

سورة التوبة



دانشکده شیمی
گروه شیمی تجزیه

عنوان:

مدل سازی QSPR فاکتور بازداری ترکیبات آلی بر روی فازهای ثابت تری فلوئورو پروپیل

دانشجو: حمید غفاری راد

اساتید راهنما:

دکتر ناصر گودرزی

دکتر محمد حسین فاطمی

استاد مشاور:

دکتر منصور عرب

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

ماه و سال انتشار: تیر ۱۳۸۸



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده شیمی

پایان نامه کارشناسی ارشد

حمید غفاری راد

تحت عنوان

مدلسازی QSPR فاکتور بازداری ترکیبات آلی بر روی فازهای ثابت تری

فلوئورو پروپیل

در تاریخ ۱۳۸۸/۴/۲۷ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک کارشناسی ارشد مورد ارزیابی و با درجه کالی مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	مرتبۀ علمی	نام و نام خانوادگی	اعضای هیأت داوران
	استادیار	محمد حسین فاطمی	استاد راهنمای اول
	استادیار	ناصر گودرزی	استاد راهنمای دوم
	دانشیار	منصور عرب چم جنگلی	استاد مشاور
	استادیار	بهرام بهرامیان	نماینده شورای تحصیلات تکمیلی
	استادیار	زهرا کلانتر کهدمی	استاد ممتحن
	استادیار	حسین نیکوفرد	استاد ممتحن

تقدیم به:

پدر و مادر دلسوزم به پاس حمایت های بی دریغشان

و

خواهر و برادر عزیزم

"سپاس نامه"

- خداوند را سپاس می گویم که به من توفیق داد تا این دوره را با موفقیت به پایان برسانم، بی شک گذراندن این دوره بدون همکاری خانواده ، اساتید بزرگوار و دوستان ارجمندم امکان پذیر نبود لذا از پروردگار موفقیت و پیشرفت این عزیزان را خواستارم.
- سپاس بی کران خویش را نثار تمام زحماتی می نمایم که اساتید راهنمای این پروژه آقایان دکتر محمد حسین فاطمی و دکتر ناصر گودرزی متحمل و متقبل گشته اند.
- در پایان شایسته است تا تشکر فراوان خود را به تمامی عزیزانی ابلاغ نمایم که همراه و پشتیبان بنده بوده و به من دلگرمی بخشیدند.

حمید غفاری راد

تیر ۱۳۸۸

تعهد نامه

اینجانب دانشجوی دوره کارشناسی ارشد / دکتری رشته
دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه / رساله
تحت راهنمایی آقای/ خانم
متعهد می شوم .

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

تاریخ: ۱۳۸۸/۰۵/۲۴

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

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

* متن این صفحه نیز باید در ابتدای نسخه های تکثیر شده پایان نامه / رساله وجود داشته باشد .

چکیده:

یک مطالعه ی ارتباط کمی ساختار-خاصیت بر روی شاخص های بازداري (RI) ترکیبات آلی انجام شد. استراتژی رگرسیون مرحله ای برای انتخاب توصیف کننده به کار گرفته شد. مدل سازی جهت ارتباط میان توصیف کننده های مولکولی انتخاب شده و شاخص های بازداري داده ها از طریق روش های خطی (رگرسیون خطی چندگانه؛ MLR) و غیر خطی (شبکه ی عصبی مصنوعی؛ ANN) مورد بررسی قرار گرفته است. مدل های QSPR به وسیله تکنیک توقف زود هنگام اعتبار سنجی شدند به طوری که مدل برای پیش بینی زمان بازداري ترکیبات سری بیرونی که در مراحل ایجاد مدل شرکت نداشتند، به کار برده شد. هر دوی روش های خطی و غیر خطی توانایی پیش بینی دقیقی دارند اگر چه مدل ANN نتایج دقیق تری دارد. خطای مربع میانگین (mse) سری تست توسط مدل های MLR و ANN به ترتیب ۷۵/۵۴۹ و ۳۴/۷۱۴ بودند. در بخش دوم، روش های MLR و ANN برای پیش بینی زمان بازداري ۱۲۶ دی فنیل اتر برومینه شده (PBDE) بر روی فاز ساکن DB-۱ ستون کروماتوگرافی گازی به کار برده شد. خطاهای مربع میانگین سری تست به دست آمده توسط مدل های MLR و ANN برای آن دسته از ترکیبات به ترتیب ۰/۰۲۸ و ۰/۰۱۷ بودند.

کلمات کلیدی: کروماتوگرافی گازی، رگرسیون خطی چندگانه، شبکه ی عصبی مصنوعی

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	فصل اول: مقدمه
۱	۱-۱- مقدمه
۲	۲-۱- هدف تحقیق
۳	۳-۱- روش کار
۳	۴-۱- پیشینه ی تحقیق
	فصل دوم: کمومتریکس
۶	۱-۲- کمومتریکس
۷	۲-۲- ارتباط کمی ساختار- ویژگی
۹	۳-۲- ارتباط کمی ساختار- فعالیت
۱۰	۴-۲- تکنیک های اعتبار سنجی
۱۱	۱-۴-۲- اعتبارسنجی تقاطعی
۱۱	۲-۴-۲- تقسیم کردن مجموعه به آموزش و ارزیابی
۱۱	۳-۴-۲- اعتبار سنجی بیرونی
۱۲	۵-۲- رگرسیون خطی چندگانه (MLR)
۱۴	۱-۵-۲- انتخاب سری داده ها
۱۴	۲-۵-۲- انتخاب توصیف کننده ها
۱۶	۱-۲-۵-۲- توصیف کننده های صفر بعدی
۱۶	۲-۲-۵-۲- توصیف کننده های یک بعدی
۱۷	۳-۲-۵-۲- توصیف کننده های دوبعدی
۱۷	۴-۲-۵-۲- توصیف کننده های سه بعدی
۱۸	۳-۵-۲- تجزیه و تحلیل آماری توصیف کننده ها
۱۸	۴-۵-۲- آنالیز مدل های آماری و انتخاب مدل مناسب
۱۹	۱-۴-۵-۲- روش ورود اجباری
۱۹	۲-۴-۵-۲- روش انتخاب جلو برنده

