵۵	۰/۸۲۸۲
۳۳	۰/۷۷۰۵	۰/۴۹۰۳	۰/۸۵۸۴	۰/۷۷۵۱
۳۴	۰/۷۳۵۷	۰/۳۹۱۱	۰/۸۳۷۹	۰/۷۳۸۰
۳۵	۰/۱۴۸۹	۰/۹۰۸۹	۱/۰۸۵۰	۱/۱۳۸۳
۳۶	۰/۰۱۰۶	۰/۸۱۰۲	۰/۹۷۶۱	۰/۹۹۴۱
۳۷	۰/۹۱۷۹	۰/۷۱۱۰	۰/۸۸۷۶	۰/۹۲۴۷
ہگزیل آمین	مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۸۴۹۲	۰/۶۱۱۸	۰/۸۱۴۶	۰/۸۵۸۷
۲	۰/۷۹۷۹	۰/۵۱۲۶	۰/۷۵۵۵	۰/۸۰۴۷
۳	۰/۷۵۱۶	۰/۴۱۳۳	۰/۷۱۰۹	۰/۷۵۵۶
۴	۰/۷۰۴۸	۰/۳۶۴۵	۰/۶۷۲۶	۰/۷۰۶۴
۵	۱/۱۶۹۲	۰/۹۳۰۱	۱/۱۰۴۲	۱/۱۶۶۲
۶	۱/۰۱۸۷	۰/۸۳۱۴	۰/۹۸۹۰	۱/۰۰۴۰
۷	۰/۹۲۳۱	۰/۷۳۲۲	۰/۸۹۶۹	۰/۹۳۰۷
۸	۰/۸۵۰۷	۰/۶۳۲۹	۰/۸۲۲۱	۰/۸۵۷۵
۹	۰/۷۹۶۸	۰/۵۳۳۷	۰/۷۶۲۶	۰/۷۹۹۱
۱۰	۰/۷۵۰۲	۰/۴۳۴۵	۰/۷۱۸۲	۰/۷۴۸۵
۱۱	۰/۷۱۹۱	۰/۳۳۵۳	۰/۶۸۹۲	۰/۷۱۵۶
۱۲	۰/۶۸۵۱	۰/۲۳۶۱	۰/۶۷۵۴	۰/۶۷۸۲
۱۳	۱/۰۹۶۹	۰/۹۰۲۲	۱/۰۶۱۰	۱/۱۰۵۸
۱۴	۰/۹۷۲۰	۰/۸۰۳۰	۰/۹۵۲۴	۰/۹۷۶۲
۱۵	۰/۸۹۰۱	۰/۷۰۳۷	۰/۸۶۶۱	۰/۸۸۷۱
۱۶	۰/۸۲۲۴	۰/۶۰۴۵	۰/۷۹۷۴	۰/۸۲۶۲
۱۷	۰/۷۴۸۷	۰/۴۵۵۷	۰/۷۲۴۴	۰/۷۴۵۲
۱۸	۰/۷۱۱۹	۰/۳۶۶۵	۰/۶۹۵۴	۰/۷۰۴۳
۱۹	۰/۶۷۹۸	۰/۲۵۷۳	۰/۶۸۱۴	۰/۶۶۹۴
۲۰	۱/۱۱۶۴	۰/۹۲۳۴	۱/۰۸۰۵	۱/۱۲۵۵
۲۱	۰/۹۸۱۰	۰/۸۲۴۱	۰/۹۶۵۱	۰/۹۸۱۹
۲۲	۰/۹۰۴۰	۰/۷۲۴۹	۰/۸۷۴۷	۰/۸۹۹۹
۲۳	۰/۸۲۴۴	۰/۶۲۵۷	۰/۸۰۳۷	۰/۸۲۹۷

ادامہی جدول (۱-پ)

۲۴	۰/۷۷۰۸	۰/۵۲۶۵	۰/۷۴۹۹	۰/۷۷۰۱
۲۵	۰/۷۲۷۷	۰/۴۲۷۳	۰/۷۱۲۵	۰/۷۲۲۶
۲۶	۰/۶۹۲۳	۰/۳۲۸۱	۰/۶۹۰۷	۰/۶۸۳۸
۲۷	۱/۲۳۳۵	۰/۹۹۳۶	۱/۱۷۶۱	۰/۲۳۹۴
۲۸	۱/۰۴۳۷	۰/۸۹۴۹	۱/۰۳۵۷	۱/۰۳۳۴
۲۹	۰/۹۱۸۳	۰/۷۴۶۱	۰/۸۸۲۸	۰/۹۱۱۹
۳۰	۰/۷۹۳۰	۰/۵۹۷۳	۰/۷۷۹۰	۰/۷۹۸۹
۳۱	۰/۷۴۵۶	۰/۴۹۸۱	۰/۷۳۲۳	۰/۷۴۸۴
۳۲	۰/۶۹۶۸	۰/۳۹۸۸	۰/۷۰۲۱	۰/۶۹۴۸
۳۳	۰/۶۶۸۸	۰/۲۹۹۶	۰/۶۸۷۲	۰/۶۶۵۶
۳۴	۱/۱۰۰۰	۱/۱۴۳۲	۱/۱۴۴۸	۱/۰۸۵۱
۳۵	۰/۹۳۰۰	۰/۹۴۴۸	۰/۹۵۲۲	۰/۹۳۸۷
۳۶	۱/۲۷۰۰	۱/۲۶۳۱	۱/۳۳۲۴	۱/۲۶۱۸
پروپیل استات	(مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۱/۰۲۰۰	۱/۰۶۵۲	۱/۰۵۲۴	۱/۰۰۵۰
۲	۰/۸۲۰۰	۰/۷۶۷۵	۰/۸۳۹۲	۰/۸۱۸۸
۳	۱/۳۱۰۰	۱/۲۹۴۹	۱/۳۸۲۴	۱/۳۲۶۶
۴	۱/۰۳۰۰	۱/۰۹۷۰	۱/۰۸۶۸	۱/۰۲۴۸
۵	۰/۹۵۰۰	۰/۹۹۷۷	۰/۹۷۸۴	۰/۹۵۵۰
۶	۱/۳۵۰۰	۱/۳۱۶۱	۱/۴۰۳۵	۱/۳۶۱۴
۷	۱/۰۵۰۰	۱/۱۱۸۱	۱/۱۱۱۸	۱/۰۳۶۱
۸	۰/۸۴۰۰	۰/۸۲۰۵	۰/۸۲۷۸	۰/۸۴۷۱
۹	۱/۲۶۰۰	۱/۱۹۲۲	۱/۱۵۱۹	۱/۲۴۸۹
۱۰	۱/۰۳۰۰	۰/۹۹۴۳	۰/۹۷۹۷	۱/۰۱۳۵
۱۱	۰/۸۴۰۰	۰/۶۹۶۶	۰/۸۵۴۸	۰/۸۴۸۰
اتیل پروپیونات	(مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۱/۲۹۰۰	۱/۲۱۳۴	۱/۱۸۷۲	۱/۲۸۶۸
۲	۱/۰۳۰۰	۱/۰۱۵۴	۰/۹۹۰۰	۱/۰۲۲۶
۳	۰/۸۴۰۰	۰/۷۱۷۸	۰/۸۴۵۱	۰/۸۴۳۰
۴	۱/۳۴۰۰	۱/۲۴۵۱	۱/۲۴۶۳	۱/۳۴۹۸
۵	۱/۰۴۰۰	۱/۰۴۷۲	۱/۰۰۷۹	۱/۰۳۵۸
۶	۰/۸۴۰۰	۰/۷۴۹۶	۰/۸۲۸۲	۰/۸۳۹۱
۷	۱/۳۷۰۰	۱/۲۶۶۳	۱/۲۸۸۰	۱/۳۸۶۵
۸	۱/۰۵۰۰	۱/۰۶۸۴	۱/۰۲۱۰	۱/۰۴۲۱
۹	۰/۸۳۰۰	۰/۷۷۰۷	۰/۸۱۵۲	۰/۸۳۸۸
۱۰	۱/۱۵۰۰	۱/۲۱۸۸	۱/۱۵۶۰	۱/۱۳۳۵
۱۱	۰/۹۴۰۰	۱/۰۲۰۹	۰/۸۸۴۳	۰/۹۵۶۵
۱۲	۰/۷۸۰۰	۰/۷۲۳۲	۰/۶۸۶۷	۰/۷۸۴۲
بوتیل استات	(مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۱۷۰۰	۱/۲۴۰۰	۱/۱۹۵۴	۱/۱۶۷۶

ادامہی جدول (۱-پ)

۲	۱/۰۴۰۰	۱/۱۴۱۲	۱/۰۲۷۴	۱/۰۲۸۸
۳	۰/۷۸۰۰	۰/۷۴۴۴	۰/۶۸۳۲	۰/۷۷۷۷
۴	۱/۲۱۰۰	۱/۲۷۱۷	۱/۲۵۵۷	۱/۲۲۲۲
۵	۰/۹۵۰۰	۱/۰۷۳۸	۰/۹۳۱۴	۰/۹۶۲۴
۶	۰/۷۷۰۰	۰/۷۷۶۱	۰/۶۷۶۵	۰/۷۷۳۴
۷	۱/۲۴۰۰	۱/۲۹۲۹	۱/۲۹۲۱	۰/۲۵۱۵
۸	۰/۹۶۰۰	۱/۰۹۵۰	۰/۹۵۳۷	۰/۹۶۵۷
۹	۰/۷۷۰۰	۰/۷۹۷۳	۰/۶۷۰۸	۰/۷۷۴۰
۱۰	۱/۱۸۰۰	۱/۱۶۶۹	۱/۲۰۴۲	۱/۱۶۸۸
۱۱	۰/۹۲۰۰	۰/۹۱۹۴	۰/۷۶۲۸	۰/۹۳۵۶
۱۲	۰/۷۴۰۰	۰/۴۲۳۳	۰/۶۲۱۲	۰/۷۴۶۷
پنتان-۳-اون	$10^3 \times$ (مقادیر تجربی)	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۱/۰۶۰۰	۱/۰۸۹۴	۰/۹۹۱۱	۱/۰۵۳۸
۲	۰/۸۰۰۰	۰/۶۹۲۵	۰/۶۱۶۱	۰/۸۰۰۵
۳	۱/۲۳۰۰	۱/۲۱۹۹	۱/۳۴۲۰	۱/۲۳۲۱
۴	۰/۹۳۰۰	۰/۹۷۲۳	۰/۷۹۱۴	۰/۹۳۹۷
۵	۰/۷۰۰۰	۰/۴۷۶۲	۰/۶۳۰۶	۰/۶۸۹۳
۶	۱/۰۹۰۰	۱/۱۴۲۳	۱/۰۵۸۷	۱/۰۹۶۰
۷	۰/۷۷۰۰	۰/۷۴۵۵	۰/۶۲۷۳	۰/۷۵۳۵
۸	۱/۰۸۰۰	۱/۱۳۸۲	۱/۲۰۶۲	۱/۰۶۳۵
۹	۰/۹۷۰۰	۱/۰۳۹۵	۱/۰۲۴۵	۰/۹۸۱۸
۱۰	۰/۸۳۰۰	۰/۸۴۱۱	۰/۸۱۲۵	۰/۸۳۲۰
۴-متیل-پنتان-۲-اون	$10^3 \times$ (مقادیر تجربی)	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۷۳۰۰	۰/۶۴۲۷	۰/۷۰۸۳	۰/۷۳۶۴
۲	۱/۱۱۰۰	۱/۱۵۹۴	۱/۲۴۵۶	۱/۰۹۶۶
۳	۰/۹۹۰۰	۱/۰۶۰۷	۱/۰۴۸۵	۰/۹۸۹۰
۴	۰/۸۳۰۰	۰/۸۶۲۲	۰/۸۲۳۸	۰/۸۳۴۱
۵	۰/۷۴۰۰	۰/۶۶۳۸	۰/۷۱۶۲	۰/۷۳۶۱
۶	۱/۱۵۰۰	۱/۱۹۱۲	۱/۳۱۵۷	۱/۱۴۹۹
۷	۱/۰۰۰۰	۱/۰۹۲۴	۱/۰۸۹۷	۱/۰۰۱۵
۸	۰/۸۴۰۰	۰/۸۹۴۰	۰/۸۴۱۸	۰/۸۴۳۶
۹	۰/۷۵۰۰	۰/۶۹۵۶	۰/۷۲۶۷	۰/۷۴۵۲
۱۰	۱/۰۱۰۰	۱/۱۱۳۶	۱/۱۲۰۳	۱/۰۰۸۶
۱۱	۰/۸۴۰۰	۰/۹۱۵۲	۰/۸۵۳۹	۰/۸۵۱۵
۱۲	۰/۷۵۰۰	۰/۷۱۶۸	۰/۷۳۲۰	۰/۷۵۴۴
۱۳	۱/۰۳۰۰	۱/۱۴۵۴	۱/۱۶۹۹	۱/۰۱۳۵
۱۴	۰/۸۵۰۰	۰/۹۴۶۹	۰/۸۷۱۶	۰/۸۶۶۵
۱۵	۰/۷۶۰۰	۰/۷۴۸۵	۰/۷۳۷۷	۰/۷۷۶۵
۱۶	۱/۰۰۴۰	۱/۱۸۲۳	۰/۹۹۹۱	۰/۹۹۷۳
۱۷	۰/۹۷۳۰	۱/۱۵۸۰	۰/۹۶۲۵	۰/۹۷۷۱

ادامہی جدول (۱-پ)

۱۸	۰/۹۱۸۰	۱/۱۰۸۴	۰/۹۰۴۰	۰/۹۲۳۷
۱۹	۰/۸۷۲۰	۱/۰۵۸۸	۰/۸۶۰۵	۰/۸۷۸۰
۲۰	۰/۸۳۳۰	۱/۰۰۹۲	۰/۸۲۹۱	۰/۸۳۸۰
۱-پروپانول	(مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۷۹۹۰	۰/۹۵۹۶	۰/۸۰۸۱	۰/۸۰۳۷
۲	۰/۷۶۹۰	۰/۹۱۰۰	۰/۷۹۶۰	۰/۷۶۰۲
۳	۱/۰۲۸۰	۱/۲۰۳۵	۱/۰۳۳۳	۱/۰۱۳۳
۴	۰/۹۹۴۰	۱/۱۷۹۲	۰/۹۹۳۵	۰/۹۹۰۹
۵	۰/۹۳۴۰	۱/۱۲۹۶	۰/۹۳۰۴	۰/۹۳۴۷
۶	۰/۸۸۵۰	۱/۰۸۰۰	۰/۸۸۳۰	۰/۸۸۷۹
۷	۰/۸۴۳۰	۱/۰۳۰۴	۰/۸۴۸۰	۰/۸۴۶۰
۸	۰/۸۰۷۰	۰/۹۸۰۷	۰/۸۲۳۹	۰/۸۱۰۳
۹	۰/۷۷۶۰	۰/۹۳۱۱	۰/۸۰۹۲	۰/۷۶۵۷
۱۰	۱/۰۵۲۰	۱/۲۲۴۷	۱/۰۶۸۷	۱/۰۳۵۵
۱۱	۱/۰۱۵۰	۱/۲۰۰۴	۱/۰۲۵۸	۱/۰۱۱۰
۱۲	۰/۹۵۱۰	۱/۱۵۰۸	۰/۹۵۸۷	۰/۹۵۲۱
۱۳	۰/۸۹۹۰	۱/۱۰۱۱	۰/۹۰۷۴	۰/۹۰۴۹
۱۴	۰/۸۵۵۰	۱/۰۵۱۵	۰/۸۶۸۵	۰/۸۶۱۵
۱۵	۰/۸۱۸۰	۱/۰۰۱۹	۰/۸۴۰۸	۰/۸۲۴۸
۱۶	۰/۷۸۵۰	۰/۹۵۲۳	۰/۸۲۳۰	۰/۷۷۹۸
۱۷	۱/۰۷۷۰	۱/۲۴۵۹	۰/۱۰۳۵	۱/۰۶۴۴
۱۸	۱/۰۳۸۰	۱/۲۲۱۵	۱/۰۵۷۶	۱/۰۳۷۹
۱۹	۰/۹۷۰۰	۱/۱۷۱۹	۰/۹۸۷۸	۰/۹۷۴۸
۲۰	۰/۹۱۴۰	۱/۱۲۲۳	۰/۹۳۳۲	۰/۹۲۶۶
۲۱	۰/۸۷۰۰	۱/۰۷۲۷	۸۹۰۳	۰/۸۸۱۸
۲۲	۰/۸۳۱۰	۱/۰۲۳۱	۰/۸۵۸۶	۰/۸۴۴۰
۲۳	۰/۷۹۸۰	۰/۹۷۳۵	۰/۸۳۷۳	۰/۷۹۹۳
۲۴	۱/۱۰۴۰	۱/۲۶۷۰	۱/۱۳۴۸	۱/۰۹۸۷
۲۵	۱/۰۶۲۰	۱/۲۴۲۷	۱/۰۸۶۵	۱/۰۷۰۵
۲۶	۰/۹۹۱۰	۱/۱۹۳۱	۱/۰۱۶۰	۱/۰۰۰۹
۲۷	۰/۹۳۴۰	۱/۱۴۳۵	۰/۹۵۹۴	۰/۹۵۰۵
۲۸	۰/۸۸۸۰	۱/۰۹۳۹	۰/۹۱۲۸	۰/۹۰۴۳
۲۹	۰/۸۴۹۰	۱/۰۴۴۳	۰/۸۷۷۰	۰/۸۶۵۵
۳۰	۰/۸۱۵۰	۰/۹۹۴۷	۰/۸۵۱۷	۰/۸۲۱۹
۳۱	۱/۱۳۲۰	۱/۲۸۸۲	۱/۱۵۸۷	۱/۱۳۳۵
۳۲	۱/۰۸۸۰	۱/۲۶۳۹	۱/۱۰۹۰	۱/۱۰۴۶
۳۳	۱/۰۱۵۰	۱/۲۱۴۳	۱/۰۴۱۵	۱/۰۲۷۰
۳۴	۰/۹۵۸۰	۱/۱۶۴۷	۰/۹۸۵۱	۰/۹۷۳۸
۳۵	۰/۹۱۱۰	۱/۱۱۵۱	۰/۹۳۵۶	۰/۹۲۷۰
۳۶	۰/۸۷۲۰	۱/۰۶۵۵	۰/۸۹۵۷	۰/۸۸۷۹

