



دانشگاه شاهرود

دانشکده شیمی

گروه شیمی فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار-خاصیت (QSPR) دانسیته‌ی مایعات یونی به صورت

تابعی از دما و فشار با استفاده از روش‌های غیر خطی

هدی کشتکار

استاد راهنما:

دکتر زهرا کلانتر

استاد مشاور:

دکتر ناصر گودرزی

بهمن ۱۳۹۳

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ





دانشگاه شاهرود

دانشکده‌ی شیمی
گروه شیمی فیزیک

عنوان:

مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار-خاصیت (QSPR) دانسیته‌ی مایعات یونی به صورت
تابعی از دما و فشار با استفاده از روش‌های غیر خطی

دانشجو: هدی کشتکار

استاد راهنما:

دکتر زهرا کلانتر

استاد مشاور:

دکتر ناصر گودرزی

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

بهمن ۱۳۹۳

تقدیم بہ:

پدرم بہ استواری کوه،

مادرم بہ زلالی چشمہ،

خواہر و برادر عزیزم

کہ وجودشان شادی بخش و صفایشان مایہی آرامش من است.

تقدیر و تشکر:

نخستین سپاس ستایش از آن خداوندی است که بنده‌ی کوچکش را در دریای بیکران اندیشه، قطره‌ای ساخت تا وسعت آن را از دریچه‌ی اندیشه‌های ناب آموزگارانی بزرگ به تماشا نشیند. لذا اکنون که در سایه‌سار بنده نوازی هایش پایان نامه‌ی حاضر به انجام رسیده است، بر خود لازم می‌دانم تا مراتب سپاس را از بزرگوارانی به جا آورم که اگر دست یاریگرشان نبود، هرگز این پایان نامه به انجام نمی‌رسید.

سپاس اول را به مهربانترین هم‌رئیس زندگیم؛ به پدر، مادر و خواهر و برادر عزیزم تقدیر می‌کنم که حضورشان در فضای زندگیم مصداق بی‌ریای سخاوت بوده است.

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

از استاد گران‌قدرم جناب آقای دکتر کوردزی که زحمت مشاوره‌ی این پایان نامه را متحمل شدند، صمیمانه تشکر می‌کنم.

در پایان نیز از تمامی دوستان خوبم که در این مدت با محبت‌ها و همدلی‌هایشان همراه من بودند کمال تشکر را دارم.

تعمدنامه

اینجانب هدی کشتکار، دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته شیمی فیزیک، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه «مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار - خاصیت (QSPR) دانسیته‌ی مایعات یونی به صورت تابعی از دما و فشار با استفاده از روش‌های غیر خطی» تحت راهنمایی خانم دکتر 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 می‌باشد و مقالات مستخرج با نام «دانشگاه صنعتی شاهرود» و یا «Shahrood University of Technology» به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می‌گردد.
- 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 ۱۳۹۳/۱۱/۲۸

امضای دانشجو کشتکار

مالکیت نتایج و حق نشر

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

چکیده

در این تحقیق، دانسیته‌ی مایعات یونی با استفاده از دو روش که شامل: ترکیب روش سهم گروه با شبکه‌ی عصبی مصنوعی (GCM-ANN) و روش سهم گروه با ماشین بردار پشتیبان (GCM-SVM) می‌باشد، تخمین زده شد. مجموعه‌ی نقاط شامل، ۳۱۰۷ نقطه داده‌ی تجربی دانسیته برای محدوده‌ی وسیعی از دما (۲۹۳-۴۱۴ K)، فشار (۰/۱-۶۵ MPa) و دانسیته ($۸۶۹/۲۱-۲۴۰۰ \text{ kg.m}^{-۳}$) مطابق با ۱۸۸ مایع یونی می‌باشد. مجموعه‌ی داده‌ها در شبکه‌ی عصبی مصنوعی به طور تصادفی به سه گروه: آموزش، ارزیابی و تست تقسیم‌بندی شدند و داده‌ها در ماشین بردار پشتیبان به دو گروه: آموزش و تست تقسیم شدند. ما مجموع ۳۳ گروه ساختاری بعلاوه‌ی دما و فشار را به عنوان مقادیر ورودی به کار گرفتیم. پس از آموزش شبکه و بهینه کردن پارامترهای شبکه‌ی عصبی مصنوعی و ماشین بردار پشتیبان، کارایی مدل توسط سری تست مورد بررسی قرار گرفت و نتایج حاصل از شبکه‌ی عصبی مصنوعی و ماشین بردار پشتیبان برای این سری‌ها با نتایج تجربی مقایسه گردید. نتایج نشان می‌دهد که ماشین بردار پشتیبان و روش سهم گروه انتخاب شده، نشان‌دهنده‌ی یک جایگزین عالی برای تخمین دانسیته‌ی مایعات یونی با دقت قابل قبولی ($R^2=۰/۹۹۹۶$ ، $MSE=۱۲/۹۵۲۵$)، برای محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار می‌باشد.

واژه‌های کلیدی: دانسیته، مایعات یونی، روش سهم گروه، شبکه‌ی عصبی مصنوعی، ماشین بردار پشتیبان.

لیست مقالات مستخرج از پایان نامه که در هفتمین کنفرانس شیمی فیزیک در دانشگاه خواجه نصیرالدین طوسی ارائه شده است:

* Keshtkar H., Z Kalantar., N Goudarzi., (۲۰۱۴)., "Application of coupling of group contribution method and artificial neural network (GCM-ANN) for prediction of density of some ionic liquids" ., ۴۸۳, ۱۳۳۰-۱۳۳۱.

* Keshtkar H., Z Kalantar., N Goudarzi., (۲۰۱۴)., "Prediction of density of some ionic liquids by using of new coupling of group contribution method and support vector machine (GCM-SVM)". ۴۸۴, ۱۳۳۲-۱۳۳۳.

فهرست مطالب

فصل اول: مایعات یونی، خواص، کاربردها و روش‌های پیش‌بینی دانسیته‌ی آنها

- ۱-۱- معرفی مایعات یونی ۲
- ۲-۱- خصوصیات فیزیکی مایعات یونی ۵
- ۱-۲-۱- نقطه‌ی ذوب ۵
- ۲-۲-۱- خواص حلال و حلالیت مایعات یونی ۶
- ۳-۲-۱- فشار بخار ۷
- ۴-۲-۱- ویسکوزیته ۷
- ۵-۲-۱- کشش سطحی ۸
- ۶-۲-۱- دانسیته ۹
- ۷-۲-۱- سمی بودن مایعات یونی ۹
- ۳-۱- کاربرد مایعات یونی ۱۰
- ۱-۳-۱- کاتالیست‌های همگن و غیرهمگن ۱۱
- ۲-۳-۱- حذف یون‌های فلزی ۱۱
- ۳-۳-۱- تصفیه‌ی گاز ۱۲
- ۴-۳-۱- واکنش‌های بیولوژیکی ۱۳
- ۴-۱- مروری بر روش‌های پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی ۱۳
- ۱-۴-۱- روش سهم گروه به و شریو ۱۴
- ۲-۴-۱- روش سهم گروه گارداس ۱۵

۱-۴-۳- با استفاده از معادله‌ی حالت گوه‌رشادی-مرسلی-عباسپور (GMA)..... ۱۶

۱-۴-۴- روش لازیوس..... ۱۷

۱-۴-۵- روش والدردما..... ۱۷

فصل دوم: بخش تئوری

۲-۱-۱- کمومتریکس..... ۲۰

۲-۲-۲- روش‌های پارامتری..... ۲۰

۲-۲-۱- انتخاب سری داده‌ها..... ۲۱

۲-۲-۲- محاسبه‌ی توصیف‌کننده‌ها..... ۲۲

۲-۲-۲-۱- روش سهم گروه (GCM)..... ۲۲

۲-۲-۲-۲- انتخاب توصیف‌کننده‌ها بر مبنای روش سهم گروه..... ۲۴

۲-۲-۳- ساختن مدل..... ۲۴

۲-۳-۱- شبکه‌های عصبی..... ۲۵

۲-۳-۱- الف-نرون زیستی..... ۲۵

۲-۳-۱- ب-نرون محاسباتی..... ۲۶

۲-۳-۱- پ-ساختار لایه‌ای شبکه‌ی عصبی مصنوعی..... ۲۸

۲-۳-۱- ث-آموزش شبکه‌ی عصبی..... ۳۰

۲-۳-۲- ماشین‌های بردار پشتیبان..... ۳۱

۲-۳-۲- الف-طبقه‌بندی خطی دو کلاسه با ماشین‌های بردار پشتیبان..... ۳۲

۲-۳-۲- ب-طبقه‌بندی خطی سیستم‌های دو کلاسه با ایده‌ی حاشیه‌ی نرم..... ۳۷

۳۹-۲-۳-۲-پ-طبقه‌بندی غیر خطی با ماشین‌های بردار پشتیبان.....

۴۱-۲-۳-۲-ت-بردار پشتیبان رگرسیونر برای سیستم‌های خطی.....

۴۴-۲-۳-۲-ث-بردار پشتیبان رگرسیونر برای سیستم‌های غیر خطی.....

۴۵-۲-۲-۴-ارزیابی اعتبار مدل‌های انتخاب شده.....

فصل سوم: پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی برحسب دما و فشار با استفاده از

روش‌های غیر خطی

۵۰-۳-۱-انتخاب سری داده‌ها.....

۵۰-۳-۲-انتخاب توصیف‌کننده‌ها به روش سهم گروه.....

۵۷-۳-۳-دسته‌بندی داده‌ها.....

۵۷-۳-۴-بهینه‌سازی مدل شبکه‌ی عصبی مصنوعی با استفاده از توصیف‌کننده‌های حاصل از روش

سهم گروه‌ها (GCM-ANN).....

۶۱-۳-۵-بهینه‌سازی ماشین بردار پشتیبان با استفاده از توصیف‌کننده‌های حاصل از روش سهم

گروه‌ها (GCM-SVM).....

۶۲-۳-۶-ارزیابی مدل‌ها.....

۶۳-۳-۶-۱-ارزیابی مدل‌ها با استفاده از نمودار برگشت.....

۶۵-۳-۶-۲-ارزیابی مدل‌ها با استفاده از نمودار خطای باقیمانده.....

۶۷-۳-۶-۳-ارزیابی مدل‌ها با استفاده از پارامترهای آماری.....

۶۷-۳-۶-۴-ارزیابی مدل‌ها با استفاده از روش رد مرحله‌ای تک تک داده‌ها (LOO).....

۷۱-۳-۶-۵-ارزیابی مدل شبکه‌ی عصبی مصنوعی با استفاده از آزمون Y-تصادفی.....

۷۲.....نتیجه گیری. ۷-۳

۷۳.....آینده نگری. ۸-۳

۷۵.....پیوست

۹۵.....منابع

فهرست جداول

۹	جدول (۱-۱): مقایسه‌ی دانسیته‌ی مایعات یونی مختلف.....
۴۱	جدول (۱-۲): توابع کرنل در فضای ویژگی.....
۵۱	جدول (۱-۳): گروه‌های انتخاب شده به روش سهم گروه برای توسعه‌ی مدل‌های ANN و SVM.....
۵۶	جدول (۲-۳): مقادیر همبستگی توصیف‌کننده‌های روش GCM با دانسیته.....
۵۸	جدول (۳-۳): مقادیر MSE سری ارزیابی برای شبکه‌ی GCM-ANN با الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین و تابع انتقال لگاریتم سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت.....
۵۸	جدول (۴-۳): مقادیر MSE سری ارزیابی برای شبکه‌ی GCM-ANN با الگوریتم آموزشی لورنبرگ-مارکوات و تابع انتقال لگاریتم سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت.....
۵۹	جدول (۵-۳): مقادیر MSE سری ارزیابی برای شبکه‌ی GCM-ANN با الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین و تابع انتقال تانژانت سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت.....
۵۹	جدول (۶-۳): مقادیر MSE سری ارزیابی برای شبکه‌ی GCM-ANN با الگوریتم آموزشی لورنبرگ-مارکوات و تابع انتقال تانژانت سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت.....
۶۰	جدول (۷-۳): توابع و پارامترهای بهینه‌ی شبکه‌های عصبی مصنوعی مختلف با استفاده از توصیف‌کننده‌های حاصل از روش سهم گروه.....
۶۱	جدول (۸-۳): توابع و پارامترهای بهینه شده‌ی شبکه‌ی عصبی با استفاده از توصیف‌کننده‌های سهم گروه.....
۶۲	جدول (۹-۳): مقادیر بهینه‌سازی پارامترهای GCM-SVM.....
۶۷	جدول (۱۰-۳): جدول پارامترهای آماری روش‌های GCM-ANN و GCM-SVM برای سری تست و سری ارزیابی.....
۷۱	جدول (۱۱-۳): جدول پارامترهای آماری روش‌های GCM-ANN و GCM-SVM برای آزمون LOO.....
۷۲	جدول (۱۲-۳): مقادیر R^2 بدست آمده با آزمون Y-تصادفی برای سری ارزیابی و سری تست روش GCM-ANN.....
۷۶	جدول (پ-۱): نام آیوپاک، اسم اختصاری، محدوده‌ی دما و فشار و تعداد داده‌های استفاده شده برای مایعات یونی به همراه مرجع مورد استفاده‌ی آن‌ها در مدلسازی دانسیته‌ی این ترکیبات
۸۷	جدول (پ-۲): مقادیر تجربی و مقادیر پیش‌بینی شده‌ی دانسیته‌ی مایعات یونی برای سری تست.....

فهرست اشکال

۳ شکل (۱-۱): کاتیون‌های متداول در ساختار مایعات یونی.
۲۶ شکل (۱-۲): شمایی از نرون زیستی.
۲۷ شکل (۲-۲): ساختمان یک نرون محاسباتی.
۲۹ شکل (۳-۲): ساختار یک شبکه‌ی سه لایه.
۳۳ شکل (۴-۲): خط جداساز بهینه با حداکثر مقدار حاشیه.
۳۴ شکل (۵-۲): نمایش بردارهای پشتیبان روی ابرصفحه‌های موازی مرزی.
۳۵ شکل (۶-۲): صفحه‌ی جداساز و حاشیه‌ها.
۳۸ شکل (۷-۲): سیستم‌های خطی جدا ناپذیر با میزان خطای ϵ .
۳۹ شکل (۸-۲): داده‌های ورودی ارجاع داده شده به فضای بالاتر.
۴۲ شکل (۹-۲): تابع حساسیت به مقدار ϵ .
۴۴ شکل (۱۰-۲): مدل ارائه شده توسط ماشین برداری برای سیستم غیرخطی.
۵۴ شکل (۱-۳): ۱- پروپیل-۳-متیل ایمیدازولیوم هگزا فلوئورو فسفات.
۶۰ شکل (۲-۳): نمودار میانگین مربعات خطا، MSE، برای سری ارزیابی بر حسب تغییرات ممنتوم حول نقطه‌ی بهینه.
۶۳ شکل (۳-۳): نمودار برگشت حاصل از روش GCM-ANN برای سری ارزیابی.
۶۴ شکل (۴-۳): نمودار برگشت برای سری تست، حاصل از روش‌های (الف) GCM-ANN و (ب) GCM-SVM.
۶۵ شکل (۵-۳): نمودار خطای باقی‌مانده، حاصل از روش GCM-ANN برای سری ارزیابی.
۶۶ شکل (۶-۳): نمودار خطای باقی‌مانده برای سری تست، حاصل از روش‌های (الف) GCN- ANN و (ب) GCM-SVM.
۶۹ شکل (۷-۳): نمودار خطای باقی‌مانده برای روش (الف) GCM-ANN و (ب) GCM- SVM.
۷۰ شکل (۸-۳): نمودار برگشت برای روش (الف) GCM-ANN و (ب) GCM-SVM.

فصل اول

مایعات یونی، خواص، کاربردها و

روش‌های پیش‌بینی دانسیته‌ی آنها

۱-۱- معرفی مایعات یونی^۱

مایعات یونی به عنوان انقلاب شیمیایی سبز در مراکز تحقیقاتی و صنایع شیمیایی پذیرفته شده‌اند. این ترکیبات شیمیایی جدید، علاوه بر آن که می‌توانند استفاده از حلال‌های متداول آلی خطرناک که باعث آلودگی محیط زیست می‌شوند را کاهش دهند، می‌توانند در سنتزهای مختلف نیز سهمیم شوند [۱].

به طور کلی مایعات یونی دارای سه ویژگی مهم هستند [۲]:

(الف) مایعات یونی به طور کامل، از یون‌ها تشکیل شده‌اند.

(ب) دارای دمای ذوب کمتر از ۱۰۰ درجه‌ی سانتیگراد هستند.

(ج) زیر دمای تجزیه‌ی حرارتی، فشار بخار قابل ملاحظه‌ای ندارند، به همین دلیل غیر فرار بوده و مشکلی را برای محیط زیست ایجاد نمی‌کنند.

لازم به تذکر است که برای دسته‌بندی مایعات یونی دمای ۱۰۰ درجه‌ی سانتیگراد به عنوان مبنا در نظر گرفته شده است. به دسته‌ای که در دمای بالاتر از ۱۰۰ درجه‌ی سانتیگراد مایع هستند، مایعات مذاب^۲ و به دسته‌ای که زیر این دما حالت مایع دارند، مایعات یونی می‌گویند. بنابراین حد دمایی ذوب برای مایعات یونی، ۱۰۰ درجه‌ی سانتیگراد است. بعضی از مایعات یونی در دمای اتاق نیز مایع هستند که به آن‌ها مایعات یونی دمای اتاق^۳ (RTILs) اطلاق می‌شود [۳-۵].

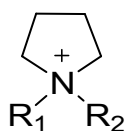
مایعات یونی همانطور که از نام آن‌ها پیداست، ترکیباتی کاملاً یونی هستند که از یک کاتیون آلی نامتقارن بزرگ و حجیم و آنیون‌های آلی یا غیر آلی تشکیل شده‌اند. به دلیل تفاوت اندازه‌ی کاتیون‌ها و آنیون‌ها، پیوند بین دو جزء تشکیل دهنده‌ی مایعات یونی ضعیف بوده و همین موضوع سبب می‌شود که این مواد در زیر دمای ۱۰۰ درجه‌ی سانتیگراد مایع باشند [۶ و ۷].

^۱ Ionic liquid

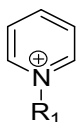
^۲ Liquid melts

^۳ Room temperature ionic liquids

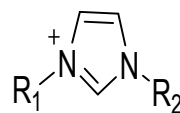
یون‌های ایمیدازولیوم^۱، پیریدینیوم^۲، پیرولیدینیوم^۳، سولفونیوم^۴، فسفونیوم^۵ و آمونیوم^۶ از مهم‌ترین و متداول‌ترین کاتیون‌هایی می‌باشند که در ساختار مایعات یونی به کار می‌روند. ساختار این کاتیون‌ها در شکل (۱-۱) نمایش داده شده است.



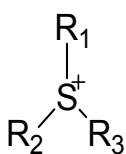
پیرولیدینیوم



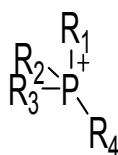
پیریدینیوم



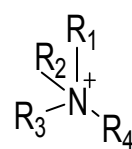
ایمیدازولیوم



سولفونیوم



فسفونیوم



آمونیوم

شکل (۱-۱): کاتیون‌های متداول در ساختار مایعات یونی

آنیون‌ها نیز می‌توانند شامل یون‌های هالید، X^- ، تترافلوروبورات، $[BF_4]^-$ ، تتراکلروآلومینات، $[AlCl_4]^-$ ، هگزاfluorوفسفات، $[PF_6]^-$ ، و بیس (تری فلورو متیل سولفونیل) ایمید، $[(CF_3SO_2)_2N]^-$ ، باشند [۳].

از نظر تاریخی، توسعه‌ی مایعات یونی بر اساس شناسایی آنیون‌های متفاوتی که در ترکیب با

^۱ Imidazolium

^۲ Pyridinium

^۳ Pyrrolidinium

^۴ Sulfonium

^۵ Phosphonium

^۶ Ammonium

کاتیون‌های ایمیدازولیوم، پیریدینیوم، آمونیوم و فسفونیوم، نمک‌های با دمای ذوب پایین را تشکیل می‌دهند، رخ داده است. نمک‌های کلروآلومینات با دمای ذوب پایین به عنوان "نسل اول مایعات یونی"^۱ شناخته می‌شوند [۲].

در سال ۱۹۹۲، با سنتز «مایعات یونی دمای اتاق بدون کلروآلومینات»^۲، یعنی نمک‌های تترافلوئورو بورات که به عنوان «نسل دوم مایعات یونی»^۳ شناخته شدند در روش‌شناسی^۴ مایعات یونی پیشرفت قابل توجهی رخ داد. امروزه، مایعات یونی حاوی آنیون‌های تترافلوئورو بورات و هگزاfluorofosfat که اندکی بعد از تترافلوئورو بورات معرفی گردیدند به طور گسترده‌ای در مطالعات مربوط به مایعات یونی مورد استفاده قرار می‌گیرند [۲].

مایعات یونی که به تازگی توسعه داده شده‌اند را می‌توان به دو گروه تقسیم کرد. گروه اول که «مایعات یونی انبوه»^۵ نامیده می‌شوند، برای استفاده در مقادیر بالا طراحی و تولید می‌شوند. این مایعات یونی به عنوان حلال برای واکنش‌های آلی، سیستم‌های کاتالیزوری همگن، سیستم‌های کاتالیزوری زیستی و سایر کاربردهای سنتزی به کار می‌روند. هم‌چنین از مایعات یونی انبوه در برخی کاربردهای غیر سنتزی مانند روان‌کننده‌ها، فعال‌کننده‌های سطحی^۶، کاتالیزورهای انتقال فاز و حلال استخراج نیز استفاده می‌شود. کاتیون‌ها و آنیون‌های این دسته از مایعات یونی به گونه‌ای انتخاب می‌شوند که در نهایت به تهیه‌ی مایع نسبتاً ارزان، فاقد هالوژن و با سمیت کمتر منجر شوند. گروه دوم مایعات یونی، که از آن‌ها با عنوان «مایعات یونی با کاربرد خاص»^۷ در منابع نام برده می‌شود، برای بهترین عملکرد در کاربردهای با «ارزش افزوده‌ی بالا»^۸ طراحی و بهینه‌سازی می‌شوند. در این

^۱ First generation ionic liquids

^۲ Non-chloro aluminate, room temperature ionic liquids

^۳ Second generation ionic liquids

^۴ Methodology

^۵ Bulk ionic liquid

^۶ Surfactants

^۷ Task specific ionic liquids

^۸ High value added

گروه، مایعات یونی عامل دار شده، فلوئوردار شده، دوتریم‌دار شده و کایرال قرار دارند که انتظار می‌رود در آینده نقش حلال‌های ویژه را در سنتزهای خاص، ابزارهای تجزیه‌ای مثل فاز ساکن یا متحرک برای کروماتوگرافی، حسگرها و الکترولیت‌های ویژه ایفا کنند [۲].

تاکنون مایعات یونی گوناگونی سنتز شده‌اند که خواص فیزیکی و شیمیایی این مایعات یونی می‌تواند دامنه‌ی گسترده‌ای از چگالی، ویسکوزیته، کشش سطحی، ظرفیت گرمایی، قطبیت، اسیدیته و ... را پوشش دهد. امروزه مطالعه‌ی ارتباط بین ساختار و خواص مایعات یونی برای طراحی مایعات یونی خاص برای کاربردی مشخص بسیار مورد توجه است [۲ و ۸].

۲-۱- خصوصیات فیزیکی مایعات یونی

تحقیقات اولیه بر روی خصوصیات فیزیکی مایعات یونی، برای یافتن رابطه‌ای میان طبیعت ساختار کاتیون‌ها و آنیون‌های به کار رفته در ساختار مایعات یونی با خصوصیت فیزیکی آن‌ها صورت گرفته است. این خصوصیات شامل، نقطه‌ی ذوب^۱، حلالیت و حل شوندگی، فشار بخار، ویسکوزیته، کشش سطحی، دانسیته و سمی بودن می‌باشد، که در ادامه هر یک از موارد شرح داده خواهد شد [۹].

۱-۲-۱- نقطه‌ی ذوب

همان‌طور که قبلاً گفته شد مایعات یونی، مایعاتی هستند که دمای ذوبی کمتر از ۱۰۰ درجه‌ی سانتیگراد داشته و بعضی از آن‌ها در دمای محیط نیز مایع هستند. بنابراین اصلی‌ترین خاصیت فیزیکی مایعات یونی نسبت به نمک‌های غیر آلی دمای ذوب پایین آن‌هاست [۱۰].

انتخاب کاتیون‌ها و آنیون‌ها در نقطه‌ی ذوب مایعات یونی نقش بسزایی دارد. بررسی‌ها نشان داده است که افزایش اندازه‌ی آنیون منجر به کاهش دمای ذوب می‌شود. هم‌چنین عدم تقارن مولکولی

^۱ Melting point

کاتیون باعث کاهش تمرکز بار روی آن گشته و در نتیجه مانع از تشکیل شبکه‌ی کریستالی قوی می‌گردد [۱۱ و ۵]. از مقایسه‌ی نقطه‌ی ذوب مایعات یونی با نمک‌های غیر آلی (به عنوان مثال ۸۰۰ درجه‌ی سانتیگراد برای کلرید سدیم و ۶۰ درجه‌ی سانتیگراد برای ۱-پروپیل-۳-متیل ایمیدازولیوم کلراید)، روشن می‌شود که عامل اصلی در کاهش نقطه‌ی ذوب مایعات یونی، جایگزینی کاتیون‌های کوچک غیر آلی با کاتیون‌های آلی نامتقارن حجیم می‌باشد [۱۲].

۱-۲-۲- خواص حلال و حلالیت مایعات یونی

مایعات یونی به عنوان حلال‌های طراح^۱ شناخته می‌شوند، زیرا این فرصت را به ما می‌دهند که خصوصیات ویژه‌شان را برای یک نیاز ویژه تغییر دهیم. محققان می‌توانند مایع یونی ویژه‌ای را با انتخاب آنیون‌های کوچک و کاتیون‌های بزرگ طراحی کنند، به گونه‌ای که این مایع یونی ویژه بتواند ماده‌ی شیمیایی مشخصی را در خود حل کند [۱ و ۳].

اگرچه مایعات یونی توسط گروه‌های زیادی از محققین مطالعه شده‌اند اما هنوز سوالات زیادی وجود دارد که دانشمندان قادر به پاسخ دادن آن‌ها نیستند. به عنوان مثال یکی از قوانین اساسی شیمی "همانند همانند را حل می‌کند" توسط مایعات یونی شکسته می‌شود. بنزن غیرقطبی (بالای ۵۰٪ حجمی) در مایع یونی بر پایه‌ی تتراکلروآلومینات قطبی محلول است [۱۳ و ۳]. بنابراین مطالعه بر روی این که چرا مایعات یونی قادرند تا مولکول‌های بدون بار را در خود حل کنند هنوز ادامه دارد. همچنین مایعات یونی می‌توانند هم دارای خاصیت آب‌گریزی و هم دارای خاصیت آب‌دوستی باشند. به عنوان مثال، برای کاتیون ۱-آلکیل-۳-آلکیل ایمیدازولیوم، با جایگزینی آنیون هگزا فلئوئورو فسفات ($[PF_6]^-$) با تترا فلئوئورو بورات ($[BF_4]^-$)، حلالیت مایع یونی در آب به طور قابل توجهی افزایش می‌یابد، در حالی که اگر از آنیون بیس (تری فلئوئورو متیل سولفونیل) ایمید ($[NTF_2]^-$) استفاده شود،

^۱ Designer solvents

حلالیت آن در آب کاهش می‌یابد، که این خاصیت مایعات یونی (آب‌گریزی) باعث می‌شود که در فرایند تصفیه مورد استفاده قرار بگیرند [۷، ۱۰ و ۱۴].

۱-۲-۳- فشار بخار

یکی از خواص فیزیکی با اهمیت برای مایعات یونی، داشتن فشار بخار ناچیز در دمای محیط می‌باشد. مایعات یونی تنها در صورتی که در معرض خلاء قرار بگیرند، بخار می‌شوند و برخلاف حلال‌های آلی متداول مانند بنزن، استن و تولوئن تمایل به بخار شدن ندارند. فشار بخار مایعات یونی آن قدر پایین است که عملاً می‌توان از آن صرف نظر کرد. به طور مثال فشار بخار ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم ([PF₆][bmim]) در ۲۹۸/۱۵ کلوین، $9/86 \times 10^{-17}$ اتمسفر گزارش شده است [۸ و ۱۳]. فشار بخار پایین، پایداری حرارتی خوب، و عدم آتشگیری این مواد باعث شده تا مایعات یونی به عنوان حلال‌های سبز^۱ شناخته شوند، زیرا این موضوع باعث کاهش اثرات زیست محیطی می‌گردد. کم بودن آثار منفی مایعات یونی بر روی محیط زیست، یکی از اصلی‌ترین انگیزه‌های جایگزینی آن‌ها به جای حلال‌های متداول آلی است [۱۵].

۱-۲-۴- ویسکوزیته

به طور کلی، مایعات یونی غلیظ‌تر از حلال‌های متداول آلی و حتی روغن‌ها بوده و ویسکوزیته‌ی آن‌ها در دمای اتاق در محدوده‌ی (۵۰۰-۱۰ mPa.s) قرار دارد [۱۰ و ۱۱]. ویسکوزیته‌ی بالا یکی از عیوب مایعات یونی است، زیرا اثر منفی روی سرعت انتقال جرم دارد. تحقیق بر روی تأثیر کاتیون‌ها و آنیون‌ها روی ویسکوزیته توسط بونهوت^۲ و سان^۳ به ترتیب در

^۱ Green solvents

^۲ Bónhote

^۳ Sun

سال‌های ۱۹۹۶ و ۱۹۹۸ صورت گرفت [۱۷ و ۱۸]. آن‌ها نشان دادند که، مایعات یونی بر پایه‌ی آنیون‌های $[NTF_2]^-$ دارای ویسکوزیته‌ی کمتری نسبت به $[PF_6]^-$ و $[BF_4]^-$ می‌باشند. به عنوان مثال، ویسکوزیته‌ی ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم هگزا فلئورو فسفات ($[bmim][PF_6]$) در ۲۰ درجه‌ی سانتیگراد، ۴۰۳ mPa.s، و برای ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترا فلئورو بورات ($[bmim][BF_4]$) ۱۵۴ mPa.s، و هم‌چنین برای ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم بیس (تری فلئورو متیل سولفونیل) ایمید ($[bmim][NTF_2]$)، ۵۴ mPa.s، گزارش شده است [۱۲ و ۱۶].

از طرف دیگر افزایش طول زنجیره‌ی آلکیل در کاتیون منجر به افزایش ویسکوزیته می‌گردد. به طور مثال، همیل^۱ و همکارانش طبق تحقیقاتی که در سال ۲۰۰۱ انجام دادند متوجه شدند که برای ترکیبات ۱-اتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلئوروبورات ($[emim][BF_4]$)، ۱-بوتیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلئوروبورات ($[bmim][BF_4]$)، ۱-هگزیل-۳-متیل ایمیدازولیوم تترافلئوروبورات ($[hmim][BF_4]$)، مقدار ویسکوزیته از ۶۶/۵ mPa.s تا ۳۱۴ mPa.s افزایش می‌یابد. ویسکوزیته‌ی مایعات یونی با افزایش دما کاهش می‌یابد [۱۹].

۱-۲-۵- کشش سطحی

کشش سطحی در مایعات یونی کمتر از آب و بیشتر از آلکان‌های خطی است. به عنوان مثال، کشش سطحی $[bmim][PF_6]$ در ۲۰ درجه‌ی سانتیگراد، 49 N.m^{-1} می‌باشد در حالی که کشش سطحی آب برابر $72/8 \text{ Nm}^{-1}$ می‌باشد، هم‌چنین برای پنتان برابر با 16 N.m^{-1} می‌باشد. بررسی‌ها نشان داده است که با افزایش طول زنجیره‌ی آلکیل در مایعات یونی دمای اتاق، کشش سطحی افزایش می‌یابد [۱۱ و ۱۴].