۱۹ روش عقب برنده ۳-۴-۵-۲
۲۰ روش مرحله ای ۴-۴-۵-۲
۲۰ روش حذفی ۵-۴-۵-۲
۲۰ نرم افزارهای مورد استفاده در این پژوهش ۶-۲
۲۱ WinMopac 7.21 نرم افزار ۱-۶-۲
۲۱ MOPAC 6 - RM 1 نرم افزار ۲-۶-۲
۲۲ Hyperchem نرم افزار ۳-۶-۲
۲۲ Dragon نرم افزار ۴-۶-۲
۲۴ SPSS نرم افزار ۵-۶-۲
۲۴ MATLAB نرم افزار ۶-۶-۲

فصل سوم: شبکه ی عصبی مصنوعی

۲۶ ۱-۳- مقدمه ای بر شبکه های عصبی مصنوعی
۲۷ ۲-۳- شباهت با مغز
۲۸ ۳-۳- روش کار نورون ها
۲۹ ۴-۳- مدل ریاضی
۳۳ ۵-۳- مدل نورونی و معماری شبکه
۳۳ ۱-۵-۳- مدل نورونی(عصبی)
۳۳ ۱-۱-۵-۳- توابع انتقال
۳۴ ۲-۱-۵-۳- نورون با بردار ورودی
۳۵ ۲-۵-۳- معماری های شبکه
۳۶ ۱-۲-۵-۳- یک لایه از نورون ها
۳۷ ۲-۲-۵-۳- ورودی ها و لایه ها
۳۷ ۳-۲-۵-۳- لایه های چند گانه از نورون ها
۳۸ ۳-۵-۳- ساختارهای داده ها و شبکه ها

۳۹ ۳-۵-۴- سبک های آموزش
۳۹ ۳-۶- قواعد یادگیری
۴۰ ۳-۷- پس انتشار
۴۰ ۳-۷-۱- مقدمه
۴۰ ۳-۷-۲- کم ترین میانگین مربع خطا
۴۱ ۳-۷-۳- الگوریتم (learnwb) یا الگوریتم ویدرو- هاف
۴۳ ۳-۷-۴- معماری
۴۳ ۳-۷-۴-۱- مدل نورونی
۴۳ ۳-۷-۴-۲- شبکه ی پیش خور
۴۴ ۳-۷-۴-۲-۱- ایجاد یک شبکه
۴۴ ۳-۷-۴-۲-۲- مقدار اولیه دهی وزن ها
۴۵ ۳-۷-۴-۲-۳- شبیه سازی
۴۵ ۳-۷-۵- آموزش
۴۵ ۳-۷-۵-۱- الگوریتم های پس انتشار
۴۶ ۳-۷-۶- آموزش سریع تر
۴۶ ۳-۷-۶-۱- لونبرگ- مارکواردت
۴۹ ۳-۷-۷- بهبود تعمیم
۵۰ ۳-۷-۷-۱- توقف در ابتدا
۵۱ ۳-۷-۷-۲- تنظیم
۵۱ ۳-۷-۸- پیش پردازش و پس پردازش
۵۱ ۳-۷-۸-۱- می نی مم و ماکزیمم
۵۱ ۳-۷-۸-۲- میانگین و انحراف استاندارد
۵۲ ۳-۷-۸-۳- آنالیز اجزای اصلی
۵۲ ۳-۷-۸-۴- پردازش ورودی های ناشناخته

۵۲ حذف ردیف های ثابت ۳-۷-۸-۵
۵۲ آنالیز پس پردازش ۳-۷-۸-۶
	فصل چهارم: مدل سازی QSPR فاکتور بازداری ترکیبات آلی بر روی فازهای ثابت ۳ و ۳ و ۳- تری فلئوروپروپیل متیل سایلوکسان
۵۴ ۴-۱- مقدمه
۵۴ ۴-۲- انتخاب سری داده ها
۶۳ ۴-۳- انتخاب توصیف کننده ها
۶۴ ۴-۴- آنالیز رگرسیون خطی چندگانه
۷۰ ۴-۵- مدل سازی به روش شبکه ی عصبی مصنوعی
۷۱ ۴-۵-۱- بهینه سازی پارامترها
۷۲ ۴-۵-۱-۱- بهینه سازی تعداد نوروں های لایه ی پنهان
۷۲ ۴-۵-۱-۲- بهینه سازی مقدار μ
۷۳ ۴-۵-۱-۳- بهینه سازی تعداد دوره های آموزش
۷۵ ۴-۶- بحث و نتیجه گیری
۷۵ ۴-۶-۱- مقایسه روش های رگرسیون خطی چندگانه و شبکه ی عصبی مصنوعی
۹۵ ۴-۶-۲- بررسی ارتباط توصیف کننده های ساختاری وارد شده در مدل با زمان بازداری مولکول ها
	فصل پنجم: مدل سازی زمان بازداری ۱۲۶ دی فنیل اتر پلی برومینه شده (PBDE) مشابه بر روی فاز ثابت کروماتوگرافی گازی موئینه ۱-DB
۱۰۳ ۵-۱- مقدمه
۱۰۳ ۵-۲- انتخاب سری داده ها
۱۰۷ ۵-۳- انتخاب توصیف کننده ها
۱۰۷ ۵-۴- آنالیز رگرسیون خطی چندگانه
۱۱۴ ۵-۵- مدل سازی به روش شبکه ی عصبی
۱۱۷ ۵-۶- بهینه سازی پارامترهای شبکه