ادامہی جدول (۱-پ)

۳۷	۰/۸۳۹۰	۱/۰۱۵۹	۰/۸۶۶۲	۰/۸۴۶۶
۳۸	۱/۱۶۱۰	۱/۳۰۹۴	۱/۱۷۰۲	۱/۱۶۱۳
۳۹	۱/۱۱۷۰	۱/۲۸۵۱	۱/۱۲۰۱	۱/۱۳۲۹
۴۰	۱/۰۴۴۰	۱/۲۳۵۵	۱/۰۶۱۱	۱/۰۴۸۶
۴۱	۰/۹۸۷۰	۱/۱۸۵۹	۱/۰۰۸۸	۰/۹۹۳۴
۴۲	۰/۹۴۱۰	۱/۱۳۶۳	۰/۹۵۸۱	۰/۹۴۷۶
۴۳	۰/۹۰۳۰	۱/۰۸۶۷	۰/۹۱۴۵	۰/۹۰۹۸
۴۴	۰/۸۷۲۰	۱/۰۳۷۰	۰/۸۸۰۷	۰/۸۷۲۷
۴۵	۰/۹۴۴۰	۱/۰۷۲۲	۰/۹۵۲۲	۰/۹۴۳۱
۴۶	۰/۹۱۷۰	۱/۰۴۷۹	۰/۹۲۵۹	۰/۹۱۹۹
۴۷	۰/۸۶۸۰	۰/۹۹۸۳	۰/۸۸۱۵	۰/۸۷۳۳
۴۸	۰/۸۲۷۰	۰/۹۴۸۷	۰/۸۴۷۱	۰/۸۲۸۶
۱-بیوتانول	(مقادیر تجربی) $10^3 \times$	(CDFs-MLR). 10^3	(CDFs-ANN). 10^3	(CDFs-SVM). 10^3
۱	۰/۷۹۲۰	۰/۸۹۹۱	۰/۸۲۰۵	۰/۷۸۹۱
۲	۰/۷۶۱۰	۰/۸۴۹۵	۰/۸۰۰۱	۰/۷۶۳۶
۳	۰/۷۳۴۰	۰/۷۹۹۹	۰/۷۸۴۸	۰/۷۲۴۱
۴	۰/۹۶۶۰	۱/۰۹۳۴	۰/۹۷۴۴	۰/۹۵۶۰
۵	۰/۹۳۶۰	۱/۰۶۹۱	۰/۹۴۵۱	۰/۹۳۳۲
۶	۰/۸۸۴۰	۱/۰۱۹۵	۰/۸۹۵۷	۰/۸۸۶۱
۷	۰/۸۴۰۰	۰/۹۶۹۹	۰/۸۵۷۵	۰/۸۳۴۵
۸	۰/۸۰۲۰	۰/۹۲۰۳	۰/۸۲۷۹	۰/۷۸۸۵
۹	۰/۷۷۰۰	۰/۸۷۰۷	۰/۸۰۵۳	۰/۷۶۸۲
۱۰	۰/۷۴۲۰	۰/۸۲۱۱	۰/۷۸۸۳	۰/۷۳۲۲
۱۱	۰/۹۸۸۰	۱/۱۱۴۶	۱/۰۰۰۵	۰/۹۷۶۳
۱۲	۰/۹۵۶۰	۱/۰۹۰۳	۰/۹۶۷۸	۰/۹۵۴۱
۱۳	۰/۹۰۰۰	۱/۰۴۰۷	۰/۹۱۳۰	۰/۹۰۵۳
۱۴	۰/۸۵۴۰	۰/۹۹۱۱	۰/۸۷۰۴	۰/۸۴۷۷
۱۵	۰/۸۱۴۰	۰/۹۴۱۵	۰/۸۳۷۳	۰/۷۹۷۵
۱۶	۰/۷۸۱۰	۰/۸۹۱۸	۰/۸۱۲۰	۰/۷۸۰۳
۱۷	۰/۷۵۱۰	۰/۸۴۲۲	۰/۷۹۲۹	۰/۷۴۸۰
۱۸	۱/۰۱۲۰	۱/۱۳۵۸	۱/۰۳۰۱	۱/۰۰۳۳
۱۹	۰/۹۷۸۰	۱/۱۱۱۵	۰/۹۹۳۸	۰/۹۸۱۱
۲۰	۰/۹۱۸۰	۱/۰۶۱۸	۰/۹۳۳۰	۰/۹۲۷۸
۲۱	۰/۸۶۹۰	۱/۰۱۲۲	۰/۸۸۵۵	۰/۸۶۷۰
۲۲	۰/۸۲۸۰	۰/۹۶۲۶	۰/۸۴۸۴	۰/۸۱۷۳
۲۳	۰/۷۹۴۰	۰/۹۱۳۰	۰/۸۱۹۸	۰/۷۹۷۵
۲۴	۰/۷۶۳۰	۰/۸۶۳۴	۰/۷۹۸۱	۰/۷۶۶۸
۲۵	۱/۰۳۷۰	۱/۱۵۶۹	۱/۰۶۲۶	۱/۰۳۴۳
۲۶	۱/۰۰۰۰	۱/۱۳۲۶	۱/۰۲۲۳	۱/۰۱۱۳
۲۷	۰/۹۳۸۰	۱/۰۸۳۰	۰/۹۵۵۲	۰/۹۵۰۹

ادامہی جدول (۱-پ)

۲۸	۰/۸۸۷۰	۱/۰۳۳۴	۰/۹۰۲۴	۰/۸۹۰۷
۲۹	۰/۸۴۵۰	۰/۹۸۳۸	۰/۸۶۰۸	۰/۸۴۷۴
۳۰	۰/۸۱۰۰	۰/۹۳۴۲	۰/۸۲۸۵	۰/۸۱۸۳
۳۱	۰/۷۷۹۰	۰/۸۸۴۶	۰/۸۰۳۷	۰/۷۸۶۴
۳۲	۱/۰۶۲۰	۱/۱۷۸۱	۱/۰۹۷۳	۱/۰۶۴۶
۳۳	۱/۰۲۴۰	۱/۱۵۳۸	۱/۰۵۲۸	۱/۰۴۰۵
۳۴	۰/۹۶۰۰	۱/۱۰۴۲	۰/۹۷۹۱	۰/۹۷۱۸
۳۵	۰/۹۰۹۰	۱/۰۵۴۶	۰/۹۲۰۷	۰/۹۱۶۱
۳۶	۰/۸۶۷۰	۱/۰۰۵۰	۰/۸۷۴۳	۰/۸۸۳۵
۳۷	۰/۸۳۱۰	۰/۹۵۵۴	۰/۸۳۷۸	۰/۸۴۱۷
۳۸	۰/۸۰۱۰	۰/۹۰۵۸	۰/۸۰۹۵	۰/۸۰۷۵
۳۹	۱/۰۸۹۰	۱/۱۹۹۳	۱/۱۳۳۳	۱/۰۸۸۴
۴۰	۱/۰۵۱۰	۱/۱۷۵۰	۱/۰۸۴۵	۱/۰۶۳۸
۴۱	۰/۹۸۶۰	۱/۱۲۵۴	۱/۰۰۴۳	۰/۹۸۸۶
۴۲	۰/۹۳۵۰	۱/۰۷۵۸	۰/۹۴۰۲	۰/۹۳۹۲
۴۳	۰/۸۵۸۰	۰/۹۷۶۶	۰/۸۴۷۵	۰/۸۶۵۸
۴۴	۰/۸۲۸۰	۰/۹۲۷۰	۰/۸۱۵۴	۰/۸۳۱۳
۴۵	۰/۸۲۲۰	۱/۰۴۳۴	۰/۹۹۶۹	۰/۸۲۷۸
۴۶	۰/۷۵۲۰	۰/۹۴۴۲	۰/۸۶۱۳	۰/۷۵۹۷
۴۷	۰/۶۹۷۰	۰/۸۴۵۰	۰/۷۵۳۴	۰/۷۰۲۷
۴۸	۰/۶۵۳۰	۰/۷۴۵۸	۰/۶۶۵۴	۰/۶۵۶۲
۲-متیل-۱-بوتانول	۱۰ ^۳ × (مقادیر تجربی)	(CDFS-MLR).10 ³	(CDFS-ANN).10 ³	(CDFS-SVM).10 ³
۱	۰/۶۱۵۰	۰/۶۴۶۶	۰/۵۹۵۰	۰/۶۱۷۰
۲	۰/۷۹۷۰	۱/۰۰۴۴	۰/۹۳۸۹	۰/۷۹۸۳
۳	۰/۷۳۴۰	۰/۹۰۵۲	۰/۸۱۴۸	۰/۷۳۶۰
۴	۰/۶۸۴۰	۰/۸۰۶۰	۰/۷۱۴۸	۰/۶۸۲۸
۵	۰/۶۴۲۰	۰/۷۰۶۷	۰/۶۳۳۷	۰/۶۳۸۹
۶	۰/۸۴۸۰	۱/۰۶۴۶	۱/۰۳۰۰	۰/۸۴۲۳
۷	۰/۷۷۵۰	۰/۹۶۵۴	۰/۸۸۵۵	۰/۷۷۸۶
۸	۰/۷۱۸۰	۰/۸۶۶۲	۰/۷۷۱۰	۰/۷۱۹۳
۹	۰/۶۷۲۰	۰/۷۶۶۹	۰/۶۷۸۲	۰/۶۷۰۵
۱۰	۰/۶۳۳۰	۰/۶۶۷۷	۰/۶۰۴۳	۰/۶۲۹۲
۱۱	۰/۹۰۹۰	۱/۱۲۴۸	۰/۹۶۷۸	۰/۹۰۰۸
۱۲	۰/۸۲۱۰	۱/۰۲۵۶	۰/۸۳۵۵	۰/۸۲۲۴
۱۳	۰/۷۵۶۰	۰/۹۲۶۴	۰/۷۲۹۳	۰/۷۶۴۰
۱۴	۰/۶۶۱۰	۰/۷۲۷۹	۰/۶۴۳۸	۰/۶۶۵۶
۱۵	۰/۹۲۱۶	۰/۹۷۶۲	۰/۹۲۶۹	۰/۹۱۸۵
۱۶	۰/۸۵۷۵	۰/۹۰۱۸	۰/۸۶۵۸	۰/۸۵۰۵
۱۷	۰/۸۴۱۹	۰/۸۷۷۰	۰/۸۴۹۱	۰/۸۳۰۹
۱۸	۰/۸۰۵۵	۰/۸۲۷۴	۰/۸۱۹۸	۰/۷۹۹۹

ادامہ ی جدول (۱-پ)

۱۹	۰/۷۷۴۷	۰/۷۷۷۸	۰/۷۹۴۷	۰/۷۶۳۵
۲۰	۰/۷۴۵۳	۰/۷۲۸۲	۰/۷۷۲۷	۰/۷۴۲۳
۲۱	۰/۹۳۵۰	۰/۹۷۲۶	۰/۹۲۳۹	۰/۹۲۷۹
۲۲	۰/۸۸۹۸	۰/۹۲۳۰	۰/۸۸۰۶	۰/۸۸۱۲
۲-پنٹانول	$10^2 \times$ (مقادیر تجربی)	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۸۵۰۵	۰/۸۷۳۴	۰/۸۴۴۸	۰/۸۴۴۰
۲	۰/۸۱۰۴	۰/۸۲۳۸	۰/۸۱۴۶	۰/۸۱۰۱
۳	۰/۷۸۴۲	۰/۷۷۴۲	۰/۷۸۸۷	۰/۷۶۷۷
۴	۱/۰۱۰۵	۱/۰۱۸۶	۰/۹۷۴۷	۱/۰۰۲۲
۵	۰/۹۵۶۴	۰/۹۶۹۰	۰/۹۲۱۳	۱/۹۴۷۷
۶	۰/۹۰۸۹	۰/۹۱۹۴	۰/۸۷۷۲	۰/۹۰۱۵
۷	۰/۸۶۷۹	۰/۸۶۹۸	۰/۸۴۰۵	۰/۸۶۴۷
۸	۰/۸۳۰۳	۰/۸۲۰۲	۰/۸۰۹۳	۰/۸۲۶۰
۹	۰/۷۹۳۱	۰/۷۷۰۶	۰/۷۸۲۶	۰/۷۹۷۳
۱۰	۱/۰۲۸۵	۱/۰۱۵۰	۰/۹۷۲۳	۱/۰۳۱۸
۱۱	۰/۹۷۱۵	۰/۹۶۵۴	۰/۹۱۸۲	۰/۹۶۸۸
۱۲	۰/۹۲۲۹	۰/۹۱۵۸	۰/۸۷۳۲	۰/۹۲۴۱
۱۳	۰/۸۷۸۷	۰/۸۶۶۲	۰/۸۳۵۴	۰/۸۸۴۳
۱۴	۰/۸۴۰۶	۰/۸۱۶۶	۰/۸۰۳۲	۰/۸۳۸۰
۱۵	۱/۱۰۰۰	۱/۰۶۱۰	۱/۰۳۵۲	۱/۱۱۰۳
۱۶	۱/۰۳۴۴	۱/۰۱۱۴	۰/۹۶۹۱	۱/۰۴۳۶
۱۷	۰/۹۸۲۸	۰/۹۶۱۸	۰/۹۱۴۰	۰/۹۸۵۳
۱۸	۰/۹۳۳۴	۰/۹۱۲۱	۰/۸۶۷۸	۰/۹۳۷۸
۱۹	۰/۸۸۹۵	۰/۸۶۲۵	۰/۸۲۸۹	۰/۸۹۳۶
۲۰	۰/۸۴۳۹	۰/۸۱۲۹	۰/۷۹۵۶	۰/۸۵۸۸
۲۱	۱/۱۰۸۴	۱/۰۵۷۴	۱/۰۳۱۱	۱/۱۲۵۰
۲۲	۱/۰۴۷۳	۱/۰۰۷۷	۰/۹۶۴۱	۱/۰۴۳۲
۲۳	۰/۹۹۰۶	۰/۹۵۸۱	۰/۹۰۷۸	۰/۹۸۷۹
۲۴	۰/۹۴۰۹	۰/۹۰۸۵	۰/۸۶۰۴	۰/۹۴۱۱
۲۵	۰/۸۹۹۲	۰/۸۵۸۹	۰/۸۲۰۲	۰/۸۹۲۹
۲۶	۰/۹۳۴۶	۱/۱۰۱۰	۱/۰۳۴۰	۰/۹۲۹۲
۲۷	۰/۸۹۷۸	۱/۰۵۱۴	۰/۹۵۸۷	۰/۸۹۰۹
۲۸	۰/۸۶۷۷	۱/۰۰۱۸	۰/۸۹۶۳	۰/۸۵۷۷
۲۹	۰/۸۳۶۸	۰/۹۵۲۲	۰/۸۴۴۲	۰/۸۳۲۰
۳۰	۰/۸۰۷۴	۰/۹۰۲۶	۰/۸۰۰۴	۰/۷۹۸۵
۳۱	۰/۷۷۱۰	۰/۸۵۳۰	۰/۷۶۳۱	۰/۷۷۳۰
۳۲	۰/۹۵۱۷	۱/۰۹۷۴	۱/۰۲۸۳	۰/۹۳۵۱
۳-پنٹانول	$10^2 \times$ (مقادیر تجربی)	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۹۱۸۶	۱/۰۴۷۸	۰/۹۵۳۶	۰/۹۰۵۳