^۱ Hamill

۱-۲-۶- دانسیته

مایعات یونی معمولاً، سنگین تر از آب بوده و دارای دانسیته‌هایی در محدوده‌ی ۱ تا $1/6 \text{ g cm}^{-3}$ می‌باشند. بررسی‌ها نشان داده است که دانسیته‌ی مایعات یونی با کاهش طول شاخه‌ی آلکیل بر روی کاتیون و افزایش جرم آنیون، افزایش می‌یابد. در جدول (۱-۱) اثر وزن آنیون روی سه مایع یونی با کاتیون یکسان ([bmim])، نشان داده شده است که با افزایش جرم آنیون به صورت؛ $M_{\text{NTF}_2} > M_{\text{PF}_6} > M_{\text{BF}_4}$ ، دانسیته افزایش می‌یابد. همچنین در این جدول اثر افزایش تعداد کربن شاخه‌ی آلکیل در سه مایع یونی حاوی آنیون یکسان ($[\text{HSO}_4^-]$)، بر پایه‌ی کاتیون ایمیدازولیوم نشان داده شده است. همانطور که در این جدول مشاهده می‌شود، با کاهش طول زنجیره‌ی آلکلی دانسیته افزایش می‌یابد [۱۲-۱۰، ۱۵].

جدول (۱-۱): مقایسه‌ی دانسیته‌ی مایعات یونی مختلف

مقدار دانسیته (kg m^{-3})	مایعات یونی حاوی آنیون $[\text{HSO}_4^-]$ و کاتیون‌های بر پایه‌ی ایمیدازولیوم با طول زنجیره‌ی آلکلی متفاوت	مقدار دانسیته (kg m^{-3})	مایعات یونی حاوی کاتیون [bmim] و آنیون‌های مختلف
۱۴۸۴	[mim][HSO_4^-]	۱۴۴۲/۸۰	[bmim][NTF_2]
۱۳۶۷	[emim][HSO_4^-]	۱۳۶۹/۹۰	[bmim][PF_6^-]
۱۲۷۷	[bmim][HSO_4^-]	۱۲۰۶/۹۰	[bmim][BF_4^-]

۱-۲-۷- سمی بودن مایعات یونی

مایعات یونی با وجود داشتن مزایایی چون محدوده‌ی مایع بودن وسیع، فشار بخار پایین، و عدم آتشگیری دارای معایبی نیز هستند. بررسی‌های زیست محیطی مشخص کرده است که درجه‌ی سمی بودن مایعات یونی از روی کاتیون آن‌ها مشخص می‌شود به این ترتیب که مایعات یونی با زنجیره‌ی آلکلی کوتاه‌تر معمولاً دارای سمیت کمتری هستند [۱].

سمی بودن مواد شیمیایی با فاکتوری به نام LC_{50} ^۱، مشخص می‌گردد که به معنی مقدار غلظت کشنده‌ی ۵۰٪ از ترکیب برحسب میکروگرم و یا میلی‌گرم در لیتر یا قسمت در میلیون (ppm) می‌باشد. هر چه مقدار این فاکتور بیشتر باشد (۱۰۰ تا ۱۰۰۰) ماده‌ی مورد نظر سمیت کمتری دارد، و هر چه مقدار این فاکتور کمتر باشد (۱۰ تا ۱۰۰) ترکیب مورد نظر از سمیت بالایی برخوردار است. به طور مثال مقدار LC_{50} برای مایع یونی آلکیل-متیل-ایمیدازولیوم باشاخه‌ی آلکیل ۴ کربنه بین ۲۰۰ تا 300 mg L^{-1} گزارش شده است که نشان می‌دهد این ماده از سمیت متوسطی برخوردار است. در حالی که همین مایع یونی با شاخه‌ی آلکیل بیشتر از ۴ کربن دارای LC_{50} کمتر از ۱۰۰ بوده و سمیت بیشتری دارد و برعکس با شاخه‌ی آلکیل کمتر از ۴ کربن، مقدار LC_{50} بیشتر از ۱۰۰۰ بوده و ترکیب مورد نظر دارای سمیت کمتری می‌باشد [۳].

علاوه بر این بررسی‌ها نشان داده است که مایعات یونی حاوی آنیون‌های $[BF_4]^-$ و $[PF_6]^-$ ، پایداری ضعیفی در آب دارند و در حضور آب تجزیه شده و مواد خورنده و سمی مانند HF ایجاد می‌کنند. بنابراین، استفاده از آنیون‌های فاقد هالوژن مثل اکتیل سولفات و یا آنیون‌های نسبتاً پایدار در برابر هیدرولیز مثل $[NTF_2]^-$ توصیه می‌شود [۱۳ و ۲۰].

۳-۱- کاربرد مایعات یونی

در دهه‌ی اخیر میزان تحقیقات بر روی مایعات یونی به سرعت رشد کرده و زمینه‌ی کاربرد مایعات یونی زیاد شده است. خصوصیات فیزیکی و شیمیایی منحصر به فرد مایعات یونی باعث شده است که این مواد دارای کاربردهای فراوانی در زمینه‌های مختلف باشند. در ادامه بعضی از کاربردهای مایعات یونی به طور مختصر شرح داده خواهد شد.

^۱Lethal concentration (LC)

۱-۳-۱- کاتالیست‌های همگن و غیرهمگن

یکی از مهم‌ترین اهداف در شیمی مدرن، ترکیب مزایای هر دو کاتالیست هموزن و هتروژن است. به طور کلی کاتالیزورهای هموزن انتخاب پذیری بالاتری در مقایسه با کاتالیزورهای هتروژن دارند. با استفاده از مایعات یونی می‌توان به صورت همزمان از مزایای کاتالیست هموزن و هتروژن بهره برد. برای این منظور با انتخاب درست یک مایع یونی برای واکنش کاتالیستی خاص، مایع یونی انتخاب شده نه در فاز واکنش دهنده‌ها و نه در فاز محصولات، حل نمی‌شود، اما قادر به حل کردن کاتالیست در خود می‌باشد. در نتیجه مایع یونی هم مزیت‌های یک جامد برای عدم تحرک کاتالیست و هم مزیت بزرگ واکنش هموزن که همان حرکت آزادانه کاتالیست و سطح برخورد زیاد است را به طور همزمان دارد. همچنین مایعات یونی می‌توانند نقش بسیار فعالی را در واکنش‌های شیمیایی و کاتالیستی نظیر پلیمریزاسیون پاک^۱، آلکیلاسیون فریدل کرفتس^۲، احیاء حلقه‌های آروماتیک^۳، هالوژناسیون^۴ و اکسیداسیون^۵ را دارا باشند. انجام این فرایندها با استفاده از مایعات یونی مرحله‌ی شستن را حذف و از دست دادن کاتالیست را کاهش می‌دهد. همچنین باعث خلوص محصول خواهد شد [۱ و ۱۳].

۱-۳-۲- حذف یون‌های فلزی

از مایعات یونی می‌توان در استخراج یون‌های فلزی نیز استفاده کرد. ویسر^۶ در سال ۲۰۰۱ چند مایع یونی آب‌گریز جدید را برای حذف کادمیوم و جیوه از آب آلوده طراحی و سنتز کرد [۲۱]. طبیعت آب‌گریز این نوع از مایعات یونی سبب می‌شود هنگامی که وارد آب می‌شوند، یون‌های فلزی از آب جدا شده و وارد مایع یونی شوند، و در نتیجه آب تصفیه می‌شود. همچنین تحقیقات او نشان داد

^۱ Clean polymerization

^۲ Friedel crafts alkylation

^۳ Reduction of aromatic rings

^۴ Halogenation

^۵ Oxidation

^۶ Visser

که طول شاخه‌ی کاتیون بر روی آب‌گریزی مایع یونی اثر می‌گذارد به این صورت که با افزایش طول شاخه‌ی کاتیون، آب‌گریزی افزایش می‌یابد [۲۱].

۱-۳-۳- تصفیه‌ی گاز

امروزه استفاده از مایعات یونی برای خالص‌سازی جریان گاز توسعه یافته است. برای این منظور حلالیت گازها در مایعات یونی مختلف اندازه‌گیری و گزارش شده است. تحقیقات صورت گرفته نشان داده است که آنیون نقش بسیار کلیدی در حلالیت گازها در مایعات یونی دارد [۱۳].

آنتونی^۱ و همکارانش در سال ۲۰۰۲، حلالیت ۹ گاز مختلف شامل دی‌اکسیدکربن، اتیلن، اتان، متان، آرگون، اکسیژن، منواکسیدکربن، هیدروژن و نیتروژن را در مایع یونی $[PF_6][bmim]$ بررسی کردند و نتیجه گرفتند که در بین گازهای مطالعه شده دی‌اکسیدکربن بیشترین میزان حلالیت و آرگون و اکسیژن کمترین میزان حلالیت را در این مایع یونی دارند. مقایسه‌ی ثابت‌های هنری این گازها در حلال‌های آلی و مایعات یونی، نشان می‌دهد که گازهایی که حلالیت کمتری در مایعات یونی دارند در حلال‌های دیگر نیز حلالیت کمی دارند. آنتونی و همکارانش گزارش کردند که حلالیت گازها در مایعات یونی به برهم‌کنش بین مولکولی میان آنیون موجود در مایعات یونی و گازها مربوط می‌شود [۲۲].

از آن جایی که مایعات یونی می‌توانند گونه‌های گازی معینی را در خود حل کنند، در فرایندهای جذب گاز می‌توان از آنها استفاده کرد. از طرف دیگر غیر فرار بودن مایعات یونی، از آلوده کردن جریان گاز در طی فرایند جلوگیری می‌کند [۱۳].

^۱ Anthony

۱-۳-۴- واکنش‌های بیولوژیکی

از مایعات یونی در واکنش‌های بیولوژیکی همانند سنتز داروهای مربوط به پایداری آنزیم، جداسازی و استخراج آمینواسیدها و جداسازی مولکول‌های مهم بیولوژیکی مانند کربوهیدرات‌ها و اسیدهای آلی استفاده می‌شود. کربوهیدرات‌ها مواد تجدید پذیر و منابع ارزان انرژی به شمار می‌روند. کربوهیدرات‌های مشتق نشده^۱ در بسیاری از حلال‌های متداول محلول نیستند اما در آب قابل حل هستند. این خاصیت نامحلولی و ماندگاری در اکثر حلال‌ها مانع از تغییر شکل^۲ آن‌ها می‌شود. اما مایعات یونی با حل کردن کربوهیدرات‌ها در خود، امکان تغییر شکل و دگرگونی آن‌ها را فراهم می‌سازند. به طور مثال مایعات یونی می‌توانند سلولز را در خود حل کنند. سلولز در آب و بیشتر حلال‌های آلی غیر قابل حل است در نتیجه در این حلال‌ها قابل فرآوری نیست. محصولات حاصل از سلولز در صنایعی مانند فیبر، کاغذ و صنعت پلیمر کاربرد دارد [۱۳].

۱-۴- مروری بر روش‌های پیش بینی دانسیته‌ی مایعات یونی

در طول چند سال گذشته، اندازه‌گیری خواص ترموفیزیکی و ترمودینامیکی مایعات یونی افزایش قابل ملاحظه‌ای داشته است. اگرچه مقادیر تجربی برای مایعات معمول در شرایط مرجع ترمودینامیکی، قابل دسترس هستند، اما داده‌های تجربی برای بسیاری از مایعات یونی در گستره‌ی وسیعی از دما و فشار و همچنین برای مایعات جدید صنعتی، موجود نمی‌باشند. این در حالی است که بانک اطلاعاتی خواص فیزیکی و شیمیایی بنیادی مایعات یونی، نه تنها برای طراحی فرایند، بلکه برای توسعه‌ی روش‌های پیش بینی این خواص در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار ضروری است.

یکی از خواص فیزیکی بسیار مهم مایعات، دانسیته‌ی مایع است که این کمیت برای محاسبات انتقال جرم و انتقال گرما در طراحی فرایندهای شیمیایی ضروری است. با وجودی که داده‌های تجربی

^۱ Underivatized carbohydrates

^۲ Transformation

بسیار دقیق است، اما تهیه داده‌های تجربی برای دانسیته‌ی همه‌ی مایعات بسیار مشکل می‌باشد [۲۳]. لذا روش‌های مختلفی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی پیشنهاد شده است. در ادامه، به چند روش محاسبه‌ی دانسیته‌ی مایعات یونی اشاره می‌شود.

۱-۴-۱- روش سهم گروه^۱ یه^۲ و شریو^۳

جنکینز^۴ و همکارانش برای تخمین انرژی پتانسیل شبکه‌ی جامدات یونی از قرار دادن حجم مولکولی در عبارت دانسیته استفاده نموده، و عبارت (۱-۱) را برای دانسیته ارائه کردند [۲۴]:

$$\rho = \frac{W}{NV} \quad (1-1)$$

که در آن ρ چگالی بر حسب kg m^{-3} ، W جرم مولی بر حسب kg mol^{-1} ، N ثابت آووگادرو و V نیز حجم مولکولی ترکیب مورد نظر بر حسب $\text{m}^3 \text{ molecule}^{-1}$ می‌باشد.

یه و شریو در سال ۲۰۰۷ با الهام از کار جنکینز، توانستند دانسیته‌ی مایعات یونی دمای اتاق را با استفاده از معادله‌ی (۱-۱) پیش‌بینی کنند [۲۵]. آن‌ها حجم مولکولی هر مایع یونی را به صورت مجموع خطی از حجم کاتیون (v_+) و حجم آنیون (v_-) در نظر گرفتند. سپس برای بدست آوردن حجم یون‌ها، از روش سهم گروه استفاده کردند به این صورت که حجم یون‌ها را از مجموع مقادیر حجم گروه‌های شرکت کننده در کاتیون و آنیون به دست آوردند که این حجم گروه‌ها قبلاً توسط جنکینز ارائه شده بود. آن‌ها با استفاده از این روش توانستند دانسیته‌ی ۵۹ مایع یونی دمای اتاق بر پایه‌ی ایمیدازولیوم را با میانگین انحراف مطلق^۵ (MAD) برابر 0.007 g.cm^{-3} پیش‌بینی کنند.

^۱ Group contribution method (GCM)

^۲ Ye

^۳ Shreeve

^۴ Jenkins

^۵ Mean absolute deviation (MAD)

۱-۴-۲- روش سهم گروه گارداس^۱

گارداس و همکارانش در سال ۲۰۰۸ با استفاده از توسعه‌ی روش سهم گروه یه و شریو دانسیته‌ی مایعات یونی را در طیف گسترده‌ای از دما و فشار پیش‌بینی کردند [۲۳]. آن‌ها با تلفیق روابط تراکم‌پذیری همدم، κ_T ، و انبساط‌پذیری هم‌فشار، α_p ، که به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\kappa_T = -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial P} \right)_T \quad (۲-۱)$$

$$\alpha_p = \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_p \quad (۳-۱)$$

و سپس انتگرال‌گیری از معادله‌ی حاصل، وابستگی حجم مولکولی به دما و فشار را به صورت معادله‌ی (۴-۱) ارائه کردند:

$$V = V_0 e^{(x + \alpha_p + \kappa_T)} \quad (۴-۱)$$

که در آن V_0 ثابت، و مقدار x برابر $(\alpha_p T_0 + \kappa_T P_0)$ است. سپس با بسط عبارت (۴-۱) در یک سری تیلور و نگه‌داشتن اولین عضو از این سری، عبارت (۴-۱) را به صورت زیر نوشتند:

$$V = V_0 (a + bT + cT) \quad (۵-۱)$$

که در آن V_0 ، حجم مولکولی در دمای مرجع، T_0 ، و فشار مرجع، P_0 بر حسب واحد $\text{m}^3 \text{ molecule}$ می‌باشد. هم‌چنین ضرایب a ، b و c به ترتیب برابر با $(1+x)$ ، α_p و κ_T هستند. بعد با جایگذاری رابطه‌ی (۵-۱) در رابطه‌ی (۱-۱)، دانسیته را از رابطه‌ی (۶-۱) بدست آوردند:

$$\rho = \frac{W}{NV_0(a + bT + cT)} \quad (۶-۱)$$

آن‌ها طبق این روش، چگالی‌های پیش‌بینی شده‌ی ۱۵۲۱ نقطه داده برای ۲۰ مایع یونی بر اساس کاتیون‌های ایمیدازولیوم، پیریدینیوم، پیرولیدینیوم و فسفونیوم را با میانگین درصد انحراف^۲

^۱ Gardas

^۲ Mean percent deviation (MPD)

(MPD) کمتر از ۱/۵۷٪ در طیف گسترده‌ای از دما (۳۹۳/۱۵ - ۲۷۳/۱۵ K) و فشار (۱۰۰ MPa - ۰/۱) گزارش کردند.

۱-۴-۳- با استفاده از معادله‌ی حالت گوهرشادی-مرسلی-عباسپور^۱ (GMA)

گوهرشادی و موسوی در سال ۲۰۰۸ با استفاده از معادله‌ی حالت GMA، توانستند دانسیته و برخی از خواص ترمودینامیکی ۹ مایع یونی را بر حسب دما و فشار پیش‌بینی کنند [۲۶]. طبق این معادله‌ی حالت که به صورت زیر بیان می‌شود، نمودار $(2Z - 1)V_m^3$ بر حسب ρ برای هر همدمای سیال چگال خطی است.

$$(2Z - 1)V_m^3 = A(T) + B(T)\rho \quad (7-1)$$

که در آن Z ، V_m و ρ به ترتیب ضریب تراکم‌پذیری، حجم مولی و دانسیته می‌باشند همچنین وابستگی دمایی A و B به صورت زیر بیان می‌شوند:

$$A(T) = A_0 - \frac{2A_1}{RT} + \frac{2A_2 \ln T}{R} \quad (8-1)$$

$$B(T) = B_0 - \frac{2B_1}{RT} + \frac{2B_2 \ln T}{R} \quad (9-1)$$

که در معادلات بالا مقادیر A_0 تا A_2 و B_0 تا B_2 ثابت‌ها هستند. این معادله حالت توانست دانسیته‌ی ۹ مایع یونی انتخاب شده را با میانگین مطلق انحراف^۲ (AAD) کمتر از ۱/۱۵۷٪ پیش‌بینی کند.

^۱ Goharshadi-Morsali-Abbaspour "GMA EoS"

^۲ Average absolute deviation (AAD)

۱-۴-۴- روش لاززیوس^۱

لازیوس در سال ۲۰۰۹ با استفاده از یک روش ترکیبی که شامل شبکه‌ی عصبی مصنوعی توسعه یافته با روش بهینه سازی اجتماع ذرات^۲ و روش سهم گروه ساده بود توانست دانسیته‌ی مایعات یونی بر پایه‌ی ایمیدازولیوم را بر حسب دما و فشار پیش‌بینی کند [۲۷]. برای این منظور، او مجموع ۱۷۳۶ داده از دانسیته‌ی ۱۳۱ مایع یونی را در چندین دما و فشار، برای آموزش شبکه‌ی عصبی مورد استفاده قرار داد. در این روش ۳۳ توصیف‌کننده‌ی ورودی شامل جرم مولی و گروه‌های سازنده‌ی هر مولکول بعلاوه‌ی دما و فشار به عنوان متغیرهای ورودی به شبکه داده شده‌اند. سپس مقادیر دانسیته برای ۳۳ مایع یونی دیگر (۴۲۶ داده) به عنوان سری تست به صورت تابعی از دما و فشار پیش‌بینی، و نتایج آن‌ها با نتایج تجربی مقایسه شده‌اند. طبق این روش، دانسیته‌ی مایعات یونی بر پایه‌ی ایمیدازولیوم با میانگین مطلق انحراف نسبی^۳ (AARD) ۰/۴۴٪ برای محدوده‌ی وسیعی از دما (۳۹۳K - ۲۵۸) و فشار (۲۰۶/۹۴۰KPa - ۹۹) گزارش شده است.

۱-۴-۵- روش والدرما^۴

والدرما و همکارانش نیز در سال ۲۰۰۹ دانسیته‌ی مایعات یونی را فقط بر حسب دما با استفاده از شبکه‌ی عصبی مصنوعی و توصیف‌کننده‌هایی بر مبنای سهم گروه پیش‌بینی کردند [۲۸]. در این روش آن‌ها داده‌های تجربی دانسیته را برای ۱۰۳ مایع یونی جمع‌آوری نمودند. سپس از ۳۹۹ داده برای آموزش شبکه و ۸۲ داده برای سری پیش‌بینی استفاده کردند. آن‌ها برای انتخاب توصیف‌کننده‌های شبکه، از یک روش سهم گروه استفاده کردند، که طبق آن ترکیبات مورد نظر به ۸ گروه بنیادی تقسیم شدند. سپس با استفاده از توصیف‌کننده‌های بر مبنای روش سهم گروه، دما و

^۱ Lazzús

^۲ Particle swarm optimization (ps)

^۳ Average absolute relative deviation (AARD)

^۴ Valderrma

جرم مولکولی ترکیبات، شبکه را آموزش دادند. در مرحله‌ی بعد، از شبکه‌ی بهینه شده جهت پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی بر حسب دما برای سری پیش‌بینی استفاده کردند که میانگین انحراف مطلق (MAD) برای سری پیش‌بینی توسط این گروه برابر ۰/۰۲۶٪ گزارش شده است.

فصل دوم

بخش تئوری

۲-۱- کمومتریکس^۱

واژه‌ی کمومتریکس توسط اسوانت ولد^۲ سوئدی و بروس کووالسکی^۳ آمریکایی در سال ۱۹۷۲ مطرح شد. 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 از شیمی مطرح شود.

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. امروزه با پیشرفت کامپیوترها، ریزپردازنده‌ها و بسته‌های نرم‌افزاری، کمومتریکس به یک علم توانمند در انجام بسیاری از فعالیت‌های شیمیایی، زیستی، دارویی و حتی نانو تکنولوژی تبدیل شده است [۲۹].

۲-۲- روش‌های پارامتری

مجموعه تکنیک‌هایی که برای مدل‌سازی و پیش‌بینی خاصیت‌های مولکولی مورد استفاده قرار می‌گیرند، روش‌های پارامتری نام دارند. با استفاده از این روش‌ها می‌توان ارتباط منطقی بین فعالیت یا خاصیت مولکول‌ها با تعدادی از توصیف‌کننده‌های مولکولی برقرار نمود. این توصیف‌کننده‌ها، متغیرهای مستقلی هستند که ویژگی‌های مولکول را به طور کمی بیان می‌کنند. جهت ایجاد این

^۱ Chemometrics

^۲ Svante Wold

^۳ Bruce R Kowalski

روابط می‌توان هم از روش‌های خطی و هم از روش‌های غیر خطی استفاده نمود.

مراحل کلی مدل‌سازی به روش پارامتری به ترتیب زیر می‌باشد:

۱- انتخاب سری داده‌ها

۲- محاسبه‌ی توصیف‌کننده‌ها

۳- تجزیه و تحلیل آماری توصیف‌کننده‌ها

۴- آنالیز مدل‌های آماری و انتخاب مدل مناسب

۵- ارزیابی اعتبار مدل‌های انتخاب شده

۲-۱-۱- انتخاب سری داده‌ها

اولین مرحله‌ی روش‌های پارامتری، انتخاب یکسری داده‌ی مناسب و معتبر برای خاصیت مورد نظر می‌باشد. سپس داده‌ها به سه سری آموزش، ارزیابی و تست تقسیم می‌شوند. سری آموزش شامل اکثریت مولکول‌های سری داده‌هاست، و از این سری برای مدل‌سازی استفاده می‌شود. سری تأیید که سری ارزیابی نیز نامیده می‌شود، شامل تقریباً ۱۵٪ سری داده‌هاست و به گونه‌ای انتخاب می‌شود که نماینده‌ی کل ترکیبات موجود در سری آموزش باشد. سری تست که سری آزمایشی نیز نامیده می‌شود، شامل حدوداً ۱۵٪ داده‌ها می‌باشد که از این سری صرفاً به منظور ارزیابی قدرت مدل استفاده می‌شود و هیچ دخالتی در مدل‌سازی نخواهد داشت. در اکثر مواقع این سه سری به طور تصادفی از سری داده‌های اولیه انجام می‌شود به طوری که انواع مختلف مولکول‌های موجود در سری داده‌ها را شامل می‌شود. هر چه سری داده‌ها وسیع‌تر و متنوع‌تر باشد، مدل بدست آمده مدلی کلی‌تر و متنوع‌تر بوده و محدود به یک گروه خاص از ترکیبات نخواهد بود.

۲-۲-۲- محاسبه‌ی توصیف‌کننده‌ها

توصیف‌کننده‌ها پارامترهای عددی هستند که ویژگی‌های مختلف ساختاری و الکترونی مولکول‌ها را به طور کمی نشان می‌دهند. به عبارت دیگر هر توصیف‌کننده، بیانگر خصوصیت ویژه‌ای از مولکول است که ممکن است بر خاصیت مورد نظر مؤثر باشد. این توصیف‌کننده‌ها به دو گروه کلی^۱ توصیف‌کننده‌های تجربی و تئوری تقسیم‌بندی می‌شوند. توصیف‌کننده‌های تجربی بر اساس اندازه‌گیری‌های تجربی به دست می‌آیند. در حالی که توصیف‌کننده‌های 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.

توصیف‌کننده‌های تئوری می‌توانند با استفاده از محاسبات کوانتوم مکانیکی و یا با استفاده از روش سهم گروه‌ها به دست آیند. چون در این پایان‌نامه از روش سهم گروه‌ها برای انتخاب توصیف‌کننده‌ها استفاده شده است لذا در ادامه فقط راجع به این روش به اختصار توضیح داده خواهد شد.

۲-۲-۲-۱- روش سهم گروه (GCM)

امروزه در طراحی صنعتی، روش‌های ساده، کارآمد و در عین حال معتبر برای پیش‌بینی خواص مواد از روی ساختار مولکولی آن‌ها ضروری است. یکی از این روش‌ها، روش سهم گروه است که امروزه به طور گسترده‌ای در پیش‌بینی خواص فیزیکی و ترمودینامیکی مواد به کار می‌رود اما تاکنون نتوانسته موفقیت قابل ملاحظه‌ای را در پیش‌بینی خواص انتقالی مواد کسب کند. این روش که به رابطه‌ی جمع‌پذیری گروه‌ها^۱ نیز معروف است، ارتباطی بین خاصیت یک ماده با ساختار شیمیایی آن برقرار می‌کند. مبنای به وجود آمدن روش سهم گروه‌ها این است که اگر چه هزاران ترکیب شیمیایی در دنیای علم و تکنولوژی وجود دارد اما تعداد گروه‌های ساختاری و عاملی سازنده‌ی همه‌ی این

^۱ Group additivity relation

ترکیبات، بسیار کمتر از تعداد این ترکیبات می‌باشد. با این ایده، روش سهم گروه‌ها فرض می‌کند که خاصیت فیزیکی یا ترمودینامیکی هر ماده را می‌توان از مجموع سهم همه‌ی گروه‌های موجود در مولکول آن ماده در خاصیت مورد نظر، به دست آورد. به این ترتیب یک روش عملی برای پیش‌بینی خواص تعداد زیادی ماده بر حسب تعداد کمتری پارامتر به دست می‌آید که این پارامترها، سهم گروه‌های ساختاری را در خاصیت مورد نظر مشخص می‌کنند.

بر اساس توضیحات فوق، مبنای ایجاد و توسعه‌ی هر روش سهم گروه شامل دو مرحله است:

- ۱- خواص مواد شناخته شده به ساختار شیمیایی آن‌ها مرتبط می‌گردد تا گروه‌های اصلی در این مواد، شناسایی شده و مقادیر جمع‌پذیری مولی^۱ آن‌ها مشخص شود.
- ۲- سهم یک گروه مشخص در یک مولکول با تمام مولکول‌ها یکسان در نظر گرفته می‌شود. از این رو می‌توان خواص یک ماده‌ی جدید را از جمع مستقیم مقادیر جمع‌پذیر مولی گروه‌های شیمیایی تشکیل دهنده‌ی آن ترکیب پیش‌بینی نمود.

اکثر این روش‌ها تجربی هستند اما اطلاعات نظری راجع به سهم گروه‌ها در خواص مواد می‌تواند به عنوان راهنما در توسعه‌ی روابط سهم گروه‌ها به کار گرفته شود. البته لازم به توضیح است که تعریف گروه‌های تشکیل دهنده‌ی هر ماده، یک مقوله‌ی اختیاری است. به طور مثال ممکن است یک نفر پیشنهاد کند که باید اتم‌های اصلی شناسایی شوند. در حالی که ما می‌دانیم خواص کربن در الماس نسبت به کربن در گرافیت بسیار متفاوت است. از طرف دیگر، تجربه نشان داده است که اگر چه گروه کربونیل موجود در کتون‌ها نسبت به گروه کربونیل موجود در کربوکسیلیک اسیدها خواص متفاوتی دارد اما حداقل گروه کربونیل موجود در همه‌ی کتون‌ها مشابه می‌باشد. بدیهی است هر چه تمایز بین گروه‌ها بیشتر شود، صحت روش سهم گروه‌ها افزایش می‌یابد تا جایی که سرانجام هر ترکیب فقط شامل گروه‌های مربوط به خودش باشد. اما می‌توان با انتخاب صحیح گروه‌ها به روش

^۱ Additive molar quantities

سودمندی دست یافت که با وجود تعداد گروه‌های کم، صحت خواص پیش‌بینی شده قابل قبول باشد [۳۰].

۲-۲-۲-۲- انتخاب توصیف‌کننده‌ها بر مبنای روش سهم گروه

انتخاب توصیف‌کننده‌های مناسب برای برقراری ارتباط بین ساختار مولکول و دانسیته، در ایجاد ساخت مدل اهمیت بسیاری دارد. انتخاب توصیف‌کننده‌ها بر مبنای روش سهم گروه‌ها، یک روش بسیار ساده است که در آن ابتدا باید گروه‌های ساختاری مولکول‌ها را مشخص نمود، سپس تعداد گروه‌های ساختاری در هر ترکیب به عنوان توصیف‌کننده‌های آن ترکیب انتخاب می‌شود، در صورتی که هر یک از این گروه‌های ساختاری در ترکیبی وجود نداشته باشد توصیف‌کننده‌ی مربوط به آن صفر در نظر گرفته می‌شود.

۲-۲-۳- ساختن مدل

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

^۱ Artificial neural network (AAN)

^۲ Support vector machine (SVM)

۲-۲-۳-۱- شبکه‌های عصبی

سیستم عصبی انسان یک سیستم بسیار پیچیده است که قادر به تفکر، یادگیری، یادآوری، تجزیه و تحلیل مسائل است. شبکه‌ی عصبی مصنوعی یک برنامه‌ی نرم‌افزاری است که نتیجه‌ی کوشش‌های دانشمندان جهت مدلسازی سیستم عصبی انسان می‌باشد.

این سیستم‌ها از تعداد زیادی عنصر پردازش به نام نرون^۱ تشکیل شده‌اند که برای یک مسئله به صورت هماهنگ با هم عمل می‌کنند. شبکه‌ی عصبی مصنوعی، طرحی ساده شده از سیستم عصبی بیولوژیکی است که هر چند از لحاظ ساختاری، کاملاً شبیه آن نیست، اما بسیاری از توانمندی‌های آن، از جمله قابلیت پردازش سریع حجم وسیعی از داده‌ها و استخراج اطلاعات از آن‌ها را دارا می‌باشد که این ویژگی در عصر حاضر بسیار حائز اهمیت است. به این سیستم‌ها، هوشمند گفته می‌شود زیرا شبکه‌ها بر اساس محاسبات روی داده‌های عددی یا مثال‌ها، قوانین کلی را فرا می‌گیرند [۳۱].