۱۱۷ ۱-۶-۵- بهینه سازی تعداد نورون های لایه ی پنهان
۱۱۸ ۲-۶-۵- بهینه سازی مقدار μ
۱۱۸ ۳-۶-۵- بهینه سازی تعداد دوره های آموزش
۱۲۰ ۷-۵- بحث و نتیجه گیری
۱۲۰ ۱-۷-۵- مقایسه روش های رگرسیون خطی چندگانه و شبکه ی عصبی مصنوعی
۱۲۸ ۲-۷-۵- بررسی ارتباط توصیف کننده های ساختاری وارد شده در مدل با زمان های بازداری تجربی
۱۳۳ آینده نگری
۱۳۴ منابع

فهرست اشکال

صفحه	عنوان
۲۸	شکل ۳-۱- ساختار یک نورون بیولوژیک
۲۹	شکل ۳-۲- مدل ریاضی یک نورون
۳۱	شکل ۳-۳- ساختار لایه ای شبکه ی عصبی مصنوعی
۳۳	شکل ۳-۴- چهار تابع انتقال مختلف
۳۴	شکل ۳-۵- یک نورون با R بردار ورودی تک عنصری
۳۵	شکل ۳-۶- علامت مختصر شده نورون انفرادی
۳۶	شکل ۳-۷- یک شبکه ی تک لایه ای
۳۷	شکل ۳-۸- شبکه ی تک لایه ای دارای S نورون با R ورودی
۳۸	شکل ۳-۹- علامت مختصر شده شبکه ی سه لایه ای
۳۹	شکل ۳-۱۰- شبکه های استاتیک (الف) و دینامیک (ب)
۴۴	شکل ۳-۱۱- شبکه ی پیش خور دو لایه ای tansig/purelin
۷۲	شکل ۴-۱- نمودار میانگین مربع خطا (mse) بر حسب تعداد نورون های لایه ی پنهان
۷۳	شکل ۴-۲- نمودار میانگین مربع خطا (mse) بر حسب پارامتر μ
۷۴	شکل ۴-۳- تصویر شماتیک ساختار شبکه ی عصبی مصنوعی به دست آمده پس از بهینه سازی
۷۵	شکل ۴-۴- منحنی شاخص های بازداری محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل مقادیر تجربی برای (الف) سری آموزشی (ب) سری تست (ج) سری اعتبار
۷۶	شکل ۴-۵- منحنی مقادیر باقیمانده ی محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل شاخص های بازداری تجربی برای (الف) سری آموزشی (ب) سری تست (ج) سری اعتبار
۷۷	شکل ۴-۶- منحنی شاخص های بازداری محاسبه شده توسط تکنیک ANN در مقابل شاخص های بازداری تجربی برای (الف) سری آموزشی (ب) سری تست (ج) سری اعتبار
۷۸	شکل ۴-۷- منحنی مقادیر باقیمانده ی محاسبه شده توسط روش ANN در مقابل شاخص های بازداری تجربی برای (الف) سری آموزشی (ب) سری تست (ج) سری اعتبار
۱۰۳	شکل ۵-۱- ساختار و فرمول شیمیایی دی فنیل اتر پلی برمینه شده (PBDE)
۱۱۷	شکل ۵-۲ نمودار میانگین مربع خطا (mse) بر حسب تعداد نورون های لایه ی پنهان

- ۱۱۸ شکل ۳-۵- نمودار میانگین مربع خطا (mse) بر حسب مقادیر μ
- ۱۱۹ شکل ۴-۵- تصویر شماتیک ساختار شبکه ی عصبی مصنوعی به دست آمده پس از بهینه سازی
- شکل ۵-۵- منحنی زمان بازداری نسبی محاسبه شده توسط روش MLR برای الف) سری آموزش ب) سری تست ج) سری اعتبار
- ۱۲۰ شکل ۶-۵- منحنی مقادیر باقیمانده در مقابل زمان بازداری نسبی تجربی برای روش ANN در الف) سری آموزش ب) سری تست ج) سری اعتبار
- ۱۲۱ شکل ۷-۵- منحنی زمان بازداری نسبی محاسبه شده توسط روش ANN برای الف) سری آموزش ب) سری تست ج) سری اعتبار
- ۱۲۲ شکل ۸-۵- منحنی مقادیر باقیمانده در مقابل مقادیر تجربی زمان بازداری توسط روش ANN برای الف) سری آموزش ب) سری تست ج) سری اعتبار
- ۱۲۳ شکل ۹-۵- منحنی مقادیر باقیمانده در مقابل مقادیر تجربی زمان بازداری توسط روش ANN برای الف) سری آموزش ب) سری تست ج) سری اعتبار