ادامہی جدول (۱-پ)

۲	۰/۸۸۰۳	۰/۹۹۸۲	۰/۸۹۱۲	۰/۸۷۲۵
۳	۰/۸۵۲۳	۰/۹۴۸۶	۰/۸۳۸۹	۰/۸۴۸۰
۴	۰/۸۲۲۱	۰/۸۹۸۹	۰/۷۹۴۶	۰/۸۰۷۴
۵	۱/۰۱۱۷	۱/۱۴۳۴	۱/۱۱۱۸	۱/۰۰۰۸
۶	۰/۹۷۰۱	۱/۰۹۳۸	۱/۰۲۳۳	۰/۹۵۹۰
۷	۰/۹۳۳۶	۱/۰۴۴۱	۰/۹۴۸۸	۰/۹۲۹۸
۸	۰/۸۹۹۵	۰/۹۹۴۵	۰/۸۸۶۱	۰/۸۹۸۴
۹	۰/۸۶۸۷	۰/۹۴۴۹	۰/۸۳۳۱	۰/۸۶۷۸
۱۰	۰/۸۳۷۵	۰/۸۹۵۳	۰/۷۸۸۰	۰/۸۳۷۵
۱۱	۱/۰۳۴۲	۱/۱۳۹۷	۱/۱۰۶۴	۱/۰۳۰۱
۱۲	۰/۹۸۸۹	۱/۰۹۰۱	۱/۰۱۸۳	۰/۹۹۱۹
۱۳	۰/۹۵۱۷	۱/۰۴۰۵	۰/۹۴۳۴	۰/۹۵۵۵
۱۴	۰/۹۱۴۴	۰/۹۹۰۹	۰/۸۷۹۹	۰/۹۲۳۱
۱۵	۰/۸۷۸۸	۰/۹۴۱۳	۰/۸۲۵۹	۰/۸۸۴۰
۱۶	۱/۰۹۲۸	۱/۱۸۵۷	۱/۲۰۲۵	۱/۱۰۹۴
۱۷	۱/۰۴۲۸	۱/۱۳۶۱	۱/۱۰۰۵	۱/۰۵۴۸
۱۸	۱/۰۰۵۶	۱/۰۸۶۵	۱/۰۱۲۰	۱/۰۱۷۵
۱۹	۰/۹۶۵۲	۱/۰۳۶۹	۰/۹۳۶۲	۰/۹۷۲۹
۲۰	۰/۹۳۰۰	۰/۹۸۷۳	۰/۸۷۱۶	۰/۹۳۶۶
۲۱	۰/۸۸۶۷	۰/۹۳۷۷	۰/۸۱۶۴	۰/۹۰۳۲
۲۲	۱/۱۳۰۳	۱/۱۸۲۱	۰/۱۹۴۸	۱/۱۳۲۲
۲۳	۱/۰۷۴۸	۱/۱۳۲۵	۱/۰۹۲۷	۱/۰۷۱۵
۲۴	۱/۰۲۲۳	۱/۰۸۲۹	۱/۰۰۳۳	۱/۰۲۲۹
۲۵	۰/۹۷۶۴	۱/۰۳۳۳	۰/۹۲۶۲	۰/۹۷۸۹
۲۶	۰/۹۳۰۷	۰/۹۸۳۷	۰/۸۶۰۳	۰/۹۳۸۶
۲۷	۰/۸۹۴۰	۰/۹۷۳۱	۰/۹۳۶۳	۰/۸۹۶۷
۲۸	۰/۸۷۱۰	۰/۹۴۸۸	۰/۹۱۴۵	۰/۸۷۴۱
۲۹	۰/۸۲۸۰	۰/۸۹۹۲	۰/۸۷۶۶	۰/۸۳۳۰
۳۰	۰/۷۹۲۰	۰/۸۴۹۶	۰/۸۴۵۸	۰/۷۹۶۱
۳۱	۰/۷۶۱۰	۰/۸۰۰۰	۰/۸۲۰۴	۰/۷۶۴۹
۳۲	۰/۷۳۳۰	۰/۷۵۰۴	۰/۷۹۹۲	۰/۷۳۷۲
۳۳	۰/۷۰۸۰	۰/۷۰۰۸	۰/۷۸۱۳	۰/۶۹۶۲
۱-پنتانول	(مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۹۱۵۰	۰/۹۹۴۳	۰/۹۵۵۲	۰/۹۱۰۸
۲	۰/۸۸۹۰	۰/۹۷۰۰	۰/۹۳۱۰	۰/۸۸۸۴
۳	۰/۸۴۳۰	۰/۹۲۰۴	۰/۸۸۸۹	۰/۸۴۵۹
۴	۰/۸۰۴۰	۰/۸۷۰۸	۰/۸۵۴۸	۰/۸۰۶۹
۵	۰/۷۷۱۰	۰/۸۲۱۲	۰/۸۲۶۹	۰/۷۷۳۹
۶	۰/۷۴۱۰	۰/۷۷۱۶	۰/۸۰۳۹	۰/۷۴۵۰
۷	۰/۷۱۶۰	۰/۷۲۲۰	۰/۷۸۴۸	۰/۷۰۳۲

ادامہی جدول (۱-پ)

۸	۰/۹۳۶۰	۱/۰۱۵۵	۰/۹۷۷۷	۰/۹۳۱۹
۹	۰/۹۰۸۰	۰/۹۹۱۲	۰/۹۵۰۹	۰/۹۱۰۱
۱۰	۰/۸۵۹۰	۰/۹۴۱۶	۰/۹۰۴۲	۰/۸۶۵۵
۱۱	۰/۸۱۷۰	۰/۸۹۲۰	۰/۸۶۶۴	۰/۸۲۴۳
۱۲	۰/۷۸۲۰	۰/۸۴۲۴	۰/۸۳۵۶	۰/۷۸۹۴
۱۳	۰/۷۵۱۰	۰/۷۹۲۸	۰/۸۱۰۴	۰/۷۵۹۲
۱۴	۰/۷۲۴۰	۰/۷۴۳۲	۰/۷۸۹۵	۰/۷۱۷۳
۱۵	۰/۶۵۸۰	۱/۰۳۶۷	۱/۰۰۳۶	۰/۶۵۷۶
۱۶	۰/۶۲۸۰	۱/۰۱۲۴	۰/۹۷۴۰	۰/۹۳۶۰
۱۷	۰/۸۷۵۰	۰/۹۶۲۸	۰/۹۲۲۲	۰/۸۸۷۷
۱۸	۰/۸۳۱۰	۰/۹۱۳۲	۰/۸۸۰۲	۰/۸۴۳۸
۱۹	۰/۷۹۴۰	۰/۸۶۳۶	۰/۸۴۶۰	۰/۸۰۶۶
۲۰	۰/۷۶۲۰	۰/۸۱۴۰	۰/۸۱۸۱	۰/۷۷۴۸
۲۱	۰/۷۳۳۰	۰/۷۶۴۳	۰/۷۹۵۲	۰/۷۳۲۷
۲۲	۰/۶۸۱۰	۱/۰۵۷۹	۱/۰۳۲۴	۰/۶۸۴۷
۲۳	۰/۹۴۹۰	۱/۰۳۳۶	۰/۹۹۹۷	۰/۹۶۲۹
۲۴	۰/۸۹۳۰	۰/۹۸۴۰	۰/۹۴۲۵	۰/۹۰۹۰
۲۵	۰/۸۴۷۰	۰/۹۳۴۴	۰/۸۹۵۸	۰/۸۶۲۸
۲۶	۰/۸۰۸۰	۰/۸۸۴۷	۰/۸۵۷۸	۰/۸۲۳۵
۲۷	۰/۷۷۴۰	۰/۸۳۵۱	۰/۸۲۶۸	۰/۷۸۹۸
۲۸	۰/۷۴۵۰	۰/۷۸۵۵	۰/۸۰۱۳	۰/۷۴۷۲
۲۹	۱/۰۰۵۰	۱/۰۷۹۱	۱/۰۶۳۷	۱/۰۰۹۷
۳۰	۰/۹۷۱۰	۱/۰۵۴۷	۱/۰۲۷۸	۰/۹۸۷۵
۳۱	۰/۹۱۲۰	۱/۰۰۵۱	۰/۹۶۴۷	۰/۹۲۷۹
۳۲	۰/۸۶۴۰	۰/۹۵۵۵	۰/۹۱۲۹	۰/۸۸۰۶
۳۳	۰/۸۲۴۰	۰/۹۰۵۹	۰/۸۷۰۶	۰/۸۴۰۶
۳۴	۰/۷۸۹۰	۰/۸۵۶۳	۰/۸۳۶۰	۰/۸۰۵۵
۳۵	۰/۷۶۰۰	۰/۸۰۶۷	۰/۸۰۷۶	۰/۷۶۲۵
۳۶	۱/۰۳۰۰	۱/۱۰۰۲	۱/۰۹۶۸	۱/۰۲۹۳
۳۷	۰/۹۹۵۰	۱/۰۷۵۹	۱/۰۵۷۶	۱/۰۰۷۲
۳۸	۰/۹۳۴۰	۱/۰۲۶۳	۰/۹۸۸۴	۰/۹۴۳۶
۳۹	۰/۸۸۴۰	۰/۹۷۶۷	۰/۹۳۱۱	۰/۸۹۷۶
۴۰	۰/۸۴۳۰	۰/۹۲۷۱	۰/۸۸۴۰	۰/۸۵۹۲
۴۱	۰/۸۰۸۰	۰/۸۷۷۵	۰/۸۴۵۵	۰/۸۲۴۶
۴۲	۰/۷۷۹۰	۰/۸۲۷۹	۰/۸۱۳۹	۰/۷۸۲۱
۴۳	۱/۰۴۴۰	۱/۰۶۳۴	۱/۱۲۵۶	۱/۰۳۶۱
۴۴	۱/۰۲۹۰	۱/۰۵۳۶	۱/۱۰۷۷	۱/۰۲۴۳
۴۵	۱/۰۱۴۰	۱/۰۴۳۸	۱/۰۹۰۰	۱/۰۰۸۷
۴۶	۰/۹۹۹۰	۱/۰۳۳۸	۱/۰۷۲۷	۰/۹۹۱۱

ادامہی جدول (۱-پ)

۴۷	۰/۹۸۵۰	۱/۰۲۳۸	۱/۰۵۵۸	۰/۹۷۳۳
۴۸	۰/۹۷۱۰	۱/۰۱۴۰	۱/۰۳۹۶	۰/۹۵۶۸
۲-ہگز انول	(مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۹۵۷۰	۱/۰۰۴۰	۱/۰۲۳۴	۰/۹۴۱۴
۲	۰/۹۴۴۰	۰/۹۹۴۲	۱/۰۰۸۰	۰/۹۲۷۸
۳	۰/۹۳۲۰	۰/۹۸۴۲	۰/۹۹۲۸	۰/۹۱۵۵
۴	۰/۹۱۹۰	۰/۹۷۴۳	۰/۹۷۷۹	۰/۹۰۵۲
۵	۰/۹۰۷۰	۰/۹۶۴۴	۰/۹۶۳۴	۰/۸۹۷۶
۶	۱/۱۱۳۰	۱/۰۸۴۴	۱/۱۶۴۷	۱/۰۹۶۴
۷	۱/۰۹۶۰	۱/۰۷۴۷	۱/۱۴۵۶	۱/۰۸۸۴
۸	۱/۰۸۰۰	۱/۰۶۴۷	۱/۱۲۶۵	۱/۰۷۴۶
۹	۱/۰۶۴۰	۱/۰۵۴۹	۱/۱۰۸۱	۱/۰۵۷۶
۱۰	۱/۰۴۹۰	۱/۰۴۵۰	۱/۰۹۰۰	۱/۰۳۹۷
۱۱	۱/۰۳۴۰	۱/۰۳۵۰	۱/۰۷۲۴	۱/۰۲۲۴
۱۲	۱/۰۱۹۰	۱/۰۲۵۲	۱/۰۵۵۴	۱/۰۰۶۶
۱۳	۱/۰۰۵۰	۱/۰۱۵۲	۱/۰۳۸۶	۰/۹۹۲۱
۱۴	۰/۹۹۲۰	۱/۰۰۵۳	۰/۰۲۲۲	۰/۹۷۸۷
۱۵	۰/۹۷۸۰	۰/۹۹۵۴	۱/۰۰۶۴	۰/۹۶۶۴
۱۶	۰/۹۶۵۰	۰/۹۸۵۵	۰/۹۹۰۸	۰/۹۵۵۴
۱۷	۱/۱۷۴۰	۱/۱۰۵۶	۱/۲۰۶۴	۱/۱۵۹۰
۱۸	۱/۱۵۶۰	۱/۰۹۵۸	۱/۱۸۵۵	۱/۱۵۴۵
۱۹	۱/۱۳۹۰	۱/۰۸۵۹	۱/۱۶۴۹	۱/۱۴۲۲
۲۰	۱/۱۲۲۰	۱/۰۷۵۸	۱/۱۴۴۸	۱/۱۲۴۹
۲۱	۱/۱۰۶۰	۱/۰۶۶۱	۱/۱۲۵۶	۱/۱۰۶۱
۲۲	۱/۰۸۹۰	۱/۰۵۶۰	۱/۱۰۶۵	۱/۰۸۷۲
۲۳	۱/۰۷۴۰	۱/۰۴۶۲	۱/۰۸۸۲	۱/۰۷۰۴
۲۴	۱/۰۵۹۰	۱/۰۳۶۳	۱/۰۷۰۲	۱/۰۵۵۰
۲۵	۱/۰۴۵۰	۱/۰۲۶۴	۱/۰۵۲۶	۱/۰۴۰۷
۲۶	۱/۰۳۰۰	۱/۰۱۶۴	۱/۰۳۵۴	۱/۰۲۶۸
۲۷	۱/۰۱۷۰	۱/۰۰۶۵	۱/۰۱۸۷	۱/۰۱۳۳
۲۸	۱/۲۲۸۰	۱/۱۲۶۴	۱/۲۴۸۸	۱/۲۱۶۶
۲۹	۱/۲۰۹۰	۱/۱۱۶۷	۱/۲۲۶۴	۱/۲۱۴۵
۳۰	۱/۱۹۱۰	۱/۱۰۶۸	۱/۲۰۴۴	۱/۲۰۲۶
۳۱	۱/۱۷۳۰	۱/۰۹۶۹	۱/۱۸۲۸	۱/۱۸۳۹
۳۲	۱/۱۵۶۰	۱/۰۸۶۸	۱/۱۶۱۵	۱/۱۶۱۹
۳۳	۱/۱۳۹۰	۱/۰۷۷۰	۱/۱۴۱۴	۰/۱۴۰۹
۳۴	۱/۱۲۳۰	۱/۰۶۷۱	۱/۱۲۱۶	۱/۱۲۱۷
۳۵	۱/۱۰۷۰	۱/۰۵۷۲	۱/۱۰۲۱	۱/۱۰۴۶
۳۶	۱/۰۹۲۰	۱/۰۴۷۳	۱/۰۸۳۲	۱/۰۸۹۴
۳۷	۱/۰۷۷۰	۱/۰۳۷۳	۱/۰۶۴۷	۱/۰۷۴۵

ادامہی جدول (۱-پ)