۲-۲-۳-۱-الف- نرون زیستی

هر نرون طبیعی دارای سه قسمت اصلی دندریت^۲، جسم سلولی^۳ و آکسون^۴ است. محل تلاقی آکسون هر سلول به دندریت‌های سلول دیگر را سیناپس می‌گویند که ارتباط مابین نرون‌ها توسط سیناپس‌ها برقرار می‌شود. در حقیقت دندریت‌ها به عنوان ورودی نرون و آکسون به عنوان خروجی و فضای سیناپسی محل اتصال این دو می‌باشد. زمانی که سیگنال عصبی از آکسون به نرون‌ها و یا عناصر دیگر بدن مثل ماهیچه‌ها می‌رسد، باعث تحریک آن‌ها می‌شود. نرون‌ها از هر یک از اتصالات ورودی خود یک ولتاژ کم دریافت می‌کنند و آن‌ها را با هم جمع می‌زنند. اگر این حاصل جمع به یک

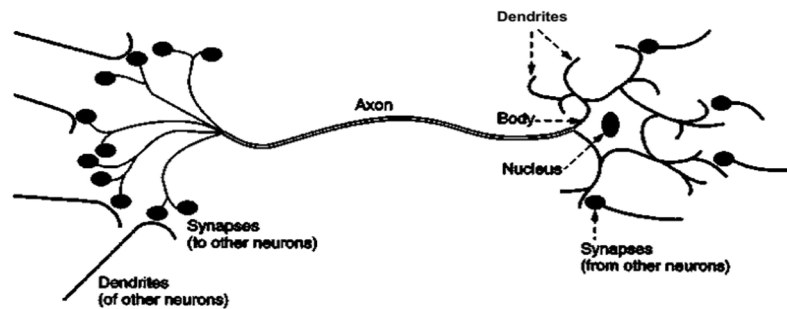
^۱ Neuron

^۲ Dendrite

^۳ Cell body

^۴ Axon

مقدار آستانه برسد، نرون روی آکسون خود یک ولتاژ خروجی ارسال می‌کند. این ولتاژ به دندریتهایی که به این آکسون متصل هستند رسیده و باعث یکسری فعل و انفعال‌های شیمیایی در اتصالات سیناپسی می‌شود و می‌تواند باعث ارسال پیک‌های فعالیت الکتریکی بین نرون‌های دیگر گردد [۳۲]. شکل (۱-۲) نمای کلی یک نرون طبیعی را نشان می‌دهد.



شکل (۱-۲): شمایی از نرون زیستی

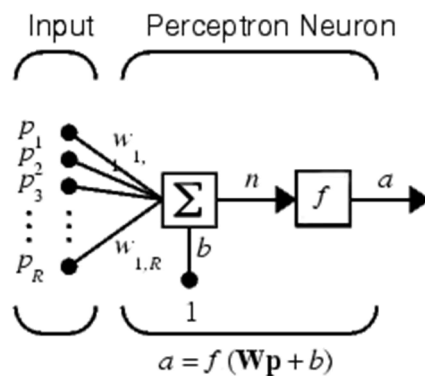
۲-۲-۱-۳-ب-نرون محاسباتی

مهم‌ترین جزء تشکیل دهنده‌ی هر شبکه‌ی عصبی، نرون می‌باشد. نرون که یک واحد محاسباتی پردازشی است در حقیقت مدل ساده شده‌ای از نرون طبیعی، یک خروجی، وزن‌های مربوط به سیگنال تحریک و تابع تبدیل^۱ یا تابع تحریک تشکیل شده است. ارتباط بین خروجی و سیگنال تحریک در قسمتی به نام تابع تحریک به وجود می‌آید. بنابراین یک نرون از دو بخش تشکیل شده است. بخش اول وظیفه‌ی دریافت ورودی‌ها، وزن‌دهی آن‌ها و محاسبه‌ی مجموع آن‌ها به عنوان سیگنال تحریک را به عهده دارد و بخش دوم وظیفه‌ی اعمال تابع تحریک روی سیگنال تحریک و ساختن پیغام خروجی نرون به لایه‌ی بعد و یا خروجی شبکه را به عهده دارد. شکل (۲-۲) ساختمان

^۱ Transfer function

یک نرون محاسباتی را نشان می‌دهد. بیان رابطه‌ی ورودی‌ها و خروجی‌های شبکه در یک مدل ریاضی مطابق فرمولاسیون شکل (۲-۲)، پرسپترون نامیده می‌شود.

اگر به شکل دقت کنید، 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 حاصلضرب ورودی‌ها در وزن‌ها جمع می‌شود تا ورودی خالص را ایجاد کند.



شکل (۲-۲): ساختمان یک نرون محاسباتی

$$n = \mathbf{Wp} + b = w_{1,1}p_1 + w_{1,2}p_2 + \dots + w_{1,R}p_R + b \quad (۱-۲)$$

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

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

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 بر طرف می‌شود [۳۳].

^۱ Bias

۲-۲-۳-۱-پ-ساختار لایه‌ای شبکه‌ی عصبی مصنوعی

در این نوع تقسیم بندی، شبکه‌های عصبی مصنوعی به دو صورت تک لایه و چند لایه تفکیک می‌شوند. در شبکه‌های تک لایه، نرون‌های ورودی و خروجی یکی هستند بنابراین به تعداد خروجی، نرون در شبکه وجود دارد که همگی در یک لایه و به موازات هم کار می‌کنند.

گاهی دینامیک و قوانین شبکه‌های عصبی آنقدر پیچیده است که به پارامترهای قابل تنظیم بیشتر نیاز است، در این موارد از شبکه‌های چند لایه استفاده می‌شود. شبکه‌های چند لایه شامل لایه‌ی ورودی^۱، لایه‌ی خروجی^۲ و یک یا چند لایه‌ی پنهان^۳ یا لایه‌ی میانی می‌باشند. در این توپولوژی، نرون‌ها علاوه بر این که در لایه‌ی خود به شکل محدودی به یکدیگر اتصال داده شده‌اند، از طریق ورودی‌های خود با جهان واقعی ارتباط دارند. گروهی دیگر از نرون‌ها نیز از طریق خروجی‌های خود، جهان خارج را می‌سازند که لایه‌ی خروجی نام دارند. بقیه‌ی نرون‌ها که از دید پنهان هستند نیز لایه‌های پنهان را تشکیل می‌دهند [۳۴]. در یک شبکه‌ی چند لایه، هر لایه، ماتریس وزن، بردار پیش‌قدر، بردار ورودی خاص و بردار خروجی مخصوص به خود را دارد، که برای مشخص کردن لایه‌های مختلف از بالانویس^۴ استفاده می‌شود. در شکل (۲-۳) ساختار یک شبکه‌ی سه لایه نشان داده شده است.

۲-۲-۳-۱-ت-انواع شبکه‌ها از نظر ارتباطات بین نرونی

ارتباطات بین نرونی در یک شبکه‌ی عصبی از اهمیت بسیاری برخوردار می‌باشد و به نوعی قدرت شبکه را تعیین می‌کند. در این نوع تقسیم‌بندی دو نوع شبکه وجود دارد: شبکه‌های پیش‌خور^۵ و

^۱ Input layer

^۲ Output layer

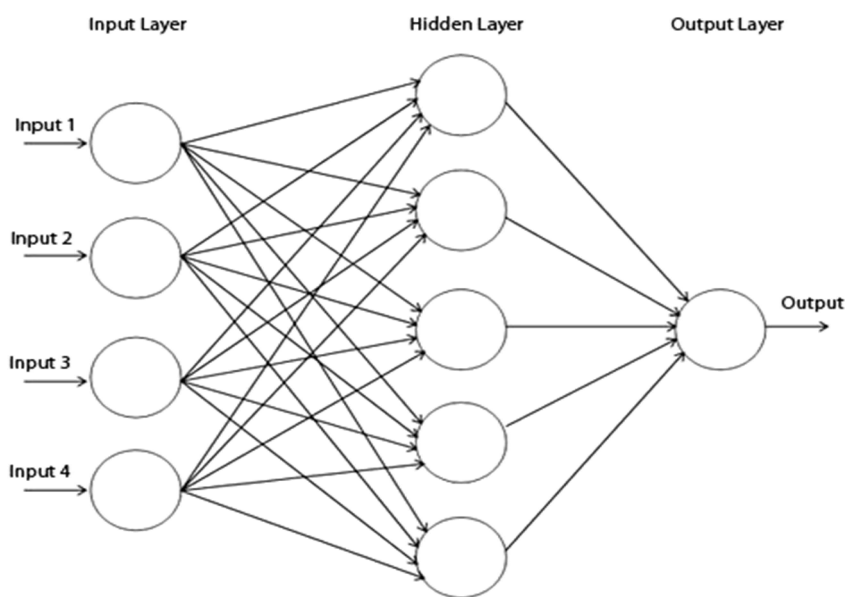
^۳ Hidden layer

^۴ Superscript

^۵ Feed forward

شبکه‌های پس‌خور^۱.

در شبکه‌های پیش‌خور، اتصالات بین نرونی به گونه‌ای است که هر نرون لایه‌ی میانی، می‌تواند ورودی خود را از هر یک از نرون‌های لایه‌ی قبلی خود دریافت کند اما هیچ سیگنالی از نرون به خودش یا به نرون لایه‌ی قبل بر نمی‌گردد. بدین ترتیب در یک شبکه‌ی عصبی، سیگنال‌ها به تدریج از یک لایه‌ی نرونی به لایه‌های بعدی حرکت می‌کنند و در نهایت به لایه‌ی آخر یا خروجی شبکه می‌رسند. در نتیجه جریان اطلاعات در این نوع از شبکه‌ها همیشه در یک مسیر یک طرفه و از ورودی به خروجی می‌باشد.



شکل (۲-۳): ساختار یک شبکه‌ی سه لایه

نوع دیگری از ارتباط بین نرونی در شبکه‌های عصبی ارتباط بازخوردی است که در شبکه‌های پس‌خور وجود دارد. در این نوع از ارتباطات، خروجی یک نرون به همان نرون یا نرون‌های همان لایه یا به نرون‌های لایه‌ی قبلی اتصال داده می‌شود [۳۵]. بنابراین این نوع از شبکه‌ها می‌توانند با استفاده

^۱ Feed back

از حلقه‌های برگشتی، سیگنال‌هایی داشته باشند که در هر دو مسیر ورودی به خروجی و بالعکس حرکت کنند.

۲-۲-۳-۱-ت-آموزش شبکه‌ی عصبی

شبکه‌های عصبی می‌توانند بر اساس طراحی خود، سیگنال‌های ورودی را پردازش کنند و به سیگنال‌های خروجی مورد نظر تبدیل نمایند. به طور معمول پس از این که شبکه‌های عصبی طراحی و پیاده سازی شدند، باید پارامترهای پیش‌قدر و وزن‌ها به ازای مجموعه‌هایی از سیگنال‌های ورودی، به گونه‌ای تنظیم شوند که سیگنال‌های خروجی شبکه، خروجی مطلوب را تشکیل دهند. چنین فرایندی را آموزش شبکه‌ی عصبی می‌نامند. به طور کلی برای آموزش شبکه دو روش وجود دارد:

۱- یادگیری با ناظر^۱

۲- یادگیری 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 متناهی از گروه‌ها تقسیم‌بندی کند و به عبارتی عمل خوشه‌بندی را انجام دهد. باید توجه داشت که در این حالت، فردِ کاربر است که هدف نهایی را مشخص می‌کند.

رفتار سیستم‌های آموزش‌پذیر توسط الگوریتم‌های برگشتی بیان می‌شود که به این الگوریتم‌ها

^۱ Supervised learning

^۲ Unsupervised learning

قوانین یادگیری می‌گویند. انواع مختلفی از قوانین یادگیری برای شبکه‌های عصبی وجود دارند که یادگیری عملکردی^۱ 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)^۲ است. شاخص عملکرد را اصطلاحاً تابع هدف یا تابع خطا نیز می‌گویند، یعنی تابعی که کمینه کردن آن مورد نظر است. در مرحله‌ی بعد، باید پارامترهای شبکه برای کاهش مقدار شاخص عملکرد تنظیم گردد [۳۶].

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

۲-۲-۳-۲ - ماشین‌های بردار پشتیبان

ماشین‌های بردار پشتیبان (SVM) یکی از روش‌های یادگیری با ناظر هستند که از الگوریتم‌های آموزش دیده توسط آنها می‌توان هم در طبقه‌بندی و هم در آنالیز رگرسیون استفاده نمود. این روش از جمله روش‌های نسبتاً جدیدی است که در سال‌های اخیر کارایی خوبی برای طبقه‌بندی، نشان داده است.

ماشین‌های بردار پشتیبان اولیه فقط در طبقه‌بندی دو کلاسه به کار می‌رفتند و به آنها

^۱ Performance learning

^۲ Mean square error (MSE)

جداکننده‌های خطی دوتایی^۱ می‌گفتند اما بعداً از این روش برای طبقه‌بندی چند کلاسه نیز استفاده شد. هدف از این گونه بررسی‌ها ایجاد یک معیار طبقه‌بندی است به گونه‌ای که بتواند برای نمونه‌های جدید به خوبی قابل استفاده بوده و از قدرت تعمیم خوبی برخوردار باشد.

اگر چه SVMها در ابتدا برپایه‌ی مسائل طبقه‌بندی بنا نهاده شده بودند اما امروزه توانسته‌اند با استفاده از تابع کرنل در طبقه‌بندی غیرخطی و آنالیز رگرسیون نیز کاربرد وسیعی پیدا کنند. ماشین‌های بردار پشتیبان در مقایسه با شبکه‌های عصبی دارای دو مزیت عمده هستند که همین امر موجب توجه خاص محققین به این ماشین‌های فراگیر شده است:

(الف) قابلیت مدل‌سازی توسط SVM با تعداد داده‌های کم نسبت به شبکه‌های عصبی بیشتر است.

(ب) 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 حداقل‌سازی خطای ساختاری برای یافتن بهترین مدل استفاده می‌شود که در آن خطای تعمیم حداقل می‌شود [۳۷].

۲-۲-۳-۲-الف-طبقه‌بندی خطی دو کلاسه با ماشین‌های بردار پشتیبان

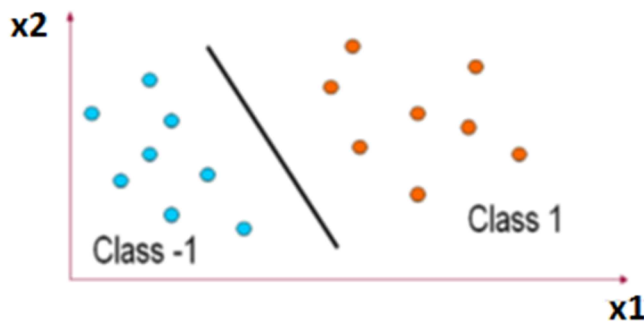
فرض کنید دو دسته داده‌ی آموزشی که به صورت خطی از هم جداپذیر باشند در اختیار داریم. برای این داده‌ها تعداد زیادی خط جداکننده وجود دارد که قادر هستند داده‌ها را به صورت خطی جدا کنند اما همان‌طور که در شکل (۲-۴) نشان داده شده است، تنها یکی از آن‌ها دارای ماکزیمم فاصله بین خط جداکننده و نزدیک‌ترین نقاط آموزشی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

^۱ Binary linear classifier

بهینه می‌گویند. به طور کلی این داده‌ها به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$D = \{(X_i, y_i) | x_i \in R^n, y_i \in [-1, 1]\}_{i=1}^n \quad (3-2)$$

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 جداساز^۱ با بیشترین فاصله از نقاط حاشیه‌ای است که نقاط با $y_i = +1$ را از نقاط با $y_i = -1$ جدا کند.

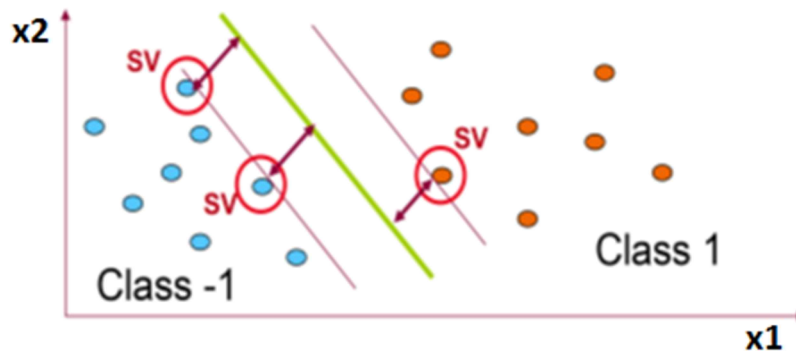


شکل (۴-۲): خط جداساز بهینه با حداکثر مقدار حاشیه [۳۸]

به نزدیک‌ترین داده‌های آموزشی به ابرصفحه‌ی جداساز بهینه که در واقع روی ابرصفحه‌های موازی مرزی قرار گرفته‌اند، بردارهای پشتیبان^۲ 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.

^۱ Separating hyper plane

^۲ Support vectors (SV)



شکل (۵-۲): نمایش بردارهای پشتیبان روی ابرصفحه‌های موازی مرزی [۳۸]

در حالت دو بعدی معادله‌ی این خط به صورت زیر نوشته می‌شود:

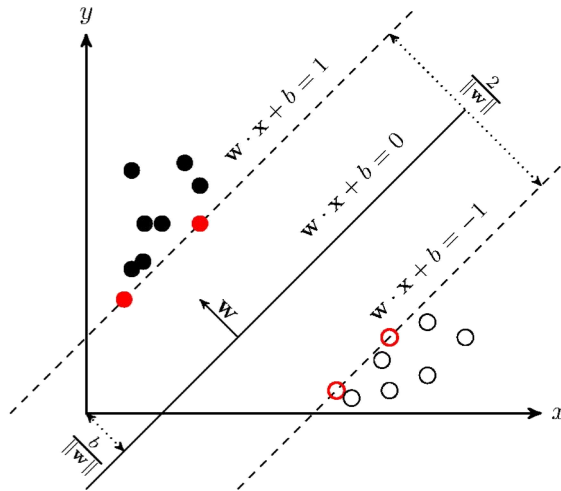
$$W_1 X_1 + W_2 X_2 + b = 0 \quad (۴-۲)$$

اکنون موضوع دسته بندی 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:

$$\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} + b = 0 \quad (۵-۲)$$

که در آن \mathbf{W} 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 [۳۹]. 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 باشد؛ یعنی، حداکثر حاشیه‌ی ممکن بین ابرصفحه‌های موازی که داده‌ها را از هم جدا می‌کنند ایجاد شود. این موضوع به صورت ریاضی چنین بیان می‌شود:

$$\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} + b = \pm 1 \quad 1 \leq i \leq n \quad (۶-۲)$$



شکل (۶-۲): صفحه‌ی جداساز و حاشیه‌ها [۳۸]

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

$$d = \frac{\left| (\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{X} + b - 1) - (\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{X} + b + 1) \right|}{\|\mathbf{w}\|} = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|} \quad (۷-۲)$$

براساس این رابطه اگر تابع $\frac{2}{\|\mathbf{w}\|}$ را با در نظر گرفتن قید (۸-۲) ماکزیم کنیم حاشیه‌ی مورد نظر ماکزیم خواهد شد.

$$y_i (\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{X} + b) \geq 1 \quad 1 \leq i \leq n \quad (۸-۲)$$

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 (۸-۲) 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:

$$L_p(\mathbf{w}, b, \alpha) = \frac{1}{2} \mathbf{w}^T \cdot \mathbf{w} - \sum_{i=1}^n \alpha_i [y_i (\mathbf{w}^T \cdot \mathbf{X}_i + b) - 1] \quad (۹-۲)$$

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 (۹-۲) نسبت به b و W مشتق بگیریم و مساوی صفر قرار دهیم مقدار بهینه‌ی W به دست می‌آید.

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}} = 0 \Rightarrow \mathbf{W} = \sum_{i=1}^N \alpha_i \mathbf{X}_i y_i \quad (10-2)$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0 \quad (11-2)$$

حال اگر مقدار W به دست آمده از مشتقات جزئی رابطه‌ی (۱۰-۲) را در خود رابطه‌ی (۹-۲)

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

$$L_d(\alpha) = \sum_{i=1}^N \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N y_i y_j \alpha_i \alpha_j \mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_j \quad (12-2)$$

بنابراین هدف در ماشین‌های برداری حل معادله‌ی (۱۲-۲) با توجه به دو محدودیت (۱۳-۲) و

(۱۴-۲) می‌باشد:

$$\alpha_i \geq 0 \quad (13-2)$$

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0 \quad (14-2)$$

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

$$\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X}_i + b = \frac{1}{y_i} = y_i \Rightarrow b = y_i - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X}_i \quad (15-2)$$

البته بهتر است که با متوسط‌گیری روی همه‌ی بردارهای پشتیبان، مقدار بهینه‌ی b را محاسبه

کرد تا در عمل الگوریتم مقاوم‌تری به دست آید:

$$b = \frac{1}{N_{SV}} \sum_{i=1}^{N_{SV}} (y_i - \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X}_i) \quad (16-2)$$

با حل مسئله‌ی بهینه‌سازی (۱۲-۲) و استفاده از رابطه‌ی (۱۶-۲) می‌توان به بهینه‌ترین

ابرفحه‌ی جداساز دست یافت و سپس از این ابرفحه جداساز برای طبقه‌بندی نمونه‌های جدید استفاده نمود [۳۹].

۲-۲-۳-۲-ب-طبقه‌بندی خطی سیستم‌های دو کلاسه با ایده‌ی حاشیه‌ی نرم

گاهی اوقات در سیستم‌های خطی همان‌طور که در شکل (۷-۲) 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 واپنایک^۱ و کورتس^۲ در سال ۱۹۹۵ مطرح شد [۴۰]. 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 (۲-۱۸) و (۲-۱۹) بهینه شده، به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\text{Min}_{w,b} = \frac{1}{2} \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{W} + C \sum_{i=1}^N \xi_i \quad (۱۷-۲)$$

$$y_i (\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X}_i + b) \geq 1 - \xi_i \quad (۱۸-۲)$$

$$F(\xi) = \sum_{i=1}^N \xi_i \quad (۱۹-۲)$$

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:

$$L_p(\mathbf{W}, b, \xi, \alpha, \beta) = \frac{1}{2} \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{W} + C \sum_{i=1}^N \xi_i - \sum_{i=1}^N \alpha_i \{y_i (\mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X}_i + b) - 1 + \xi_i\} - \sum_{i=1}^N \beta_i \xi_i \quad (۲۰-۲)$$

اگر از رابطه‌ی (۲۰-۲) نسبت به \mathbf{W} ، b و ξ_i مشتق گرفته و مساوی صفر قرار داده شود، مقادیر

زیر به دست می‌آیند:

^۱ Vapnik

^۲ Cortes

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{W}} = 0 \Rightarrow \mathbf{W} = \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i \mathbf{X}_i \quad (21-2)$$

$$\frac{\partial L}{\partial b} = 0 \Rightarrow \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0 \quad (22-2)$$

$$\frac{\partial L}{\partial \xi} = 0 \Rightarrow \alpha_i + \beta_i = C \quad (23-2)$$

با قرار دادن این روابط در رابطه (۲۰-۲)، معادله‌ی اساسی ماشین‌های برداری در حالت خطی

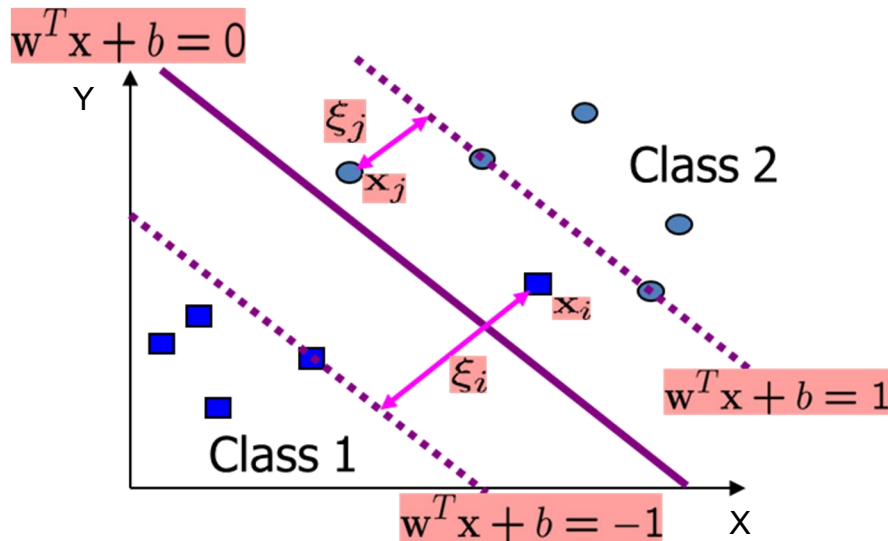
جداناپذیر به دست می‌آید که به صورت معادله‌ی زیر خواهد بود:

$$L_d(\alpha) = \sum_{i=1}^N \alpha_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N y_i y_j \alpha_i \alpha_j \mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_j \quad (24-2)$$

در این حالت هدف حل معادله‌ی (۲۴-۲) با توجه به دو محدودیت (۲۵-۲) و (۲۶-۲) می‌باشد:

$$0 \leq \alpha_i \leq C \quad (25-2)$$

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i y_i = 0 \quad (26-2)$$



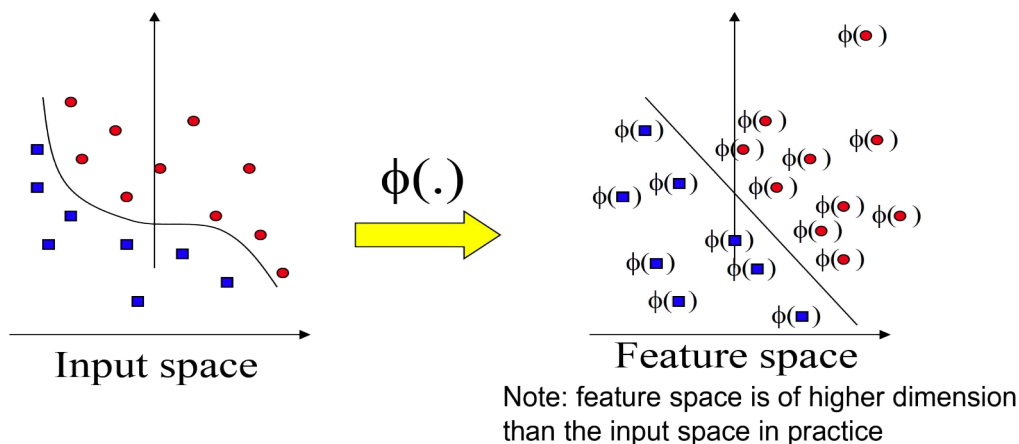
شکل (۷-۲): سیستم‌های خطی جدا ناپذیر با میزان خطای ξ_j [۳۸]

همان‌گونه که مشاهده می‌شود، تابع هدف سیستم‌های جداناپذیر خطی مشابه با سیستم‌های

جدپذیر خطی است با این تفاوت که ضرایب لاگرانژ α_i دارای کران بالای C هستند [۴۱]. در این حالت پارامتر C نیز که قابلیت کنترل ظرفیت اضافی در طبقه‌بندی کننده را فراهم می‌آورد، باید تعیین شود.

۲-۲-۳-۲-پ-طبقه‌بندی غیر خطی^۱ با ماشین‌های بردار 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 X_i به صورت $\phi(X_i)$ 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 [۳۹].



شکل (۸-۲): داده‌های ورودی ارجاع داده شده به فضای بالاتر [۳۸]

^۱ Nonlinear classification

^۲ Feature space

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

$$\mathbf{W} = \sum_{i=1}^N \alpha_i y_i \varphi(\mathbf{X}_i) \quad (27-2)$$

$$b = y_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i y_i \varphi(\mathbf{X}_i)^T \cdot \varphi(\mathbf{X}_j) \quad (28-2)$$

به منظور کم کردن حجم محاسبات به دلیل زیاد شدن ابعاد، تئوری مرسر^۱ در سال ۱۹۰۹ 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 [۴۲]. در نتیجه رابطه‌ی (۲۸-۲) به صورت زیر تغییر می‌یابد:

$$b = y_i - \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i y_i K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) \quad (29-2)$$

با استفاده از ترفند کرنل می‌توان معادله‌ی ابرصفحه‌ی جداساز بهینه در سیستم‌های غیرخطی را

به صورت معادله‌ی زیر نوشت:

$$d(x) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N y_i \alpha_i K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) + b \quad (30-2)$$

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.

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 (۱-۲) گردآوری شده‌اند [۳۹].

^۱ Mercer

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	$K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) = \tanh(\gamma \mathbf{X}_i^T \mathbf{X}_j + \mu)$
کلیه‌ی مسائل شرایط مرزی	$K(\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j) = \frac{\sin((n+1/2)(\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j))}{2 \sin((\mathbf{X}_i - \mathbf{X}_j)/2)}$

۲-۲-۳-۲-ت- بردار پشتیبان رگرسیونر برای سیستم‌های خطی

یک روش از SVM برای آنالیز رگرسیون در سال ۱۹۹۶ توسط واپنایک و همکارانش پیشنهاد شد که این روش بردار پشتیبانی رگرسیونر (SVR)^۱ نامیده می‌شود [۴۳]. هدف SVR پیدا نمودن تابعی است که بر داده‌ی با کمترین انحراف از کمیتی مانند ϵ برای هر جفت \mathbf{X}_i, y_i برازش یابد. به عبارت دیگر، تابع رگرسیونر در این حالت یک ابر صفحه‌ی جداساز است که بر روی داده‌ها با در نظر گرفتن کمترین مربع خطا بین ابر صفحه و داده‌ها، برازش می‌یابد. بنابراین تابع رگرسیونر به صورت زیر بیان می‌شود:

$$f(x) = \mathbf{W}^T \cdot \mathbf{X} + b \quad (۲-۳۱)$$

^۱ Support vector regression

در این جا نیز تلاش می شود که کمترین مقدار ممکن برای $\|W\|$ با توجه به دو قید (۳۲-۲) و

(۳۳-۲) به دست آید.

$$y_i - W^T \cdot X - b \leq \varepsilon \quad (32-2)$$

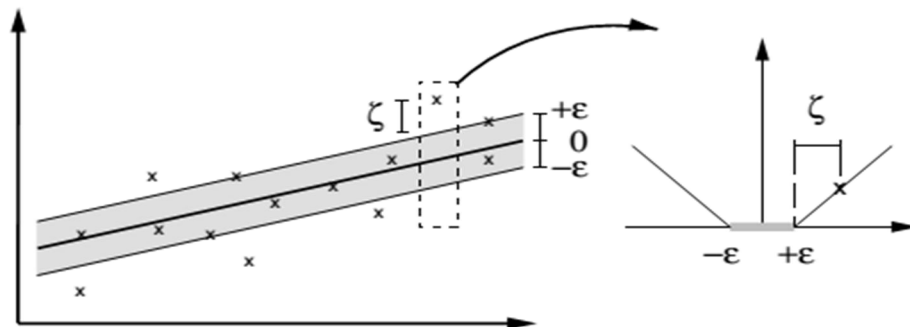
$$y_i + W^T \cdot X + b \leq \varepsilon \quad (32-2)$$

برخی مواقع، برخی خطاها ممکن است از مقدار ε بیشتر باشد، بنابراین برای این حالت تابع حساسیت^۱

ε یا متغیر ξ_i معرفی می شود که به صورت زیر بیان می شود:

$$|\xi| = \begin{cases} \text{if } |\xi| < \varepsilon & 0 \\ \text{otherwise} & |\xi| - \varepsilon \end{cases} \quad (34-2)$$

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



شکل (۹-۲): تابع حساسیت به مقدار ε [۴۴]

بنابراین رگرسیون خطی برای ماشین های بردار می تواند به صورت تابع اولیه (۳۵-۲) نوشته شود

که در آن هدف، مینیمم سازی خطای کلی و $\|W\|$ با توجه به قیدهای (۳۶-۲)، (۳۷-۲) و (۳۸-۲)

است.

^۱ ε -sensitivity

$$L_p = \frac{1}{2} \|W\|^2 + C \sum_{i=1}^N (\xi_i + \xi'_i) \quad (35-2)$$

$$y_i - W^T \cdot X - b \leq \xi_i + \varepsilon \quad (36-2)$$

$$y_i + W^T \cdot X + b \leq \xi_i + \varepsilon \quad (37-2)$$

$$\xi_i, X_i \geq 0 \quad (38-2)$$

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 [45].