فهرست جداول

صفحه	عنوان
۲۳	جدول ۱-۲- فهرست توصیف کننده های محاسبه شده توسط نرم افزار Dragon
۵۵	جدول ۴-۱- شاخص های بازداري در الف (۳۵۳K، ب) (۳۷۳k، ج) ۳۹۳k و د) ۴۱۳k در فاز های ثابت تری فلئوئوروپروپیل مطالعه شده با درصد گروه های تری فلئوئورو پروپیل (TFP) متفاوت
۵۵	جدول ۴-۱- الف- شاخص های بازداري در ۳۵۳K
۵۷	جدول ۴-۱- ب- شاخص های بازداري در ۳۷۳K
۵۹	جدول ۴-۱- ج- شاخص های بازداري در ۳۹۳K
۶۱	جدول ۴-۱- د- شاخص های بازداري در ۴۱۳k
۶۶	جدول ۴-۲- مشخصات مدل منتخب توسط روش رگرسیون خطی چندگانه
۶۷	جدول ۴-۳- ماتریس هم بستگی متغیرهای مستقل وارد شده در مدل منتخب
۶۸	جدول ۴-۴- مقادیر توصیف کننده های وارد شده در مدل منتخب برای ستون های TFPS
۷۳	جدول ۴-۵- توابع و مقادیر پارامترهای مهم شبکه ی عصبی مصنوعی
۸۰	جدول ۴-۶- مقادیر تجربی شاخص بازداري (RI) و مقادیر پیش بینی شده توسط تکنیک های MLR و ANN. (tr: سری آموزش، t: سری تست، v: سری اعتبار)
۹۵	جدول ۴-۷- مقایسه ی آماره های به دست آمده از دو روش MLR و ANN
۱۰۴	جدول ۵-۱- روش نامگذاری ۲۰۹ دی فنیل اتر پلی برمینه شده (PBDE) مشابه
۱۰۵	جدول ۵-۲- نام ۱۲۶ دی فنیل اتر برمینه شده (BDE) مشابه و زمان های بازداري نسبی (RRT) آن ها بر حسب BDE های ۴۷ و ۱۸۳
۱۰۹	جدول ۵-۳- مشخصات مدل منتخب توسط رگرسیون خطی چندگانه
۱۱۰	جدول ۵-۴- ماتریس هم بستگی توصیف کننده های وارد شده در مدل
۱۱۱	جدول ۵-۵- مقادیر توصیف کننده های وارد شده در مدل منتخب برای PBDE ها
۱۱۹	جدول ۵-۶- توابع و مقادیر پارامترهای مهم شبکه ی عصبی
۱۲۴	جدول ۵-۷- مقادیر تجربی زمان بازداري نسبی (RRT) و مقادیر پیش بینی شده توسط تکنیک های MLR و ANN. (tr: سری آموزش، t: سری تست، v: سری اعتبار)
۱۲۸	جدول ۵-۸- مقایسه ی آماره های به دست آمده از دو روش MLR و ANN

جدول ۵-۹- مقادیر جرم اتمی برای سه اتم ۱۳۱

فصل اول

مقدمه

۱-۱- مقدمه

توانایی حل مسائل مختلف در زمینه درک مکانیسم فرایندهای مختلف شیمیایی، کشف و توسعه ی مواد جدید و زمینه های دیگر شیمی هنوز به طور کامل وجود ندارد. روش های محاسباتی کمومتریکس توانسته اند در جهت حل این مشکلات به میزان زیادی مفید واقع شوند. روش های تئوری تکنیک های کمومتریکس از چند دهه ی پیش شناخته شده اند اما اخیراً با ظهور کامپیوترهای قدرتمند، کمومتریکس ماهیت واقعی خود را پیدا کرده است. بر طبق تعریف جامعی که انجمن بین المللی کمومتریکس از این روش دارد، کمومتریکس علم برقراری ارتباط بین سنجش های انجام شده بر روی یک سیستم یا فرایند شیمیایی با استفاده از روش های آماری و ریاضی می باشد. شاخه های مختلف شیمی اعم از شیمی فیزیک، شیمی آلی، شیمی معدنی، بیوشیمی و به ویژه شیمی تجزیه به نحوی از این تکنیک ها بهره می جویند. یکی از شاخه های بسیار مهم کمومتریکس که مورد بحث این پایان نامه است، ارتباط کمی ساختار-ویژگی^۱ است. از جمله کاربردهای این تکنیک، پیش بینی فاکتور بازداری ترکیبات آلی روی ستون های کروماتوگرافی گازی است. از جمله روش هایی که به منظور مطالعه ارتباط خطی ساختار-ویژگی مورد استفاده قرار می گیرند روش رگرسیون خطی چندگانه، رگرسیون اجزای اصلی و روش حداقل مربعات جزئی می باشند. روش های دیگری مانند شبکه های عصبی مصنوعی که رابطه غیرخطی میان ساختار و ویژگی ترکیبات را علاوه بر روابط خطی آن ها مورد مطالعه قرار می دهند نیز در این زمینه کاربردهای چشم گیری داشته اند. در تحقیق حاضر، مطالعه ی ارتباط کمی ساختار-ویژگی تعدادی از ترکیبات آلی در ستون های کروماتوگرافی مختلف برای دو دسته از ترکیبات مختلف با استفاده از تکنیک های رگرسیون خطی چندگانه^۲ و شبکه های عصبی مصنوعی^۳ انجام گرفته و با یکدیگر مقایسه شده اند.