۳۸	۱/۰۶۲۰	۱/۰۲۷۴	۱/۰۴۶۶	۱/۰۵۹۴
۳۹	۰/۸۶۵۰	۰/۸۸۳۶	۰/۸۵۲۰	۰/۸۶۸۰
۴۰	۰/۸۴۳۰	۰/۸۵۹۳	۰/۸۲۹۹	۰/۸۴۵۴
۴۱	۰/۸۰۳۰	۰/۸۰۹۷	۰/۷۸۹۷	۰/۸۰۷۰
۴۲	۰/۷۶۸۰	۰/۷۶۰۱	۰/۷۵۴۹	۰/۷۷۱۵
۴۳	۰/۷۳۸۰	۰/۷۱۰۵	۰/۷۲۴۵	۰/۷۴۲۲
۱-ہگزاتول	مقادیر تجربی) × ۱۰ ^۲	(CDFS-MLR).10 ³	(CDFS-ANN).10 ³	(CDFS-SVM).10 ³
۱	۰/۷۱۲۰	۰/۶۶۰۹	۰/۶۹۷۵	۰/۷۱۵۴
۲	۰/۶۸۹۰	۰/۶۱۱۳	۰/۶۷۳۴	۰/۶۷۵۱
۳	۰/۸۸۵۰	۰/۹۰۴۸	۰/۸۷۵۷	۰/۸۸۳۶
۴	۰/۸۶۰۰	۰/۸۸۰۵	۰/۸۵۱۷	۰/۸۶۰۸
۵	۰/۸۱۷۰	۰/۸۳۰۹	۰/۸۰۸۲	۰/۸۱۹۸
۶	۰/۷۸۰۰	۰/۷۸۱۳	۰/۷۷۰۷	۰/۷۸۲۳
۷	۰/۷۴۹۰	۰/۷۳۱۷	۰/۷۳۸۰	۰/۷۵۱۴
۸	۰/۷۲۱۰	۰/۶۸۲۱	۰/۷۰۹۳	۰/۷۲۳۶
۹	۰/۶۹۷۰	۰/۶۳۲۵	۰/۶۸۳۸	۰/۶۸۲۴
۱۰	۰/۹۰۵۰	۰/۹۲۶۰	۰/۹۰۲۳	۰/۹۰۶۲
۱۱	۰/۸۷۹۰	۰/۹۰۱۷	۰/۸۷۶۲	۰/۸۸۳۶
۱۲	۰/۸۳۲۰	۰/۸۵۲۱	۰/۸۲۹۰	۰/۸۳۹۵
۱۳	۰/۷۹۳۰	۰/۸۰۲۵	۰/۷۸۸۴	۰/۷۹۹۹
۱۴	۰/۷۶۰۰	۰/۷۵۲۹	۰/۷۵۳۲	۰/۷۶۷۶
۱۵	۰/۷۳۱۰	۰/۷۰۳۳	۰/۷۲۲۴	۰/۷۳۹۰
۱۶	۰/۷۰۵۰	۰/۶۵۳۷	۰/۶۹۵۳	۰/۶۹۷۶
۱۷	۰/۹۲۶۰	۰/۹۴۷۲	۰/۹۳۱۶	۰/۹۳۱۹
۱۸	۰/۸۹۸۰	۰/۹۲۲۹	۰/۹۰۳۲	۰/۹۰۹۴
۱۹	۰/۸۴۹۰	۰/۸۷۳۳	۰/۸۵۱۸	۰/۸۶۱۴
۲۰	۰/۸۰۷۰	۰/۸۲۳۷	۰/۸۰۷۸	۰/۸۱۹۵
۲۱	۰/۷۷۲۰	۰/۷۷۴۱	۰/۷۶۹۷	۰/۷۸۵۵
۲۲	۰/۷۴۲۰	۰/۷۲۴۵	۰/۷۳۶۵	۰/۷۵۵۸
۲۳	۰/۷۱۵۰	۰/۶۷۴۸	۰/۷۰۷۵	۰/۷۱۴۳
۲۴	۰/۹۴۸۰	۰/۹۶۸۴	۰/۹۶۳۴	۰/۹۵۷۰
۲۵	۰/۹۱۸۰	۰/۹۴۴۱	۰/۹۳۲۴	۰/۹۳۴۶
۲۶	۰/۸۶۶۰	۰/۸۹۴۵	۰/۸۷۶۴	۰/۸۸۲۳
۲۷	۰/۸۲۳۰	۰/۸۴۴۸	۰/۸۲۸۵	۰/۸۳۸۴
۲۸	۰/۷۸۶۰	۰/۷۹۵۲	۰/۷۸۷۱	۰/۸۰۲۵
۲۹	۰/۷۵۵۰	۰/۷۴۵۶	۰/۷۵۱۲	۰/۷۷۱۵
۳۰	۰/۷۲۸۰	۰/۶۹۶۰	۰/۷۱۹۸	۰/۷۲۹۸
۳۱	۰/۹۷۱۰	۰/۹۸۹۶	۰/۹۹۷۴	۰/۹۷۸۶
۳۲	۰/۹۴۰۰	۰/۹۶۵۲	۰/۹۶۳۶	۰/۹۵۶۵
۳۳	۰/۸۸۵۰	۰/۹۱۵۶	۰/۹۰۲۴	۰/۹۰۱۱

ادامہی جدول (۱-پ)

۳۴	۰/۸۴۰۰	۰/۸۶۶۰	۰/۸۵۰۰	۰/۸۵۶۵
۳۵	۰/۸۰۳۰	۰/۸۱۶۴	۰/۸۰۴۹	۰/۸۱۹۵
۳۶	۰/۷۷۱۰	۰/۷۶۶۸	۰/۷۶۵۹	۰/۷۸۷۵
۳۷	۰/۷۴۳۰	۰/۷۱۷۲	۰/۷۳۲۰	۰/۷۴۵۷
۳۸	۰/۹۹۶۰	۱/۰۱۰۷	۱/۰۳۳۱	۰/۹۹۴۸
۳۹	۰/۹۶۳۰	۰/۹۸۶۴	۰/۹۹۶۲	۰/۹۷۳۹
۴۰	۰/۹۰۶۰	۰/۹۳۶۸	۰/۹۲۹۳	۰/۹۱۷۸
۴۱	۰/۸۶۰۰	۰/۸۸۷۲	۰/۸۷۲۰	۰/۸۷۴۹
۴۲	۰/۸۲۲۰	۰/۸۳۷۶	۰/۸۲۲۸	۰/۸۳۸۵
۴۳	۰/۷۹۰۰	۰/۷۸۸۰	۰/۷۸۰۳	۰/۸۰۶۶
۴۴	۰/۷۶۲۰	۰/۷۳۸۴	۰/۷۴۳۵	۰/۷۶۵۵
۴۵	۱/۰۴۶۰	۱/۰۳۰۱	۱/۰۰۹۰	۱/۰۳۹۳
۴۶	۱/۰۳۱۰	۱/۰۲۰۲	۰/۹۹۳۱	۱/۰۳۳۹
۴۷	۱/۰۱۶۰	۱/۰۱۰۴	۰/۹۷۷۷	۱/۰۲۴۳
۲-ہیٹانول	(مقادیر تجربی) × ۱۰ ^۳	(CDFS-MLR).10 ³	(CDFS-ANN).10 ³	(CDFS-SVM).10 ³
۱	۱/۰۰۲۰	۱/۰۰۰۵	۰/۹۶۲۷	۱/۰۱۱۵
۲	۰/۹۸۹۰	۰/۹۹۰۵	۰/۹۴۷۸	۰/۹۹۶۳
۳	۰/۹۷۵۰	۰/۹۸۰۷	۰/۹۳۳۷	۰/۹۸۰۳
۴	۰/۹۶۲۰	۰/۹۷۰۶	۰/۹۱۹۵	۰/۹۶۳۴
۵	۰/۹۵۰۰	۰/۹۶۰۸	۰/۹۰۶۰	۰/۹۴۷۷
۶	۰/۹۳۸۰	۰/۹۵۰۸	۰/۸۹۲۶	۰/۹۳۳۴
۷	۰/۹۲۶۰	۰/۹۴۱۰	۰/۸۷۹۷	۰/۹۲۱۸
۸	۰/۹۱۴۰	۰/۹۳۱۰	۰/۸۶۶۹	۰/۹۱۳۸
۹	۱/۰۷۷۰	۱/۰۵۱۱	۱/۰۴۴۶	۱/۰۷۵۲
۱۰	۱/۰۶۲۰	۱/۰۴۱۴	۱/۰۲۷۸	۱/۰۶۹۷
۱۱	۱/۰۴۷۰	۱/۰۳۱۴	۱/۰۱۱۰	۱/۰۵۸۶
۱۲	۱/۰۳۲۰	۱/۰۲۱۵	۰/۹۹۴۸	۱/۰۴۳۵
۱۳	۱/۰۱۸۰	۱/۰۱۱۵	۰/۹۷۸۹	۱/۰۲۶۰
۱۴	۱/۰۰۴۰	۱/۰۰۱۴	۰/۹۶۳۱	۱/۰۰۷۴
۱۵	۰/۹۹۱۰	۰/۹۹۱۷	۰/۹۴۸۵	۰/۹۸۹۹
۱۶	۰/۹۷۸۰	۰/۹۸۱۸	۰/۹۳۳۹	۰/۹۷۳۲
۱۷	۰/۹۶۵۰	۰/۹۷۱۹	۰/۹۱۹۶	۰/۹۵۸۲
۱۸	۰/۹۵۳۰	۰/۹۶۱۹	۰/۹۰۵۶	۰/۹۴۵۷
۱۹	۰/۹۴۰۰	۰/۹۵۱۹	۰/۸۹۱۹	۰/۹۳۶۴
۲۰	۱/۱۱۰۰	۱/۰۷۲۵	۱/۰۸۳۳	۰/۱۱۲۱
۲۱	۱/۰۹۳۰	۱/۰۶۲۴	۱/۰۶۴۳	۱/۱۰۶۷
۲۲	۱/۰۷۸۰	۱/۰۵۲۴	۱/۰۴۶۲	۱/۰۹۴۵
۲۳	۱/۰۶۲۰	۱/۰۴۲۵	۱/۰۲۸۷	۱/۰۷۷۷
۲۴	۱/۰۴۸۰	۱/۰۳۲۵	۱/۰۱۱۵	۱/۰۵۸۲
۲۵	۱/۰۳۳۰	۱/۰۲۲۶	۰/۹۹۴۹	۱/۰۳۸۴

ادامہی جدول (۱-پ)

۲۶	۱/۰۱۹۰	۱/۰۱۲۷	۰/۹۷۸۷	۱/۰۱۹۴
۲۷	۱/۰۰۶۰	۱/۰۰۲۸	۰/۹۶۳۰	۱/۰۰۲۱
۲۸	۰/۹۹۲۰	۰/۹۹۲۸	۰/۹۴۷۴	۰/۹۸۶۷
۲۹	۰/۹۷۹۰	۰/۹۸۲۹	۰/۹۳۲۴	۰/۹۷۳۶
۳۰	۰/۹۶۷۰	۰/۹۷۳۰	۰/۹۱۷۶	۰/۹۶۳۱
۳۱	۱/۱۴۱۰	۱/۰۹۳۱	۱/۱۲۲۳	۱/۱۴۱۷
۳۲	۱/۱۲۴۰	۱/۰۸۳۳	۱/۱۰۲۴	۱/۱۳۶۸
۳۳	۱/۱۰۸۰	۱/۰۷۳۳	۱/۰۸۲۷	۱/۱۲۴۲
۳۴	۱/۰۹۲۰	۱/۰۶۳۳	۱/۰۶۳۶	۱/۱۰۶۱
۳۵	۱/۰۷۷۰	۱/۰۵۳۲	۱/۰۴۴۸	۱/۰۸۵۲
۳۶	۱/۰۶۲۰	۱/۰۴۳۵	۱/۰۲۷۱	۱/۰۶۴۹
۳۷	۱/۰۴۷۰	۱/۰۳۳۶	۱/۰۰۹۶	۱/۰۴۵۴
۳۸	۱/۰۳۳۰	۱/۰۲۳۷	۰/۹۹۲۴	۱/۰۲۷۹
۳۹	۱/۰۱۹۰	۱/۰۱۳۶	۰/۹۷۵۶	۱/۰۱۲۴
۴۰	۱/۰۰۶۰	۱/۰۰۳۸	۰/۹۵۹۴	۰/۹۹۹۲
۴۱	۰/۹۹۳۰	۰/۹۹۳۸	۰/۹۴۳۳	۰/۹۸۷۸
۴۲	۰/۸۵۷۵	۰/۸۶۶۸	۰/۹۰۶۴	۰/۸۶۵۵
۱-ہیٹانول	مقادیر تجربی) × ۱۰ ^۲	(CDFs-MLR).10 ³	(CDFs-ANN).10 ³	(CDFs-SVM).10 ³
۱	۰/۷۷۷۷	۰/۷۶۸۱	۰/۸۰۵۷	۰/۷۸۶۷
۲	۰/۷۱۸۰	۰/۶۶۸۹	۰/۷۱۹۱	۰/۷۲۴۳
۳	۰/۶۷۰۶	۰/۵۶۹۷	۰/۶۴۲۸	۰/۷۶۵۰
۴	۰/۶۳۱۶	۰/۴۷۰۵	۰/۵۷۶۳	۰/۶۳۴۳
۵	۰/۵۹۸۶	۰/۳۷۱۲	۰/۵۲۱۰	۰/۵۹۹۸
۶	۰/۸۲۳۰	۰/۸۲۸۳	۰/۸۶۵۳	۰/۸۲۸۶
۷	۰/۷۵۲۶	۰/۷۲۹۱	۰/۷۷۰۲	۰/۷۵۶۱
۸	۰/۶۹۸۷	۰/۶۲۹۹	۰/۶۸۷۷	۰/۶۹۸۷
۹	۰/۶۵۵۳	۰/۵۳۰۷	۰/۶۱۵۵	۰/۶۵۲۴
۱۰	۰/۶۱۹۱	۰/۴۳۱۴	۰/۵۵۴۰	۰/۶۱۳۸
۱۱	۰/۸۷۷۵	۰/۸۸۸۰	۰/۹۳۲۳	۰/۸۷۵۵
۱۲	۰/۷۹۲۷	۰/۷۸۹۳	۰/۸۲۶۳	۰/۷۹۸۹
۱۳	۰/۷۳۰۲	۰/۶۹۰۱	۰/۷۳۶۳	۰/۷۳۲۳
۱۴	۰/۶۷۵۹	۰/۵۹۰۹	۰/۶۵۸۰	۰/۶۸۰۱
۱۵	۰/۶۴۱۲	۰/۴۹۱۶	۰/۵۹۰۳	۰/۶۳۷۴
۱۶	۰/۶۰۷۶	۰/۳۹۲۴	۰/۵۳۴۳	۰/۶۰۱۶
۱۷	۰/۸۴۰۲	۰/۸۴۹۵	۰/۸۸۹۲	۰/۸۴۷۰
۱۸	۰/۷۶۶۲	۰/۷۵۰۳	۰/۷۸۹۴	۰/۷۷۴۸
۱۹	۰/۷۱۰۲	۰/۶۵۱۱	۰/۷۰۴۰	۰/۷۱۶۳
۲۰	۰/۶۶۵۴	۰/۵۵۱۸	۰/۶۳۰۰	۰/۶۶۹۶
۲۱	۰/۶۲۸۴	۰/۴۵۲۶	۰/۵۶۷۴	۰/۶۳۱۰

ادامہی جدول (۱-پ)

۲۲	۰/۸۹۸۰	۰/۹۰۹۲	۰/۹۶۰۶	۰/۸۹۲۹
۲۳	۰/۸۳۸۶	۰/۸۲۹۹	۰/۸۶۷۹	۰/۸۴۷۱
۱-اکتائول	(مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۷۶۲۳	۰/۷۳۱۲	۰/۷۷۸۵	۰/۷۷۰۶
۲	۰/۷۰۴۳	۰/۶۳۱۹	۰/۶۹۹۰	۰/۷۱۰۱
۳	۰/۶۵۸۰	۰/۵۳۲۷	۰/۶۲۷۶	۰/۶۶۷۴
۴	۰/۶۱۹۸	۰/۴۳۳۵	۰/۵۶۴۶	۰/۶۲۷۵
۵	۰/۵۸۷۴	۰/۳۳۴۳	۰/۵۱۱۸	۰/۵۸۸۱
۶	۰/۸۰۵۸	۰/۷۹۱۴	۰/۸۲۷۸	۰/۸۱۱۹
۷	۰/۷۳۷۹	۰/۶۹۲۱	۰/۷۴۲۵	۰/۷۴۰۴
۸	۰/۶۸۵۳	۰/۵۹۲۹	۰/۶۶۶۸	۰/۶۸۵۳
۹	۰/۶۴۲۸	۰/۴۹۳۷	۰/۵۹۹۷	۰/۶۵۷۲
۱۰	۰/۶۰۷۴	۰/۳۹۴۵	۰/۵۴۲۲	۰/۶۰۲۳
۱۱	۰/۸۵۷۸	۰/۸۵۱۱	۰/۸۸۲۳	۰/۸۵۸۷
۱۲	۰/۷۷۶۷	۰/۷۵۲۳	۰/۷۸۹۴	۰/۷۸۱۸
۱۳	۰/۷۱۵۹	۰/۶۵۳۱	۰/۷۰۸۴	۰/۷۱۷۰
۱۴	۰/۶۶۸۱	۰/۵۵۳۹	۰/۶۳۶۹	۰/۶۷۴۸
۱۵	۰/۶۲۹۰	۰/۴۵۴۷	۰/۵۷۴۶	۰/۶۳۳۱
۱۶	۰/۵۹۶۱	۰/۳۵۵۵	۰/۵۲۲۸	۰/۵۸۹۳
۱۷	۰/۸۲۲۴	۰/۸۱۲۵	۰/۸۴۱۰	۰/۸۳۱۶
۱۸	۰/۷۵۰۸	۰/۷۱۳۳	۰/۷۵۳۰	۰/۷۵۸۷
۱۹	۰/۶۹۶۲	۰/۶۱۴۱	۰/۶۷۶۳	۰/۷۰۲۳
۲۰	۰/۶۵۲۵	۰/۵۱۴۹	۰/۶۰۹۳	۰/۶۶۸۰
۲۱	۰/۶۱۶۴	۰/۴۱۵۷	۰/۵۵۲۳	۰/۶۱۹۰
۲۲	۰/۸۳۰۳	۰/۸۲۶۳	۰/۸۹۵۵	۰/۸۲۹۴
۱-نونانول	(مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۷۴۶۶	۰/۷۲۷۶	۰/۸۱۷۰	۰/۷۵۴۳
۲	۰/۶۸۹۴	۰/۶۲۸۴	۰/۷۵۵۴	۰/۶۹۴۶
۳	۰/۶۴۳۱	۰/۵۲۹۱	۰/۷۰۸۹	۰/۶۴۵۹
۴	۰/۶۲۳۰	۰/۴۷۹۵	۰/۶۹۰۸	۰/۶۳۹۵
۵	۰/۷۵۳۳	۰/۷۳۸۲	۰/۸۱۷۵	۰/۷۵۶۹
۶	۰/۶۹۵۰	۰/۶۳۹۰	۰/۷۵۶۳	۰/۶۹۴۷
۷	۰/۶۴۸۲	۰/۵۳۹۷	۰/۷۱۰۴	۰/۶۴۴۳
۸	۰/۸۳۷۶	۰/۸۴۷۵	۰/۸۹۸۳	۰/۸۴۱۸
۹	۰/۷۶۰۱	۰/۷۴۸۸	۰/۸۱۸۴	۰/۷۶۴۲
۱۰	۰/۷۰۰۷	۰/۶۴۹۵	۰/۷۵۷۳	۰/۷۰۰۹
۱۱	۰/۶۵۳۴	۰/۵۵۰۳	۰/۷۱۱۸	۰/۶۴۹۸
۱۲	۰/۸۴۶۴	۰/۸۵۸۱	۰/۹۰۰۶	۰/۸۵۲۰
۱۳	۰/۷۶۶۹	۰/۷۵۹۴	۰/۸۱۹۷	۰/۷۷۵۶
۱۴	۰/۷۰۶۵	۰/۶۶۰۱	۰/۷۵۸۴	۰/۷۱۲۵