برای حل مسئله بهینه‌سازی دارای محدودیت (35-2)، 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 (39-2) و (40-2) به دست می‌آیند.

$$W = \sum_{i=1}^N (\alpha_i - \alpha'_i) X_i \quad (39-2)$$

$$\sum_{i=1}^N (\alpha_i - \alpha'_i) = 0 \quad (40-2)$$

با قرار دادن رابطه‌ی به دست آمده از معادله‌ی (39-2) برای مقدار W ، در معادله‌ی (35-2) به دست آمده از تابع لاگرانژ، معادله‌ی اساسی ماشین‌های بردار رگرسیونر به صورت معادله‌ی زیر نوشته خواهد شد:

$$L_d = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\alpha_i - \alpha'_i) X_i^T \cdot X_j (\alpha_i - \alpha'_i) + \sum_{i=1}^N ((\alpha_i - \alpha'_i) y_i - (\alpha_i + \alpha'_i) \varepsilon) \quad (41-2)$$

با توجه به این که:

$$0 \leq (\alpha_i - \alpha'_i) \leq C \quad (42-2)$$

۲-۲-۳-۲-ت- بردار پشتیبان رگرسیونر برای سیستم‌های غیر خطی

همان‌گونه که در بحث بردار پشتیبان رگرسیونر 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 $W = \sum_{i=1}^N (\alpha_i - \alpha'_i) \varphi(X_i)$ 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

$\varphi(X_i)$ است که مقدار آن ناشناخته است. در این شرایط مانند حالت طبقه‌بندی داده‌ها از حقه‌ی

کرل استفاده می‌شود تا بتوان بدون محاسبه‌ی مقدار $\varphi(X_i)$ 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 $y_i = \sum_{i=1}^N W^T \varphi(X_i) + b$ بیان می‌گردد. با قراردادن رابطه‌ی به

دست آمده برای W در رابطه‌ی (۲-۳۹)، می‌توان معادله‌ی اساسی (۲-۴۳) را برای ماشین‌های بردار

رگرسیونر در سیستم‌های غیرخطی به صورت زیر معرفی نمود.

$$y_i = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\alpha_i - \alpha'_i) \varphi(X_i)^T \varphi(X_j) + b = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N (\alpha_i - \alpha'_i) K(X_i, X_j) + b \quad (۲-۴۳)$$

با در نظر گرفتن رابطه‌ی (۲-۴۳) نیازی به محاسبه مقدار $\varphi(X_i)$ نیست و مقدار b از این رابطه

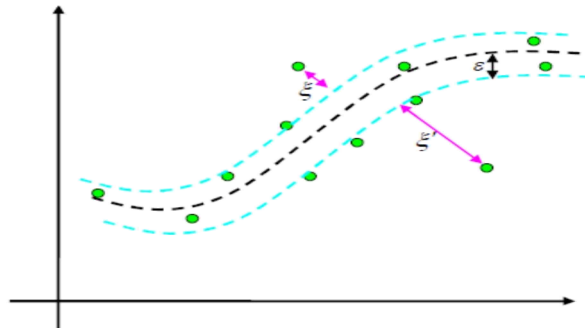
محاسبه می‌شود [۴۵].

عملکرد ماشین‌های بردار 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 بردار برای یک رگرسیونر

غیرخطی در شکل (۲-۱۰) نشان داده شده است.



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

۲-۲-۴- ارزیابی اعتبار مدل‌های انتخاب شده

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.

ارزیابی تقاطعی^۱: به منظور ارزیابی اعتبار مدل‌های انتخاب شده در مراحل قبل، از روش ارزیابی

تقاطع‌ی استفاده می‌شود. در این روش، هر بار تعداد معینی از مولکول‌ها کنار گذاشته می‌شوند و با بقیه‌ی مولکول‌ها، مدل‌سازی انجام می‌شود. سپس خاصیت مورد نظر برای مولکول‌های کنار گذاشته شده پیش‌بینی می‌شود. این کار آنقدر تکرار می‌شود تا تمام مولکول‌ها، حداقل یکبار در دسته‌ای که در مدل‌سازی شرکت نمی‌کند، قرار گیرند. بسته به تعداد مولکول‌های کنار گذاشته شده، این روش به دو شیوه‌ی حذف یکتایی^۲ (LOO) و حذف چندتایی (LGO^۳ یا LMO^۴) قابل انجام است. در شیوه‌ی LOO هر بار یک مولکول از سری داده‌ها کنار گذاشته شده و مدل‌سازی با بقیه‌ی مولکول‌ها انجام می‌پذیرد. بدیهی است که در این حالت، به تعداد مولکول‌های سری داده‌ها، باید این عمل صورت گیرد، اما در شیوه‌ی LGO هر بار یک چندتایی از مولکول‌های سری داده‌ها کنار گذاشته می‌شود. بقیه‌ی مراحل LGO مانند LOO است. تعداد دفعات انجام عمل LGO به تعداد مولکول‌هایی بستگی

^۱ Cross validation

^۲ Leave one out (LOO)

^۳ Leave group out (LGO)

^۴ Leave multiple out (LMO)

دارد که هر بار کنار گذاشته می‌شوند.

ضریب تعیین^۱: به عنوان یک شاخص برای بیان دقت خط رگرسیون برآورد شده، به کار می‌رود و نشان‌دهنده‌ی نسبت تغییرات متغیر وابسته‌ی 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:

$$R^2 = \frac{SSR}{SST} = 1 - \frac{SSE}{SST} \quad (۴۴-۲)$$

که SSR^2 طبق رابطه‌ی (۴۵-۲)، بیانگر مجموع مربعات انحراف مقادیر پیش‌بینی شده‌ی متغیر وابسته از میانگین مقادیر آن است.

$$SSR = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \quad (۴۵-۲)$$

SST^3 طبق رابطه‌ی (۴۶-۲) نشانگر مجموع مربعات انحراف مقادیر واقعی متغیر وابسته از میانگین مقادیر آن است.

$$SST = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (۴۶-۲)$$

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.

SSE^4 نیز مبین مجموع مربعات انحراف مقادیر واقعی متغیر وابسته از مقادیر پیش‌بینی شده برای آن است.

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

^۱ Determination coefficient (R^2)

^۲ Sum square regression (SSR)

^۳ Sum square total (SST)

^۴ Sum square error (SSE)

بنابراین با توجه به روابط فوق می توان نوشت:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (48-2)$$

طبق رابطه ی (۴۸-۲)، 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 می شود و هر گونه انحرافی از این حالت باعث می شود که مقدار R^2 از یک کوچکتر شود.

میانگین مربع خطاها (MSE): آماره ی MSE نیز از رابطه ی (۴۹-۲) به دست می آید:

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

میانگین خطای مطلق^۱ (MAE):

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

میانگین مطلق انحراف (AAD):

$$AAD = \frac{\sum_{i=1}^n \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right|}{n} \times 100 \quad (51-2)$$

خطای استاندارد پیش بینی^۲ (SEP):

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

میانگین انحراف^۳ (Bias):

$$Bias = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)}{N} \times 100 \quad (53-2)$$

^۱ Mean absolute error (MAE)

^۲ Standard error off prediction (SEP)

^۳ Average deviation (Biase)

ماکزیمم انحراف^۱ (D_{\max}):

$$D_{\max} = \max \left(100 \left| \frac{y_i - \hat{y}_i}{y_i} \right| \right) \quad (۵۴-۲)$$

نمودار برگشت: در این نمودار مقادیر پیش‌بینی شده‌ی کمیت مورد نظر برحسب مقادیر تجربی رسم می‌شود و به کمک ضریب همبستگی (R^2) به دست آمده از نمودار، پراکندگی نقاط اطراف خط برگشت تعیین می‌شود. محدوده‌ی تغییرات بین صفر و یک است. اگر $R^2 = 1$ باشد، همبستگی کاملی بین داده‌ها وجود دارد و نتایج پیش‌بینی شده به واقعیت نزدیک‌ترند. اما اگر $R^2 = 0$ باشد، بین داده‌ها هیچ‌گونه همبستگی وجود ندارد.

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

آزمون Y-تصادفی^۲: آزمون تصادفی کردن داده‌ها یا به عبارتی آزمون Y-تصادفی نیز روشی برای ارزیابی اعتبار مدل است که هدف این روش بررسی هر گونه ارتباط تصادفی بین داده‌ها می‌باشد. در این روش به متغیر وابسته یا همان خاصیت مورد اندازه‌گیری، به جای پاسخ درست، داده‌ی تصادفی داده می‌شود. اگر تفاوت چشمگیری بین نتایج حاصل از داده‌های تصادفی و داده‌های تجربی باشد نشان‌دهنده‌ی صحت و اعتبار کار است.

^۱ Maximum deviation (D_{\max})

^۲ Y- randomization test

فصل سوم

پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی بر حسب
دما و فشار با استفاده از روش‌های غیر خطی

در این پایان نامه از دو روش غیر خطی "شبکه‌ی عصبی مصنوعی" و "ماشین بردار پشتیبان" و توصیف‌کننده‌های بر مبنای روش سهم گروه برای پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی مختلف در گستره‌ی وسیعی از دما و فشار استفاده شده است. در ادامه، مراحل مدل‌سازی توسط این دو روش شرح داده خواهد شد.

۳-۱- انتخاب سری داده‌ها

به منظور پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی، ۳۱۰۷ نقطه داده‌ی مربوط به ۱۸۸ مایع یونی در گستره‌ی وسیعی از دما و فشار جمع‌آوری گردید. نام این ترکیبات، به همراه محدوده‌ی دما و فشار آن‌ها، تعداد نقاط مورد استفاده از هر ترکیب و مرجع مربوطه در جدول (پ-۱) در پیوست گزارش شده است.

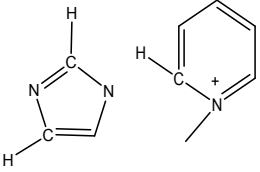
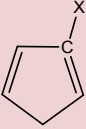
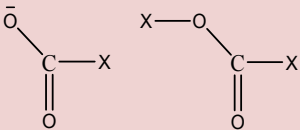
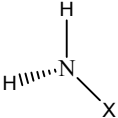
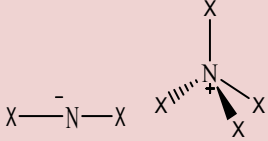
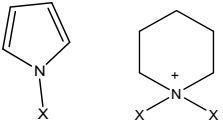
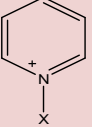
۳-۲- انتخاب توصیف‌کننده‌ها به روش سهم گروه

در این پایان نامه برای انتخاب توصیف‌کننده‌ها از روش سهم گروه استفاده شده است. برای این منظور، مولکول‌ها به اجزای مختلف شکسته شدند که در نهایت برای ۱۸۸ مایع یونی، ۳۳ گروه ساختاری بدست آمد. در جدول (۳-۱) توصیف‌کننده‌های روش سهم گروه برای همه‌ی مایعات یونی نشان داده شده است. تعداد هر یک از گروه‌های ساختاری موجود در ترکیبات مورد بررسی همراه با دما و فشار به عنوان ورودی برای شبکه‌ی عصبی مصنوعی و ماشین بردار پشتیبان انتخاب شدند.

جدول (۳-۱): گروه‌های انتخاب شده به روش سهم گروه برای توسعه‌ی مدل‌های ANN و SVM

شماره‌ی گروه	نماد گروه	ساختار شیمیایی	توضیحات
۱	CH _۳		کربن نوع اول انتهایی =X هر اتم انتهایی یا گروهی از اتم‌ها مثل -O-، -SO _۳ -، -COO-
۲	CH _۲		کربن نوع دوم =X هر اتم انتهایی یا گروهی از اتم‌ها
۳	CH		کربن نوع سوم OH، -COO-، NH _۲ ، F =X
۴	C		کربن نوع چهارم و C ⁻
۵	CH _۲ ®		کربن نوع دوم داخل حلقه
۶	-CH®		کربن نوع سوم داخل حلقه

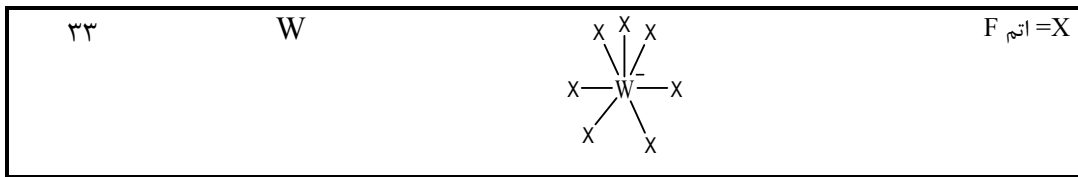
ادامه ی جدول (۱-۳)

۷	$=\text{CH}^{\oplus}$		$=\text{CH}-$ با کربن sp^2 داخل حلقه
۸	C^{\oplus}		$=\text{CH}-$ با کربن sp^2
۹	$-\text{OH}$	$\text{H}-\text{O}-\text{X}$	گروه هیدروکسیل
۱۰	$-\text{O}$	$\text{X}-\text{O}-\text{X}$ $\overset{-}{\text{O}}-\text{X}$	اکسیژن دارای باند یگانه
۱۱	$=\text{O}$	$\text{X}=\text{O}$	اکسیژن دارای باند دوگانه
۱۲	COO		گروه‌های استری و کربوکسیلات
۱۳	$-\text{NH}_2$		گروه آمین نوع اول
۱۴	$-\text{N}$		نیتروژن دارای پیوندهای یگانه با اتم‌های دیگر
۱۵	$-\text{N}^{\oplus}$		نیتروژن دارای پیوندهای یگانه با اتم‌های دیگر داخل حلقه
۱۶	$=\text{N}^{\oplus}$		نیتروژن دارای پیوند دوگانه داخل حلقه
۱۷	$-\text{CN}$	$\text{X}-\text{CN}$	N^- و $\text{C}^+=\text{X}$...
۱۸	F	$\overset{-}{\text{F}}$ $\text{F}-\text{X}$	آنیون F^- و گروه فلوئورو
۱۹	Cl	$\text{X}-\text{Cl}$ $\overset{-}{\text{Cl}}$	آنیون Cl^- و گروه کلرو

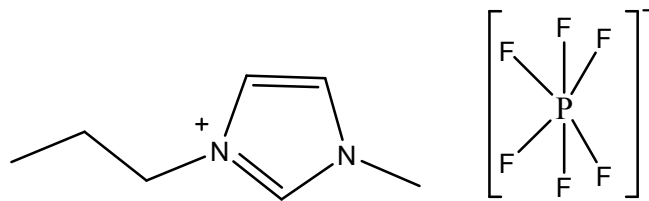
ادامه ی جدول (۱-۳)

۲۰	Br	$\text{Br}-\text{X} \quad \text{Br}^-$	انیون Br^- و گروه برم
۲۱	I	I^-	گروه یدو
۲۲	P		$=\text{X}$ ترکیبات آلیفاتیک (کربن نوع اول)، اتم F ، O^- ، $=\text{O}$ و...
۲۳	B		$=\text{X}$ اتم F ، COO و...
۲۴	S		$=\text{X}$ ترکیبات آلیفاتیک (کربن نوع اول)
۲۵	-SH	$\text{X}-\text{SH}$	$=\text{X}$ ترکیبات آلیفاتیک (کربن نوع دوم)
۲۶	$-\text{SO}_2-$		$=\text{X}$ اتم O^- ، N^- و...
۲۷	Al		$=\text{X}$ اتم Cl ، Br
۲۸	Ga		$=\text{X}$ اتم Cl
۲۹	In		$=\text{X}$ اتم Cl
۳۰	Nb		$=\text{X}$ اتم F
۳۱	Sb		$=\text{X}$ اتم F
۳۲	Ta		$=\text{X}$ اتم F

ادامه ی جدول (۱-۳)



لازم به تذکر است که برای تعیین مقدار هر گروه ساختاری به این صورت عمل گردید که، مقدار توصیف کننده وقتی که ترکیب مورد نظر فاقد گروه ساختاری معین بود، صفر، و زمانی که گروه ساختاری n بار در ترکیب ظاهر شده بود، n در نظر گرفته شد. به طور مثال، برای ترکیب ۱-پروپیل-۳-متیل ایمیدازولیوم هگزا فلئورو فسفات، $[Prmim][PF_6]$ ، که ساختار آن در شکل (۱-۳) نشان داده شده است، تعداد هر یک از گروه های ساختاری مولکول به این صورت خواهد بود:



شکل (۱-۳): ۱-پروپیل-۳-متیل ایمیدازولیوم هگزا فلئورو فسفات

- | | |
|----------------------------------|---------------------------------|
| تعداد گروه $[>N^+=\text{R}] = ۱$ | تعداد گروه $[-CH_2-] = ۲$ |
| تعداد اتم $[P] = ۱$ | تعداد گروه $[-CH_3] = ۲$ |
| تعداد اتم $[F] = ۶$ | تعداد گروه $[=CH-\text{R}] = ۳$ |
| | تعداد گروه $[>N-\text{R}] = ۱$ |

با توجه به این که توصیف کننده های حاصل از روش سهم گروه به صورت ورود اجباری به شبکه داده می شوند لذا نمی توان هیچکدام از آن ها را حذف نمود و بهترین توصیف کننده ها را انتخاب کرده، در

این حالت فقط با استفاده از روش مرتب سازی CR^۱، ترتیب قرار گیری توصیف کننده‌ها در ماتریس ورودی تعیین می‌شود. منظور از مرتب‌سازی CR این است که همبستگی توصیف کننده‌ها با خاصیت مورد نظر، یعنی دانسیته، تعیین شده و سپس توصیف کننده‌ها به ترتیب کاهشی این مقدار در ماتریس ورودی مرتب شوند. محاسبات مربوط به مرتب‌سازی CR توسط نرم افزار SPSS انجام گردید و مقادیر همبستگی توصیف کننده‌های حاصل از روش سهم گروه بعلاوه‌ی دما و فشار با دانسیته در جدول (۲-۳) ارائه شده است.

^۱ Correlation ranking (CR)

جدول (۲-۳): مقادیر همبستگی توصیف‌کننده‌های روش GCM با دانسیته

شماره‌ی گروه	۱	۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۹	۱۰	۱۱	۱۲	۱۳	۱۴	۱۵	۱۶	۱۷
توصیف‌گر	CH _۲	F	CH _۲	-SO _۲ -	C	P	-N®	-N	COO	N=®	=CH®	-NH _۲	-CN	CH _۲ ®	Cl	-OH	CH
ضریب همبستگی	-۰/۷۵۸	۰/۶۸۴	-۰/۶۷۲	-۰/۶۴۹	۰/۵۹۵	-۰/۵۸۰	۰/۵۶۰	۰/۵۳۶	-۰/۵۰۵	۰/۴۳۳	۰/۴۰۱	-۰/۲۵۰	-۰/۲۳۶	۰/۲۱۹	-۰/۱۶۳	-۰/۱۵۹	-۰/۱۳۵

ادامه‌ی جدول (۲-۳)

شماره‌ی گروه	۱۸	۱۹	۲۰	۲۱	۲۲	۲۳	۲۴	۲۵	۲۶	۲۷	۲۸	۲۹	۳۰	۳۱	۳۲	۳۳	۳۴	۳۵
توصیف‌گر	Br	W	C®	Ta	-CH®	-SH	فشار	S	Sb	Al	دما	B	Nb	In	Ga	I	-O	=O
ضریب همبستگی	۰/۱۱۸	۰/۱۰۲	۰/۱۰۰	۰/۰۹۲	-۰/۰۸۷	-۰/۰۷۴	۰/۰۶۷	۰/۰۶۴	۰/۰۶۰	-۰/۰۵۵	-۰/۰۵۲	-۰/۰۴۴	۰/۰۴۱	۰/۰۳۰	۰/۰۱۹	۰/۰۱۸	۰/۰۰۹	-۰/۰۰۱

۳-۳- دسته‌بندی داده‌ها

در این مرحله، نقطه داده‌های جمع آوری شده از مراجع مختلف برای ۱۸۸ مایع یونی که برابر با ۳۱۰۷ نقطه می‌باشد، به طور تصادفی به سه دسته‌ی آموزش (۲۲۷۰ نقطه)، ارزیابی (۴۱۹ نقطه) و تست (۴۱۸ نقطه) تقسیم‌بندی شدند.

۳-۴- بهینه‌سازی مدل شبکه‌ی عصبی مصنوعی با استفاده از توصیف‌کننده‌های

حاصل از روش سهم گروه‌ها (GCM-ANN)

۳۳ توصیف‌کننده‌ای که از روش سهم گروه به دست آمدند به همراه دو متغیر تجربی دما و فشار به عنوان ورودی به شبکه‌ی عصبی مصنوعی داده شدند. خروجی شبکه نیز دانسیته‌ی متناظر با ورودی‌ها را نشان می‌دهد. برای آموزش شبکه، دو الگوریتم آموزشی لورنبرگ-مارکوارت (lm) و تنظیم بایزین (br)، و برای انتخاب تابع انتقال مناسب، دو تابع انتقال تانژانت سیگموئید (tan sig) و لگاریتم سیگموئید (log sig) مورد استفاده قرار گرفتند که از ترکیب این دو الگوریتم و دو تابع انتقال، چهار نوع شبکه‌ی عصبی مختلف طراحی گردید. در هر یک از این شبکه‌ها باید تعداد نرون‌های لایه‌ی پنهان و تعداد دور آموزشی بهینه گردند که مقدار بهینه‌ی هر یک از این پارامترها زمانی است که میانگین مربع خطا (MSE) برای سری ارزیابی دارای کمترین مقدار باشد. برای بهینه‌سازی این دو پارامتر از روش تغییر هم‌زمان استفاده شد به این صورت که تعداد گره در لایه‌ی پنهان از ۲ تا ۱۰ با گام ۱ و تعداد دور آموزشی از ۱۰ تا ۱۰۰ با گام ۱۰ در نظر گرفته شدند و به ازای همه‌ی ترکیب‌های ممکن این دو پارامتر، چهار شبکه‌ی عصبی مصنوعی طراحی شده آموزش داده شدند. نتایج حاصل از این محاسبات، برای سری ارزیابی در جداول (۳-۳) تا (۳-۶) ارائه شده است. در هر یک از چهار شبکه‌ی طراحی شده، شبکه‌ی دارای کمترین مقدار MSE برای سری ارزیابی، به عنوان شبکه‌ی بهینه انتخاب گردید.

جدول (۳-۳): مقادیر MSE سری ارزیابی برای شبکه‌ی GCM-ANN با الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین و تابع انتقال لگاریتم سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت

		تعداد گره لایه‌ی پنهان								
		۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۹	۱۰
دور آموزشی	۱۰	۵۰/۱۳۷۱	۱۰۲/۹۹۳	۸۴/۲۴۱	۱۰۰/۶۹۸	۱۶۸/۵۱۴	۱۱۶/۴۷۷	۲۰/۳۵۲	۷۶/۷۱۶	۸۲/۷۴۶
	۲۰	۳۱۹/۴۴۱	۳۹/۶۶۱	۴۰/۳۱۷	۳۸/۸۶۲	۴۲/۳۲۷	۴۱/۸۰۳	۳۷/۴۱۴	۴۰/۹۳۷	۳۷/۹۷۹
	۳۰	۱۸۶/۴۰۴	۳۵/۵۱۷	۳۷/۸۸۵	۳۴/۱۲۵	۳۵/۳۹۸	۳۴/۴۶۶	۲۲/۶۳۰	۳۵/۱۵۶	۳۳/۶۵۶
	۴۰	۸۷/۲۷۱	۳۵/۲۸۹	۳۶/۸۵۵	۳۲/۰۶۳	۳۳/۶۸۷	۳۲/۴۵۰	۳۱/۷۰۰	۳۲/۵۴۳	۳۱/۲۹۲
	۵۰	۲۰/۸۳۹	۳۴/۷۰۲	۳۵/۴۹۴	۳۰/۸۵۰	۲۷/۹۵۲	۳۱/۳۸۳	۳۰/۸۰۹	۳۱/۰۴	۳۰/۱۴۳
	۶۰	۸۳/۷۴۹	۳۴/۲۱۷	۳۰/۰۸۳	۳۰/۴۷۴	۱۵/۶۳۱	۲۹/۹۶۸	۱۹/۹۵۳	۲۰/۰۱۳	۲۹/۵۷۵
	۷۰	۸۳/۵۱۰	۳۳/۸۵۲	۲۸/۹۸۷	۳۰/۳۵۱	۲/۷۶۰	۲۸/۵۵۸	۲۹/۲۱۶	۱۹/۰۱۱	۱۸/۸۵۳
	۸۰	۸۳/۵۴۷	۳۳/۳۴۵	۲۸/۴۴۷	۳۰/۱۷۳	۹/۴۰۴	۲۷/۵۶۱	۱۷/۱۷۵	۲۸/۰۵۶	۲۸/۰۱۸
	۹۰	۸۳/۵۱۰	۸/۳۲۳	۷/۰۸۵	۲۹/۹۵۹	۲۵/۸۳۲	۲۶/۹۲۲	۱۱/۷۸۷	۱۷/۳۳۸	۱۲/۴۱۰
	۱۰۰	۸۳/۵۱۰	۳۳/۳۷۴	۲۸/۴۶۴	۶/۹۳۷	۸/۵۵۹	۱۲/۵۶۳	۲۶/۶۰۹	۲۶/۹۷۳	۲۷/۰۱۶

جدول (۴-۳): مقادیر MSE سری ارزیابی برای شبکه‌ی GCM-ANN با الگوریتم آموزشی لورنبرگ-مارکوات و تابع انتقال لگاریتم سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت

		تعداد گره لایه‌ی پنهان								
		۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۹	۱۰
دور آموزشی	۱۰	۷۱۱/۶۸۹	۵۰/۲۵۷	۸۹/۰۲۶	۵۲/۹۶۵	۳۱/۵۱۱	۶۸/۶۰۴	۵۲/۵۲۰	۱۱۶/۸۴۶	۵۴۷/۰۰۷
	۲۰	۵۵۳/۹۲۷	۱۷۰/۳۶۶	۲۳/۵۴۱	۲۸/۳۳۸	۱۵/۱۳۶	۹۹/۷۷۳	۲۳۴/۱۸۰	۴۱/۳۴۲	۷۴۸/۴۵۵
	۳۰	۴۱۳/۱۳۵	۱۲۰/۸۸۷	۲۳/۴۸۱	۳۰/۴۸۳	۱۴/۱۶۱	۷۷/۰۳۶	۹۸/۳۴۶	۳۴/۳۰۸	۲۷۰/۶۸۴
	۴۰	۷۶۷/۶۹۲	۴۷/۸۱۱	۱۴/۶۶۸	۲۹/۹۱۹	۳۲/۶۸۸	۷۰/۴۴۷	۱۲۵/۶۰۳	۳۲/۰۹۰	۱۲۴/۳۶۴
	۵۰	۱۸۲/۲۲۷	۵۷/۶۰۶	۱۴/۲۲۷	۱۹/۳۱۹	۲۴/۴۹۸	۶۷/۳۲۸	۱۵۶/۳۴۳	۱۸/۰۱۸	۱۵۶/۷۴۴
	۶۰	۱۲۹/۲۱۸	۴۷/۰۸۶	۲۴/۳۳۶	۹/۰۸۹	۲۲/۶۶۲	۶۲/۶۰۴	۹۶/۶۰۵	۲۷/۷۰۹	۱۰۵/۳۶۲
	۷۰	۱۰۹/۲۱۳	۱۷۶/۱۴۰	۳۴/۳۶۴	۱۸/۸۶۴	۲۹/۱۴۷	۴۲/۷۲۷	۸۷/۳۱۶	۱۵/۹۳۸	۹۲/۸۸۱
	۸۰	۹۹/۲۱۴	۷۵/۳۴۴	۱۴/۳۶۵	۲۰/۰۶۳	۲۹/۲۰۶	۳۵/۳۵۶	۲۵۷/۲۹۹	۶/۲۳۷	۵۲/۹۸۳
	۹۰	۶۹/۲۱۶	۴۷/۸۷۹	۱۴/۳۰۱	۱۶/۹۴۶	۲۷/۵۹۵	۲۷/۶۹۳	۱۵۷/۲۹۶	۲۴/۹۴۸	۴۴/۰۰۳
	۱۰۰	۲۹/۲۲۴	۲۷/۸۴۸	۱۲/۲۴۴	۶/۶۷۵	۲۸/۵۵۵	۱۷/۸۵۴	۱۰۷/۲۹۶	۲۴/۸۸۰	۳۶/۸۲۷

جدول (۳-۵): مقادیر MSE سری ارزیابی برای شبکه‌ی GCM-ANN با الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین و تابع انتقال تانژانت سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت

		تعداد گره لایه‌ی پنهان								
		۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۹	۱۰
دور آموزشی	۱۰	۳۶۵/۴۸۰	۷۲/۳۴۶	۱۰۸/۴۸۵	۹۷/۲۴۷	۱۵۳/۳۱۱	۱۳۱/۳۳۹	۴۲/۵۷۹	۸۳/۶۴۹	۷۵/۷۱۲
	۲۰	۱۴۵/۰۴۰	۵۴/۵۸۱	۴۷/۵۷۲	۱۳۶/۲۰۸	۳۱/۸۶۰	۳۴/۷۹۳	۳۱/۷۳۵	۴۴/۷۸۵	۳۴/۴۰۷
	۳۰	۲۵۱/۸۲۹	۴۸/۵۴۷	۴۵/۸۶۶	۳۴/۰۰۱	۲۹/۳۸۴	۲۸/۲۴۸	۲۷/۰۳۹	۲۹/۸۸۸	۲۸/۱۱۵
	۴۰	۸۲/۱۵۹	۴۳/۶۳۶	۳۷/۹۹۴	۳۰/۳۰۳	۱۷/۳۳۰	۴۶/۱۶۱	۲۶/۳۳۴	۲۶/۲۹۱	۴۵/۹۴۳
	۵۰	۵۴/۶۸۸	۸/۵۸۰	۴۱/۷۹۶	۲۷/۶۸۵	۴۶/۷۲۵	۲۵/۳۰۸	۱۶/۲۸۷	۱۵/۷۷۵	۱۴/۱۴۶
	۶۰	۴۸/۰۸۷	۳۵/۵۴۵	۳۵/۵۴۵	۶/۸۶۴	۲۷/۰۷۱	۳۵/۰۰۰	۵۵/۹۴۳	۵۵/۳۷۶	۲۴/۰۴۶
	۷۰	۱۱/۵۰۶	۳۶/۳۳۵	۲۵/۲۰۵	۲۷/۴۷۰	۲۶/۶۴۸	۲۴/۵۵۹	۱۵/۳۳۰	۲۴/۸۵۴	۳۴/۰۷۱
	۸۰	۴۶/۰۹۰	۳۶/۳۶۳	۴۶/۱۳۷	۲۷/۵۳۶	۲۵/۸۶۶	۱۴/۴۹۰	۲۴/۴۱۹	۴۴/۶۸۷	۱۳/۹۶۲
	۹۰	۴۶/۰۹۹	۳۶/۳۶۴	۳۶/۳۶۳	۱۷/۶۳۸	۱۵/۳۷۴	۲۴/۶۴۱	۵/۸۹۵	۹۴/۵۵۰	۸۳/۸۲۶
	۱۰۰	۴۶/۱۰۰	۲۶/۳۶۴	۳۵/۷۹۶	۲۷/۷۵۴	۶/۲۸۲	۲۴/۷۴۰	۲۳/۵۸۲	۲۴/۴۶۱	۲۳/۷۲۵

جدول (۳-۶): مقادیر MSE سری ارزیابی برای شبکه‌ی GCM-ANN با الگوریتم آموزشی لورنبرگ-مارکوات و تابع انتقال تانژانت سیگموئید با تعداد گره و دور آموزشی متفاوت

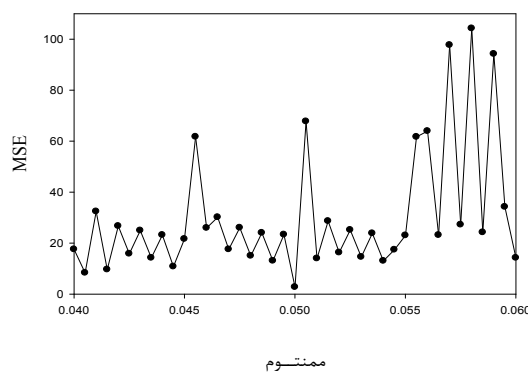
		تعداد گره لایه‌ی پنهان								
		۲	۳	۴	۵	۶	۷	۸	۹	۱۰
دور آموزشی	۱۰	۲۱۱/۶۷۰	۸۴/۷۵۴	۶۹۱/۸۳۲	۹۱/۲۳۷	۱۱۱/۹۳۳	۴۸۳/۰۲۳	۴۱۰/۳۷۶	۳۱/۹۴۰	۴۷/۰۹۶
	۲۰	۴۰۸/۹۵۸	۱۸۰/۵۱۶	۳۳۰/۳۴۰	۴۷/۸۵۷	۳۶۱/۹۱۷	۱۰۸/۰۲۲	۱۷۰/۷۷۸	۱۶/۵۹۴	۱۱/۷۸۲
	۳۰	۳۱۲/۹۵۶	۲۸۰/۷۵۲	۱۲۶/۳۲۸	۳۹/۵۸۹	۵۴۴/۳۸۵	۱۴۹/۸۹۴	۱۰۰/۴۰۵	۲۲۵/۶۸۳	۳۲/۷۴۱
	۴۰	۱۰۱/۹۴۰	۷۰/۴۹۹	۲۱/۷۸۱	۱۸/۸۹۶	۱۰۰/۶۷۶	۴۸/۸۸۰	۹۹/۴۶۰	۲۰۵/۱۰۶	۱۸/۱۱۰
	۵۰	۹۱/۹۸۶	۱۰۰/۸۲۷	۶۴/۲۸۵	۱۸۳/۲۸۳	۹۸/۳۳۲	۱۵۰/۳۱۱	۲۲/۶۸۹	۱۶/۲۷۱	۱۶/۵۴۳
	۶۰	۵۱۱/۸۵۴	۱۲۰/۶۸۷	۳۲/۳۰۹	۱۰۹/۳۰۰	۲۲/۵۳۳	۵۲/۹۶۹	۱۵/۲۳۱	۳۵/۱۷۹	۳۶/۵۹۳
	۷۰	۹۱/۶۰۳	۱۸۰/۶۶۴	۹۸/۳۸۹	۱۵۸/۳۵۰	۱۳/۹۴۲	۱۵/۷۴۱	۴۵/۲۵۱	۵۵/۲۵۱	۲۵/۹۲۰
	۸۰	۳۱۱/۵۵۶	۲۰/۲۴۸	۳۴/۸۳۳	۲۴۶/۰۶۴	۲۱/۰۰۱	۱۲/۱۰۰	۲۵/۴۸۳	۲۵/۳۴۹	۵۵/۳۶۹
	۹۰	۵۲/۸۶۳	۸۰/۰۳۱	۳۳۴/۳۹۱	۳۱/۲۷۱	۲۱۴/۰۵۷	۱۴۸/۱۴۱	۱۰۵/۶۱۱	۹۵/۴۵۸	۴/۶۱۲
	۱۰۰	۲۱۱/۵۱۱	۲۸۰/۹۹۹	۱۲۱/۹۷۰	۱۳۱/۱۰۶	۱۱۴/۱۱۷	۷۱/۶۰۳	۹۵/۷۸۱	۲۵/۵۱۱	۲۴/۹۴۸

مقادیر بهینه‌ی پارامترهای شبکه‌های طراحی شده در جدول (۷-۳) گزارش شده است. نتایج موجود در این جدول نشان می‌دهد که شبکه‌ای با الگوریتم آموزشی تنظیم بایزین، تابع انتقال لگاریتم سیگموئید (log sig) با تعداد ۶ نرون در لایه‌ی پنهان و ۷۰ دور آموزشی، دارای کمترین مقدار MSE برای سری ارزیابی است. در نتیجه شبکه‌ای با این مشخصات به عنوان شبکه‌ی بهینه برای پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی در گستره‌ی وسیعی از دما و فشار انتخاب گردید.