^۱ Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR)

^۲ Multiple Linear Regression (MLR)

^۳ Artificial Neural Network (ANN)

۱-۲- هدف تحقیق

اندازه گیری فاکتورهای بازداری ترکیبات آلی به طور معمول با استفاده از تکنیک های مختلف کروماتوگرافی انجام می شود، وجود ستون های کروماتوگرافی مختلف برای اندازه گیری مواد گوناگون و پیشرفت هایی که از گذشته تا به حال در زمینه کروماتوگرافی پدید آمده اند اندازه گیری فاکتور بازداری تعداد زیادی از ترکیبات را امکان پذیر کرده است و بسیاری از مسائل مربوط به جداسازی و شناسائی ترکیبات را حل نموده است. اما در کنار این مزایا، تکنیک های کروماتوگرافی محدودیت هایی نیز دارند که از آن جمله می توان به عدم توانایی آن ها در اندازه گیری پاره ای از ترکیبات که تهیه و یا آماده سازی آن ها بسیار مشکل است یا ترکیباتی که در ستون های کروماتوگرافی ناپایدارند اشاره نمود. هم چنین تکنیک های کروماتوگرافی نیاز به آماده سازی ها، انجام عملیات ویژه بر روی نمونه و ستون های کروماتوگرافی و در مواردی بهینه سازی پارامترها دارند که ممکن است با صرف زمان و هزینه های بسیار زیاد همراه باشند. بنابراین این محدودیت ها موجب می شوند که در کنار روشهای آزمایشگاهی تجربی، روش های تئوری نیز برای استفاده از نتایج تجربی توسعه یابند. از جمله این روش ها مطالعات کمومتریکس به ویژه در زمینه ی QSPR می باشد که همان گونه که قبلاً ذکر شد در آن می توان از تکنیک های مختلفی برای ایجاد روابط خطی و یا غیرخطی میان خواص ساختاری و فاکتور بازداری ترکیباتی که فاکتور بازداری آن ها با استفاده از روش های تجربی اندازه گیری شده اند استفاده نمود. تدبیر اساسی QSPR به دست آوردن رابطه ی کمی بهینه ای از ساختار مولکولی برای پیش بینی خواص می باشد و هنگامی که رابطه ی معتبری به دست آمد امکان پیش بینی فاکتورهای بازداری برای ساختارهای مشابه با ترکیبات اندازه گیری شده یا ساختارهای دیگر که هنوز اندازه گیری نشده و یا تهیه نشده اند، وجود دارد.

۱-۳- روش کار

در این پایان نامه به منظور مطالعه ی ارتباط کمی ساختار-بازداری از دو روش رگرسیون خطی چندگانه و شبکه ی عصبی مصنوعی استفاده شده است. در بخش اول رگرسیون خطی چندگانه به منظور ایجاد ارتباط خطی بین شاخص بازداری و ساختار ۶۳ مولکول آلی از دسته های مختلف (آلدئید، کتون، آلکان، آمین و...) در بیست ستون کروماتوگرافی با فازهای ثابت ۳ و ۳ و ۳-تری فلوئورو پروپیل متیل سایلوکسان با شرایط مختلف از نظر قطبیت و دما می باشد. در بخش دوم این پایان نامه ارتباط زمان بازداری نسبی و ساختار مربوط به ۱۲۶ دی فنیل اتر پلی برمینه شده بر روی ستون کروماتوگرافی گازی موئینه با نام DB۱ بررسی شده و در ادامه شبکه ی عصبی مصنوعی به منظور بررسی روابط غیرخطی بین فاکتور بازداری و ساختار این ترکیبات به کار رفته است. پس از رسم ساختار مولکول ها، توصیف کننده های مولکولی از ساختار ترکیبات مورد نظر توسط نرم افزار مناسب استخراج شد. مدل ارائه شده برای هر دو سری از داده ها با استفاده از توصیف کننده های محاسبه شده توسط نرم افزارهای آماری مناسب به دست آمد. شبکه ی عصبی مورد استفاده در این تحقیق از نوع پیش خور بوده و با استفاده از الگوریتم پس انتشار به منظور به حداقل رساندن خطا آموزش داده شد.

۱-۴- پیشینه تحقیق

در سال ۲۰۰۸ مهدی ستاری و فرهاد قراقیزی ضریب پخش ۳۷۸ ترکیب خالص در هوا را با استفاده از الگوریتم ژنتیک بر پایه رگرسیون خطی چندگانه^۱ (GA-MLR) و شبکه عصبی پیش خور^۲ (FFNN) بررسی کردند که در آن GA-MLR برای انتخاب توصیف کننده ها به عنوان ورودی های FFNN استفاده شد. ضریب هم بستگی مدل خطی چندگانه شامل هفت توصیف کننده، ۰/۹۳۳ به دست آمد و همان مقدار برای FFNN برابر ۰/۹۶۴ به دست آمد [۱]. لوان و همکارانش^۳ در سال ۲۰۰۸

^۱ Genetic Algorithm- based multivariate linear regression (GA-MLR)

^۲ Feed Forward Neural Network (FFNN)

^۳ F. Luan et al.