ادامہی جدول (۱-پ)

۱۵	۰/۶۵۸۵	۰/۵۶۰۹	۰/۷۱۳۲	۰/۶۶۲۱
۱۶	۰/۸۳۰۳	۰/۷۹۲۵	۰/۸۲۶۱	۰/۸۲۹۴
۱-دکانول	مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۷۴۶۶	۰/۶۹۳۸	۰/۷۶۷۵	۰/۷۵۴۳
۲	۰/۶۸۹۴	۰/۵۹۴۵	۰/۷۲۷۳	۰/۶۹۴۵
۳	۰/۶۴۳۱	۰/۴۹۵۳	۰/۷۰۱۵	۰/۶۴۵۹
۴	۰/۸۲۸۸	۰/۸۰۳۱	۰/۸۲۷۲	۰/۸۳۴۰
۵	۰/۷۵۳۳	۰/۷۰۴۴	۰/۷۶۹۱	۰/۷۵۶۹
۶	۰/۶۹۵۰	۰/۶۰۵۱	۰/۷۲۹۷	۰/۶۹۴۷
۷	۰/۶۷۰۵	۰/۵۵۵۵	۰/۷۱۵۶	۰/۶۶۸۴
۸	۰/۸۳۷۶	۰/۸۱۳۷	۰/۸۲۸۸	۰/۸۴۱۸
۹	۰/۷۶۰۱	۰/۷۱۴۹	۰/۷۷۱۰	۰/۷۶۴۲
۱۰	۰/۷۰۰۷	۰/۶۱۵۷	۰/۷۳۲۱	۰/۷۰۰۹
۱۱	۰/۶۵۳۴	۰/۵۱۶۵	۰/۷۰۷۴	۰/۶۴۹۸
۱۲	۰/۸۴۶۴	۰/۸۲۴۳	۰/۸۳۰۸	۰/۸۵۲۰
۱۳	۰/۷۶۶۹	۰/۷۲۵۵	۰/۷۷۳۰	۰/۷۷۵۶
۱۴	۰/۷۰۶۵	۰/۶۲۶۳	۰/۷۳۴۴	۰/۷۱۲۵
۱۵	۰/۶۵۸۵	۰/۵۲۷۱	۰/۷۰۹۹	۰/۶۶۲۱
۱۶	۰/۸۵۵۴	۰/۸۳۴۸	۰/۸۳۳۲	۰/۸۶۴۱

جدول (۲-پ)- مقادیر تجربی و مقادیر پیش‌بینی شده‌ی انبساط‌پذیری هم‌فشار برای ترکیبات سری تست بیرونی

هپتانوئیک اسید	(مقادیر تجربی) $\times 10^2$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۹۰۹۲	۰/۹۴۶۸	۰/۹۵۱۸	۰/۹۲۵۷
۲	۰/۹۰۸۷	۰/۹۴۶۳	۰/۹۵۱۱	۰/۹۲۵۲
۳	۰/۹۰۷۲	۰/۹۴۴۸	۰/۹۴۹۱	۰/۹۲۳۶
۴	۰/۹۰۴۵	۰/۹۴۲۳	۰/۹۴۵۹	۰/۹۲۱۰
۵	۰/۸۹۹۳	۰/۹۳۷۴	۰/۹۳۹۵	۰/۹۱۵۸
۶	۰/۸۸۳۷	۰/۹۲۲۵	۰/۹۲۱۰	۰/۹۰۰۲
۷	۰/۸۵۷۷	۰/۸۹۷۷	۰/۸۹۲۱	۰/۸۷۴۲
۸	۰/۸۳۱۷	۰/۸۷۲۹	۰/۸۶۵۴	۰/۸۴۲۴
۹	۰/۸۰۵۶	۰/۸۴۸۱	۰/۸۴۰۸	۰/۸۰۷۰
۱۰	۰/۷۷۹۴	۰/۸۲۳۳	۰/۸۱۷۹	۰/۷۹۵۹
۱۱	۰/۹۱۲۰	۰/۹۵۷۴	۰/۹۶۰۱	۰/۹۲۵۴
۱۲	۰/۹۱۱۵	۰/۹۵۶۹	۰/۹۵۹۴	۰/۹۲۴۹
۱۳	۰/۹۱۰۰	۰/۹۵۵۴	۰/۹۵۷۴	۰/۹۲۳۳
۱۴	۰/۹۰۷۴	۰/۹۵۲۹	۰/۹۵۴۰	۰/۹۲۰۷
۱۵	۰/۹۰۲۲	۰/۹۴۷۹	۰/۹۴۷۴	۰/۹۱۵۴
۱۶	۰/۸۸۶۸	۰/۹۳۳۱	۰/۹۲۸۴	۰/۸۹۹۵
۱۷	۰/۸۶۱۰	۰/۹۰۸۳	۰/۸۹۸۷	۰/۸۷۲۶
۱۸	۰/۸۳۵۲	۰/۸۸۳۵	۰/۸۷۱۴	۰/۸۳۹۵
۱۹	۰/۸۰۹۴	۰/۸۵۸۷	۰/۸۴۶۱	۰/۸۰۲۷
۲۰	۰/۷۸۳۵	۰/۸۳۳۹	۰/۸۲۲۸	۰/۷۹۱۲
۲۱	۰/۹۱۴۸	۰/۹۶۸۰	۰/۹۶۹۱	۰/۹۲۶۲
۲۲	۰/۹۱۴۳	۰/۹۶۷۵	۰/۹۶۸۴	۰/۹۲۵۷
۲۳	۰/۹۱۲۷	۰/۹۶۶۰	۰/۹۶۶۴	۰/۹۲۴۲
۲۴	۰/۹۱۰۲	۰/۹۶۳۵	۰/۹۶۲۹	۰/۹۲۱۵
۲۵	۰/۹۰۵۱	۰/۹۵۸۵	۰/۹۵۶۱	۰/۹۱۶۳
۲۶	۰/۸۸۹۸	۰/۹۴۳۷	۰/۹۳۶۵	۰/۹۰۰۳
۲۷	۰/۸۶۴۳	۰/۹۱۸۹	۰/۹۰۵۹	۰/۸۷۳۱
۲۸	۰/۸۳۸۷	۰/۸۹۴۱	۰/۸۷۷۹	۰/۸۳۹۴
۲۹	۰/۸۱۳۱	۰/۸۶۹۲	۰/۸۵۲۱	۰/۸۰۱۹
۳۰	۰/۷۸۷۵	۰/۸۴۴۴	۰/۸۲۸۲	۰/۷۹۰۱
۳۱	۰/۹۱۷۵	۰/۹۷۸۶	۰/۹۷۹۰	۰/۹۲۸۰
۳۲	۰/۹۱۷۰	۰/۹۷۸۱	۰/۹۷۸۳	۰/۹۲۷۵
۳۳	۰/۹۱۵۴	۰/۹۷۶۶	۰/۹۷۶۱	۰/۹۲۶۰
۳۴	۰/۹۱۲۹	۰/۹۷۴۱	۰/۹۷۳۶	۰/۹۲۳۵
۳۵	۰/۹۰۷۹	۰/۹۶۹۱	۰/۹۶۵۶	۰/۹۱۸۳
۳۶	۰/۸۹۲۷	۰/۹۵۴۲	۰/۹۴۵۳	۰/۹۰۲۷
۳۷	۰/۸۶۷۴	۰/۹۲۹۴	۰/۹۱۳۸	۰/۸۷۵۷
۳۸	۰/۸۴۲۱	۰/۹۰۴۶	۰/۸۸۵۰	۰/۸۴۲۰
۳۹	۰/۸۱۶۸	۰/۸۷۹۶	۰/۸۵۸۵	۰/۸۰۴۶

ادامہی جدول (۲-پ)

۴۰	۰/۷۹۱۴	۰/۸۵۵۰	۰/۸۳۴۱	۰/۷۹۲۶
۴۱	۰/۹۲۰۱	۰/۹۸۹۱	۰/۹۸۹۷	۰/۹۳۰۶
۴۲	۰/۹۱۹۶	۰/۹۸۸۷	۰/۹۸۸۹	۰/۹۳۰۲
۴۳	۰/۹۱۸۱	۰/۹۸۷۲	۰/۹۸۶۷	۰/۹۲۸۷
۴۴	۰/۹۱۵۶	۰/۹۸۴۷	۰/۹۸۳۰	۰/۹۲۶۳
۴۵	۰/۹۱۰۶	۰/۹۷۹۷	۰/۹۷۵۷	۰/۹۲۱۴
۴۶	۰/۸۹۵۶	۰/۹۶۴۸	۰/۹۵۴۸	۰/۹۰۶۳
۴۷	۰/۸۷۰۶	۰/۹۴۰۰	۰/۹۲۲۴	۰/۸۸۰۱
۴۸	۰/۸۴۵۵	۰/۹۱۵۲	۰/۸۹۲۷	۰/۸۴۷۰
۴۹	۰/۸۲۰۴	۰/۸۹۰۴	۰/۸۶۵۵	۰/۸۱۰۵
۵۰	۰/۷۹۵۲	۰/۸۶۵۶	۰/۸۴۰۵	۰/۷۹۸۶
۵۱	۰/۹۲۲۷	۰/۹۹۹۷	۱/۰۰۱۱	۰/۹۳۳۹
۵۲	۰/۹۲۲۲	۰/۹۹۹۲	۱/۰۰۰۳	۰/۹۳۳۵
۵۳	۰/۹۲۰۷	۰/۹۹۷۸	۰/۹۹۸۰	۰/۹۳۲۲
۵۴	۰/۹۱۸۲	۰/۹۹۵۳	۰/۹۹۴۲	۰/۹۲۹۹
۵۵	۰/۹۱۳۳	۰/۹۹۰۳	۰/۹۸۶۷	۰/۹۲۵۳
۵۶	۰/۸۹۸۴	۰/۹۷۵۴	۰/۹۶۵۰	۰/۹۱۱۱
۵۷	۰/۸۷۳۷	۰/۹۵۰۶	۰/۹۳۱۵	۰/۸۸۶۱
۵۸	۰/۸۴۸۸	۰/۹۲۵۸	۰/۹۰۰۹	۰/۸۵۴۳
۵۹	۰/۸۲۴۰	۰/۹۰۱۰	۰/۸۷۲۹	۰/۸۱۹۲
۶۰	۰/۷۹۹۰	۰/۸۷۶۲	۰/۸۴۷۲	۰/۸۰۷۷
۶۱	۰/۹۲۵۲	۱/۰۱۰۳	۱/۰۱۳۳	۰/۹۳۷۷
۶۲	۰/۹۲۴۷	۱/۰۰۹۸	۱/۰۱۲۵	۰/۹۳۷۳
۶۳	۰/۸۲۳۲	۰/۰۰۸۳	۱/۰۱۰۱	۰/۹۳۶۱
۶۴	۰/۹۲۰۸	۱/۰۰۵۹	۱/۰۰۶۲	۰/۹۳۴۰
۶۵	۰/۹۱۵۹	۱/۰۰۰۹	۰/۹۹۸۳	۰/۹۲۹۸
۶۶	۰/۹۰۱۲	۰/۹۸۶۰	۰/۹۷۵۸	۰/۹۱۶۷
۶۷	۰/۸۷۶۷	۰/۹۶۱۲	۰/۹۴۱۲	۰/۸۹۳۲
۶۸	۰/۸۵۲۱	۰/۹۳۶۴	۰/۹۰۹۶	۰/۸۶۳۳
۶۹	۰/۸۲۷۵	۰/۹۱۱۶	۰/۸۸۰۸	۰/۸۳۰۲
۷۰	۰/۸۰۲۸	۰/۸۸۶۸	۰/۸۵۴۳	۰/۸۱۹۳
دکان	مقادیر تجربی) $10^3 \times$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۱/۰۲۱۰	۰/۹۷۲۹	۰/۹۸۰۸	۱/۰۱۵۰
۲	۰/۹۷۴۰	۰/۹۴۸۶	۰/۹۴۸۵	۰/۹۹۰۱
۳	۰/۹۴۹۰	۰/۹۲۳۸	۰/۹۱۷۴	۰/۹۵۸۸
۴	۰/۸۹۹۰	۰/۸۷۴۲	۰/۸۶۰۴	۰/۹۱۴۵
۵	۰/۸۵۳۰	۰/۸۲۴۶	۰/۸۰۹۸	۰/۸۶۹۵
۶	۰/۸۱۴۰	۰/۷۷۵۰	۰/۷۶۵۰	۰/۸۳۰۵
۷	۰/۷۷۹۰	۰/۷۲۵۴	۰/۷۲۵۸	۰/۷۹۵۵
۸	۰/۷۴۳۰	۰/۶۷۵۸	۰/۶۹۱۷	۰/۷۵۹۵

ادامہی جدول (۲-پ)