جدول (۷-۳): توابع و پارامترهای شبکه‌های عصبی مصنوعی مختلف با استفاده از توصیف‌کننده‌های حاصل از روش سهم گروه

شماره‌ی مدل	۱	۲	۳	۴
تابع آموزش	Train br	Train lm	Train br	Train lm
تابع انتقال لایه‌ی پنهان	log sig	log sig	Tan sig	Tan sig
تعداد نرون لایه‌ی پنهان	۶	۹	۸	۱۰
تعداد دورهای آموزش	۷۰	۸۰	۹۰	۹۰
MSE	۲/۷۶۰	۶/۲۳۷	۵/۸۹۵	۴/۶۱۲

در مرحله‌ی بعد برای تعیین مقدار بهینه‌ی μ ، با استفاده از شبکه‌ی بهینه، مقدار μ از ۰/۰۰۰۵ تا ۰/۱ با گام ۰/۰۰۰۵ تغییر داده شد و بر اساس کمترین مقدار MSE برای هر گام، مقدار بهینه‌ی μ ، ۰/۰۵ بدست آمد. نمودار مقدار میانگین مربعات خطا بر حسب μ حول نقطه‌ی بهینه در شکل (۲-۳) رسم شده است.



شکل (۲-۳): نمودار میانگین مربعات خطا، MSE، برای سری ارزیابی بر حسب تغییرات ممتموم حول نقطه‌ی بهینه

توابع و مقادیر پارامترهای بهینه شده‌ی شبکه‌ی عصبی با توصیف‌کننده‌های روش سهم گروه (GCM-ANN) برای پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی در جدول (۳-۸) ارائه شده است.

جدول (۳-۸): توابع و پارامترهای بهینه شده‌ی شبکه‌ی عصبی با استفاده از توصیف‌کننده‌های سهم گروه

trainbr	تابع آموزش
tansig	تابع انتقال لایه‌ی پنهان
۶	تعداد نرون لایه‌ی پنهان
۷۰	تعداد دوره‌های آموزش
۰/۰۵۰	پارامتر μ
۲/۷۶۰۰	مقدار MSE سری ارزیابی

۳-۵- بهینه‌سازی ماشین بردار پشتیبان با استفاده از توصیف‌کننده‌های حاصل

از روش سهم گروه‌ها (GCM-SVM)

روش غیرخطی دیگر برای پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی، 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 بردار پشتیبان باید پارامترهای آن شامل تابع حساسیت و پنیایک، پارامتر موازنه‌ی C و پارامتر کرنل بهینه گردند. بنابراین تابع حساسیت و پنیایک در بازه‌ی ۰/۰۰۱ تا ۰/۱، پارامتر موازنه‌ی C در بازه‌ی ۱۰۰۰ تا ۱۰۰۰۰۰۰ و پارامتر کرنل در بازه‌ی ۰/۰۰۰۱ تا ۰/۰۱ انتخاب گردیدند. لازم به ذکر است که در ماشین بردار پشتیبان 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 از این بررسی در جدول (۳-۹) گزارش شده است.

جدول (۳-۹): مقادیر بهینه‌سازی پارامترهای GCM-SVM

تابع حساسیت وپنایک	پارامتر موازنه‌ی C	پارامتر کرنل	MSE
۰/۱	۱۰۰۰	۰/۰۱	۳۴۳/۵
۰/۱	۱۰۰۰	۰/۰۰۵۵	۳۲۵/۲۷۸۰
۰/۱	۱۰۰۰	۰/۰۰۱۰	۳۰۳/۰۰۲۰
۰/۱	۱۰۰۰	۰/۰۰۰۵	۳۲۸/۰۰۰۱
۰/۱	۱۰۰۰	۰/۰۰۰۱	۳۶۷/۰۲۳۰
۰/۱	۱۰۰۰	۰/۰۰۱	۳۰۳/۰۰۲۰
۰/۰۶	۱۰۰۰	۰/۰۰۱	۲۸۱/۱۸۴۰
۰/۰۱	۱۰۰۰	۰/۰۰۱	۱۱۰/۸۷۵۰
۰/۰۰۵۵	۱۰۰۰	۰/۰۰۱	۱۹۰/۱۰۱۰
۰/۰۰۱۰	۱۰۰۰	۰/۰۰۱	۲۶۶/۰۹۴۰
۰/۰۱	۱۰۰۰	۰/۰۰۱	۱۱۰/۸۷۵۰
۰/۰۱	۲۰۰۰۰	۰/۰۰۱	۲۹/۱۳۷۲
۰/۰۱	۴۲۰۰۰۰	۰/۰۰۱	۱/۷۳۴۰
۰/۰۱	۷۰۰۰۰۰	۰/۰۰۱	۴/۰۶۵۱
۰/۰۱	۱۰۰۰۰۰۰	۰/۰۰۱	۴/۵۷۱۴

نتایج جدول (۳-۹) نشان می‌دهد که ماشین بردار پشتیبان با مقادیر ۰/۰۱، ۴۲۰۰۰۰ و ۰/۰۰۱ به ترتیب برای تابع حساسیت وپنایک، پارامتر موازنه‌ی C و پارامتر کرنل، به عنوان ماشین بهینه برای پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی می‌باشد.

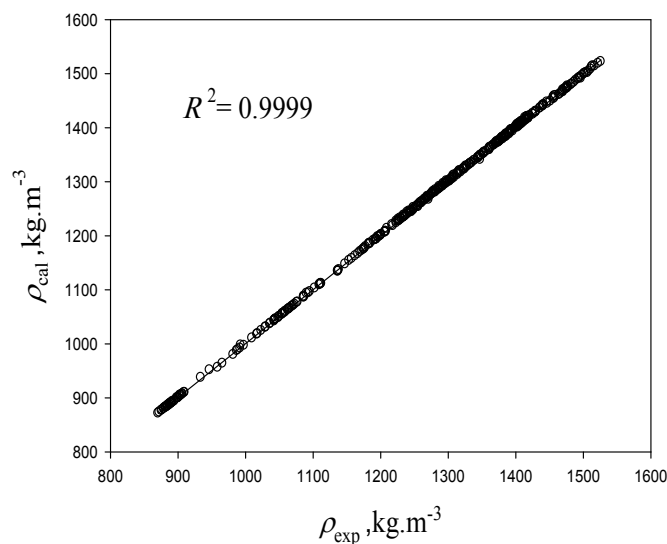
۳-۶- ارزیابی مدل‌ها

در بخش‌های (۳-۴) و (۳-۵)، مدل‌های غیرخطی بهینه‌ی GCM-ANN و GCM-SVM برای پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی به دست آمدند. ورودی این مدل‌ها، توصیف‌کننده‌هایی بود که با

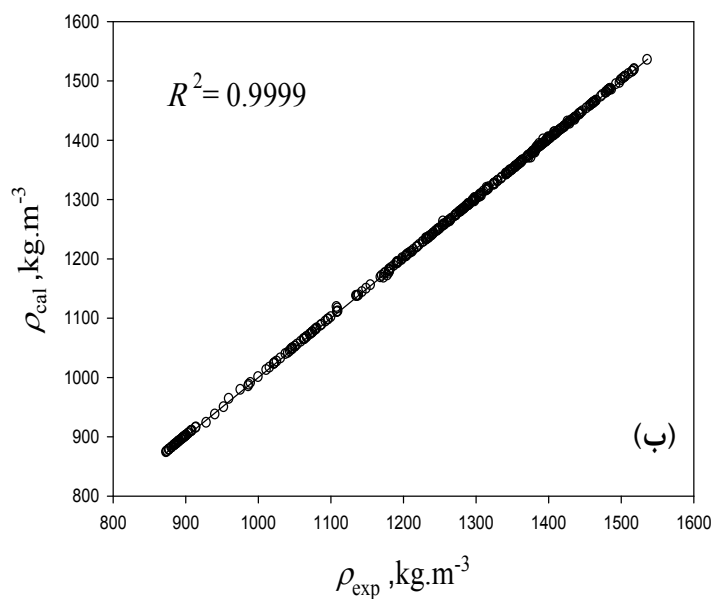
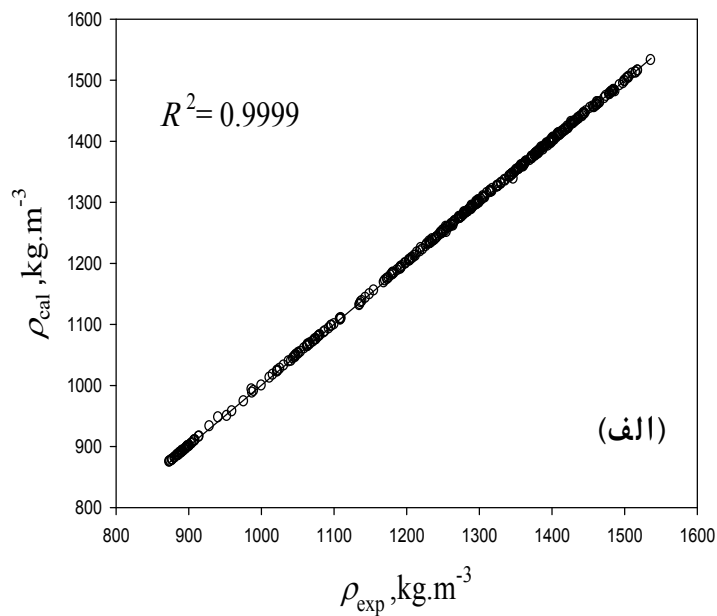
روش سهم گروه انتخاب شده بودند. در این بخش، توانایی مدل‌های بهینه در پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی با استفاده از روش‌های مختلف مورد بررسی قرار می‌گیرند که در ادامه نتایج حاصل از این بررسی‌ها گزارش شده است.

۳-۶-۱- ارزیابی مدل‌ها با استفاده از نمودار برگشت

در نمودار برگشت، مقادیر پیش‌بینی شده‌ی دانسیته بر حسب مقادیر تجربی آن رسم می‌شود و سپس مقدار ضریب تعیین (R^2) محاسبه می‌شود. هر چه مقدار ضریب تعیین به یک نزدیک‌تر باشد، مدل ساخته شده، مدل بهتری است. نمودارهای برگشت برای سری ارزیابی و سری تست برای هر روش در نمودارهای (۳-۳) و (۴-۳) نشان داده شده است. لازم به ذکر است که مقادیر پیش‌بینی شده‌ی سری تست دانسیته، توسط دو روش GCM-ANN و GCM-SVM به همراه مقادیر واقعی مربوطه در جدول (پ-۲) در بخش پیوست گزارش شده است.



شکل (۳-۳): نمودار برگشت حاصل از روش GCM-ANN برای سری ارزیابی

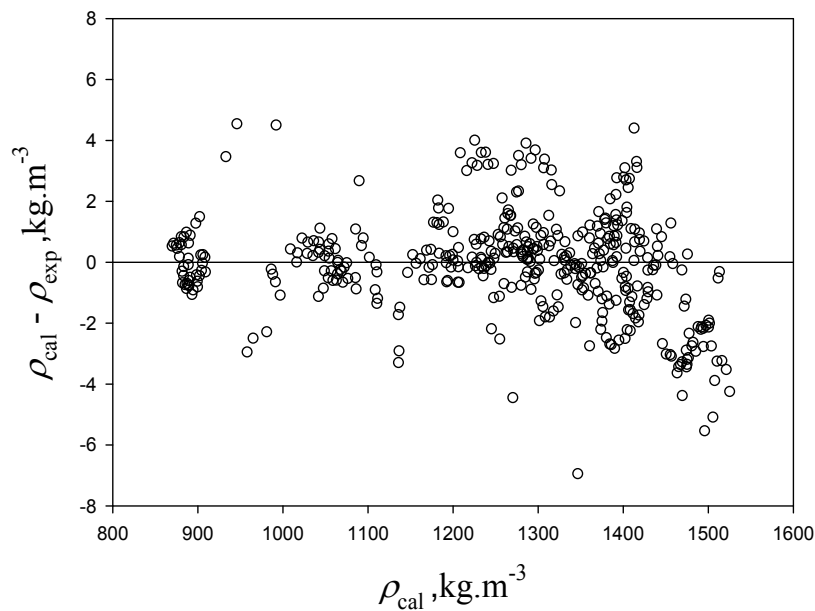


شکل (۳-۴): نمودار برگشت برای سری تست، حاصل از روش‌های (الف) GCM-ANN و (ب) GCM-SVM

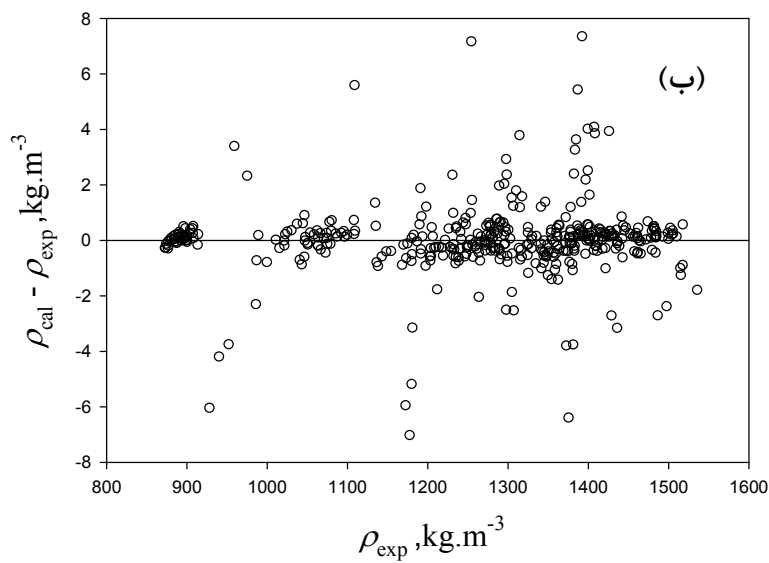
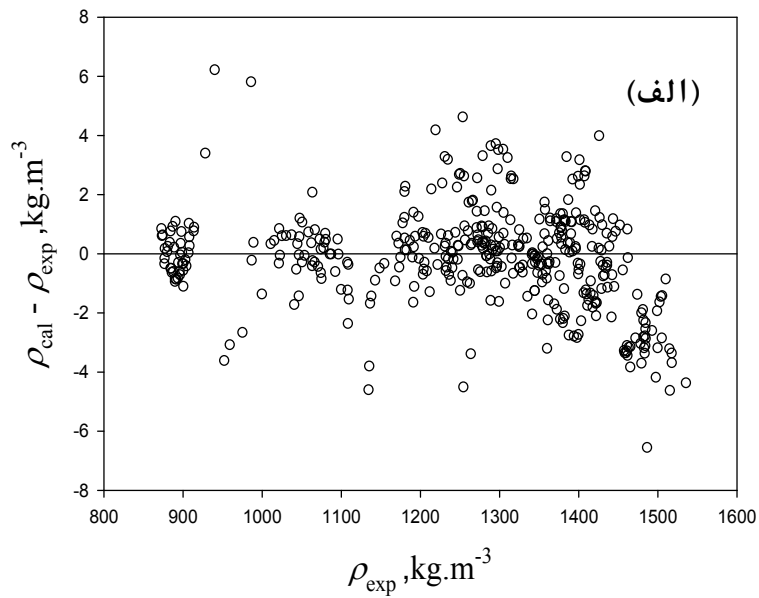
همان طور که در این شکل‌ها مشاهده می‌شود، ضریب تعیین، R^2 ، بدست آمده برای تمام ترکیبات مورد بررسی در هر دو روش نزدیک به یک است که این موضوع بر توافق بین مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط این دو روش با مقادیر تجربی دلالت دارد.

۳-۶-۲- 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 سیستماتیکی در مدل‌سازی وجود ندارد. نمودار خطای باقیمانده بر حسب مقادیر تجربی، برای مدل‌های غیر خطی بهینه‌ی شبکه‌ی عصبی مصنوعی و ماشین بردار پشتیبان در شکل‌های (۳-۵) و شکل (۳-۶)، نشان داده شده است.



شکل (۳-۵): نمودار خطای باقی‌مانده، حاصل از روش GCM-ANN برای سری ارزیابی



شکل (۳-۶): نمودار خطای باقی مانده برای سری تست، حاصل از روش‌های (الف) GCM-ANN و (ب) GCM-SVM

همان طور که در شکل (۳-۶-ب) مشاهده می‌شود حدود ۸۵٪ نقاط دارای $\pm 1 \text{ kg.m}^{-3}$ خطای باقی مانده هستند. هر چند بعضی از نقاط $\pm 7 \text{ kg.m}^{-3}$ با مقدار واقعی اختلاف دارند، این در حالیست که در شکل (۳-۶-الف) ۸۵٪ نقاط خطای باقی مانده، در محدوده‌ی kg.m^{-3} -۳ تا +۳ قرار دارند. این نتایج نشان می‌دهد که مدل GCM-SVM قدرت تعمیم بهتری دارد.

۳-۶-۳- ارزیابی مدل‌ها با استفاده از پارامترهای آماری

پارامترهای آماری برای مدل‌های غیرخطی ساخته شده برای سری ارزیابی و سری تست محاسبه و نتایج در جدول (۱۰-۳) گزارش شده است.

جدول (۱۰-۳): جدول پارامترهای آماری روش‌های GCM-ANN و GCM-SVM برای سری تست و سری ارزیابی

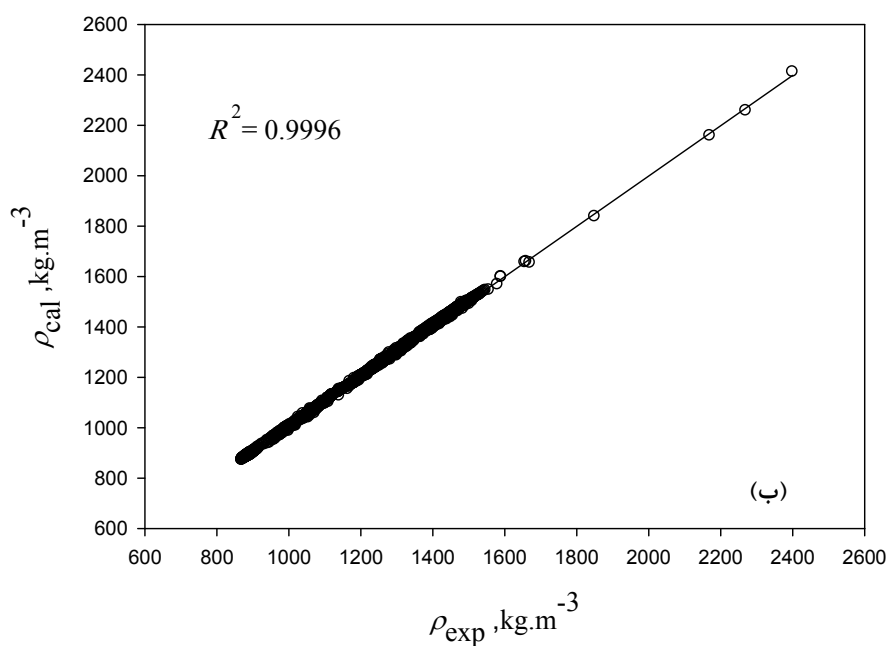
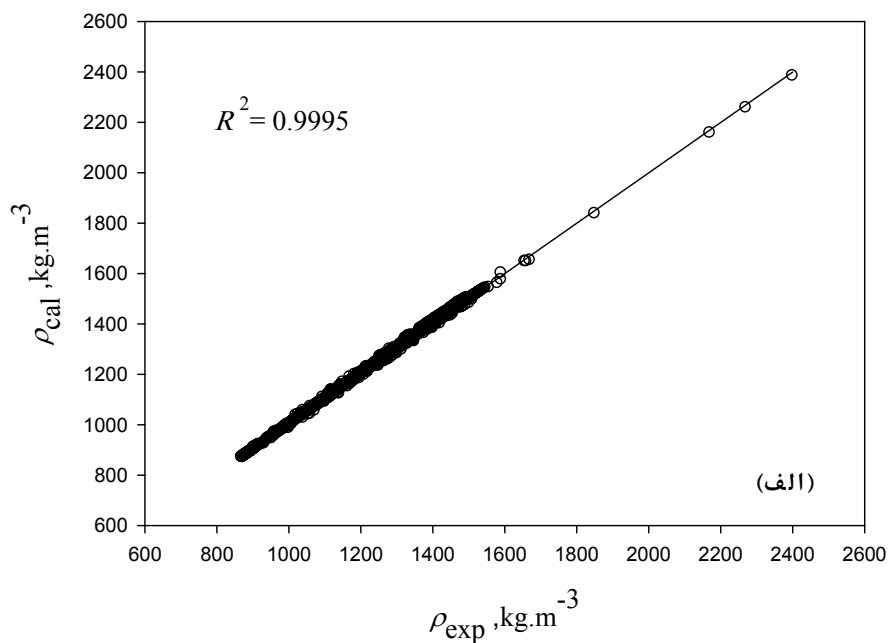
		GCM-ANN	GCM-SVM
R ^۲	سری تست	۰/۹۹۹۹	۰/۹۹۹۹
	سری ارزیابی	۰/۹۹۹۹	-
MSE	سری تست	۳/۰۱۰۲	۱/۷۳۴۰
	سری ارزیابی	۲/۷۶۰۰	-
AAD	سری تست	۰/۰۹	۰/۰۵
	سری ارزیابی	۰/۰۹	-
SEP	سری تست	۱/۷۳۴۹	۱/۳۱۶۸
	سری ارزیابی	۱/۶۶۱۳	-
MAE	سری تست	۱/۲۳۱۵	۰/۷۳۲۷
	سری ارزیابی	۱/۱۹۷۷	-
Bias	سری تست	-۰/۰۱۰۹	-۰/۰۰۱۲۴۱
	سری ارزیابی	-۰/۰۰۴۷۴۶	-
D _{max}	سری تست	۰/۶۹۲۹۰	۰/۴۴۲۵۰
	سری ارزیابی	۰/۵۱۷۶۰	-

همان‌طور که از جدول قابل مشاهده می‌باشد از ۷ پارامتر آماری ذکر شده برای هر دو روش، مقدار همه‌ی پارامترهای آماری در سری تست برای روش GCM-SVM کمتر از روش GCM-ANN می‌باشد، که این نتایج نیز برتری مدل GCM-SVM را نشان می‌دهد.

۳-۶-۴- ارزیابی مدل‌ها با استفاده از روش رد مرحله‌ای تک تک داده‌ها (LOO)

در این پایان‌نامه، از روش LOO برای ارزیابی مدل‌های بهینه شده استفاده شده است. برای این منظور، در مدل‌های بهینه شده‌ی ANN و SVM، هر بار فقط یکی از نقاط در سری تست قرار

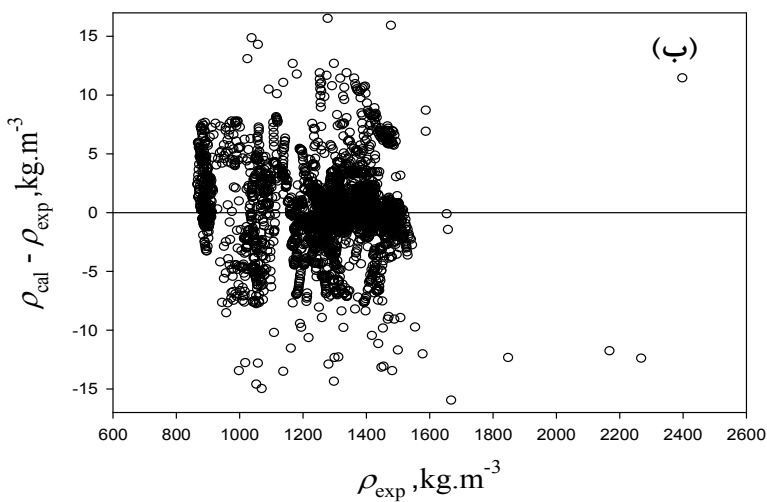
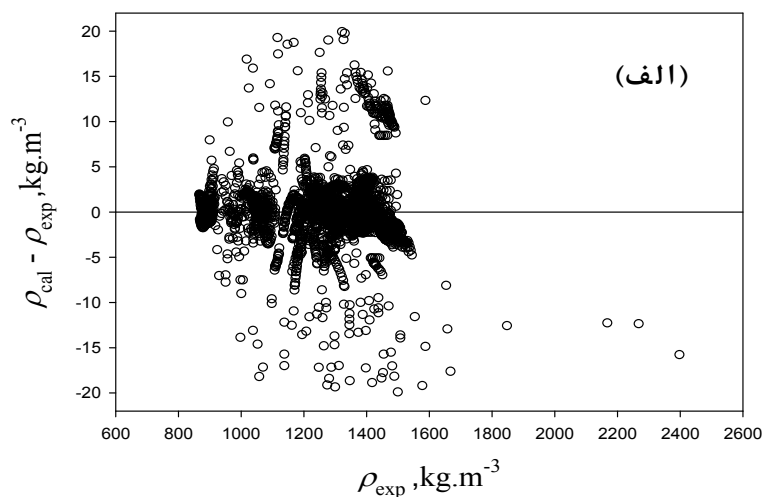
می‌گیرد و سایر نقاط همگی در سری آموزش قرار داده می‌شوند. سپس برنامه در نقطه‌ی بهینه‌ی مدل‌ها اجرا شده و نقطه‌ی مورد نظر در سری تست پیش‌بینی می‌گردد. در مرحله‌ی بعد نقطه‌ای که در سری تست قرار داشت به سری آموزش بازگردانده می‌شود و نقطه‌ی دیگری به عنوان سری تست انتخاب می‌شود و مراحل فوق دوباره تکرار می‌گردد. این کار تا جایی تکرار می‌شود که کل نقاط یک بار در سری تست قرار گیرند. نمودارهای برگشت حاصل از LOO برای کل نقاط در دو روش شبکه‌ی عصبی مصنوعی و ماشین بردار پشتیبان در نمودار (۷-۳) ترسیم شده است. همان طور که در این شکل مشاهده می‌شود مقدار R^2 برای هر دو مدل بسیار به یک نزدیک است که این امر بر توانایی هر دو مدل در پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی دلالت دارد



شکل (۷-۳): نمودار خطای باقی مانده برای روش GCM-ANN (الف) و GCM-SVM (ب)

همچنین نمودارهای خطای باقی مانده‌ی حاصل از روش LOO برای هر دو مدل بهینه شده نیز در شکل (۸-۳) نشان داده شده است. همان طور که در شکل مشاهده می‌شود در روش LOO خطای باقی مانده‌ی روش GCM-SVM $\pm 17 \text{ kg.m}^{-3}$ و برای GCM-ANN $\pm 22 \text{ kg.m}^{-3}$ می‌باشد، بعلاوه در

روش GCM-SVM ۸۵٪ نقاط در محدوده‌ی -۷ تا +۷ می‌باشد در حالی که روش GCM-ANN ۸۵٪ نقاط در بازه‌ی -۱۰ تا +۱۰ قرار دارند، که این امر نیز خود دلالت بر برتری روش GCM-SVM دارد.



شکل (۳-۸): نمودار برگشت برای روش (الف) GCM-ANN و (ب) GCM-SVM

و در آخر نیز پارامترهای آماری برای این دو روش محاسبه شدند. این پارامترها در جدول

(۳-۱۱) آورده شده‌اند.

جدول (۳-۱۱): جدول پارامترهای آماری روش‌های GCM-ANN و GCM-SVM برای آزمون LOO

	GCM-ANN	GCM-SVM
R^2	۰/۹۹۹۵	۰/۹۹۹۶
MSE	۱۶/۲۵۷۳	۱۲/۹۵۲۵
AAD	۰/۲۱	۰/۱۸
SEP	۴/۰۳۲۰	۳/۵۹۸۹
MAE	۲/۵۷۹۶	۲/۳۹۲۹
Bias	-۰/۰۰۹۱۳۴	-۰/۰۰۱۰۲۸
D_{max}	۱/۷۲۳۲۰	۱/۴۲۴

همچنین طبق این آزمون نیز تمام پارامترهای آماری محاسبه شده برای روش GCM-SVM نتایج بهتری را نشان دادند.