با استفاده از QSPR مدل هایی را برای پیش بینی ضریب تقسیم خون به هوا برای ترکیبات آلی فرار با استفاده از روش های خطی و غیرخطی بر پایه ی شبکه های عصبی مصنوعی محاسبه نمودند. هر دو روش خطی و غیرخطی نتایج مناسبی را ارائه دادند به طوری که مقدار R برای دو روش خطی و غیرخطی به ترتیب برابر ۰/۹۶۴ و ۰/۹۷۹ بود [۲]. همچنین لوان با همکاری گروه دیگری در همان سال برای پیش بینی فاکتورهای کالیبراسیون کمی در کروماتوگرافی گازی برای تعداد ۲۰۸ ترکیب آلی از تکنیک QSPR استفاده نمود، بدین صورت که از دو روش ANN و MLR مدل هایی به دست آمد و مقایسه ی ویژگی های آماری این دو مدل با $R^2=0/927$ برای MLR و $R^2=0/959$ برای ANN باز هم برتری مدل ANN و استفاده از این مدل را برای پیش بینی فاکتورهای کالیبراسیون کمی برای سایر ترکیبات نشان می دهد [۳]. بهرام همتی نژاد و همکارانش نیز در سال ۲۰۰۸ در چارچوب مطالعات QSPR برای ایجاد مدل هایی که ارتباط دهنده حلالیت با ساختار مشتقات آنتراکینون، آنترون و زانتون در دی اکسید کربن فوق بحرانی باشند، کار کردند. در این کار ۲۹ مولکول در دماها و فشارهای مختلف که مجموعاً ۱۱۹۰ داده حلالیت را ایجاد می نمود، در دسترس قرار داشت. مدل سازی توصیف کننده های مولکولی انتخاب شده و داده های حلالیت توسط روش های خطی (MLR) و غیرخطی (ANN) به دست آمد. هر دوی روش های خطی و غیرخطی منجر به پیش بینی های خوبی شدند [۴]. مطالعه ی دیگری بر اساس الگوریتم ژنتیکی (GA-MLR) و شبکه ی عصبی (ANN) برای مدل سازی و بررسی رفتار بازداری مشتقات آریل پروپونیک اسید در HPLC فاز معکوس توسط یک گروه تحقیقاتی ایتالیایی با سرپرستی کارلوسی^۱ در سال ۲۰۰۷ انجام شد [۵]. در سال ۲۰۰۵ نیز لی و همکارانش^۲ ارتباط میان شاخص توپولوژیکی جدید و شاخص های بازداری کروماتوگرافی گازی مربوط به هجده هیدروکربن را بر روی سه نوع فاز ساکن مختلف در کروماتوگرافی گازی با استفاده از دو روش ANN و MLR به دست آورده و با یکدیگر مقایسه کردند. در نهایت نشان داده شد که توانایی پیش بینی ANN نسبت به روش MLR تحت شرایط آزمایشی آن ها بیش تر بود [۶].

^۱ G. Carlucci

^۲ H. Li et al.

برای ترکیبات مورد بررسی در این پایان نامه، قبلاً مدل سازی صورت نگرفته است و این کار به عنوان تحقیقی جدید در ارتباط با این ترکیبات آلی می باشد که از شیوه های مدل سازی برای سایر ترکیبات الهام گرفته شده است. در این پایان نامه از رگرسیون خطی چندگانه و شبکه ی عصبی مصنوعی برای مدل سازی استفاده شده است زیرا دارای توانایی بسیار بالایی در یافتن ارتباطات خطی و غیرخطی ساختار/ بازداری و نیز پیش بینی برای موارد مشابه است.

فصل دوم

گروه متریکس

۲-۱- کمومتریکس

کمومتریکس قدرتمند ترین تکنیک در مطالعاتی است که خواص ملکول ها را به ویژگی های ساختاری آنها نسبت می دهند. از نظر شیمیدانان فعالیت ها و خواص یک ترکیب ناشی از ویژگی های ساختاری آن است. این نوع از مطالعات به بررسی کمی ارتباط ساختمان با فعالیت، QSAR، و همچنین بررسی کمی ارتباط ساختمان با خاصیت، QSPR، معروف می باشد. نتایج این مطالعات علاوه بر شفاف سازی نحوه ی ارتباط بین خواص ملکول ها و ویژگی های ساختمانی آنها به پژوهشگران در پیش بینی رفتار ملکول های جدید براساس رفتار ملکول های مشابه کمک می کند.

عبارت کمومتریکس توسط اسوانت ولد^۱ و بروس کووالسکی^۲ در اوایل ۱۹۷۰ تعریف شد [۷]. قبلاً عباراتی مانند بیومتریکس^۳ و اقتصاد سنجی^۴ نیز در زمینه های علوم زیستی و اقتصاد معرفی شده اند و پس از آن بود که انجمن بین المللی کمومتریکس تاسیس شد. از آن موقع به بعد کمومتریکس به سرعت توسعه یافت و اکنون در شاخه های مختلف شیمی، به ویژه شیمی تجزیه مورد استفاده قرار می گیرد که از جمله ی آنها می توان به کنترل فرآیندها، تجزیه و تحلیل و شناخت الگوها، پردازش علائم و بهینه کردن شرایط اشاره نمود.

هاوری و هیرش^۵ [۸] در اوایل سال ۱۹۸۰ پیشرفت های کمومتریکس را در مراحل مختلف رده بندی کردند. اولین مرحله قبل از ۱۹۷۰ است که در آن تعدادی از روش های ریاضی توسعه یافتند و در زمینه های مختلف ریاضی، علم رفتار و مهندسی استفاده شدند. در این محدوده ی زمانی، شیمیدانان خود را به آنالیز داده ها، از جمله محاسبه پارامترهای آماری مانند میانگین، انحراف استاندارد و حدود اطمینان محدود کرده بودند. هاوری و هیرش، تحقیق خود را به طور ویژه، به همبستگی تعداد زیادی از داده های شیمیایی به ویژگی های مولکولی مربوطه، اختصاص دادند. این اقدامات اولیه اساس یکی از شاخه های مهم کمومتریکس یعنی ارتباط کمی ساختار-فعالیت را فراهم کرد. دومین مرحله تکامل