۹	۱/۰۲۸۰	۰/۹۸۳۵	۰/۹۸۴۷	۱/۰۲۵۶
۱۰	۰/۹۹۳۰	۰/۹۵۹۲	۰/۹۵۲۰	۰/۹۹۸۵
۱۱	۰/۹۵۷۰	۰/۹۳۴۴	۰/۹۲۰۵	۰/۹۶۳۴
۱۲	۰/۹۱۱۰	۰/۸۸۴۸	۰/۸۶۳۲	۰/۹۱۵۴
۱۳	۰/۸۶۵۰	۰/۸۳۵۲	۰/۸۱۲۵	۰/۸۷۰۲
۱۴	۰/۸۲۳۰	۰/۷۸۵۶	۰/۷۶۷۸	۰/۸۳۰۷
۱۵	۰/۷۸۷۰	۰/۷۳۶۰	۰/۷۲۸۶	۰/۷۹۴۳
۱۶	۰/۷۵۳۰	۰/۶۸۶۴	۰/۶۹۴۸	۰/۷۵۷۹
۱۷	۱/۰۲۷۰	۰/۹۹۴۱	۰/۹۸۸۹	۱/۰۳۶۴
۱۸	۰/۹۹۱۰	۰/۹۶۹۸	۰/۹۵۵۷	۱/۰۰۷۶
۱۹	۰/۹۶۰۰	۰/۹۴۵۰	۰/۹۲۴۰	۰/۹۶۸۹
۲۰	۰/۹۰۵۰	۰/۸۹۵۴	۰/۸۶۶۱	۰/۹۱۷۷
۲۱	۰/۸۵۷۰	۰/۸۴۵۸	۰/۸۱۵۲	۰/۸۷۳۲
۲۲	۰/۸۲۱۰	۰/۷۹۶۲	۰/۷۷۰۴	۰/۸۳۴۱
۲۳	۰/۷۸۵۰	۰/۷۴۶۶	۰/۷۳۱۴	۰/۷۹۶۹
۲۴	۰/۷۶۱۰	۰/۶۹۷۰	۰/۶۹۷۶	۰/۷۶۱۰
۲۵	۱/۰۳۵۰	۱/۰۰۴۷	۰/۹۹۳۶	۱/۰۴۶۶
۲۶	۱/۰۰۱۰	۰/۹۸۰۴	۰/۹۵۹۸	۱/۰۱۶۵
۲۷	۰/۹۷۲۰	۰/۹۵۵۶	۰/۹۲۷۶	۰/۹۷۵۰
۲۸	۰/۹۱۲۰	۰/۹۰۶۰	۰/۸۶۹۲	۰/۹۲۱۲
۲۹	۰/۸۶۲۰	۰/۸۵۶۴	۰/۸۱۷۹	۰/۸۷۸۵
۳۰	۰/۸۲۴۰	۰/۸۰۶۸	۰/۷۷۳۰	۰/۸۴۰۵
۳۱	۰/۷۹۵۰	۰/۷۵۷۲	۰/۷۳۳۹	۰/۸۰۳۳
۳۲	۰/۷۷۴۰	۰/۷۰۷۶	۰/۷۰۰۱	۰/۷۶۸۵
۳۳	۱/۰۵۴۰	۱/۰۱۵۳	۰/۹۹۸۵	۱/۰۵۵۶
۳۴	۱/۰۲۰۰	۰/۹۹۱۰	۰/۹۶۴۲	۱/۰۲۴۹
۳۵	۰/۹۹۰۰	۰/۹۶۶۲	۰/۹۳۱۵	۰/۹۸۱۲
۳۶	۰/۹۲۸۰	۰/۹۱۶۶	۰/۸۷۲۳	۰/۹۲۵۹
۳۷	۰/۸۸۵۰	۰/۸۶۷۰	۰/۸۲۰۶	۰/۸۸۵۷
۳۸	۰/۸۴۰۰	۰/۸۱۷۴	۰/۷۷۵۴	۰/۸۴۹۶
۳۹	۰/۸۱۳۰	۰/۷۶۷۸	۰/۷۳۶۲	۰/۸۱۳۰
۴۰	۰/۷۸۱۰	۰/۷۱۸۲	۰/۷۰۲۴	۰/۷۸۰۰
۴۱	۱/۰۷۵۰	۱/۰۲۵۹	۱/۰۰۳۷	۱/۰۶۲۷
۴۲	۱/۰۲۷۰	۱/۰۰۱۶	۰/۹۶۸۷	۱/۰۳۲۱
۴۳	۰/۹۹۴۰	۰/۹۷۶۸	۰/۹۳۵۴	۰/۹۸۷۲
۴۴	۰/۹۳۷۰	۰/۹۲۷۲	۰/۸۷۵۵	۰/۹۳۱۲
۴۵	۰/۸۸۷۰	۰/۸۷۷۶	۰/۸۲۳۲	۰/۸۹۴۲
۴۶	۰/۸۵۳۰	۰/۸۲۸۰	۰/۷۷۷۷	۰/۸۶۰۷
۴۷	۰/۸۲۴۰	۰/۷۷۸۴	۰/۷۳۸۲	۰/۸۲۵۳
۴۸	۰/۷۸۳۰	۰/۷۲۸۷	۰/۷۰۴۲	۰/۷۹۴۶

ادامه‌ی جدول (۲-پ)

۴۹	۱/۰۸۴۰	۱/۰۳۶۵	۱/۰۰۹۱	۱/۰۶۷۵
۵۰	۱/۰۴۰۰	۱/۰۱۲۲	۰/۹۷۳۴	۱/۰۳۷۶
۵۱	۱/۰۰۱۰	۰/۹۸۷۴	۰/۹۳۹۵	۰/۹۹۲۴
۵۲	۰/۹۴۸۰	۰/۹۳۷۸	۰/۸۷۸۶	۰/۹۳۶۹
۵۳	۰/۸۹۹۰	۰/۸۸۸۲	۰/۸۲۵۶	۰/۹۰۳۶
۵۴	۰/۸۵۷۰	۰/۸۳۸۵	۰/۷۷۹۷	۰/۸۷۳۱
۵۵	۰/۸۲۳۰	۰/۷۸۸۹	۰/۷۳۹۹	۰/۸۳۹۵
۵۶	۰/۷۹۵۰	۰/۷۳۹۳	۰/۷۰۵۸	۰/۸۱۱۶
هگزادکان	مقادیر تجربی) $\times 10^3$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۹۰۱۰	۰/۹۰۹۲	۰/۸۴۳۶	۰/۹۱۶۶
۲	۰/۹۰۰۰	۰/۹۱۱۳	۰/۸۴۵۸	۰/۹۱۶۵
۳	۰/۹۰۰۰	۰/۹۱۳۴	۰/۸۴۸۰	۰/۹۱۶۵
۴	۰/۹۰۱۰	۰/۹۱۵۶	۰/۸۵۰۲	۰/۹۱۶۶
۵	۰/۹۰۳۰	۰/۹۱۷۷	۰/۸۵۲۳	۰/۹۱۶۷
۶	۰/۹۰۲۰	۰/۹۱۹۸	۰/۸۵۴۴	۰/۹۱۶۹
۷	۰/۹۰۴۰	۰/۹۲۱۹	۰/۸۵۶۵	۰/۹۱۷۱
۸	۰/۹۰۴۰	۰/۹۲۴۰	۰/۸۵۸۶	۰/۹۱۷۴
۹	۰/۹۰۷۰	۰/۹۲۶۲	۰/۸۶۰۶	۰/۹۱۷۷
۱۰	۰/۹۰۶۰	۰/۹۲۸۳	۰/۸۶۲۷	۰/۹۱۸۱
۱۱	۰/۹۰۷۰	۰/۹۳۰۴	۰/۸۶۴۷	۰/۹۱۸۵
۱۲	۰/۹۱۰۰	۰/۹۳۲۵	۰/۸۶۶۷	۰/۹۱۹۰
۱۳	۰/۹۱۰۰	۰/۹۳۴۶	۰/۸۶۸۷	۰/۹۱۹۵
۱۴	۰/۹۱۰۰	۰/۹۳۶۷	۰/۸۷۰۶	۰/۹۲۰۱
۱۵	۰/۹۱۰۰	۰/۹۳۸۹	۰/۸۷۲۶	۰/۹۲۰۷
۱۶	۰/۹۱۲۰	۰/۹۴۱۰	۰/۸۷۴۵	۰/۹۲۱۴
۱۷	۰/۹۱۱۰	۰/۹۴۳۱	۰/۸۷۶۴	۰/۹۲۲۱
۱۸	۰/۹۱۴۰	۰/۹۴۵۲	۰/۸۷۸۳	۰/۹۲۲۸
۱۹	۰/۹۱۴۰	۰/۹۴۷۳	۰/۸۸۰۲	۰/۹۲۳۶
۲۰	۰/۹۱۶۰	۰/۹۴۹۵	۰/۸۸۲۰	۰/۹۲۴۴
۲۱	۰/۹۱۷۰	۰/۹۵۱۶	۰/۸۸۳۹	۰/۹۲۵۳
۲۲	۰/۹۱۵۰	۰/۹۵۳۷	۰/۸۸۵۷	۰/۹۲۶۲
۲۳	۰/۹۱۶۰	۰/۹۵۵۸	۰/۸۸۷۵	۰/۹۲۷۱
۲۴	۰/۹۱۹۰	۰/۹۵۷۹	۰/۸۸۹۳	۰/۹۲۸۰
۲۵	۰/۹۱۹۰	۰/۹۶۰۰	۰/۸۹۱۱	۰/۹۲۹۰
۲۶	۰/۹۱۹۰	۰/۹۶۲۲	۰/۸۹۲۹	۰/۹۳۰۰
۲۷	۰/۹۲۳۰	۰/۹۶۴۳	۰/۸۹۴۶	۰/۹۳۱۰
۲۸	۰/۹۲۲۰	۰/۹۶۶۴	۰/۸۹۶۴	۰/۹۳۲۰
۲۹	۰/۹۲۱۰	۰/۹۶۸۵	۰/۸۹۸۱	۰/۹۳۳۰
۳۰	۰/۹۲۳۰	۰/۹۷۰۶	۰/۸۹۹۹	۰/۹۳۴۱
۳۱	۰/۹۲۴۰	۰/۹۷۲۸	۰/۹۰۱۶	۰/۹۳۵۱

ادامه‌ی جدول (۲-پ)

اول-۲ پروبان دی	(مقادیر تجربی) $\times 10^2$	(CDFs-MLR). 10^3	(CDFs-ANN). 10^3	(CDFs-SVM). 10^3
۱	۰/۷۳۱۰	۰/۹۲۵۷	۰/۷۳۷۸	۰/۷۴۷۵
۲	۰/۷۲۹۰	۰/۹۲۱۲	۰/۷۳۳۸	۰/۷۴۱۱
۳	۰/۷۱۹۰	۰/۹۰۱۴	۰/۷۱۷۱	۰/۷۳۵۴
۴	۰/۷۰۷۰	۰/۸۷۶۶	۰/۶۹۸۴	۰/۷۱۹۰
۵	۰/۶۹۵۰	۰/۸۵۱۷	۰/۶۸۱۸	۰/۷۱۱۵
۶	۰/۶۸۵۰	۰/۸۲۶۹	۰/۶۶۷۲	۰/۷۰۰۸
۷	۰/۶۷۴۰	۰/۸۰۲۱	۰/۶۵۴۴	۰/۶۸۶۵
۸	۰/۶۶۵۰	۰/۷۷۷۳	۰/۶۴۳۳	۰/۶۸۱۶
۹	۰/۷۵۰۰	۰/۹۴۶۸	۰/۷۵۹۰	۰/۷۴۷۳
۱۰	۰/۷۴۷۰	۰/۹۴۲۴	۰/۷۵۴۷	۰/۷۴۰۷
۱۱	۰/۷۳۷۰	۰/۹۲۲۵	۰/۷۳۶۶	۰/۷۲۴۲
۱۲	۰/۷۲۴۰	۰/۸۹۷۷	۰/۷۱۶۱	۰/۷۱۶۳
۱۳	۰/۷۱۲۰	۰/۸۷۲۹	۰/۶۹۸۰	۰/۷۰۷۱
۱۴	۰/۷۰۱۰	۰/۸۴۸۱	۰/۶۸۲۰	۰/۶۹۵۱
۱۵	۰/۶۹۰۰	۰/۸۲۳۳	۰/۶۶۷۹	۰/۶۷۹۵
۱۶	۰/۶۸۰۰	۰/۷۹۸۵	۰/۶۵۵۷	۰/۶۷۰۹
۱۷	۰/۶۷۰۰	۰/۷۷۳۷	۰/۶۴۵۲	۰/۶۸۰۲
۱۸	۰/۷۶۹۰	۰/۹۶۸۰	۰/۷۸۳۶	۰/۷۶۲۶
۱۹	۰/۷۶۶۰	۰/۹۶۳۶	۰/۷۷۹۰	۰/۷۵۶۴
۲۰	۰/۷۵۵۰	۰/۹۴۳۷	۰/۷۵۹۲	۰/۷۳۹۹
۲۱	۰/۷۴۲۰	۰/۹۱۸۹	۰/۷۳۶۹	۰/۷۳۰۵
۲۲	۰/۷۳۰۰	۰/۸۹۴۱	۰/۷۱۷۰	۰/۷۱۹۷
۲۳	۰/۷۱۸۰	۰/۸۶۹۳	۰/۶۹۹۴	۰/۷۰۶۷
۲۴	۰/۷۰۷۰	۰/۸۴۴۵	۰/۶۸۳۹	۰/۶۹۰۹
۲۵	۰/۶۹۶۰	۰/۸۱۹۷	۰/۶۷۰۳	۰/۶۷۹۵
۲۶	۰/۶۸۶۰	۰/۷۹۴۹	۰/۶۵۸۷	۰/۶۷۹۷
۲۷	۰/۶۷۷۰	۰/۷۷۰۱	۰/۶۴۸۶	۰/۶۸۳۷
۲۸	۰/۶۶۷۰	۰/۷۴۵۳	۰/۶۴۰۲	۰/۶۸۳۵
۲۹	۰/۶۵۹۰	۰/۷۲۰۵	۰/۶۳۳۱	۰/۶۷۳۶
۳۰	۰/۶۵۰۰	۰/۶۹۵۷	۰/۶۲۷۳	۰/۶۵۳۵
۳۱	۰/۶۴۲۰	۰/۶۷۰۹	۰/۶۲۲۶	۰/۶۵۸۵
۳۲	۰/۷۸۹۰	۰/۹۸۹۲	۰/۸۱۰۹	۰/۷۸۸۵
۳۳	۰/۷۸۷۰	۰/۹۸۴۷	۰/۸۰۵۹	۰/۷۸۲۸
۳۴	۰/۷۷۵۰	۰/۹۶۴۹	۰/۷۸۴۶	۰/۷۶۷۱
۳۵	۰/۷۶۲۰	۰/۹۴۰۱	۰/۷۶۰۳	۰/۷۵۶۶
۳۶	۰/۷۴۹۰	۰/۹۱۵۳	۰/۷۳۸۵	۰/۷۴۴۴
۳۷	۰/۷۳۷۰	۰/۸۹۰۵	۰/۷۱۹۰	۰/۷۳۰۸
۳۸	۰/۷۲۵۰	۰/۸۶۵۷	۰/۷۰۱۸	۰/۷۱۵۸

ادامہی جدول (۲-پ)

۳۹	۰/۷۱۴۰	۰/۸۴۰۹	۰/۶۸۶۷	۰/۷۰۳۰
۴۰	۰/۷۰۴۰	۰/۸۱۶۱	۰/۶۷۳۶	۰/۶۹۶۳
۴۱	۰/۶۹۴۰	۰/۷۹۱۳	۰/۶۶۲۳	۰/۶۹۱۱
۴۲	۰/۶۸۵۰	۰/۷۶۶۵	۰/۶۵۲۶	۰/۶۸۴۹
۴۳	۰/۶۷۶۰	۰/۷۴۱۷	۰/۶۴۴۵	۰/۶۷۲۶
۴۴	۰/۶۶۸۰	۰/۷۱۶۹	۰/۶۳۷۶	۰/۶۵۱۴
۴۵	۰/۶۶۰۰	۰/۶۹۲۱	۰/۶۳۲۰	۰/۶۵۵۸
۴۶	۰/۸۱۱۰	۱/۰۱۰۴	۰/۸۴۰۱	۰/۸۱۹۰
۴۷	۰/۸۰۸۰	۱/۰۰۵۹	۰/۸۳۴۷	۰/۸۱۴۱
۴۸	۰/۷۹۶۰	۰/۹۸۶۱	۰/۸۱۲۰	۰/۷۹۹۷
۴۹	۰/۷۸۲۰	۰/۹۶۱۳	۰/۷۸۵۷	۰/۷۸۸۴
۵۰	۰/۷۶۹۰	۰/۹۳۶۵	۰/۷۶۱۹	۰/۷۷۵۴
۵۱	۰/۷۵۷۰	۰/۹۱۱۷	۰/۷۴۰۵	۰/۷۶۱۹
۵۲	۰/۷۴۶۰	۰/۸۸۶۹	۰/۷۲۱۴	۰/۷۴۸۵
۵۳	۰/۷۳۵۰	۰/۸۶۲۱	۰/۷۰۴۵	۰/۷۳۶۰
۵۴	۰/۷۲۴۰	۰/۸۳۷۳	۰/۶۸۹۷	۰/۷۲۵۸
۵۵	۰/۷۱۵۰	۰/۸۱۲۵	۰/۶۷۶۹	۰/۷۱۵۹
۵۶	۰/۷۰۵۰	۰/۷۸۷۶	۰/۶۶۵۸	۰/۷۰۷۳
۵۷	۰/۶۹۶۰	۰/۷۶۲۸	۰/۶۵۶۳	۰/۶۹۵۱
۵۸	۰/۶۸۸۰	۰/۷۳۸۰	۰/۶۴۸۳	۰/۶۷۵۰
۵۹	۰/۶۸۰۰	۰/۷۱۳۲	۰/۶۴۱۶	۰/۶۷۸۵
۶۰	۰/۸۳۳۰	۱/۰۳۱۶	۰/۸۷۰۱	۰/۸۴۹۶
۶۱	۰/۸۳۰۰	۱/۰۲۷۱	۰/۸۶۴۵	۰/۸۴۵۴
۶۲	۰/۸۱۸۰	۱/۰۰۷۳	۰/۸۴۰۶	۰/۸۳۲۷
۶۳	۰/۸۰۵۰	۰/۹۸۲۵	۰/۸۱۲۶	۰/۸۲۱۵
۶۴	۰/۷۹۲۰	۰/۹۵۷۷	۰/۷۸۶۸	۰/۸۰۸۵
۶۵	۰/۷۸۰۰	۰/۹۳۲۹	۰/۷۶۳۳	۰/۷۹۵۹
۶۶	۰/۷۶۸۰	۰/۹۰۸۰	۰/۷۴۲۲	۰/۷۸۴۵
۶۷	۰/۷۵۸۰	۰/۸۸۳۲	۰/۷۲۳۴	۰/۷۷۳۹
۶۸	۰/۷۴۷۰	۰/۸۵۸۴	۰/۷۰۶۷	۰/۷۶۳۵
۶۹	۰/۷۳۸۰	۰/۸۳۳۶	۰/۶۹۲۱	۰/۷۵۳۲
۷۰	۰/۷۲۹۰	۰/۸۰۸۸	۰/۶۹۹۴	۰/۷۴۵۵
۷۱	۰/۷۲۰۰	۰/۷۸۴۰	۰/۶۶۸۴	۰/۷۳۵۳
۷۲	۰/۷۱۲۰	۰/۷۵۹۲	۰/۶۵۹۰	۰/۷۱۷۹
۷۳	۰/۷۰۴۰	۰/۷۳۴۴	۰/۶۵۱۰	۰/۷۲۰۵
اتیل پنتانوات	مقادیر تجربی) $10^3 \times$	(CDFs-MLR). 10^3	(CDFs-ANN). 10^3	(CDFs-SVM). 10^3
۱	۰/۹۵۰۰	۰/۹۶۷۶	۰/۹۱۵۰	۰/۹۵۹۵
۲	۰/۹۳۰۰	۰/۹۴۲۸	۰/۸۹۹۰	۰/۹۴۶۵
۳	۰/۹۶۰۰	۰/۹۷۸۲	۰/۹۲۷۶	۰/۹۶۸۶
۴	۰/۹۵۰۰	۰/۹۵۳۴	۰/۹۱۰۴	۰/۹۵۴۵