۳-۶-۵- ارزیابی مدل شبکه‌ی عصبی مصنوعی با استفاده از آزمون Y-تصادفی

این تکنیک ارزیابی با هدف بررسی هرگونه ارتباط تصادفی بین داده‌ها انجام می‌شود. در این آزمون مقادیر تصادفی از متغیر وابسته تولید می‌شود. سپس مدل بهینه شده با استفاده از ماتریس متغیرهای مستقل اصلی و مقادیر تصادفی از متغیر وابسته اجرا می‌شود. اگر در مدل اصلی هیچ‌گونه ارتباط تصادفی وجود نداشته باشد، تفاوت قابل توجهی بین مقدار ضریب تعیین مدل اصلی و مدلی که با پاسخ‌های تصادفی توسعه یافته، وجود دارد. نتایج حاصل از چندین بار اجرای آزمون Y-تصادفی در جدول (۳-۱۲) نشان داده شده است. مقادیر کوچک ضریب تعیین، R^2 ، بیانگر عدم وجود ارتباط شانس‌ی یا وابستگی ساختاری به سری آموزش در مدل توسعه یافته توسط شبکه‌ی عصبی مصنوعی می‌باشد.

جدول (۳-۱۲): مقادیر R^2 بدست آمده با آزمون Y-تصادفی برای سری ارزیابی و سری تست روش GCM-ANN

شماره تکرار آزمون	GCM-ANN	
	R^2 ارزیابی	R^2 تست
۱	۰/۰۰۳۵	۰/۰۰۳۱
۲	۰/۰۰۸۸	۰/۰۰۵۴
۳	۰/۰۰۱۱	۰/۰۰۲۴
۴	۰/۰۰۴۴	۰/۰۰۷۵
۵	۰/۰۰۴۰	۰/۰۰۲۱
۶	۰/۰۰۲۷	۰/۰۰۰۱
۷	۰/۰۰۵۴۷	۰/۰۰۴۹
۸	۰/۰۰۳۲	۰/۰۰۰۷
۹	۰/۰۰۳۴۰	۰/۰۰۵۱۰
۱۰	۰/۰۰۳۶۲	۰/۰۰۰۲۷

۳-۷- نتیجه گیری

در این پایان نامه از دو روش غیر خطی شبکه‌ی عصبی مصنوعی و ماشین بردار پشتیبان برای مدل‌سازی دانسیته‌ی مایعات یونی در محدوده‌ی وسیعی از دما (۲۹۳ - ۴۱۴/۹۵ K) و فشار (۰/۱ - ۶۵/۰۱ MPa) استفاده گردید. نتایج مربوطه توانایی هر دو مدل را در پیش‌بینی دانسیته تأیید نمود. همچنین مقایسه‌ی پارامترهای آماری دو روش بیانگر کارایی بهتر ماشین بردار پشتیبان نسبت به شبکه‌ی عصبی مصنوعی در پیش‌بینی دانسیته‌ی این ترکیبات بود. قابل ذکر است که همان طور که در بخش (۴-۱) بیان شد، کمترین مقدار AAD برابر ۰/۴۴٪ در روش لازیوس برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱۶۴ مایع یونی برپایه‌ی ایمیدازولیوم در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار گزارش شده بود در حالی که در مدل‌های بهینه شده‌ی شبکه‌ی عصبی مصنوعی و ماشین بردار پشتیبان ارائه شده در این پایان نامه، این پارامتر به ترتیب برابر ۰/۲۱ و ۰/۱۸ برای ۱۸۸ مایع یونی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار بدست آمد، که این موضوع کارایی بهتر این دو روش غیر خطی را نسبت به روش لازیوس در پیش‌بینی دانسیته‌ی این ترکیبات بیان می‌کند.

۳-۸- آینده نگری

در تحقیق حاضر، توصیف‌کننده‌ها از طریق روش سهم گروه محاسبه و به عنوان ورودی به شبکه‌ی عصبی مصنوعی و ماشین بردار پشتیبان داده شدند. اما می‌توان از توصیف‌کننده‌های تجربی نیز که بر اساس ساختار بهینه شده‌ی مولکول‌ها بدست می‌آیند نیز در پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی بهره برد.

هم‌چنین از روش‌های دیگری مثل ماشین بردار ارتباط^۱ و بهینه‌سازی اجتماع مورچگان^۲ می‌توان به جای شبکه‌ی عصبی مصنوعی و ماشین بردار پشتیبان، برای مدل‌سازی غیر خطی استفاده کرد و نتایج حاصل از این روش‌ها با نتایج ارائه شده در این پایان‌نامه را مقایسه نمود.

^۱ Relevance vector machine (RVM)

^۲ Ant colony optimization

پیوست

جدول (پ-۱): نام آیوپاک، اسم اختصاری، محدوده‌ی دما و فشار و تعداد داده‌های استفاده شده برای مایعات یونی به همراه مرجع مورد استفاده‌ی آن‌ها در مدل‌سازی دانسیته‌ی این ترکیبات

نام آیوپاک	اسم اختصاری	$\Delta T(K)$	$\Delta P(MPa)$	تعداد نقاط	منابع
۱-methylimidazolium chloride	[mim][Cl]	۳۵۳	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-methylimidazolium hydrogensulfate	[mim][HSO _۴]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱,۳-di methylimidazolium dimethylphosphate	[dmim][DMPO _۴]	۳۰۳	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱,۳-di methylimidazolium methoxy ethylsulfate	[dmim][MOESO _۴]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱,۳-di methylimidazolium tetra chloroaluminate	[dmim][AlCl _۴]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۲]
۱,۳-di methylimidazolium chloride	[dmim][Cl]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium acetate	[emim][AC]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium heptafluorobutanoate	[emim][hb]	۲۹۵	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium hydrogensulfate	[emim][HSO _۴]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[emim][NTF _۲]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۰	۹۶	[۴۴]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium meyhylsulfonate	[emim][MeSo]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۵]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium methylsulfate	[emim][MeSO _۴]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۵	۸۰	[۴۶]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium ethylsulfate	[emim][EtSO _۴]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۵	۸۰	[۴۶]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[emim][Cf _۳ SO _۳]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۵	۹۱	[۴۷]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium tetra fluoroborate	[emim][BF _۴]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۰	۹۶	[۴۴]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium tetra chloroaluminate	[emim][AlCl _۴]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۸]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium chloride	[emim][Cl]	۲۹۵	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]

ادامہ ی جدول (پ-۱)

۱-ethyl-۳-methylimidazolium trifluoroacetate	[emim][ta]	۲۹۵-۲۹۸	-/۱۰۱	۲	[۴۱]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium dicyanamid	[emim][dca]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium ۱,۱,۲,۲-tetra fluoroethanesulfonate	[emim][TFES]	۳۰۱	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium bis(pentafluoroethylsulfonyl)imide	[emim][BEI]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium nonafluorobutanesulfonate	[emim][NFO]	۲۹۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium hexafluoroniohium	[emim][NbF۶]	۲۹۸/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۴۹]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium hexafluoroantimonate	[emim][SbF۶]	۲۹۸/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۴۹]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium hexafluorotantalum	[emim][TaF۶]	۲۹۸/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۴۹]
۱-ethyl-۳-methylimidazolium heptafluorotangstate	[emim][wfv]	۲۹۸/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۴۹]
۱-ethyl-۳,۵-dimethylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[edmim][CF۳SO۳]	۲۹۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-ethyl-۲,۳-dimethylimidazolium ethylsulfate	[edmim][EtSO۴]	۳۵۳	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-ethyl-۲,۳-dimethylimidazolium bis[(trifluoro)sulfonyl]imide	[edmim][NTF۲]	۲۹۳/۱۵-۲۹۸/۱۵	-/۱۰۱	۳	[۵۰]
۱,۳-diethylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[deim][NTF۲]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	-/۱-۳۵	۸۰	[۴۶]
۱,۳-diethylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[deim][CF۳SO۳]	۲۹۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱,۳-diethylimidazolium trifluoroacetate	[deim][ta]	۲۹۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱,۳-diethyl-۴-methylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[demim][NTF۲]	۲۹۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-propyl-۳-methylimidazolium bis[(trifluoro)sulfonyl]imide	[prmim][NTF۲]	۲۹۸/۱۵-۳۳۳/۱	-/۱-۵۹/۵۹	۱۶۵	[۵۱]



ادامہ ی جدول (پ-۱)

۱-propyl-۳-methylimidazolium tetrachloroaluminate	[Prmim][AlCl ₄]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۴۲]
۱-propyl-۳-methylimidazolium hexafluorophosphate	[Prmim][PF ₆]	۲۹۳	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-propyl-۲,۳-dimethylimidazolium bis[(trifluoro)sulfonyl]imide	[prdmim][NTF ₂]	۲۹۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۳-methylimidazolium chloride	[bmim][Cl]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۴۲]
۱-butyl-۳-methylimidazolium indiumchloride	[bmim][InCl ₄]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۵۲]
۱-butyl-۳-methylimidazolium hydrogensulfate	[bmim][HSO ₄]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۳-methylimidazolium ۱,۱,۲,۲-tetrafluoroethanesulfonate	[bmim][TFES]	۳۰۱	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۳-methylimidazolium hexafluorophosphate	[bmim][PF ₆]	۲۹۳-۴۱۴	۱-۴۰	۳۶	[۵۲]
۱-butyl-۳-methylimidazolium tetra fluoro borate	[bmim][BF ₄]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	-/۱-۱۰	۷۷	[۵۲]
۱-butyl-۳-methylimidazolium bis[(trifluoro)sulfonyl]imide	[bmim][NTF ₂]	۲۹۳-۴۱۴	۱-۴۰	۳۶	[۵۲]
۱-butyl-۳-methylimidazolium tricyanomethane	[bmim][C(Cn) ₃]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	-/۱-۳۰	۹۶	[۴۴]
۱-butyl-۳-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[bmim][CF ₃ SO ₃]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	-/۱-۱۰	۷۷	[۵۲]
۱-butyl-۳-methylimidazolium tetrachloroaluminate	[bmim][AlCl ₄]	۲۹۳/۱۵-۳۲۸/۱۵	-/۱۰۱	۱۵	[۵۴]
۱-butyl-۳-methylimidazolium methylsulfate	[bmim][MeSO ₄]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۳-methylimidazolium chlorogallate	[bmim][GaCl ₄]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۲۷]
۱-butyl-۳-methylimidazolium trifluoroacetate	[bmim][ta]	۲۹۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۳-methylimidazolium heptafluorobutanoate	[bmim][hb]	۲۹۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]

ادامہی جدول (پ-۱)

۱-butyl-۳-methylimidazolium acetate	[bmim][AC]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۳-methylimidazolium nonafluorobutanesulfonate	[bmim][NFO]	۲۹۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۳-methylimidazolium bis(oxalato)borate	[bmim][BOB]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۵۶]
۱-butyl-۳-methylimidazolium Iodide	[bmim][I]	۲۹۸/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۵۷]
۱-butyl-۲,۳-di methylimidazolium hexafluorophosphate	[bdmim][PF ₆]	۳۱۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	-/۱-۱۰	۶۳	[۵۳]
۱-butyl-۲,۳-di methylimidazolium tetrafluoroborate	[bdmim][BF ₄]	۳۰۰	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۲,۳-dimethylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[bdmim][NTF ₂]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۳-ethylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[beim][CF ₃ SO ₃]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۳-ethylimidazolium nonafluorobutanesulfonate	[beim][NFO]	۲۹۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۳-ethylimidazolium methylsulfonate	[beim][MeSo]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۳-ethylimidazolium trifluoroacetate	[beim][ta]	۲۹۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-butyl-۳-ethylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[beim][NTF ₂]	۲۹۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱,۳-dibutylimidazolium chloride	[dbim][CL]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۴۳]
۱,۳-dibutylimidazolium tetrachloroaluminate	[dbim][AlCl ₄]	۲۹۸	-/۱۰۱	۱	[۴۲]
۱,۳-dibutylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[dbim][CF ₃ SO ₃]	۳۰۳	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱,۳-dibutylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[dbim][NTF ₂]	۲۹۸/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۵۷]
۱-isobutyl-۳-methylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[i-bmim][NTF ₂]	۲۹۳-۲۹۵	-/۱۰۱	۲	[۵۵]

ادامہی جدول (پ-۱)

۱-pentyl-۳-methylimidazolium bis[(trifluoro)sulfonyl]imide	[pmim][NTF۲]	۲۹۸/۱۵-۳۳۳/۱۵	۰/۱- ۵۹/۵۹۰	۱۶۵	[۵۱]
۱-pentyl-۳-methylimidazolium hexafluorophosphate	[pmim][PF۶]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	۰/۱	۱۵	[۵۸]
۱-pentyl-۳-methylimidazolium bromide	[pmim][Br]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۵۹]
۱-hexyl-۳-methylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[hmim][NTF۲]	۲۹۳/۱۵-۳۳۸/۱۵	۰/۱-۶۵	۱۴۹	[۵۱]
۱-hexyl-۳-methylimidazolium hexafluorophosphate	[hmim][PF۶]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۱۰	۷۷	[۵۹]
۱-hexyl-۳-methylimidazolium chlorogallate	[hmim][GaCl۴]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۶۰]
۱-hexyl-۳-methylimidazolium tetrachloroaluminate	[hmim][AlCl۴]	۲۹۳/۱۵-۳۲۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱۵	[۵۴]
۱-hexyl-۳-ethylimidazolium hexafluorophosphate	[heim][PF۶]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]
۱-heptyl-۳-methylimidazolium bis[(trifluoro)sulfonyl]imide	[hpmim][NTF۲]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۰	۹۶	[۵۴]
۱-heptyl-۳-methylimidazolium hexafluorophosphate	[hpmim][PF۶]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	۰/۱	۱۵	[۵۸]
۱-heptyl-۳-methylimidazolium ۱,۱,۲,۲-tetrafluoroethanesulfonate	[hpmim][TFES]	۳۰۱	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۳-methyl-۱-octylimidazolium bis[(trifluoro)sulfonyl]imide	[omim][NTF۲]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۰	۹۶	[۴۴]
۳-methyl-۱-octylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[omim][CF۳SO۳]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۶۱]
۳-methyl-۱-octylimidazolium dicyanamid	[omim][dca]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۶۱]
۳-methyl-۱-octylimidazolium tetrafluoroborate	[omim][BF۴]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۱۰	۷۷	[۵۳]
۳-methyl-۱-octylimidazolium hexafluorophosphate	[omim][PF۶]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۱۰	۷۷	[۵۳]
۳-methyl-۱-octylimidazolium nonafluorobutanesulfonate	[Omim][NFO]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۶۱]

ادامہی جدول (پ-۱)

۳-methyl-۱-octylimidazolium tetrachloroaluminate	[omim][AlCl ₄]	۲۹۳/۱۵-۳۲۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱۵	[۵۴]
۳-ethyl-۱-octylimidazolium hexafluorophosphate	[oeim][PF ₆]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]
۱-octyl-۳-propylimidazolium hexafluorophosphate	[oprim][PF ₆]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]
۱-nonyl-۳-methylimidazolium hexafluorophosphate	[nmim][PF ₆]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	۰/۱	۱۵	[۵۸]
۱-nonyl-۳-methylimidazolium bis[(trifluoro)sulfonyl]imide	[nmim][NTF ₂]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]
۱-decyl-۳-methylimidazolium bis[(trifluoro)sulfonyl]imide	[c۱۰mim][NTF ₂]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۵	۸۰	[۴۶]
۱-decyl-۳-methylimidazolium tetrafluoroborate	[c۱۰mim][BF ₄]	۲۹۳-۲۹۸	۰/۱۰۱	۲	[۲۷]
۱-dodecyl-۳-ethylimidazolium ۱,۱,۲,۲-tetrafluoroethanesulfonate	[c۱۲mim][TFES]	۳۰۱	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-dodecyl-۳-ethylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[c۱۲mim][NTF ₂]	۲۹۳	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
۱-dodecyl-۳-ethylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[c۱۲eim][CF ₃ SO ₃]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-trifluoroethyl-۳-methylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[tfemim][NTF ₂]	۲۹۳-۲۹۵	۰/۱۰۱	۲	[۲۷]
methoxymethyl-۳-methylimidazolium tetrafluoroborate	[mommim][BF ₄]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]
Methoxymethyl-۳-methylimidazolium hexafluorophosphate	[mommim][PF ₆]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]
۱-methoxy ethyl-۳-methylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[moemim][NTF ₂]	۲۹۳-۲۹۵	۰/۱۰۱	۲	[۲۷]
Ethoxymethyl-۳-methylimidazolium tetrafluoroborate	[eommim][BF ₄]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]
Ethoxy methyl-۳-methylimidazolium hexafluorophosphate	[eommim][PF ₆]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]
Ethoxy methyl-۳-methylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[eommim][NTF ₂]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]

ادامہی جدول (پ-۱)

۱-[۲-(۲-methoxyethoxy)ethyl]-۳-methylimidazolium chloride	[moeoemim][CL]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]
۱-[۲-(۲-methoxyethoxy)ethyl]-۳-methylimidazolium hexafluorophosphate	[moeoemim][PF _۶]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]
۱-[۲-(۲-methoxyethoxy)ethyl]-۳-methylimidazolium tetrafluoroborate	[moeoemim][BF _۴]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۳]
۱-benzyl-۳-methylimidazolium chloride	[Benmim][CL]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-benzyl-۳-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[Benmim][CF _۳ SO _۳]	۳۰۳	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-benzyl-۳-methylimidazolium tetrachloroaluminate	[Benmim][AlCl _۴]	۳۱۵/۱۵-۳۲۸/۱۵	۰/۱	۶	[۵۵]
۱-(۲-phenylethyl)-۳-methylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[ph(Ch _۲) _۲ mim][NTF _۲]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۶۲]
۱-(۳-phenylpropyl)-۳-methylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[ph(Ch _۲) _۳ mim][NTF _۲]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۶۲]
۱-(۲-phenyl ethyl)-۳-methylimidazolium tetrachloroaluminate	[ph(Ch _۲) _۲ mim][AlCl _۴]	۳۱۳/۱۵-۳۲۸/۱۵	۰/۱	۷	[۵۵]
۱-(۴-methoxy phenyl)-۳-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate	[mophmim][CF _۳ SO _۳]	۳۲۳	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-p-chlorobenzyl-۳-methylimidazolium chloride	[ClBenmim][CL]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-p-fluorobenzyl-۳-methylimidazolium chloride	[FBenmim][CL]	۲۹۸	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱,۲,۴-trimethylpyrazolium methylsulfate	[trimpz][MeSO _۴]	۳۵۳/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-methy-۱-propylpyrrolidinium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[prmpyr][NTF _۲]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۵	۹۱	[۴۷]
۱-butyl-۱-methylpyrrolidinium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[bmpyr][NTF _۲]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۵	۹۱	[۴۷]
۱-ethylpyridinium tetrafluoroborate	[epy][BF _۴]	۲۹۳/۱	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]
۱-ethylpyridinium trifluoroacetate	[epy][ta]	۲۹۳/۱	۰/۱۰۱	۱	[۴۱]

ادامہ ی جدول (پ-۱)

۱-butylpyridinium tetrachloroaluminate	[bpy][AlCl ₄]	۳۰/۱۱۵-۳۲۸/۱۵	۰/۱	۱۲	[۵۴]
۱-hexylpyridinium tetrachloroaluminate	[hpy][AlCl ₄]	۲۹۳/۱۵-۳۲۸/۱۵	۰/۱	۱۵	[۵۴]
۱-octylpyridinium tetrachloroaluminate	[opy][AlCl ₄]	۲۹۳/۱۵-۳۲۸/۱۵	۰/۱	۱۵	[۵۴]
۳-methyl-۱-propylpyridinium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[prmpy][NTF _۲]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۵	۹۱	[۴۷]
۱-butyl-۳-methylpyridinium trifluoromethanesulfonate	[bmpy][CF _۳ SO _۳]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۶۱]
۱-butyl-۳-methylpyridinium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[bmpy][NTF _۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۶۳]
۱-butyl-۴-methylpyridinium tetrachloroaluminate	[bmpy][AlCl ₄]	۲۹۳/۱۵-۳۲۸/۱۵	۰/۱	۱۵	[۵۴]
۱-hexyl-۴-methylpyridinium tetrachloroaluminate	[hmpy][AlCl ₄]	۲۹۳/۱۵-۳۲۸/۱۵	۰/۱	۱۵	[۵۴]
۱-octyl-۴-methylpyridinium tetrachloroaluminate	[ompy][AlCl ₄]	۲۹۳/۱۵-۳۲۸/۱۵	۰/۱	۱۵	[۵۴]
۱-methyl-۱-propylpiperidinium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[prmpip][NTF _۲]	۲۹۳/۱۵-۳۹۳/۱۵	۰/۱-۳۵	۹۱	[۴۷]
Triethylpentylphosphonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[P۲۲۲۵][NTF _۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۵۷]
Triethyloctylphosphonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[P۲۲۲۸][NTF _۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۶۴]
Triethyldodecylphosphonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[P۲۲۲ ۱۲][NTF _۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۶۵]
Tetrabutylphosphonium serinate	[p۴۴۴۴][Ser]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	۰/۱	۹	[۶۶]
Tetrabutylphosphonium taurinate	[p۴۴۴۴][Tau]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	۰/۱	۹	[۶۶]
Tetrabutylphosphonium lysinate	[p۴۴۴۴][Lys]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	۰/۱	۹	[۶۶]
Tetrabutylphosphonium threonate	[p۴۴۴۴][Thr]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	۰/۱	۹	[۶۶]

ادامہی جدول (پ-۱)

Tetrabutylphosphonium prolinat	[p۴۴۴۴][Pro]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	-/۱	۹	[۶۶]
Tetrabutylphosphonium valinat	[p۴۴۴۴][Val]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	-/۱	۶	[۶۶]
Tetrabutylphosphonium cycteinat	[p۴۴۴۴][Cyc]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	-/۱	۹	[۶۶]
Trihexyl(tetradecyl)phosphonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[P۶۶۶ ۱۴][NTF۲]	۲۹۸/۱۵-۳۳۳/۴۳	-/۲۱-۶۵/۰۱	۱۲۶	[۲۷]
Trihexyl(tetradecyl)phosphonium acetate	[P۶۶۶ ۱۴][AC]	۲۹۸/۱۳-۳۳۴/۱۴	-/۲۱-۶۵/۰۱	۱۴۴	[۲۷]
Trihexyl(tetradecyl)phosphonium chloride	[P۶۶۶ ۱۴][CL]	۲۹۸/۱۳-۳۳۳/۱۴	-/۱۹-۵۵	۱۲۰	[۲۷]
Triethyl(methoxymethyl)phosphonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[P۲۲۲C۱۰][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۴۱]
Triethyl(۲-methoxyethyl)phosphonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[P۲۲۲C۲O][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۶۴]
Propyltrimethylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۱۱۱۳][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۵۷]
Butyltrimethyl ammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۱۱۱۴][NTF۲]	۲۹۳-۴۱۴	۱-۴۰	۳۶	[۶۷]
Dimethylethylpropylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۱۱۲۳][NTF۲]	۲۹۳/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۵۷]
Dimethylethylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۱۱۲۴][NTF۲]	۲۹۳/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۴۹]
Dimethylpropylbutylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۱۱۳۴][NTF۲]	۲۹۳/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۵۷]
Tributylmethylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۱۴۴۴][NTF۲]	۲۹۶/۹	-/۱۰۱	۱	[۵۷]
Triethylpentylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۲۲۲۵][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۶۱]
Triethyldodecylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۲۲۲ ۱۲][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	-/۱۰۱	۱	[۶۵]
Tributylmethylammonium serinat	[N۴۴۴۱][Ser]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	-/۱	۹	[۶۶]
Tributylmethylammonium taurinat	[N۴۴۴۱][Tau]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	-/۱	۹	[۶۶]

ادامہ ی جدول (پ-۱)

Tributylmethylammonium lysinate	[N۴۴۴۱][Lys]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	۰/۱	۹	[۶۶]
Tributylmethylammonium threonate	[N۴۴۴۱][Thr]	۲۹۳/۱۵-۳۶۳/۱۵	۰/۱	۹	[۶۶]
Tributylhexylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۴۴۴۶][NTF۲]	۲۹۳/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۵۷]
Triethylhexylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۶۲۲۲][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۵۷]
Tetrahexylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۶۶۶۶][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۵۷]
Trimethylheptylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۷۱۱۱][NTF۲]	۲۹۳/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۵۷]
Triethylheptylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۷۲۲۲][NTF۲]	۲۹۳/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۵۷]
Tributylheptylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۷۴۴۴][NTF۲]	۲۹۳/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۵۷]
Tetra heptyl ammonium bis[(tri fluoro methyl)sulfonyl]imide	[N۷۷۷۷][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۵۷]
Trimethyloctylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۸۱۱۱][NTF۲]	۲۹۳/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۵۷]
Triethyloctylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۸۲۲۲][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۶۸]
Tributyloctyl ammonium trifluoromethanesulfonate	[N۸۴۴۴][CF۳SO۳]	۲۹۳/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۵۷]
Tributyloctylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۸۴۴۴][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۶۸]
Tetraoctylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۸۸۸۸][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Tetradecylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۱۰۱۰۱۰۱۰][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Trimethylmethoxymethylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۱۱۱C۱O][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Triethylmethoxymethylammonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۲۲۲C۱O][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Triethyl(۲-methoxy ethyl)ammoniumbis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[N۲۲۲C۲O][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]

ادامہ ی جدول (پ-۱)

Trimethylsulfonium heptabromodialuminate	[S۱۱۱][Al۲Br۷]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Trimethylsulfonium hexachlorobromodialuminate	[S۱۱۱][Al۲Cl۶Br]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Trimethylsulfonium heptachlorodialuminate	[S۱۱۱][Al۲Cl۷]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Trimethylsulfonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[S۱۱۱][NTF۲]	۳۱۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Dimethylpropylsulfonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[S۱۱۳][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Dimethylpentylsulfonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[S۱۱۵][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Methyl,ethyl,propylsulfonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[S۱۲۳][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Methyl,ethylbutylsulfonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[S۱۲۴][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Methyl,ethylpentylsulfonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[S۱۲۵][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
diethylmethylsulfonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[S۲۲۱][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
diethylpropylsulfonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[S۲۲۳][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
diethylbutylsulfonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[S۲۲۴][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
Tributylsulfonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[S۴۴۴][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]
diethylpentylsulfonium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide	[S۲۲۵][NTF۲]	۲۹۸/۱۵	۰/۱۰۱	۱	[۲۷]

جدول (پ-۲): مقادیر تجربی و مقادیر پیش‌بینی شده‌ی دانسیته‌ی مایعات یونی برای سری تست

[emim][NTF ₂]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	۱۲	۱۲۴۸	۱۲۴۷/۷۸۱	۱۲۴۸/۷۷۹
۱	۱۵۱۵/۶	۱۵۱۲/۳۵۹	۱۵۱۴/۵۷۲	[emim][EtSO ₂]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM
۲	۱۵۱۸/۵	۱۵۱۵/۱۱۲	۱۵۱۷/۵۸۲	۱	۱۲۴۸/۴	۱۲۴۸/۶۵۲	۱۲۴۸/۹۵۴
۳	۱۵۳۶/۶	۱۵۳۲/۲۰۵	۱۵۳۴/۷۸۶	۲	۱۲۴۲/۷	۱۲۴۲/۴۹۴	۱۲۴۲/۷۱۹
۴	۱۵۰۶	۱۵۰۳/۱۲	۱۵۰۶/۳۲۵	۳	۱۲۳۳/۱	۱۲۳۲/۵۰۱	۱۲۳۲/۹۲۷
۵	۱۵۱۸/۷	۱۵۱۴/۹۸۸	۱۵۱۹/۲۴۸	۴	۱۲۴۱/۶	۱۲۴۱/۶۲۲	۱۲۴۱/۸۷۶
۶	۱۴۹۳/۷	۱۴۹۱/۰۷۵	۱۴۹۳/۸۰۹	۵	۱۲۲۲/۷	۱۲۲۲/۳۰۵	۱۲۲۲/۶۷۸
۷	۱۵۰۰/۷	۱۴۹۷/۴۸۹	۱۵۰۰/۷۲۴	۶	۱۲۰۴/۲	۱۲۰۳/۴۷۵	۱۲۰۳/۴۴۶
۸	۱۵۱۶/۳	۱۵۱۱/۶۴۸	۱۵۱۵/۰۲۴	۷	۱۲۰۹	۱۲۰۸/۳۸۹	۱۲۰۸/۷۰۲
۹	۱۴۸۴/۷	۱۴۸۱/۸۹۲	۱۴۸۴/۲۳	۸	۱۱۹۲/۶	۱۱۹۲/۸۰۲	۱۱۹۲/۲۵
۱۰	۱۴۹۸/۴	۱۴۹۴/۱۹۱	۱۴۹۵/۹۹۹	۹	۱۲۰۴/۹	۱۲۰۵/۴۵۹	۱۲۰۴/۵۹
۱۱	۱۴۷۲/۷	۱۴۶۹/۸۲۱	۱۴۷۲/۷۰۲	۱۰	۱۲۰۷/۳	۱۲۰۷/۹۶۱	۱۲۰۷/۴۱۵
۱۲	۱۴۸۰/۲	۱۴۷۶/۴۶۵	۱۴۷۹/۸۲۶	۱۱	۱۱۸۰/۷	۱۱۸۱/۸۹۹	۱۱۷۹/۹۲۷
۱۳	۱۴۶۲/۷	۱۴۵۹/۲۳۲	۱۴۶۲/۲۴۹	۱۲	۱۱۹۲/۲	۱۱۹۳/۵۷۳	۱۱۹۱/۶۹۶
۱۴	۱۴۶۶/۱	۱۴۶۲/۲۴	۱۴۶۵/۵۹۴	[emim][CF ₃ SO ₂]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM
۱۵	۱۴۸۷/۵	۱۴۸۰/۹۱۸	۱۴۸۴/۷۶۹	۱	۱۳۷۱/۵	۱۳۷۱/۱۷۵	۱۳۷۱/۶۲۷
[emim][MeSO ₂]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	۲	۱۳۷۹	۱۳۷۹/۳۰۹	۱۳۷۹/۳۵۷
۱	۱۲۹۰/۱	۱۲۹۰/۳۶۸	۱۲۸۹/۷۴۶	۳	۱۳۶۱/۶	۱۳۶۱/۲۳۹	۱۳۶۲/۰۱
۲	۱۳۰۰	۱۳۰۰/۵۳۶	۱۲۹۹/۴۱۴	۴	۱۳۶۴/۱	۱۳۶۳/۸	۱۳۶۴/۶۳۳
۳	۱۲۸۷/۴	۱۲۸۸/۳۱۲	۱۲۸۸/۱۵۲	۵	۱۳۷۸/۸	۱۳۷۹/۶۶۶	۱۳۷۹/۰۷۶
۴	۱۲۷۶/۶	۱۲۷۵/۹۶۲	۱۲۷۷/۲۰۲	۶	۱۳۵۴/۴	۱۳۵۴/۰۲۱	۱۳۵۴/۶۵۶
۵	۱۲۸۵/۱	۱۲۸۴/۴۵۳	۱۲۸۴/۸۰۲	۷	۱۳۶۱/۲	۱۳۶۱/۱۷۱	۱۳۶۱/۴۵۶
۶	۱۲۶۳/۴	۱۲۶۲/۳۷	۱۲۶۳/۶۱۳	۸	۱۳۷۲/۹	۱۳۷۴/۰۵۴	۱۳۷۳/۷۰۵
۷	۱۲۷۴	۱۲۷۳/۴۲۹	۱۲۷۴/۵۰۲	۹	۱۳۴۶	۱۳۴۵/۶۷۸	۱۳۴۵/۹۶۵
۸	۱۲۵۱/۱	۱۲۴۹/۸۳۳	۱۲۵۰/۸۲۳	۱۰	۱۳۵۵/۴	۱۳۵۵/۶۰۲	۱۳۵۵/۴۰۱
۹	۱۲۶۰	۱۲۵۹/۰۱۷	۱۲۵۹/۸۵۱	۱۱	۱۳۲۶/۶	۱۳۲۶/۱۰۷	۱۳۲۶/۴۴۲
۱۰	۱۲۳۴	۱۲۳۳/۵۲	۱۲۳۳/۶۴۴	۱۲	۱۳۳۰/۳	۱۳۲۹/۸۸۷	۱۳۲۹/۹۸۵
۱۱	۱۲۴۱/۲	۱۲۴۰/۶۹۸	۱۲۴۰/۸۶۹	۱۳	۱۳۴۱/۹	۱۳۴۱/۸۴۶	۱۳۴۱/۷۵۶