^۱ Svant Wold

^۲ Bruce R. Kowalski

^۳ Biometrics

^۴ Econometrics

^۵ Howery and Hirsch

کمومتریक्स در سال ۱۹۷۰ به وقوع پیوست. در این سال کمومتریक्स توجه شیمیدانان، به خصوص شیمیدانان تجزیه را که نه تنها روش های در دسترس برای آنالیز داده ها بلکه روش های نوینی را برای برآوردن نیازشان توسعه داده بودند، جلب کرد. مرحله ی بعدی تکامل کمومتریक्स که توسط هاوری و هیرش در مقاله ی آن ها موجود در مرجع [۸] و سپس توسط براون [۷] پیش بینی شده بود از اوایل ۱۹۸۰ آغاز شد. پس از آن، کمومتریक्स به عنوان ابزاری برای شیمیدانان و یک شاخه ی وابسته ی شیمی در بسیاری از دانشگاه های آمریکا و اروپا و بعضی دانشگاه ها در چین و سایر کشورها به شمار آمد. با پیشرفت در علوم کامپیوتر، اطلاعات، آمار و ریاضی کاربردی عناصر جدیدی در کمومتریक्स معرفی گردید. به طور مثال شبکه ی عصبی مصنوعی [۹،۱۰]، تکنیکی ریاضی که ارسال سیگنال از سیستم های بیولوژیکی را شبیه سازی می کند و الگوریتم ژنتیکی [۱۱] نمونه هایی از این روش ها هستند.

۲-۲- ارتباط کمی ساختار- ویژگی

پیش بینی خواص فیزیکی- شیمیایی مواد با استفاده از ساختار مولکولی آن ها یکی از آرزوهای دانشمندان و مهندسان برای مدت های طولانی بود. یکی از گسترده ترین روش های مورد استفاده که برای ارتباط خواص فیزیکی و شیمیایی با ساختار شیمیایی ترکیبات به کار می رود رابطه ی کمی ساختار- ویژگی است [۱۲-۱۸]. در این روش خاصیت موردنظر با پارامترهایی بر پایه ی خواص مولکولی که توصیف کننده های مولکولی^۱ نامیده می شوند ارتباط داده می شود [۱۹-۲۲]. توصیف کننده های مولکولی پارامترهای نظری هستند که می توانند با استفاده از الگوریتم های شناخته شده ریاضی از ساختارهای مولکولی محاسبه شوند. به عبارت دیگر ساختار مولکولی به وسیله توصیف کننده های مولکولی از طریق فرمول های به دست آمده از چندین روش مانند نظریه ی گراف شیمیایی [۲۳]، روش مکانیک کوانتومی و غیره به دست می آیند. همیشه چندین توصیف کننده ی مولکولی به عنوان

^۱ Molecolar Descriptors

ورودی QSPR برای ارتباط با خاصیت مورد نظر ترکیبات با اصول خاصی انتخاب می شوند. همین تدبیر آنالیز QSPR برای یافتن روابط کمی بهینه از ساختارهای مولکولی است که می تواند برای پیش بینی خواص استفاده شود. زمانی که هم بستگی^۱ قابل اطمینانی به دست آمد، امکان پیش بینی همان خاصیت برای ساختارهای دیگر که هنوز اندازه گیری نشده اند یا حتی هنوز تهیه نشده اند، وجود دارد. کاربرد این روش شناسی برای ارتباط دادن خواص فیزیکی و شیمیایی مختلف با ساختار می باشد که نتایج امیدبخشی را نشان داده است [۲۴-۲۶].

QSPR چندین مزیت آشکار دارد. در ابتدا، تعداد توصیف کننده های مورد استفاده در روش QSPR نسبت به روش های دیگر کمتر است که منجر به ایجاد مدل های قوی تری می شود. ثانیاً، توصیف کننده هایی که در مدل های QSPR استفاده می شوند معانی فیزیکی تعریف شده ای دارند، که برای جستجوی اطلاعات فیزیکو- شیمیایی که وابستگی بالایی با خواص مورد نظر دارند، مفید هستند. ثالثاً، چون توصیف کننده های تئوری از ساختار مولکولی مشتق می شوند، بنابراین مدل های QSPR حاصل شده از آن ها از لحاظ نظری برای ترکیبات آلی مختلف قابل کاربرد هستند. در نتیجه، روشهای QSPR به طور گسترده در پیش بینی خواص فیزیکو- شیمیایی گوناگون مانند نقطه ی جوش، نقطه ی ذوب، فشار بخار، خواص بحرانی، حلالیت و... استفاده شده اند [۲۷-۳۰]. توسعه ی مدل در مطالعات QSPR این مراحل اساسی را شامل می شود: محاسبه ی توصیف کننده، دسته بندی داده ها به سری های مختلف، کاهش متغیر (فرآیندی که طی آن زیر مجموعه ای از توصیف کننده ها به صورت مستقل از خاصیت مدنظر انتخاب می شود)، یافتن مدل مناسب میان توصیف کننده های انتخاب شده و فعالیت/ ویژگی و سرانجام اعتبارسنجی مدل. در حال حاضر تکنیک هایی مانند رگرسیون خطی چندگانه (MLR) و انواع مختلفی از شبکه های عصبی مصنوعی (ANNs) [۳۰] به طور گسترده در مدل سازی QSPR استفاده شده اند، که می توانند به ترتیب برای جستجوی روابط خطی

^۱ Correlation

و غیر خطی میان خاصیت مورد نظر و توصیف کننده های مولکولی، به کار روند.