ادامہی جدول (۲-پ)

۵	۰/۹۸۰۰	۰/۹۸۸۸	۰/۹۴۱۰	۰/۹۷۹۹
۶	۰/۹۶۰۰	۰/۹۶۴۰	۰/۹۲۲۴	۰/۹۶۴۷
۷	۱/۰۱۰۰	۱/۰۲۴۲	۰/۹۷۷۰	۱/۰۱۵۸
۸	۰/۹۹۰۰	۰/۹۹۹۴	۰/۹۵۵۰	۰/۹۹۳۰
۹	۰/۹۷۰۰	۰/۹۷۴۶	۰/۹۳۵۱	۰/۹۷۶۶
۱۰	۱/۰۲۰۰	۱/۰۳۴۸	۰/۹۹۳۴	۰/۰۳۰۱
۱۱	۱/۰۰۰۰	۱/۰۱۰۰	۰/۹۶۹۷	۱/۰۰۷۳
۱۲	۰/۹۸۰۰	۰/۹۸۵۲	۰/۹۴۸۲	۰/۹۸۹۸
۱۳	۱/۰۳۰۰	۱/۰۴۵۴	۱/۰۱۰۴	۱/۰۴۴۶
۱۴	۱/۰۱۰۰	۱/۰۲۰۶	۰/۹۸۵۰	۱/۰۲۲۰
۱۵	۱/۰۰۰۰	۰/۹۹۵۸	۰/۹۶۱۹	۱/۰۰۳۴
۱۶	۱/۰۷۰۰	۱/۰۸۰۸	۱/۰۵۷۷	۱/۰۸۴۰
۱۷	۱/۰۵۰۰	۱/۰۵۶۰	۱/۰۲۸۰	۱/۰۵۸۶
۱۸	۱/۰۳۰۰	۱/۰۳۱۲	۱/۰۰۰۸	۱/۰۳۶۴
۱۹	۱/۰۱۰۰	۱/۰۰۶۴	۰/۹۷۶۰	۱/۰۱۶۹
۲۰	۱/۰۸۰۰	۱/۰۹۱۴	۱/۰۷۷۸	۱/۰۹۶۵
۲۱	۱/۰۶۰۰	۱/۰۶۶۶	۱/۰۴۶۲	۱/۰۷۱۲
۲۲	۱/۰۴۰۰	۱/۰۴۱۸	۱/۰۱۷۲	۱/۰۴۹۴
۲۳	۱/۰۳۰۰	۱/۰۱۷۰	۰/۹۹۰۴	۱/۰۲۹۲
۲۴	۱/۱۰۰۰	۱/۱۰۲۰	۱/۰۹۸۶	۱/۱۰۶۶
۲۵	۱/۰۸۰۰	۱/۰۷۷۲	۱/۰۶۴۹	۱/۰۸۱۶
۲۶	۱/۰۶۰۰	۱/۰۵۲۴	۱/۰۳۳۹	۱/۰۶۰۵
۲۷	۱/۰۴۰۰	۱/۰۲۷۶	۱/۰۰۵۲	۱/۰۳۹۸
۲۸	۱/۲۳۰۰	۱/۲۱۱۳	۱/۲۸۲۸	۱/۲۱۳۵
۲۹	۱/۲۲۰۰	۱/۲۰۶۸	۱/۲۷۵۱	۱/۲۱۶۷
۳۰	۱/۲۲۰۰	۱/۲۰۱۹	۱/۲۶۶۶	۱/۲۱۸۱
۳۱	۱/۲۱۰۰	۱/۱۹۸۰	۱/۲۵۹۹	۱/۲۱۷۵
۳۲	۱/۲۱۰۰	۱/۱۹۶۹	۱/۲۵۸۰	۱/۲۱۷۲
۳۳	۱/۲۰۰۰	۱/۱۸۷۰	۱/۲۴۰۹	۱/۲۰۹۸
۳۴	۱/۱۷۰۰	۱/۱۶۲۲	۱/۱۹۸۶	۱/۱۷۵۲
۳۵	۱/۱۴۰۰	۱/۱۳۷۴	۰/۱۵۸۱	۱/۱۴۱۴
۳۶	۱/۱۲۰۰	۱/۱۱۲۶	۱/۱۱۹۸	۱/۱۱۳۵
۳۷	۱/۰۹۰۰	۱/۰۸۷۸	۱/۰۸۴۱	۱/۰۸۹۲
۳۸	۱/۰۷۰۰	۱/۰۶۳۰	۱/۰۵۱۰	۱/۰۶۸۹
۳۹	۱/۰۶۰۰	۱/۰۳۸۲	۱/۰۲۰۳	۱/۰۴۸۰
۴۰	۱/۱۶۰۰	۱/۱۴۸۰	۱/۱۸۱۷	۱/۱۴۳۴
۴۱	۱/۱۳۰۰	۱/۱۲۳۲	۱/۱۴۱۴	۱/۱۱۶۷
۴۲	۱/۱۱۰۰	۱/۰۹۸۴	۱/۱۰۳۶	۱/۰۹۳۴
۴۳	۱/۰۹۰۰	۱/۰۷۳۶	۱/۰۶۸۳	۱/۰۷۴۱
۴۴	۱/۰۷۰۰	۱/۰۴۸۷	۱/۰۳۵۵	۱/۰۵۳۵

ادامه‌ی جدول (۲-پ)

پننان-۲-اون	مقادیر تجربی) $10^3 \times$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۱/۱۳۰۰	۱/۱۰۰۳	۱/۱۸۲۴	۱/۱۱۳۵
۲	۱/۰۷۰۰	۱/۰۰۱۶	۰/۹۹۹۰	۱/۰۵۳۵
۳	۱/۰۱۰۰	۰/۹۰۲۴	۰/۸۷۸۱	۰/۹۹۷۴
۴	۰/۹۲۰۰	۰/۸۰۳۲	۰/۷۹۹۵	۰/۹۳۶۵
۵	۰/۸۴۰۰	۰/۶۰۴۷	۰/۷۳۶۰	۰/۸۵۶۵
۶	۱/۱۷۰۰	۱/۱۲۱۵	۱/۲۰۵۶	۱/۱۶۲۳
۷	۱/۰۹۰۰	۱/۰۲۲۸	۱/۰۰۸۳	۱/۰۸۰۳
۸	۱/۰۳۰۰	۰/۹۲۳۶	۰/۸۸۰۹	۱/۰۱۵۸
۹	۰/۹۳۰۰	۰/۸۲۴۴	۰/۷۹۹۳	۰/۹۴۱۹
۱۰	۰/۸۶۰۰	۰/۶۲۵۹	۰/۷۳۷۴	۰/۸۶۱۴
۱۱	۱/۲۰۰۰	۱/۱۴۲۷	۱/۲۳۴۰	۱/۲۰۴۳
۱۲	۱/۱۲۰۰	۱/۰۴۳۹	۱/۰۲۰۷	۱/۱۱۲۵
۱۳	۱/۰۵۰۰	۰/۹۴۴۷	۰/۸۸۶۰	۱/۰۴۰۴
۱۴	۰/۹۵۰۰	۰/۸۴۵۵	۰/۸۰۰۷	۰/۹۵۱۷
۱۵	۰/۸۷۰۰	۰/۶۴۷۱	۰/۷۳۸۷	۰/۸۷۵۷
۱۶	۱/۲۵۰۰	۱/۱۷۴۴	۰/۲۸۶۸	۱/۲۳۳۵
۱۷	۱/۱۶۰۰	۱/۰۷۵۷	۱/۰۴۴۶	۱/۱۶۴۰
۱۸	۱/۰۸۰۰	۰/۹۷۶۵	۰/۸۹۷۵	۱/۰۸۳۰
۱۹	۰/۹۷۰۰	۰/۸۷۷۳	۰/۸۰۵۰	۰/۹۷۰۸
۲۰	۰/۹۰۰۰	۰/۶۷۸۹	۰/۷۳۹۶	۰/۹۰۶۳
۲۱	۱/۱۸۰۰	۱/۰۹۶۹	۱/۰۶۳۴	۱/۱۹۱۲
۲۲	۱/۱۱۰۰	۰/۹۹۷۷	۰/۹۰۷۳	۱/۱۰۷۴
۲۳	۰/۹۹۰۰	۰/۸۹۸۵	۰/۸۰۸۷	۰/۹۸۲۵
۲۴	۰/۹۱۰۰	۰/۷۰۰۰	۰/۷۳۸۹	۰/۹۲۶۵
۲۵	۱/۲۲۰۰	۱/۱۲۸۷	۱/۰۹۴۰	۱/۲۰۳۵
۲۶	۱/۱۴۰۰	۱/۰۲۹۴	۰/۹۲۴۱	۱/۱۲۳۵
۲۷	۱/۰۱۰۰	۰/۹۳۰۲	۰/۸۱۴۸	۰/۹۹۳۴
۲-اتیل-۱-بوتانول	مقادیر تجربی) $10^3 \times$	(CDFS-MLR). 10^3	(CDFS-ANN). 10^3	(CDFS-SVM). 10^3
۱	۰/۹۰۴۰	۱/۱۶۰۴	۱/۱۰۶۴	۰/۹۲۰۶
۲	۰/۸۵۶۰	۱/۱۱۱۳	۱/۰۲۳۴	۰/۸۷۲۵
۳	۰/۸۱۰	۱/۰۶۱۷	۰/۹۵۴۹	۰/۸۳۲۶
۴	۰/۷۸۱۰	۱/۰۱۲۱	۰/۸۹۸۸	۰/۷۹۷۵
۵	۰/۷۵۰۰	۰/۹۶۲۵	۰/۸۵۲۳	۰/۷۶۶۵
۶	۰/۷۲۳۰	۰/۹۱۲۹	۰/۸۱۳۱	۰/۷۳۹۵
۷	۰/۶۹۸۰	۰/۸۶۳۳	۰/۷۷۹۶	۰/۷۱۴۶
۸	۰/۶۷۶۰	۰/۸۱۳۷	۰/۷۵۰۲	۰/۶۹۲۵
۹	۰/۶۵۶۰	۰/۷۶۴۰	۰/۷۲۴۰	۰/۶۷۲۵
۱۰	۰/۶۳۷۰	۰/۷۱۴۴	۰/۷۰۰۲	۰/۶۵۳۵
۱۱	۰/۸۷۱۰	۱/۱۲۱۹	۱/۰۴۳۵	۰/۸۷۵۶

ادامہی جدول (۲-پ)

۱۲	۰/۸۲۹۰	۱/۰۷۲۳	۰/۹۷۲۶	۰/۸۳۵۱
۱۳	۰/۷۹۳۰	۱/۰۲۲۷	۰/۹۱۴۴	۰/۷۹۹۷
۱۴	۰/۷۶۱۰	۰/۹۷۳۱	۰/۸۶۶۲	۰/۷۶۸۴
۱۵	۰/۷۳۳۰	۰/۹۲۳۵	۰/۸۲۵۵	۰/۷۴۰۱
۱۶	۰/۷۰۸۰	۰/۸۷۳۹	۰/۷۹۰۷	۰/۷۱۳۶
۱۷	۰/۶۸۵۰	۰/۸۲۴۲	۰/۷۶۰۲	۰/۶۹۰۰
۱۸	۰/۶۶۴۰	۰/۷۷۴۶	۰/۷۳۲۹	۰/۶۶۸۷
۱۹	۰/۶۴۵۰	۰/۷۲۵۰	۰/۷۰۸۱	۰/۶۴۸۱
۲۰	۰/۶۲۸۰	۰/۶۷۵۴	۰/۶۸۵۵	۰/۶۴۴۵
۲۱	۰/۸۸۵۰	۰/۱۳۲۵	۱/۰۶۲۷	۰/۸۸۱۰
۲۲	۰/۸۴۱۰	۱/۰۸۲۹	۰/۹۹۱۱	۰/۸۴۱۱
۲۳	۰/۸۰۴۰	۱/۰۳۳۳	۰/۹۳۰۷	۰/۸۰۶۱
۲۴	۰/۷۷۲۰	۰/۹۸۳۷	۰/۸۸۰۵	۰/۷۷۵۲
۲۵	۰/۷۴۳۰	۰/۹۳۴۱	۰/۸۳۸۲	۰/۷۴۶۱
۲۶	۰/۷۱۷۰	۰/۸۸۴۴	۰/۸۰۱۸	۰/۷۱۸۶
۲۷	۰/۶۹۴۰	۰/۸۳۴۸	۰/۷۷۰۰	۰/۶۹۳۹
۲۸	۰/۶۷۳۰	۰/۷۸۵۲	۰/۷۴۱۵	۰/۶۷۱۶
۲۹	۰/۶۵۴۰	۰/۷۳۵۶	۰/۷۱۵۷	۰/۶۴۹۹
۳۰	۰/۶۳۶۰	۰/۶۸۶۰	۰/۶۹۲۱	۰/۶۴۱۸
۳۱	۰/۸۹۹۰	۱/۱۴۳۱	۱/۰۸۶۸	۰/۸۸۸۵
۳۲	۰/۸۵۴۰	۱/۰۹۳۵	۱/۰۱۰۴	۰/۸۴۹۹
۳۳	۰/۸۱۶۰	۱/۰۴۳۹	۰/۹۴۷۴	۰/۸۱۶۲
۳۴	۰/۷۸۳۰	۰/۹۹۴۳	۰/۸۹۵۱	۰/۷۸۶۳
۳۵	۰/۷۵۳۰	۰/۹۴۴۶	۰/۸۵۰۹	۰/۷۵۷۰
۳۶	۰/۷۲۷۰	۰/۸۹۵۰	۰/۸۱۳۰	۰/۷۲۹۱
۳۷	۰/۷۰۳۰	۰/۸۴۵۴	۰/۷۷۹۷	۰/۷۰۳۷
۳۸	۰/۶۸۲۰	۰/۷۹۵۸	۰/۷۴۹۹	۰/۶۸۱۱
۳۹	۰/۶۶۲۰	۰/۷۴۶۲	۰/۷۲۲۹	۰/۶۵۸۹
۴۰	۰/۶۴۴۰	۰/۶۹۶۶	۰/۶۹۸۳	۰/۶۴۶۶
۴۱	۰/۹۱۴۰	۱/۱۵۳۷	۱/۱۰۹۸	۰/۸۹۷۵
۴۲	۰/۸۶۷۰	۱/۱۰۴۱	۱/۰۳۰۳	۰/۸۶۱۱
۴۳	۰/۸۲۸۰	۱/۰۵۴۴	۰/۹۶۴۷	۰/۸۲۹۲
۴۴	۰/۷۹۴۰	۱/۰۰۴۸	۰/۹۱۰۱	۰/۸۰۱۱
۴۵	۰/۷۶۴۰	۰/۹۵۵۲	۰/۸۶۳۸	۰/۷۷۲۲
۴۶	۰/۷۳۷۰	۰/۹۰۵۶	۰/۸۲۴۰	۰/۷۴۴۴
۴۷	۰/۷۱۳۰	۰/۸۵۶۰	۰/۷۸۹۱	۰/۷۱۹۰
۴۸	۰/۶۹۱۰	۰/۸۰۶۴	۰/۷۵۷۹	۰/۶۹۶۴
۴۹	۰/۶۷۱۰	۰/۷۵۶۸	۰/۷۲۹۷	۰/۶۷۴۵
۵۰	۰/۶۵۲۰	۰/۷۰۷۲	۰/۷۰۴۰	۰/۶۵۸۴
۵۱	۰/۸۸۱۰	۱/۱۱۴۶	۱/۰۵۰۹	۰/۸۷۳۸