ادامه ی جدول (ب-۲)

[emim][BF ₄]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	۱۱	۱۴۸۵/۱۸	۱۴۸۲/۰۴۱	۱۴۸۵/۲۵۶
۱	۱۲۹۶/۵	۱۲۹۵/۹۸۸	۱۲۹۶/۶۵۲	۱۲	۱۴۶۲/۰۷	۱۴۵۸/۹۳۶	۱۴۶۱/۵۶۸
۲	۱۲۹۸/۲	۱۲۹۷/۸۶۵	۱۲۹۸/۴۸۵	۱۳	۱۴۸۴/۳۶	۱۴۸۰/۹۶۶	۱۴۷۴/۴۷۶
۳	۱۳۰۷/۴	۱۳۰۷/۶۸۶	۱۳۰۸/۶۱۵	۱۴	۱۴۵۸/۳۱	۱۴۵۵/۰۰۸	۱۴۵۷/۸۸۹
۴	۱۲۸۹/۲	۱۲۸۸/۹۹	۱۲۸۹/۶۵۴	۱۵	۱۴۸۳/۶۳	۱۴۸۰/۴۲	۱۴۸۴/۰۱
۵	۱۲۹۵/۱	۱۲۹۵/۳۳	۱۲۹۵/۷۱۴	۱۶	۱۴۵۹/۱۱	۱۴۵۵/۷۳۵	۱۴۵۹/۲۲۲
۶	۱۲۸۰/۱	۱۲۸۰/۲۵۸	۱۲۸۰/۳۰۹	۱۷	۱۴۸۲/۸۶	۱۴۸۰/۰۲۱	۱۴۸۳/۳۴۱
۷	۱۲۸۳/۶	۱۲۸۴	۱۲۸۳/۸۸۷	۱۸	۱۴۶۰/۶۴	۱۴۵۷/۲۵۷	۱۴۶۰/۸۷۴
۸	۱۲۹۱/۸	۱۲۹۲/۶۲۱	۱۲۹۲/۴۴۱	۱۹	۱۴۸۵/۶۲	۱۴۸۲/۷۲۴	۱۴۸۵/۷۸۴
۹	۱۲۷۴/۲	۱۲۷۴/۶۴۱	۱۲۷۴/۳۶۲	۲۰	۱۴۶۱/۹۸	۱۴۵۸/۶۶۱	۱۴۶۲/۱۰۲
۱۰	۱۲۷۹/۴	۱۲۸۰/۳۷۷	۱۲۷۹/۲۸۵	۲۱	۱۴۷۹/۱۸	۱۴۷۶/۱۱۴	۱۴۷۹/۲۴۶
۱۱	۱۲۶۵/۸	۱۲۶۶/۱۲	۱۲۶۵/۷۲۷	۲۲	۱۴۶۴/۲۴	۱۴۶۱/۰۴۷	۱۴۶۴/۲۰۸
۱۲	۱۲۷۲/۱	۱۲۷۲/۹۵۳	۱۲۷۱/۹۸۵	۲۳	۱۴۴۲/۵۳	۱۴۴۰/۳۶۱	۱۴۴۳/۳۵۸
۱۳	۱۲۵۷/۳	۱۲۵۷/۷۳۵	۱۲۵۶/۶۷۵	۲۴	۱۴۶۶/۲۷	۱۴۶۳/۰۹۹	۱۴۶۶/۲۰۴
۱۴	۱۲۶۱	۱۲۶۱/۷۴۵	۱۲۶۰/۹۲	۲۵	۱۴۸۵/۵۸	۱۴۸۳/۲۱۸	۱۴۸۵/۶۸۱
۱۵	۱۲۷۲/۲	۱۲۷۳/۶۰۵	۱۲۷۲/۱۸۳	[bmim][PF ₆]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM
[Prmim][NTF ₂]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	۱	۱۳۴۸/۲	۱۳۴۷/۹۹۹	۱۳۴۷/۶۲۱
۱	۱۴۸۲/۱۲	۱۴۸۰/۲	۱۴۸۲/۵۹۹	۲	۱۳۵۰/۶	۱۳۵۰/۱۸۳	۱۳۴۹/۳۲
۲	۱۵۰۴/۹۵	۱۵۰۳/۴۷۴	۱۵۰۵/۱۲۸	۳	۱۳۵۵/۲	۱۳۵۴/۴۷۱	۱۳۵۳/۷۷۲
۳	۱۴۷۴/۹۴	۱۴۷۳/۵۴	۱۴۷۵/۵۹۷	۴	۱۳۵۹/۳	۱۳۵۸/۶۹۶	۱۳۵۸/۲۰۹
۴	۱۵۰۰/۱۱	۱۴۹۸/۱۵۳	۱۵۰۰/۳۵۵	۵	۱۳۶۳/۳	۱۳۶۲/۹۲۸	۱۳۶۱/۸۵۵
۵	۱۴۸۰/۱۹	۱۴۷۸/۱۶۳	۱۴۸۰/۵۰۵	[bmim][BF ₄]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM
۶	۱۵۰۳/۱۸	۱۵۰۱/۵۲	۱۵۰۳/۶۰۳	۱	۱۱۹۹/۱	۱۱۹۸/۹۱۶	۱۲۰۰/۲۸۸
۷	۱۴۸۲/۸۴	۱۴۸۰/۵۶۴	۱۴۸۳/۲۴۵	۲	۱۱۹۰/۸	۱۱۹۰/۶۵۶	۱۱۹۱/۳۴۶
۸	۱۵۰۶/۴۶	۱۵۰۵/۰۱۴	۱۵۰۶/۶۷	۳	۱۱۸۳/۵	۱۱۸۳/۵۹۷	۱۱۸۳/۶۷۲
۹	۱۴۸۵/۴۱	۱۴۸۲/۸۳۸	۱۴۸۵/۷۲۴	۴	۱۱۷۵/۸	۱۱۷۵/۶۵۷	۱۱۷۵/۶۶
۱۰	۱۵۱۰/۹۳	۱۵۱۰/۰۴۳	۱۵۱۱/۰۴۲	۵	۱۱۸۱	۱۱۸۱/۵۰۱	۱۱۸۱/۰۵۶

ادامه ی جدول (پ-۲)

۶	۱۱۷۰/۸	۱۱۷۱/۳۶۶	۱۱۷۰/۶۱۶	۲	۱۲۹۷/۲۴۶	۱۲۹۸/۱۴۴	۱۲۹۸/۳۲۵
۷	۱۱۵۵/۳	۱۱۵۴/۹۴۱	۱۱۵۴/۸۵۵	۳	۱۲۷۹/۳	۱۲۷۹/۶۷۶	۱۲۷۹/۴۳۸
۸	۱۱۴۹/۳	۱۱۴۸/۷۸۴	۱۱۴۸/۷۷۳	۴	۱۲۸۲	۱۲۸۲/۳۴۱	۱۲۸۲/۰۶۷
۹	۱۱۴۳/۷	۱۱۴۲/۷۷۳	۱۱۴۳/۰۹	۵	۱۲۷۳/۱	۱۲۷۳/۴۸۴	۱۲۷۳/۸۹۹
۱۰	۱۱۳۷/۳	۱۱۳۵/۵۹۵	۱۱۳۶/۴۸۵	۶	۱۲۶۴/۵	۱۲۶۴/۷۷۲	۱۲۶۴/۰۲۴
۱۱	۱۱۳۹	۱۱۳۷/۵۳۷	۱۱۳۸/۰۴۵	۷	۱۲۵۶/۷	۱۲۵۷/۶۱۳	۱۲۵۶/۵۱۹
[bmim][NTF₂]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	۸	۱۲۴۹	۱۲۴۹/۲۳۶	۱۲۴۸/۴۸۴
۱	۱۴۱۸/۷	۱۴۱۶/۸۶۶	۱۴۱۸/۳۶۷	۹	۱۲۳۹/۶	۱۲۳۹/۶۵۴	۱۲۳۸/۸۳۲
۲	۱۴۲۲/۵	۱۴۲۰/۷۹۵	۱۴۲۱/۴۶۲	۱۰	۱۲۳۳/۱	۱۲۳۲/۹۸۲	۱۲۳۲/۵۱۲
۳	۱۴۲۹/۸	۱۴۲۸/۵۹۲	۱۴۲۷/۰۶۴	۱۱	۱۲۳۶/۱	۱۲۳۵/۹۰۳	۱۲۳۵/۴۷۷
۴	۱۴۳۶/۸	۱۴۳۶/۳۸	۱۴۳۲/۶۱۸	[bmim][AlCl₄]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM
۵	۱۴۴۳/۶	۱۴۴۴/۱۵۷	۱۴۴۲/۹۵۸	۱	۱۲۳۲/۸	۱۲۳۳/۱۲۹	۱۲۳۳/۷۸۳
۶	۱۴۰۰/۴	۱۳۹۹/۶۹	۱۴۰۲/۸۹۵	۲	۱۲۳۱/۷	۱۲۳۱/۹۲۶	۱۲۳۴/۰۳۵
[bmim][C(Cn)۳]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	[bdmim][PF₆]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM
۱	۱۰۴۵/۵	۱۰۴۵/۸۰۹	۱۰۴۶/۰۸۶	۱	۱۳۳۰/۹	۱۳۳۱/۳۸۲	۱۳۳۱/۰۱۵
۲	۱۰۵۴/۴	۱۰۵۴/۳۱۷	۱۰۵۴/۶۵۲	۲	۱۳۳۶/۲	۱۳۳۴/۷۳	۱۳۳۶/۳۳۲
۳	۱۰۳۸/۱	۱۰۳۸/۷۱	۱۰۳۸/۶۶۸	۳	۱۳۲۴/۶	۱۳۲۴/۸۷۵	۱۳۲۴/۴۰۶
۴	۱۰۴۷/۵	۱۰۴۷/۴۳۴	۱۰۴۸/۳۷۹	۴	۱۳۱۴/۶	۱۳۱۵/۷۱۶	۱۳۱۴/۳۰۱
۵	۱۰۳۱/۲	۱۰۳۱/۷۸۵	۱۰۳۱/۵۳۷	۵	۱۳۰۶	۱۳۰۷/۳۶۲	۱۳۰۵/۴۹۵
۶	۱۰۲۲/۵	۱۰۲۳/۳۲۲	۱۰۲۲/۲۸۹	۶	۱۲۹۷/۶	۱۲۹۹/۱۴۲	۱۲۹۷/۴۵۴
۷	۱۰۲۶	۱۰۲۶/۵۷۶	۱۰۲۶/۲۸۵	۷	۱۳۰۳/۶	۱۳۰۳/۱۳۸	۱۳۰۳/۶۳۹
۸	۱۰۱۶/۳	۱۰۱۶/۷۱۸	۱۰۱۵/۹۹۱	۸	۱۲۹۲/۵	۱۲۹۲/۶۲۳	۱۲۹۱/۹۶۸
۹	۱۰۲۳/۵	۱۰۲۳/۴۲	۱۰۲۳/۶۹۳	۹	۱۲۸۴/۷	۱۲۸۴/۶۰۴	۱۲۸۴/۳۰۱
۱۰	۱۰۱۱/۸	۱۰۱۲/۱۰۷	۱۰۱۱/۷۹۲	۱۰	۱۲۸۹/۷	۱۲۸۸/۰۹۲	۱۲۸۹/۳۸۶
۱۱	۱۰۲۲/۱	۱۰۲۱/۷۴۹	۱۰۲۲/۰۶۲	[pmim][NTF₂]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM
۱۲	۹۸۷/۸	۹۸۷/۵۵۱۴	۹۸۷/۰۵۴۱	۱	۱۴۱۰/۹۲	۱۴۰۹/۵۲۶	۱۴۱۰/۶۷۹
۱۳	۹۹۰	۹۹۰/۳۵۴۹	۹۹۰/۱۶۳۲	۲	۱۴۲۳/۶۸	۱۴۲۲/۹۴۲	۱۴۲۳/۸۳۶
۱۴	۱۰۰۰/۶	۹۹۹/۲۰۸۵	۹۹۹/۷۸۹۹	۳	۱۴۱۳/۵۷	۱۴۱۱/۹۸۹	۱۴۱۳/۵۵۷
[bmim][CfrSO₂]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	۴	۱۴۳۶/۸۶	۱۴۳۶/۵۰۸	۱۴۳۶/۶۹۴
۱	۱۲۹۷/۷	۱۲۹۷/۲۴۶	۱۲۹۸/۱۴۴	۵	۱۴۳۱/۸۸	۱۴۳۱/۰۹۹	۱۴۳۲/۰۰۲

ادامہ ی جدول (پ-۲)

۶	۱۴۱۱/۸۵	۱۴۱۰/۰۷۴	۱۴۱۱/۴۴۱	۱۱	۱۳۸۴/۱	۱۳۸۴/۲۱۴	۱۳۸۳/۸۷۸	
۷	۱۴۳۵/۱۸	۱۴۳۴/۶۸	۱۴۳۴/۸۵۳	۱۲	۱۴۰۲	۱۴۰۵/۱۴۸	۱۴۰۲/۰۲۸	
۸	۱۴۲۲/۱۸	۱۴۲۰/۵۲۶	۱۴۲۱/۸۷۲	۱۳	۱۳۷۶/۹	۱۳۷۶/۱۳	۱۳۷۶/۹۸۹	
۹	۱۴۳۹/۵۹	۱۴۳۹/۸۱	۱۴۳۹/۳۶۲	۱۴	۱۳۵۰/۲	۱۳۵۰/۰۶۷	۱۳۵۰/۰۲۴	
۱۰	۱۴۰۹/۱۵	۱۴۱۱/۹۲۵	۱۴۱۲/۹۷۹	۱۵	۱۳۶۲/۴	۱۳۶۰/۸۰۵	۱۳۶۲/۵۱	
۱۱	۱۳۸۵/۷۵	۱۳۸۹/۰۰۲	۱۳۸۹/۳۶۱	۱۶	۱۳۸۹/۳	۱۳۸۹/۳۲۴	۱۳۸۹/۶۹	
۱۲	۱۴۰۰/۳۱	۱۴۰۲/۸۹۹	۱۴۰۴/۳۰۵	۱۷	۱۳۶۲	۱۳۵۹/۷۳۱	۱۳۶۲/۱۱۴	
۱۳	۱۴۲۶/۸۱	۱۴۳۰/۸۷۲	۱۴۳۰/۷۲۳	۱۸	۱۳۸۲/۵	۱۳۸۱/۲۹۲	۱۳۸۲/۶۱۶	
۱۴	۱۴۰۸/۳	۱۴۱۰/۹۰۲	۱۴۱۲/۳۶۳	۱۹	۱۳۴۵/۴	۱۳۴۴/۱۲۲	۱۳۴۴/۸۲۵	
۱۵	۱۳۸۱/۴۵	۱۳۷۹/۲۲۹	۱۳۸۰/۳۴۶	۲۰	۱۳۷۵/۴	۱۳۷۴/۴	۱۳۷۴/۹۷۷	
۱۶	۱۴۰۴/۰۶	۱۴۰۱/۷۶۳	۱۴۰۴/۲۰۶	۲۱	۱۳۸۷/۳	۱۳۸۷/۶۴۷	۱۳۸۷/۸۰۳	
۱۷	۱۳۸۰/۸۹	۱۳۷۸/۵۲۷	۱۳۸۰/۰۱	۲۲	۱۳۶۱	۱۳۵۷/۷۷۱	۱۳۶۰/۱۲	
۱۸	۱۳۹۸/۷۲	۱۳۹۵/۸۵۶	۱۳۹۸/۶۸۴		[hmim][PF۶]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM
۱۹	۱۳۷۷/۵۶	۱۳۷۵/۳۱۹	۱۳۷۶/۷۵۷	۱	۱۳۰۰/۰۳	۱۲۹۸/۶۵۵	۱۲۹۹/۴۹۲	
۲۰	۱۴۰۰/۷۷	۱۳۹۸/۰۱	۱۴۰۰/۷۸۵	۲	۱۲۹۰/۶	۱۲۸۹/۹۸۳	۱۲۸۹/۸۸۸	
۲۱	۱۴۱۹/۵۶	۱۴۱۸/۱۱۹	۱۴۱۹/۶۵۴	۳	۱۲۸۲	۱۲۸۲/۳۱۵	۱۲۸۲/۰۷۸	
۲۲	۱۳۹۴/۸۹	۱۳۹۲/۰۹۵	۱۳۹۵/۰۴۸	۴	۱۲۸۴/۳	۱۲۸۴/۲۰۱	۱۲۸۴/۵۸۹	
۲۳	۱۳۷۳/۳۲	۱۳۷۱/۴۱۱	۱۳۷۲/۹۲۴	۵	۱۲۷۸/۵	۱۲۷۸/۷۵۳	۱۲۷۸/۹۶۷	
۲۴	۱۳۸۸/۵۳	۱۳۸۵/۷۴۹	۱۳۸۸/۶۹۹	۶	۱۲۵۶/۱	۱۲۵۸/۷۰۱	۱۲۵۷/۵۲۷	
۲۵	۱۴۱۵/۸۷	۱۴۱۴/۵۰۸	۱۴۱۶/۲۳۶	۷	۱۲۶۲	۱۲۶۳/۷۱۴	۱۲۶۱/۶۶۸	
	[hmim][NTF۲]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	۸	۱۲۵۱/۲	۱۲۵۳/۸۸۷	۱۲۵۰/۹۹
۱	۱۳۸۴/۴	۱۳۸۵/۴۶۱	۱۳۸۷/۶۴	۹	۱۲۴۷/۲	۱۲۴۹/۴۲۵	۱۲۴۶/۵۹۱	
۲	۱۳۹۷/۷	۱۳۹۹/۰۵۷	۱۳۹۹/۸۵۸	۱۰	۱۲۳۵/۶	۱۲۳۸/۷۶	۱۲۳۴/۷۴۱	
۳	۱۴۰۹/۸	۱۴۱۲/۵۶۱	۱۴۰۹/۵۷۷	۱۱	۱۲۲۰/۱	۱۲۲۴/۲۵۶	۱۲۱۹/۵۲۲	
۴	۱۳۸۳/۱	۱۳۸۴/۲۰۸	۱۳۸۵/۴۷۳		[hmim][AICf]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM
۵	۱۴۰۲/۴	۱۴۰۴/۷۱۴	۱۴۰۴/۰۱۶	۱	۱۱۷۸/۴	۱۱۷۹/۴۱۲	۱۱۷۱/۳۵۲	
۶	۱۳۷۹	۱۳۷۹/۵۳۴	۱۳۸۰/۱۷۳	۲	۱۱۷۳/۴	۱۱۷۳/۷۲۹	۱۱۶۷/۴۲۶	
۷	۱۳۹۲/۳	۱۳۹۳/۳۵	۱۳۹۳/۶۵۵		[hmim][AICf]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM
۸	۱۳۶۵	۱۳۶۶/۰۸۱	۱۳۶۵/۵	۱	۱۳۵۴/۸	۱۳۵۳/۸۱۴	۱۳۵۵/۱۵۵	
۹	۱۳۹۱/۲	۱۳۹۲/۲۵۶	۱۳۹۱/۵۲۶	۲	۱۳۴۲/۵	۱۳۴۲/۵	۱۳۴۱/۴۶۳	
۱۰	۱۳۶۲/۷	۱۳۶۳/۱۱۴	۱۳۶۲/۴۶۹	۳	۱۳۴۵/۳	۱۳۴۵/۲۱۱	۱۳۴۴/۴۵۹	

ادامہی جدول (پ-۲)

				[omim][BF ₄]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM
۴	۱۳۶۰/۶	۱۳۵۹/۷۴۴	۱۳۶۰/۰۹۷				
۵	۱۳۳۵/۴	۱۳۳۵/۹۰۳	۱۳۳۴/۵۴۱	۱	۱۱۰۹/۱	۱۱۰۷/۸۴	۱۱۰۹/۸۰۶
۶	۱۳۴۳/۷	۱۳۴۳/۶۶۴	۱۳۴۳/۲۸۱	۲	۱۱۰۰/۷	۱۰۹۹/۴۶۲	۱۱۰۰/۸۷۳
۷	۱۳۲۵/۸	۱۳۲۶/۵۸۴	۱۳۲۶/۰۵۳	۳	۱۰۹۳/۴	۱۰۹۲/۷۶۷	۱۰۹۳/۶۴۲
۸	۱۳۴۲	۱۳۴۱/۶۳۶	۱۳۴۳/۱۸۲	۴	۱۰۸۶/۴	۱۰۸۶/۳۶	۱۰۸۶/۶۱۷
۹	۱۳۱۷	۱۳۱۷/۲۶۳	۱۳۱۶/۶۳۱	۵	۱۰۷۹/۸	۱۰۸۰/۱۵۸	۱۰۷۹/۶۴۹
۱۰	۱۳۲۵/۸	۱۳۲۵/۲۹۸	۱۳۲۶/۲۵	۶	۱۰۷۳/۷	۱۰۷۴/۱۶۶	۱۰۷۳/۲۳۲
۱۱	۱۳۰۵/۸	۱۳۰۶/۴۶۴	۱۳۰۳/۹۰۸	۷	۱۰۶۷/۷	۱۰۶۸/۳۸۳	۱۰۶۷/۲۴
۱۲	۱۳۱۶/۳	۱۳۱۶/۱۲۵	۱۳۱۵/۵۸	۸	۱۰۶۴/۴	۱۰۶۶/۴۴۹	۱۰۶۴/۱۷۸
۱۳	۱۲۹۸/۶	۱۲۹۸/۶۶۶	۱۲۹۶/۰۷	۹	۱۰۴۷/۲	۱۰۴۵/۷۴۲	۱۰۴۶/۵۷۹
۱۴	۱۳۰۸	۱۳۰۶/۹۷۵	۱۳۰۵/۴۴۷	۱۰	۱۰۴۱/۵	۱۰۳۹/۷۵	۱۰۴۰/۷۷۱
۱۵	۱۲۶۴/۶	۱۲۶۱/۱۸۶	۱۲۶۲/۵۳	۱۱	۱۰۴۴/۱	۱۰۴۳/۵۴۴	۱۰۴۳/۲۰۵
[hpmim][PF ₆]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	[omim][PF ₆]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM
۱	۱۲۵۴/۵	۱۲۵۹/۰۹۵	۱۲۵۵/۴۵۷	۱	۱۲۴۵/۱	۱۲۴۵/۷۹۴	۱۲۴۵/۷۱۷
۲	۱۲۳۱/۸	۱۲۳۵/۰۵۷	۱۲۳۱/۴۷۴	۲	۱۲۳۶/۱	۱۲۳۶/۶۸۵	۱۲۳۶/۵۱۳
[omim][NTF ₂]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM				
۱	۱۳۳۰/۱	۱۳۲۹/۴۵۱	۱۳۳۰/۱۱۳	۳	۱۲۲۷/۱	۱۲۲۷/۷۳۹	۱۲۲۷/۴۹۵
۲	۱۳۱۵/۷	۱۳۱۸/۳۰۱	۱۳۱۶/۸۶۳	۴	۱۲۱۸/۸	۱۲۱۸/۹۵۹	۱۲۱۸/۵۱۲
۳	۱۳۱۸/۵	۱۳۲۱/۰۰۵	۱۳۲۰/۰۵۴	۵	۱۲۱۱	۱۲۱۱/۵۱۷	۱۲۱۰/۷۳۱
۴	۱۳۰۵/۶	۱۳۰۹/۱۰۳	۱۳۰۷/۱۱۱	۶	۱۲۰۳/۶	۱۲۰۴/۲۹	۱۲۰۲/۹۹۷
۵	۱۳۱۱/۱	۱۳۱۴/۳۲۱	۱۳۱۲/۸۷۱	۷	۱۱۹۴/۳	۱۱۹۴/۸۵۹	۱۱۹۴/۴۱۳
۶	۱۲۹۶/۲	۱۲۹۹/۸۹۱	۱۲۹۸/۲۱	۸	۱۱۸۷/۶	۱۱۸۸/۰۲۴	۱۱۸۷/۵۳۸
۷	۱۲۹۹/۲	۱۳۰۲/۶۹۱	۱۳۰۱/۵۴۵	۹	۱۱۸۱/۳	۱۱۸۱/۴۰۵	۱۱۸۰/۷۷
۸	۱۳۱۵/۲	۱۳۱۷/۷۰۸	۱۳۱۸/۹۶۲	۱۰	۱۱۷۴/۲	۱۱۷۳/۷۱۹	۱۱۷۳/۵۳۱
۹	۱۲۸۹/۹	۱۲۹۳/۵۲۵	۱۲۹۱/۸۴۵	۱۱	۱۱۶۹/۱	۱۱۶۸/۱۵۲	۱۱۶۸/۱۸۹
[omim][AlCl ₄]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM				
۱۰	۱۲۹۸/۷	۱۳۰۱/۵۴	۱۳۰۱/۶۰۱	۱	۱۱۰۹/۹	۱۱۰۹/۵۰۹	۱۱۱۵/۴۶۶
۱۱	۱۲۷۹/۶	۱۲۸۲/۸۸۳	۱۲۷۹/۲	۲	۱۱۰۸/۵	۱۱۰۸/۱۵۳	۱۱۰۸/۵
[c]-mim][NTF ₂]	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM				
۱۲	۱۲۹۰/۴	۱۲۹۲/۵۲۱	۱۲۹۱/۰۱	۱	۱۳۰۱/۴	۱۳۰۱/۵۷۷	۱۳۰۱/۷۵۴
۱۳	۱۲۷۲/۷	۱۲۷۵/۲۳۴	۱۲۷۲/۳۰۴	۲	۱۲۸۶/۴	۱۲۸۷/۰۶۳	۱۲۸۷/۱۴۳
۱۴	۱۲۸۲/۱	۱۲۸۳/۵۲۲	۱۲۸۱/۸۰۶	۳	۱۲۷۸/۳	۱۲۷۹/۲۰۹	۱۲۷۸/۸۲۶
۱۵	۱۲۳۹/۳	۱۲۳۸/۳۶۵	۱۲۳۸/۶۶۲				

ادامه‌ی جدول (پ-۱)

۴	۱۲۹۶/۳	۱۲۹۶/۳۶۳	۱۲۹۶/۱۳۱	۳	۱۴۰۲/۹	۱۴۰۲/۵۱۶	۱۴۰۲/۳۵۳
۵	۱۲۷۳/۲	۱۲۷۳/۸۰۶	۱۲۷۳/۱۳۴	۴	۱۳۹۰/۱	۱۳۹۰/۴۳۸	۱۳۹۰/۲۹۵
۶	۱۲۴۹/۸	۱۲۵۲/۴۵۵	۱۲۴۹/۵۳۴	۵	۱۳۹۷	۱۳۹۷/۲۱۴	۱۳۹۷/۲۶۵
۷	۱۲۲۸/۶	۱۲۳۰/۹۶۱	۱۲۲۸/۳۳۵	۶	۱۳۷۹/۸	۱۳۸۰/۵۶۶	۱۳۷۹/۶۴۶
۸	۱۲۵۴/۱	۱۲۵۳/۳۳۸	۱۲۵۴/۰۸۷	۷	۱۳۹۱/۳	۱۳۹۱/۹۴۸	۱۳۹۱/۵۶۲
۹	۱۲۱۴/۸	۱۲۱۶/۹۶۲	۱۲۱۴/۵۳۷	۸	۱۳۷۲/۵	۱۳۷۳/۵۵۹	۱۳۷۲/۳۷۸
۱۰	۱۲۳۷	۱۲۳۶/۲۷	۱۲۳۷/۴۷۳	۹	۱۳۷۸/۱	۱۳۷۸/۹۸۷	۱۳۷۸/۱۹
۱۱	۱۱۹۸/۳	۱۱۹۹/۵۳۲	۱۱۹۷/۳۵۴	۱۰	۱۳۵۱/۵	۱۳۵۲/۶۳۹	۱۳۵۱/۰۷۴
۱۲	۱۲۱۲/۸	۱۲۱۱/۴۸۷	۱۲۱۱/۰۰۴	۱۱	۱۳۵۷/۹	۱۳۵۸/۵۴۸	۱۳۵۷/۴۲۸
[Benmim][AICL۴] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM				۱۲	۱۳۱۸/۱	۱۳۱۷/۴۰۶	۱۳۱۷/۴۸۶
۱	۱۳۴۷/۲	۱۳۴۶/۷۴۷	۱۳۴۸/۵۵۸	۱۳	۱۳۴۲/۲	۱۳۴۰/۱۲۹	۱۳۴۱/۸۴۴
[ph(Chz)ɹmim][AICL۴] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM				[bpy][AICL۴] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM			
۱	۱۲۵۵/۲	۱۲۵۰/۶۶۸	۱۲۶۲/۳۴۱	۱	۱۲۶۷/۲	۱۲۶۸/۹۸	۱۲۶۷/۳۰۷
[prmpyr][NTF۲] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM				۲	۱۲۶۶/۱	۱۲۶۷/۸۵۳	۱۲۶۵/۳۴۳
۱	۱۴۴۵/۸	۱۴۴۴/۶۶۶	۱۴۴۶/۱۳	[hpy][AICL۴] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM			
۲	۱۴۲۸/۶	۱۴۲۸/۳۱۲	۱۴۲۸/۹۰۳	۱	۱۲۰۶	۱۲۰۵/۶۸۲	۱۲۰۶/۴۴۸
۳	۱۴۳۱/۶	۱۴۳۱/۱۸۵	۱۴۳۱/۷۳۹	۲	۱۲۰۵/۱	۱۲۰۴/۵۴۸	۱۲۰۴/۵۰۸
۴	۱۴۵۳	۱۴۵۳/۹۴۳	۱۴۵۳/۲۱۸	[opy][AICL۴] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM			
۵	۱۴۲۶/۳	۱۴۲۶/۴۵۶	۱۴۲۶/۴۰۹	۱	۱۱۸۱/۹	۱۱۸۴/۱۵۲	۱۱۷۸/۲۲۵
۶	۱۴۰۸/۷	۱۴۰۹/۷۳	۱۴۰۸/۶۹۳	۲	۱۱۸۰/۹	۱۱۸۲/۹۷۴	۱۱۷۵/۶۹۴
۷	۱۴۱۴/۴	۱۴۱۵/۳۴۶	۱۴۱۴/۸	[prmpyr][NTF۲] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM			
۸	۱۴۲۷/۴	۱۴۲۸/۵۹۵	۱۴۲۷/۷۱۴	۱	۱۴۶۲/۴	۱۴۶۲/۲۰۴	۱۴۶۲/۴۵۵
۹	۱۴۰۳	۱۴۰۴/۱۱۷	۱۴۰۲/۹۵۴	۲	۱۴۴۴/۴	۱۴۴۵/۵۵۶	۱۴۴۴/۹۰۵
۱۰	۱۴۲۱/۹	۱۴۲۳/۳۲۳	۱۴۲۲/۱۳۷	۳	۱۴۴۷/۶	۱۴۴۸/۳۲۷	۱۴۴۸/۰۳۶
۱۱	۱۳۸۳/۴	۱۳۸۴/۵۰۷	۱۳۸۲/۹۹۵	۴	۱۴۶۳/۱	۱۴۶۲/۹۴	۱۴۶۲/۵۲۹
۱۲	۱۴۰۷/۹	۱۴۰۹/۰۱۹	۱۴۰۷/۵۲۴	۵	۱۴۳۶/۴	۱۴۳۷/۰۶۶	۱۴۳۶/۷۵۴
۱۳	۱۳۴۵/۸	۱۳۴۵/۶۹۶	۱۳۴۵/۳۳۴	۶	۱۴۵۶/۷	۱۴۵۶/۱۲۳	۱۴۵۶/۸۰۴
۱۴	۱۳۷۰	۱۳۶۸/۲۷۵	۱۳۶۹/۵۹۷	۷	۱۴۲۹/۹	۱۴۲۹/۹۹۲	۱۴۳۰/۰۱۸
[bmpyr][NTF۲] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM				۸	۱۴۴۳/۳	۱۴۴۲/۵۶۳	۱۴۴۳/۳۴
۱	۱۴۱۶/۱	۱۴۱۵/۱۵۱	۱۴۱۶/۳۶۸	۹	۱۴۱۷/۸	۱۴۱۸/۰۱۸	۱۴۱۸/۰۲۴
۲	۱۳۹۹/۹	۱۳۹۹/۵۴۸	۱۴۰۰/۴۴۷	۱۰	۱۴۳۷/۴	۱۴۳۶/۳۳۸	۱۴۳۷/۳۳۷

ادامه‌ی جدول (پ-۲)

۱۱	۱۳۹۷/۴	۱۳۹۷/۵۴۲	۱۳۹۶/۸۸۴	۱	۹۲۹	۹۳۲/۳۷۰۲	۹۲۲/۹۳۶۴
۱۲	۱۴۲۲/۹	۱۴۲۰/۷۷۸	۱۴۲۳/۰۸۴	[P۶۶۶ ۱۴][NTF۲]			
۱۳	۱۳۵۷/۹	۱۳۵۹/۶۱۶	۱۳۵۷/۲۷۵	۱	۱۰۷۵/۸۸	۱۰۷۵/۰۰۹	۱۰۷۵/۷۲۵
۱۴	۱۳۸۳/۲	۱۳۸۱/۰۶۲	۱۳۸۲/۸۷۵	۲	۱۰۹۷/۳۴	۱۰۹۷/۲۹۵	۱۰۹۷/۴۴۲
[bmpy][AIC1۴]				۳	۱۰۶۳/۱۴	۱۰۶۳/۴۸۲	۱۰۶۳/۴۷۲
	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	۴	۱۰۷۵/۰۷	۱۰۷۴/۳۹۹	۱۰۷۵/۱۲۶
۱	۱۱۹۳	۱۱۹۱/۸۶۶	۱۱۹۳/۸۳۷	۵	۱۰۹۶/۳۹	۱۰۹۶/۸۵۲	۱۰۹۶/۶۹۳
۲	۱۱۹۱/۹	۱۱۹۰/۲۳۱	۱۱۹۳/۷۵۲	۶	۱۰۵۹/۳۷	۱۰۶۰/۰۷۵	۱۰۵۹/۵۵۵
[hmpy][AIC1۴]				۷	۱۰۷۱/۵۷	۱۰۷۱/۱۱۱	۱۰۷۱/۶۱۷
	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	۸	۱۰۸۸/۲۵	۱۰۸۸/۲۱۲	۱۰۸۸/۳۵۷
۱	۱۱۳۶/۳	۱۱۳۲/۴۷۲	۱۱۳۶/۷۹۷	۹	۱۰۵۱/۵۴	۱۰۵۲/۵۸	۱۰۵۱/۳۵۷
۲	۱۱۳۵/۴	۱۱۳۰/۷۷۲	۱۱۳۶/۷۲۶	۱۰	۱۰۶۴/۶	۱۰۶۴/۳۳۵	۱۰۶۴/۶۶۷
[ompy][AIC1۴]				۱۱	۱۰۸۱/۳۷	۱۰۸۱/۸۲۶	۱۰۸۲/۰۶۲
	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	۱۲	۱۰۴۸/۳۸	۱۰۴۹/۵۵۱	۱۰۴۸/۴۷۵
۱	۱۱۱۰/۴	۱۱۰۸/۸۳۳	۱۱۱۰/۷۱۸	۱۳	۱۰۶۷/۲۱	۱۰۶۶/۸۹۷	۱۰۶۷/۴۴۳
۲	۱۱۰۹/۴	۱۱۰۷/۰۱۳	۱۱۰۹/۶	۱۴	۱۰۷۸/۴۷	۱۰۷۸/۶۴۳	۱۰۷۹/۱۰۶
[prmpip][NTF۲]				۱۵	۱۰۴۷/۹۶	۱۰۴۸/۵۰۶	۱۰۴۷/۹۲
	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	۱۶	۱۰۶۴/۰۳	۱۰۶۳/۵۹۲	۱۰۶۳/۸۲۹
۱	۱۴۲۳/۸	۱۴۲۲/۱۱۶	۱۴۲۳/۹۷۹	۱۷	۱۰۸۰/۶۷	۱۰۸۱/۳۳	۱۰۸۰/۹۸۸
۲	۱۴۰۷/۲	۱۴۰۵/۸۵۱	۱۴۰۷/۲۶۱	۱۸	۱۰۵۱/۵۱	۱۰۵۱/۲	۱۰۵۱/۳۸۷
۳	۱۴۱۰	۱۴۰۸/۷۴۴	۱۴۱۰/۲۹۳	۱۹	۱۰۷۵/۱۷	۱۰۷۵/۲۹۵	۱۰۷۵/۴۱۱
۴	۱۴۳۰/۷۱	۱۴۳۰/۶۴۸	۱۴۳۰/۹۱۹	[P۶۶۶ ۱۴][AC]			
۵	۱۴۰۱	۱۴۰۰/۴۴۴	۱۴۰۱/۵۳۷	۱	۸۹۷/۹۶	۸۹۸/۲۸۴۳	۸۹۸/۰۰۱۱
۶	۱۴۱۸/۴	۱۴۱۹/۲۰۴	۱۴۱۸/۴۰۵	۲	۹۱۴/۹۱	۹۱۵/۷۷۶۶	۹۱۵/۱۰۵۲
۷	۱۳۹۳/۲	۱۳۹۳/۲۶۳	۱۳۹۳/۳۶۳	۳	۸۸۷/۹۶	۸۸۸/۸۵۳۸	۸۸۷/۸۸۹۹
۸	۱۳۷۷/۸	۱۳۷۹/۱۲۱	۱۳۷۷/۶۷۹	۴	۸۹۷/۵۲	۸۹۷/۴۵۰۲	۸۹۷/۶۴۶۸
۹	۱۳۸۰/۹	۱۳۸۲/۲۲۳	۱۳۸۰/۷۷۶	۵	۹۱۴/۳۱	۹۱۵/۰۵۱۳	۹۱۴/۱۲۲۷
۱۰	۱۳۵۸/۵	۱۳۵۹/۹۷۱	۱۳۵۸/۴۰۸	۶	۸۸۵/۱۳	۸۸۵/۸۶۶۱	۸۸۵/۰۳۰۹
۱۱	۱۳۶۴/۷	۱۳۶۵/۸۷۷	۱۳۶۴/۳۵۴	۷	۸۹۴/۸۸	۸۹۴/۵۵۲۳	۸۹۵/۰۱۲۸
۱۲	۱۳۲۵/۳	۱۳۲۵/۵۱۷	۱۳۲۴/۷۳۹	۸	۹۰۷/۹۵	۹۰۷/۹۵۴	۹۰۸/۳۵۴۴
۱۳	۱۳۴۸/۹	۱۳۴۸/۲۳۶	۱۳۴۸/۲۸۱	۹	۸۸۴/۲۶	۸۸۴/۶۱۵۷	۸۸۴/۳۳۳۵
[p۴۴۴۴][Ser]				۱۰	۹۰۱/۲۱	۹۰۰/۶۱۹۸	۹۰۱/۳۶۰۸
	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	۱	۹۵۳	۹۴۹/۳۵۶۹	۹۴۹/۲۲۵۵
[p۴۴۴۴][Tau]				۲	۹۸۷	۹۹۲/۷۸۴۴	۹۸۴/۶۷۰۴
	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM	[p۴۴۴۴][Lys]			
۱	۹۸۷	۹۹۲/۷۸۴۴	۹۸۴/۶۷۰۴				
[p۴۴۴۴][Lys]							
	مقادیر تجربی	GCM-ANN	GCM-SVM				

ادامه‌ی جدول (پ-۲)

۱۱	۹۰۹/۲۷	۹۰۹/۵۰۹۹	۹۰۹/۳۲۲۷	۱۰	۹۰۸/۳۴	۹۰۹/۳۳۶۷	۹۰۸/۵۷۵۱
۱۲	۸۸۱/۶	۸۸۱/۸۱۷۴	۸۸۱/۵۷۸۷	۱۱	۸۸۵/۲۴	۸۸۴/۷۱۷۶	۸۸۵/۲۵۴۶
۱۳	۸۹۴/۳۶	۸۹۳/۴۰۷۸	۸۹۴/۲۲۳۵	۱۲	۸۹۹/۶۳	۸۹۹/۶۴۸۹	۸۹۹/۶۹۱۸
۱۴	۸۷۵/۲۵	۸۷۵/۸۵۶۵	۸۷۵/۰۹۶۸	۱۳	۸۸۰/۸۲	۸۸۰/۸۶۲۱	۸۸۰/۸۶۴۹
۱۵	۸۷۸	۸۷۸/۱۴۶۶	۸۷۷/۷۸۲۶	۱۴	۸۹۹/۰۱	۸۹۹/۸۳۱۹	۸۹۹/۴۱۲۷
۱۶	۸۹۰/۸۶	۸۸۹/۸۹۳۳	۸۹۱/۰۵۷۷	۱۵	۸۷۴/۳۳	۸۷۴/۹۱۵	۸۷۴/۰۳۴۹
۱۷	۹۰۳/۸۶	۹۰۳/۶۳۰۸	۹۰۴/۰۸۳۳	۱۶	۸۸۹/۶۲	۸۸۹/۸۰۸	۸۸۹/۷۸۳۴
۱۸	۸۷۷/۷۱	۸۷۷/۵۲۸۹	۸۷۷/۶۴۸۴	۱۷	۸۷۳/۶۴	۸۷۴/۴۶۲۴	۸۷۳/۳۴۳
۱۹	۸۹۷/۰۶	۸۹۶/۳۲۱۴	۸۹۷/۱۶۲۱	۱۸	۸۹۱/۴۶	۸۹۲/۵۲۶۵	۸۹۱/۷۳۰۶
۲۰	۹۰۱/۲۷	۹۰۰/۹۰۷۲	۹۰۱/۱۸۳۷	[N۱۱۱۴][NTF۲] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM			
۲۱	۸۷۷/۵	۸۷۷/۱۳۲۳	۸۷۷/۱۸۲۳	۱	۱۳۲۶/۲	۱۳۲۶/۴۱۹	۱۳۲۴/۹۹۵
۲۲	۸۹۶/۶۶	۸۹۶/۰۲۹۸	۸۹۷/۱۳۸۹	۲	۱۳۷۳/۵	۱۳۷۳/۹۸۷	۱۳۶۹/۶۷۹
[P۶۶۶ ۱۴][CL] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM				۳	۱۳۷۶/۴	۱۳۷۷/۰۷۸	۱۳۶۹/۹۸۵
۱	۹۰۱/۳۳	۹۰۰/۱۹۹۷	۹۰۱/۲۹۹۸	۴	۱۳۸۲/۲	۱۳۸۳/۳۱	۱۳۷۸/۴۱۹
۲	۸۸۸/۵۱	۸۸۷/۸۷۴۸	۸۸۸/۳۸۷۶	۵	۱۳۸۷/۷	۱۳۸۹/۴۹۸	۱۳۹۳/۱۰۴
۳	۸۹۲/۳۵	۸۹۱/۴۵۶۴	۸۹۲/۴۱۹۶	۶	۱۳۹۳/۲	۱۳۹۵/۶۹۴	۱۴۰۰/۵۲۸
۴	۹۰۵/۱۷	۹۰۴/۷۹۷۲	۹۰۵/۵۳۹۲	[N۴۴۴۱][Ser] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM			
۵	۸۸۶/۰۷	۸۸۵/۵۴۴۵	۸۸۶/۱۰۳۴	۱	۹۷۶	۹۷۳/۳۰۷۹	۹۷۸/۳۰۲۵
۶	۸۹۰/۸۷	۸۸۹/۹۹۸۹	۸۹۰/۹۶۰۹	[N۴۴۴۱][Lys] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM			
۷	۹۰۸/۸۳	۹۰۹/۳۷۱۲	۹۰۹/۳۱۶۹	۱	۹۴۱	۹۴۷/۱۹۴۱	۹۳۶/۷۸۲۸
۸	۸۸۶/۷۵	۸۸۶/۰۸۷۴	۸۸۶/۹۲۰۴	[N۴۴۴۱][Lys] مقادیر تجربی GCM-ANN GCM-SVM			
۹	۹۰۰/۰۴	۸۸۹/۶۷۰۶	۹۰۰/۰۲۱۱	۱	۹۶۰	۹۵۶/۸۹۵۷	۹۶۳/۳۷۰۶

منابع

[۱] Keskin S., Kayrak-Talay D., Akman U., Hortacsu O., (۲۰۰۷)., "A review of ionic liquids towards supercritical fluid applications"., *J. Super Crit. Fluids.*, ۴۳, ۱۵۰-۱۸۰.

[۲] اصفهانی س، (۱۳۹۲)، رساله‌ی دکتری: "کمپلکس‌های مولیبدن و نانو ذرات پالادیوم در سیستم‌های کاتالیزوری دو فازی مایع یونی-مایع و مایع یونی تثبیت شده (SILP) و فرایندهای کاتالیزوری سبز با استفاده از پلیمرهای مایع یونی (PILS)"، دانشکده‌ی شیمی، دانشگاه صنعتی شریف.

[۳] Feng R., Zhao D., Guo Y., (۲۰۱۰)., "Revisiting Characteristics of Ionic Liquids: A Review for Further Application Development"., *J. Environ. Protec.*, ۱, ۹۵-۱۰۴.

[۴] Han D., Ho Row K., (۲۰۱۰)., "Recent Applications of Ionic Liquids in Separation Technology"., *Molecules.*, ۱۵, ۲۴۰۵-۲۴۲۶.

[۵] Khupse N., Kumar A., (۲۰۱۰)., "Ionic liquids: New materials with wide applications"., *Ind. J. chem.*, ۴۹, ۶۳۵-۶۴۸.

[۶] Plechkova N., Seddon K., (۲۰۰۸)., "Applications of ionic liquids in the chemical industry"., *Chem. Soc. Rev.*, ۳۷, ۱۲۳-۱۵۰.

[۷] Sowmiah S., Srinivasadesikan V., Tseng M., Chu Y., (۲۰۰۹)., "On the Chemical Stabilities of Ionic Liquids"., *Molecules.*, ۱۴, ۳۷۸۰-۳۸۱۳.

[۸] Zhang S., Sun N., He X., Lu X., Zhang X., (۲۰۰۶)., "Physical Properties of Ionic Liquids: Database and Evaluation"., *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, ۳۵, ۱۴۷۵-۱۵۱۷.

[۹] Selvam T., Machoke A., Schwieger W., (۲۰۱۲)., "Supported ionic liquids on non-porous and porous inorganic materials—A topical review"., *App. Catalys. A: General.*, ۴۴۵-۴۴۶, ۹۲-۱۰۱.

[۱۰] Singh G., Kumar A., (۲۰۰۸)., "Ionic liquids: physic-chemical, solvent properties and their applications in chemical processes"., *Ind. J. chem.*, ۴۷, ۴۹۵-۵۰۳.

[۱۱] Arijit B., Andreia L., João H., José A., (۲۰۱۴)., "Thermophysical properties of

- sulfonium and ammonium-based ionic liquids"., *Fluid Phase Equilib.*, 281, 36–45.
- [12] Marsh K., Boxall J., Lichtenthaler R., (2004)., "Room temperature ionic liquids and their mixtures—a review"., *Fluid Phase Equilib.*, 219, 93–98.
- [13] Keskin S., Kayrak-Talay D., Akman U., Hortac, su O., (2007)., "A review of ionic liquids towards supercritical fluid applications"., *J. Super crit. Fluids.*, 42, 150–180.
- [14] Pino V., Afonso A., (2012)., "Surface-bonded ionic liquid stationary phases in high-performance liquid chromatography—A review"., *Anal. Chim. Acta.*, 714, 20–37.
- [15] Heintz A., (2005)., "Recent developments in thermodynamics and thermophysics of non-aqueous mixtures containing ionic liquids. A review"., *J. Chem. Thermodyn.*, 37, 525–535.
- [16] Naushad M.u., ALOthman Z., Bashar Khan A., Ali M., (2012)., "Effect of ionic liquid on activity, stability, and structure of enzymes: A review"., *Int. J. Biol. Macromol.*, 51, 555–560.
- [17] Bonhote A.P., Dias AP., Papageorgiou N., Kalyanasundaram K., Graetzel M., (1996)., "Hydrophobic, Highly Conductive Ambient-Temperature Molten Salts"., *Inorg. Chem.*, 35, 1168–1178.
- [18] Sun J., Forsyth M., MacFarlane M., (1998)., "Room-temperature molten salts based on the quaternary ammonium ion"., *J. Phys. Chem.*, 102, 8858–8864.
- [19] Hamill N.A., Seddon K.R., Stark A., Torres M.J., (2001)., "Viscosity and density of 1-alkyl-3-alkylimadazolium ionic liquids"., *Am. Chem. Soc.*, 221, 270–279.
- [20] Phuong T., Cho C., Yun Y., (2010)., "Environmental fate and toxicity of ionic liquids: A review"., *water Res.*, 44, 352–372.
- [21] Visser A.E., Swatloski R.P., Reischert W.M., Mayton R., Sheff S., Wierzbicki A., Davis J.H., Rogers R.D., (2002)., "Task-specific ionic liquids incorporating novel cations for the coordination and extraction of Hg^{2+} and Cd^{2+} : synthesis, characterization,

and extraction studies, Environ"., *Sci. Technol.*, ۳۶, ۲۵۲۳-۲۵۲۹.

[۲۲] Anthony J.L., Maginn E.J., Brennecke J.F., (۲۰۰۲)., "Solubilities and thermodynamic properties of gases in the ionic liquid ۱-n-butyl-۳-methylimidazolium hexafluorophosphate"., *J. Phys. Chem.*, ۱۰۶, ۷۳۱۵-۷۳۲۰.

[۲۳] Jenkins H., (۲۰۰۲)., "Lattice Potential Energy Estimation for Complex Ionic Salts from Density Measurements"., *Inorg. Chem.*, ۴۱, ۲۳۶۴-۲۳۶۷.

[۲۴] Ye C., Shreeve J., (۲۰۰۷)., "Rapid and Accurate Estimation of Densities of Room-Temperature Ionic Liquids and Salts"., *J. Phys. Chem.*, ۱۱۱, ۱۴۵۶-۱۴۶۱.

[۲۵] Gardas R., Coutinho J., (۲۰۰۸)., "Extension of the Ye and Shreeve group contribution method for density estimation of ionic liquids in a wide range of temperatures and pressures"., *Fluid Phase Equilib.*, ۲۶۳, ۲۶-۳۲.

[۲۶] Goharshadi E., Moosavi M., (۲۰۰۸)., "Thermodynamic properties of some ionic liquids using a simple equation of state"., *J. Mol. Liq.*, ۱۴۲, ۴۱-۴۴.

[۲۷] Lazzús J., (۲۰۰۹)., "Estimation of Density as a Function of Temperature and Pressure for Imidazolium-Based Ionic Liquids Using a Multilayer Net with Particle Swarm Optimization"., *Int. J. Thermophys.*, ۳۰, ۸۸۳-۹۰۹.

[۲۸] Valderrama J.O., Reategui A., Rojas R.E., (۲۰۰۹)., "Density of ionic liquids using group contribution and artificial neural networks"., *Ind. Eng. Chem. Res.*, ۴۸, ۳۲۵۴-۳۲۵۹.

[۲۹] Mutihac L., Mutihac R., (۲۰۰۸)., "Mining in chemometrics"., *J. Anal. Chim. Acta.*, ۶۱۲, ۱-۱۸.

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

[۳۱] منهای م، (۱۳۸۷)، "مبانی شبکه‌های عصبی (هوش محاسباتی)" جلد اول، چاپ پنجم، مرکز

نشر دانشگاه امیر کبیر، تهران.

[۳۲] McCulloch W.W., Pitts W., (۱۹۴۳)., "A Logical Calculus of the Ideas Imminent in Nervous Activity"., *Bull. Math. Biophys.*, ۵, ۱۱۵-۱۳۳.

[۳۳] Rosenblatt F., (۱۹۵۸)., "The Perceptron: A Probabilistic Model for Information Storage and Organization in the brain"., *Cornel Aeronautical Lab, Psychological Review.*, ۶۵, ۳۸۶-۴۰۸.

[۳۴] اشرفی م، (۱۳۸۹)، پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد: "مطالعه‌ی ارتباط کمی ساختار-فعالیت مشتقات تیوکربامات‌ها به عنوان دسته‌ی جدیدی از بازدارنده‌های غیرنوکلئوزیدی HIV"، دانشکده‌ی شیمی، دانشگاه شاهرود.

[۳۵] کاظم نادى ورنوسفادرانى ز، (۱۳۹۱)، پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد: "پیش‌بینی ضریب تراکم‌پذیری همدمای ترکیبات آلی بر اساس توصیف‌کننده‌های ساختاری مولکولی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار"، دانشکده‌ی شیمی، دانشگاه شاهرود.

[۳۶] Mukesh D., (۱۹۹۶)., "Applications of Neural Computing for Process Chemists"., *J. Chem. E duc.*, ۷۳, ۵۱۸-۵۲۰.

[۳۶] 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.

[۳۷] Chen N., Yang J., Lu W., (۲۰۰۴)"Support Vector Machines in chemistry", Word scientific publishing Co. Pte. Ltd.

[۳۸] Ivanciuc O., (۲۰۰۷)., "Applications of support vector machines in chemistry"., *In: Rev. Comput. Chem.*, ۲۳, ۲۹۱-۴۰۰.

[۳۹] Hemmateenejad B., Javadnia K., Elyasi M., (۲۰۰۷)., "Quantitative structure-retention relationship for the Kovats retention indices of a large set of terpenes: A combined data splitting-feature selection strategy"., *Anal. Chim. Acta.*, ۵۹۲, ۷۲-۸۱.

- [٤٠] Vapnik V., Cortes C., (١٩٩٥)., "Support-Vector Networks"., *Machine learning.*, ٢٠, ٢٧٣-٢٩٧.
- [٤١] Hemmateenejad B., Shamsipur M., Miri R., Elyasi M., Foroghinia F., Sharghi H., (٢٠٠٨)., "Linear and nonlinear quantitative structure–property relationship models for solubility of some anthraquinone, anthrone and xanthone derivatives in supercritical carbon dioxide"., *Anal. Chim. Acta*, ٦١٠, ٢٥–٣٤.
- [٤٢] Mercer J., (١٩٠٩)., "Functions of positive and negative type and their connection with the theory of integral equations"., *Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. A*. ٢٠٩, ٤١٥-٤٤٤.
- [٤٣] Vapnik V., Blanz V., Scholkopf B., Bulthoff H., Burges C., Vetter T., (١٩٩٤)., "Comparison of view-based object recognition algorithms using realistic 3D models. In: von der Malsburg C., von Seelen W., Vorbruggen J.C., Sendhoff B. (Eds.), *Artificial Neural Networks ICANN'96*"., *Berlin. Springer Lecture Notes in Computer Science*, ١١١٢, ٢٥١–٢٥٤.
- [٤٤] Burges C.J.C., (١٩٩٨)., " A Tutorial on Support Vector Machines for Pattern Recognition"., *Kluwer Academic Publishers, Boston. Manufactured in The Netherlands*, ١-٤٣.
- [٤٥] Wang L, (٢٠٠٥), "Support Vector Machines: Theory and Applications", Nanyang Technological University, School of Electrical and Electronic Engineering, Springer Berlin Heidelberg New York.
- [٤٦] Valderrama J.O., Sanga W.W., Lazzús J.A., (٢٠٠٨)., "Critical Properties, Normal Boiling Temperature, and Acentric Factor of Another ٢٠٠ Ionic Liquids"., *Ind. Eng. Chem. Res.*, ٤٧, ١٣١٨-١٣٣٠.
- [٤٧] Zang S.L., Zhang Q.G., Huang M., Wang B., Yang J.Z., (٢٠٠٥)., "Studies on the properties of ionic liquid EMInCl_٤"., *Fluid Phase Equilib.*, ٢٣٠, ١٩٢-١٩٦.
- [٤٨] Zhang S., Sun N., He X., Lu X., Zhang X., (٢٠٠٤)., "Physical Properties of Ionic

Liquids: Database and Evaluation"., *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, **35**, 1475-1517.

[49] Gardas R.L., Freire M.G., Carvalho P.J., Marrucho I.M., Fonseca I.M.A., Ferreira A.J.M., Coutinho J.A.P., (2007), "PpT Measurements of Imidazolium-Based Ionic Liquids"., *J. Chem. Eng. Data.*, **52**, 1881-1888.

[50] Arce A., Rodríguez H., Soto A., (2006), "Effect of anion fluorination in 1-ethyl-3-methylimidazolium as solvent for the liquid extraction of ethanol from ethyl tert-butyl ether"., *Fluid Phase Equilib.*, **242**, 164-168.

[51] Tome L.I.N., Carvalho P.J., Freire M.J., Marrucho I.M., Fonseca I.M.A., Ferreira A.G.M., Coutinho J.A.P., Gardas R.L., (2008), "Measurements and Correlation of High-Pressure Densities of Imidazolium-Based Ionic Liquids"., *J. Chem. Eng. Data.*, **53**, 1914-1921.

[52] Gardas R.L., Costa H.F., Freire M.G., Carvalho P.J., Marrucho I.M., Fonseca I.M.A., Ferreira A.G.M., Coutinho J.A.P., (2008), "Densities and Derived Thermodynamic Properties of Imidazolium-, Pyridinium-, Pyrrolidinium-, and Piperidinium-Based Ionic Liquids"., *J. Chem. Eng. Data.*, **53**, 805-811.

[53] Chen P.Y., Hussey C.L., (2004), *Electro. Chim. Acta.*, **49**, 5125-5130.

[54] Matsumoto K., Hagiwara R., (2005), *J. Fluorine Chem.*, **126**, 1095-1099.

[55] Wypych, G., (2001), *Handbook of Solvents.*, Chem Tec Publishing., New York, U.S.A.

[56] Esperança J.M.S.S., Guedes H.J.R., Lopes J.N.C., Rebelo L.P.N., (2008), "Pressure-Density-Temperature (p - ρ - T) Surface of [C₆mim][NTf₂]"., *J. Chem. Eng. Data.*, **53**, 867-870.

[57] Tong J., Liu Q.S., Zhang P., Yang J.Z., (2007), "Surface Tension and Density of 1-Methyl-3-hexylimidazolium Chloroindium"., *J. Chem. Eng. Data.*, **52**, 1497-1500.

[58] Gardas R.L., Freire M.G., Carvalho P.J., Marrucho I.M., Fonseca I.M.A., Ferreira A.G.M., Coutinho J.A.P., (2007), "High-Pressure Densities and Derived Thermodynamic Properties of Imidazolium-Based Ionic Liquids"., *J. Chem. Eng. Data.*, **52**, 80-88.

- [69] Ochędzan-Siodłak W., Dziubek K., Siodłak D., (2013), "Densities and viscosities of imidazolium and pyridinium chloroaluminate ionic liquids", *J. Mol. Liq.*, 177, 80-93.
- [70] Carda-Broch S., Berthod A., Armstrong D.W., (2003), *Anal. Biochem.*, 325, 191-199.
- [71] Xu W., Wang L.M., Nieman R.A., Angell C.A., (2003), "Ionic Liquids of Chelated Orthoborates as Model Ionic Glassformers", *J. Phys. Chem. B.*, 107, 11749-11756.
- [72] Zhang S., Sun N., He X., Lu X., Zhang X., (2006), *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, 35, 1475-1480.
- [73] Rocha M.A.A., Ribeiro F.M.S., Ferreira A.M.C.L., Coutinho J.A.P., Santos L.M.N.B.F., (2013), *J. Mol. Liq.*, 188, 196-200.
- [74] Xiao D., Rajian J.R., Cady A., Li S., Bartsch R.A., Quitevis E.L., (2007), "Nanostructural Organization and Anion Effects on the Temperature Dependence of the Optical Kerr Effect Spectra of Ionic Liquids", *J. Phys. Chem. B.*, 111, 4669-4677.
- [75] Tong J., Hong M., Guan W., Li J.B., Yang J.Z., (2006), "Studies on the thermodynamic properties of new ionic liquids: 1-Methyl-3-pentylimidazolium salts containing metal of group III", *J. Chem. Thermodyn.*, 38, 1416-1421.
- [76] Papaiconomou N., Yakelis N., Salminen J., Bergman R., Prausnitz J.M., (2006), "Synthesis and Properties of Seven Ionic Liquids Containing 1-Methyl-3-octylimidazolium or 1-Butyl-4-methylpyridinium Cations", *J. Chem. Eng. Data.*, 51, 1389-1393.
- [77] Dzyuba S.V., Bartsch R.A., (2002), *J. Phys. Chem.*, 3, 161-170.
- [78] Shiflett M.B., Harmer M.A., Junk C., (2006), *Fluid Phase Equilib.*, 242, 220-228.
- [79] Fang S., Yang L., Wei C., Peng C., Tachibana K., (2007), *Electrochem. Commun.*, 9, 2696-2697.

- [٧٠] Tsunashima K., Sugiya M., (٢٠٠٧), "Physical and electrochemical properties of low-viscosity phosphonium ionic liquids as potential electrolytes", *Electrochem. Commun.*, 9, ٢٣٥٣-٢٣٥٨.
- [٧١] Gardas R.L., Goodrich P., Hardacre C., Hussain A., Rooney D.W., (٢٠١٠), "Thermophysical Properties of Amino Acid-Based Ionic Liquids", *J. Chem. Eng. Data.*, 55, ١٥٠٥-١٥١٥.
- [٧٢] Jacquemin J., Nancarrow P., Rooney D.W., Gomes M.F.C., Husson P., Majer V., Padua A.A.H., Hardacre C., (٢٠٠٨), "Prediction of Ionic Liquid Properties. II. Volumetric Properties as a Function of Temperature and Pressure", *J. Chem. Eng. Data.*, 53, ٢١٣٣-٢١٤٣.
- [٧٣] Mantz R.A., Trulove P.C., in *Ionic Liquids in Synthesis*, ed. by Wasserscheid P., Welton T., (Wiley-VCH Verlag GmbH and Co. KGaA, Germany, ٢٠٠٢), ٥٤-١٢٤.

Abstract

In this work, the density of ionic liquids has been estimated using two methods that includes: coupling of group contribution method with artificial neural network (GCM-ANN) and group contribution method with support vector machine (GCM-SVM). The data set consists of 3107 experimental data points of density for a wide range of temperatures (293-414 K), pressures (0.1-65 MPa) and densities (869.21-2400 Kg.m⁻³) corresponding to 188 ionic liquids. The data set in ANN was randomly divided into three groups: training, validation and test set and the data set in SVM was divided into two groups: training and test set. We employ a total of 33 sub-structures plus temperature and pressure as input variables. After training and optimization of the ANN and SVM parameters, the performance of the model was investigated by the test set. The results obtained using ANN and SVM were compared with the experimental values. The results show that the chosen support vector machine and the group contribution method represent an excellent alternative for the estimation of the density of ionic liquids with acceptable accuracy (MSE=12.9525, R²=0.9996), for a wide range of temperatures and pressures.

Key word: Density, Ionic liquid, Group contribution method, Artificial neural network, Support vector machine.



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

**QSPR study of Ionic liquids density as a function of
temperature and pressure using nonlinear methods**

Hoda Keshtkar

Supervisor:

Dr Zahra. Kalantar

Advisor:

Dr Naser. Goudarzi

February. ۲۰۱۵



Shahrood of University
Faculty of Chemistry

**QSPR study of Ionic liquids density as a function of
temperature and pressure using nonlinear methods**

Hoda Keshtkar

Supervisor:

Dr Zahra. Kalantar

Advisor:

Dr Naser. Goudarzi

February.۲۰۱۵