ادامہی جدول (۲-پ)

۵۲	۰/۸۴۰۰	۱/۰۶۵۰	۰/۹۸۲۴	۰/۸۴۴۴
۵۳	۰/۸۰۵۰	۱/۰۱۵۴	۰/۹۲۵۲	۰/۸۱۸۵
۵۴	۰/۷۷۴۰	۰/۹۶۵۸	۰/۸۷۶۸	۰/۷۹۰۵
۵۵	۰/۷۴۷۰	۰/۹۱۶۲	۰/۸۳۵۰	۰/۷۶۳۵
۵۶	۰/۷۲۲۰	۰/۸۶۶۶	۰/۷۹۸۳	۰/۷۳۸۶
۵۷	۰/۷۰۰۰	۰/۸۱۷۰	۷۶۵۵۰	۰/۷۱۶۵
۵۸	۰/۶۷۹۰	۰/۷۶۷۴	۰/۷۳۵۹	۰/۶۹۵۵
۵۹	۰/۶۶۰۰	۰/۷۱۷۸	۰/۷۰۹۱	۰/۶۷۶۵

مراجع

- [1]. Xiao-Gang Lu, (2005), PhD. Thesis, "Theoretical Modeling of Molar Volume and Thermal expansion", Department of Materials Science and Engineering Royal Institute of Technology, Stockholm, Sweden
- [۲]. اتكینز،(۱۳۸۳)،"شیمی فیزیک"، جلد اول،پارسافر غ، نجفی ب، چاپ سوم، دانشگاه صنعتی اصفهان، مرکز نشر، اصفهان، ۱۵۸
- [3]. P. Navia, J. Troncoso and L. Romani, " Isobaric Thermal Expansivity for Nonpolar Compounds", *J. Chem. Eng. Data*, **55**(2010), 2173–2179
- [4]. P. Navia, J. Troncoso and L. Romani, " Isobaric thermal expansivity behaviour against temperature and pressure of associating fluids", *J. Chem. Thermodynamics*, **42**(2010), 23-27
- [5]. J. L. Valencia, D. Gonzalez-Salgado, J. Troncoso, J. Peleteiro, E. Carballo and L. Romani, "Thermophysical Characterization of Liquids Using Precise Density and Isobaric Heat Capacity Measurements As a Function of Pressure", *J. Chem. Eng. Data*, **54**(2009), 904–915
- [6]. E. Zorębski , M. Dzida, "The effect of temperature and pressure on acoustic and thermodynamic properties of 1,4-butanediol. The comparison with 1,2-, and 1,3-butanediols", *J. Chem. Thermodynamics*, **54** (2012) 100–107
- [7]. S. Verdier and S. I. Andersen, "Determination of Isobaric Thermal Expansivity of Organic Compounds from 0.1 to 30 MPa at 30 °C with an Isothermal pressure Scanning Microcalorimeter", *J. Chem. Eng. Data*, **48**(2003), 892-897
- [8]. E. Wilhelm, T. M. Letcher, "Heat capacities liquids, solutions and vapours", Royal society of chemistry, 2010
- [9]. P. Navia, J. Troncoso and L. Romani, "New calibration methodology for calorimetric determination of isobaric thermal expansivity of liquids as a function of temperature and pressure", *J. Chem. Thermodynamics*, **40**(2008) 1607–1611
- [10]. G.A. Parsafar, Z. Kalantar, "Extension of linear isotherm regularity to long chain primary, secondary and tertiary alcohols, ketones and 1-carboxylic acids by group contribution method", *Fluid Phase Equilibria*, **234** (2005) 11–21

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

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

[13]. M. Moosavi and E. K. Goharshadi, "Investigation of Volumetric Properties of Some Glycol Ethers Using a Simple Equation of State", *International Journal of Thermophysics*, **27**(2006), 1515-1526

[۱۴]. کلانتر ز، (۱۳۸۵)، پایان نامه‌ی دکتری: "پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی و انتقالی سالات آلی چگال با استفاده از روش سهم گروه‌ها و شبکه‌ی عصبی موجک"، دانشکده‌ی شیمی، دانشگاه صنعتی

اصفهان

[15]. O. Matthias. (2000), "chemometrics", pp 375-377

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

[17]. K. Tämm, (2006), PhD. Thesis: "QSPR Modelin of Some Properties of Organic Compounds", Department of Chemistry, University of Tartu, Estonia

[18]. M. Dehmer, K Varmuza, D Benchev, " Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR", Vienna University of Technology Institute of Chemical Engineering and Technical Life Sciences

[۱۹]. اشرفی م، (۱۳۸۹)، پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد: "مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار-فعالیت

مشتقات تیوکربامات‌ها به عنون دسته‌ی جدیدی از بازدارنده‌های غیرنوکلئوزیدی HIV"، دانشکده‌ی

شیمی، دانشگاه شاهرود

[۲۰]. کاظم نادى ورنوسفادرانى ز، (۱۳۹۱)، پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد: "پیش‌بینی ضریب تراکم-

پذیری همدمای ترکیبات آلی بر اساس توصیف‌کننده‌های ساختاری مولکولی در محدوده‌ی وسیعی

ازدما و فشار"، دانشکده‌ی شیمی، دانشگاه شاهرود

[21]. I. T. Jolliffe, "Principal Component Analysis", Department of Mathematical Science",p1

[۲۲]. ایزدی یزدان‌آبادی ا، (۱۳۹۱)، پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد: "مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار-خاصیت هدایت گرمایی برای آلکان‌ها با استفاده از روش‌های خطی و غیرخطی"، دانشکده‌ی شیمی،

دانشگاه شاهرود

[23]. E. L. Ratkova, (2011), PhD. Thesis, " Computational Prediction of Thermodynamic Properties of Organic Molecules in Aqueous Solutions', Faculty of Chemistry, University of Duisburg-Essen

[24]. B. Hemmateenejad, K. Javadnia, M. Elyasi, " Quantitative structure–retention relationship for the Kovats retention indices of a large set of terpenes: A combined data splitting-feature selection strategy", *Analytica Chimica Acta*, **592** (2007) 72–81

[25]. B. Hemmateenejad, M. Shamsipur, R. Miri, M. Elyasi, F. Foroghinia, H. Sharghi, " Linear and nonlinear quantitative structure–property relationship models for solubility of some anthraquinone, anthrone and xanthone derivatives in supercritical carbon dioxide", *Analytica Chimica Acta*, **610**(2008),25–34

[26]. J. H. Kim, (2009), " Artificial Neural Network (ANN) Based Decision Support Model For Alternative Workplace Arrangements(AWA): Readiness Assessment and Type Selection", College of Architecture, Georgia Institute of Technology

[27]. Martinez-Roman M, (2006), "Support Vector Machines for antenna array processing and electromagnetic", Universided Carols III de Madrid, Spain, Morgen & Clypool, USA

[28]. Chen N, Yang J, (2004), "Support Vector Machines in chemistry", word scientific publishing Co.

[29]. Abe S, (2008), "Support Vector Machines for pattern clacssification", Kobe University, Kobe, Japan

[30]. Wang L, (2005), "Support Vector Machines: theory and applications", Nanyang technological University, School of Electrical & Electronic Engineering, Springer Berlin Heidelberg New York.

[31]. W.T. Vong and F. N. Tasi, "Densities, molar volumes, thermal expansion coefficients, and isothermal compressibilities of organic acids from 293.15 K to 323.15 K and at pressures up to 25 MPa", *J. Chem. Eng. Data*, **42** (1997), 1110-1120

- [32]. T. S. Banipal, S. K. Garg and J.C. Ahluwalia, "Densities of Some Higher Alkan-1-oic Acids at Temperatures from 343.15 K to 373.15 K and at Pressures up to 9 MPa", *J. Chem. Thermodynamics*, **24**(1992), 729-735
- [33]. R. Span and W. Wagner, "equation of state for technical applications. I. Simultaneously optimized functional forms for nonpolar and polar fluids", *Int J Thermophys*, **24** (2003), 1-38
- [34]. Darja and V. Dolecek, "isothermal compressibilities and isobaric expansibilities of pentan, hexan, heptan and their binary and ternary mixtures from density measurements", *fluid phase equilibria*, **211**(2003), 109-127
- [35]. J. L. Valencia, D. González-Salgado, J. Troncoso, J. Peleteiro, E. Carballo and L. Romani, "Thermophysical Characterization of Liquids Using Precise Density and Isobaric Heat Capacity Measurements As a Function of Pressure", *J. Chem. Eng. Data*, **54**(2009), 904-915
- [36]. T.S. Khasanshin, A.P. Shchamialiou and O.G. Poddubskij, "Thermodynamic Properties of Heavy n-Alkanes in the Liquid State: n-Dodecane", *International Journal of Thermophysisc*", **24**(2003), 1277-1289
- [37]. T. S. Khasanshin and A. P. Shchemelv, "The Thermodynamic Properties of n-Tetradecane in Liquid State", *High Temperature*, **40**(2002), 235-239
- [38]. P. Navia, J. Troncoso and L R.omaní, " Isobaric Thermal Expansivity for Nonpolar Compounds", *J. Chem. Eng. Data*, **55** (2010), 2173–2179
- [39].C.Gonzalez-Salgado, " Isobaric thermal expansivity and thermophysical characterization of liquids and liquid Mixtures" *Chem. Phys.* **3** (2001) 5230-5236
- [40]. M. Yoshimura, A. Baylaucq, J. P. Bazile, H. Ushiki and C. Bond,"Volumetric Properties of 2-Alkylamines (2-Aminobutane and 2-Aminooctane) at Pressures up to 140 MPa and Temperatures between (293.15 and 403.15) K", *J. Chem. Eng. Data*, **54** (2009), 1702-1709
- [41]. Y. Miyake, A. Baylaucq, F. Plantier, D. Bessiéres, H. Ushiki and C. Boned, "High-perssure (up to 140 MPa) density and derivative properties of some (pentyl-, hexyl- and heptyl-) amines between (293.15 and 353.15) K", *J. Chem. Eng. Data*, **40**(2008), 836-845
- [42]. M. Atilhan and S. Aparicio, " PqT measurements and derived properties of liquid 1,2-alkanediols", *J. Chem. Thermodynamics*, **57**(2013) 137–144

- [43]. E. Zorebski and M. Dzida, "The effect of temperature and pressure on acoustic and thermodynamic properties of 1,4-butanediol. The comparison with 1,2-, and 1,3-butanediols", *J. Chem. Thermodynamics*, **54** (2012), 100-107
- [44]. E. Zorebski, M. Dzida and M. Cempa, " Study of the Effects of Temperature and Pressure on the Acoustic and Thermodynamic Properties of 2-Methyl-2,4-pentanediol", *J. Chem. Eng. Data*, **53**(2008), 1950–1955
- [45]. R. Malhotra and L. A. Woolf, "PVT Property Measurements for the Liquids Propyl Acetate, Butyl Acetate and 1-Methylethyl Acetat from (278 to 338) K and (0.1 to 380) MPa", *J. Chem. Eng. Data*, **41** (1996), 1366-1370
- [46]. R. Malhotra and L. A. Woolf, " PVT Property Measurements for the Liquids Ethyl Propionate and Ethyl Butyrate from (278 to 338) K and (0.1 to 380) MPa", *J. Chem. Eng. Data*, **41** (1996), 1371-1374
- [47]. Henrique F. Costa, Ramesh L. Gardas, Irudayaraj Johnson, Isabel M. A. Fonseca, and Abel G. M. Ferreira, " PVT Property Measurements for Ethyl Propionate, Ethyl Butyrate, and Ethyl Pentanoate Esters from (298 to 393) K and up to 35 MPa" , *J. Chem. Eng. Data*, **54**(2009), 256–262
- [48]. R. L. Gards, I. Johnson, D. M. D. Vaz, I. M. A. Fonseca and A. G. M. Ferreira, "PVT Property Measurements for Some Aliphatic Esters from (298 to 393) K and up to 35 MPa", *J. Chem. Eng. Data*, **52** (2007), 737-751
- [49]. R. Malhotra and L. A. Woolf, "Thermodynamic properties of Butan-2-one at Temperatures from 278K to 338K and Pressures from 0.1 MPa to 280 MPa; Predictions for Higher ketones", *J. Chem. Thermodynamics*, **24**(1992), 1207-1217
- [50]. R. Malhorta and L. A. Woolf, "Volumetric Measurements of Liquid Pentan-3-one, Hexan-2-one and 4-Methylpentan-2-one at Temperatures from 278.15 to 338.13 K and Pressures in the range from 0.1 MPa to 386 MPa", , *J. Chem. Thermodynamics*, **28**(1996), 1411-1421
- [51]. R. Malhotra, W. E. Price and L. A. Woolf, "Thermodynamic Properties of Pentan-3-one at Temperatures from 278k to 338 k and Pressures from 0.1 MPa to 380 MPa, *J. Chem. Thermodynamics*, **25** (1993), 361-366
- [52]. M. J. D.ávila, R. Alcalde, M. Atilhan and S. Aparicio, " PVT measurements and derived properties of liquid 1-Alkanols", *J. Chem. Thermodynamics*, **47** (2012) 241–259

- [53]. M. Dzida, "Study of the Effects of Temperature and Pressure on the Thermodynamic and Acoustic Properties of 2-Methyl-1-butanol at Temperatures from 293 K to 318 K and Pressures up to 100 MPa", *Int J Thermophys*, **31** (2010), 55-69
- [54]. M. Chorazewski, M. Dzida, E. Zorebski and M. Zorebski, "Density, speed of sound, heat capacity, and related properties of 1-hexanol and 2-ethyl-1-butanol as function of temperature and pressure", *J. Chem. Thermodynamics*, **58**(2013), 389-397
- [55]. P. N. Avia, J. Troncoso and L. Roma, "Isobaric thermal expansivity behaviour against temperature and pressure of associating fluids", *J. Chem. Thermodynamics*, **42**(2010) 23–27
- [56]. R. Malhotra and L. A. Woolf, "Volumetric Measurement of Liquid Pentan-2-one, Hexan-2-one and 4-Methylpentan-2-one at Temperatures from 278.15K to 338.13 K and Pressures in the range from 0.1MPa to 386MPa", *J. Chem. Thermodynamics*, **28**(1996), 1411-1421
- [57]. Z. Moreno L. A. Galicia-Luna, F. F. Betancour-Cardenas, "Densities and Derived Thermodynamic Properties of 1-Heptanol and 2-Heptanol at Temperatures from 313 K to 363 K and Pressures up to 22 MPa", *J. Chem. Thermodynamics*, **40** (2008), 96-106
- [58]. M. Dzida, "Study of Sound, Densities, Isobaric Thermal Expansion, Compressibilities and Internal Pressures of Heptan-1-ol, Octan-1-ol, Nonan-1-ol and Decan-1-ol at Temperatures from (293 to 318) K and Pressures up to 100 MPa", *J. Chem. Eng. Data*, **52** (2007), 521-531

Abstract

The main aim of this work was to development of a quantitative structure-property relationship(QSPR) model for isobaric expansivity prediction of organic fluids. The large number of descriptors were calculated with Dragon software and the best calculated descriptors were selected from them with data splitting-feature selection (CDFS) strategy. In the CDFS strategy, data splitting is achieved many times and in each case feature selection is performed using stepwise regression (SR) method. The resulted models are compared for similarity and dissimilarity between the selected descriptors. The final model is one whose descriptors are the common variables between all of resulted models. The 6 descriptors with CDFS strategy were selected. The selected descriptors with the feature selection method and two experimental variables (T and p) were used as input for constructing multiple linear regression model, artificial neural network and support vector machines. The performance of each model was investigated by test set. The results showed that the support vector machine model, may be simulated the relationship between the structural descriptors and the isobaric expansivity of the desired molecules accurately. The mean square errors (MSEs) for the test set are 8.4×10^{-5} . Also, the performance of the nonlinear models was compared with multi linear regression (MLR) model. The results indicates that superiority of the nonlinear models over that of the linear MLR model.

Key words: isobaric thermal expansivity, combined data splitting feature (CDFS), multiple linear regression (MLR), artificial neural network (ANN), Support Vector Machines (SVM)



Shahrood University of Technology

Faculty of Chemistry

M.Sc. Thesis in Physical Chemistry

**Linear and nonlinear modeling for prediction isobaric
expansivity of a divers set of organic fluids using CDFS
strateg**

Zahra Ebrahimi

Supervisors:

Dr. Z. Kalantar

Advisor:

Dr. N. Goudarzi

Feb 2014