۲-۳- ارتباط کمی ساختار- فعالیت^۱

یکی از کاربردهای روش های کمومتریکس یافتن ارتباط کمی ساختار- فعالیت (QSAR) و ارزیابی داده های تجزیه ای از طریق آن است. مولکول های مشابه با تغییر کوچکی در ساختارشان می توانند فعالیت های شیمیایی کاملاً متفاوتی داشته باشند. این نوع ارتباط بین ساختار مولکولی و رفتار شیمیایی در مطالعات QSAR مورد توجه می باشد [۳۱]. در واقع، QSAR سعی در پیدا کردن رابطه ی هماهنگ میان فعالیت شیمیایی و ساختارهای مولکولی، به منظور کاربرد این روابط برای ارزیابی فعالیت ترکیبات جدید دارد [۳۲-۳۴]. برای انجام یک مطالعه QSAR ابتدا باید مقادیر فعالیت شیمیایی به دست آیند و توصیف کننده های مناسب از طریق تجربی یا محاسبه توسط کامپیوتر تولید شوند، مرحله بعد دست یابی به ارتباط ریاضی بین ساختار و فعالیت است. معمول ترین تکنیک های چند متغیری، رگرسیون خطی چندگانه (MLR)، آنالیز اجزای اصلی (PCA)^۲ و حداقل مربعات جزئی (PLS)^۳ [۳۵،۳۶] می باشند. معمولاً انتخاب نوع آنالیز چند متغیره تحت تاثیر نوع توصیف کننده های مورد استفاده می باشد، تکنیکی که معمولاً مورد استفاده قرار می گیرد روش MLR است. با این حال این روش تنها زمانی می تواند به کار رود که تعداد مولکول های مورد بررسی بیشتر از تعداد توصیف کننده ها باشد و متغیرها با یکدیگر هم بستگی زیادی نداشته باشند. با توجه به این که صدها نوع توصیف کننده مولکولی وجود دارند [۲۲]، بنابراین قبل از روش MLR یا روش های مدل سازی دیگر هم چون شبکه ی عصبی مصنوعی [۳۷]، رگرسیون اجزای اصلی (PCR)^۴ [۳۸،۳۹] یا حداقل مربعات جزئی (PLS) باید روش های انتخاب متغیرهای مناسب [۴۲] به کار روند.

^۱ Quantitative Structure-Activity Relationship (QSAR)

^۲ Principal Component Analysis (PCA)

^۳ Partial Least Squares (PLS)

^۴ Principal Component Regression (PCR)

۲-۴- تکنیک های اعتبارسنجی^۱ [۴۰]

این تکنیک ها برای ارزیابی اعتبار مدل های به دست آمده از سری داده توسط رگرسیون چند متغیری^۲ و روش های دسته بندی^۳ به کار می روند. تکنیک های اعتبارسنجی برای بررسی قدرت پیش بینی مدل ها استفاده می شوند، یعنی توانایی آن ها را برای انجام پیش بینی های مطمئن برای موارد جدیدی که پاسخ آن ها ناشناخته است به دست می دهند [۴۱]. یک شرط لازم برای اعتبار یک مدل رگرسیون آن است که ضریب تعیین (R^2)^۴ آن تا حد ممکن به یک نزدیک باشد و خطای استاندارد^۵ آن کوچک باشد. به هر حال این شرط (توانایی برازش) زمانی که مدل ها برازش نزدیک تری (SE کوچک تر و R^2 بزرگ تر) را برای تعداد زیادتری از پارامترها و متغیرها در مدل می دهند، برای اعتبار مدل کافی نیست زیرا این پارامترها ارتباطی به توانایی مدل برای ایجاد پیش بینی های مطمئن بر روی داده های بعدی ندارند. موارد دیگر برای اعتبارسنجی مدل ها زمانی پیش می آیند که لازم است مدل هایی با متغیرهای اندک، با استفاده از انتخاب متغیر به دست آیند [۴۲]. در حقیقت زمانی که یک مجموعه با تعداد زیادی از توصیف کننده ها برای انتخاب از آن ها در دسترس باشد، مدل های به دست آمده دارای برازش خوب اما همراه با هم بستگی شانسی^۶ [۴۳] هستند، یعنی منحنی مقادیر تئوری محاسبه شده از مدل بر حسب مقادیر تجربی دارای یک رابطه ی خطی است بدون این که توانایی پیش بینی خوبی داشته باشد [۴۴]. برای جلوگیری از مدل های با هم بستگی شانسی، یک بررسی اعتبارسنجی متفاوت باید انجام شود. یک فرآیند اعتبارسنجی متداول [۴۵] شامل حذف تعدادی از موارد قبل از انتخاب متغیرها خواهد بود یعنی ابتدا فرآیند انتخاب متغیر به کار گرفته شده و سپس پاسخ برای موارد کنار گذاشته شده پیش بینی شود. در بهترین وضعیت یک سری اعتبار مناسب از ترکیبات (سری اعتبار بیرونی^۷)، برای هر مقدار پاسخ پیش بینی شده که

^۱ Validation Technique

^۲ Multivariate Regression

^۳ Classification Methods

^۴ Determination Coefficient

^۵ Standard Error (SE)

^۶ Chance Correlation

^۷ External Validation Set

قابل مقایسه با مقادیر واقعی است، باید در دسترس باشد. تعدادی از تکنیک های اعتبارسنجی در زیر فهرست شده اند.

۲-۴-۱- اعتبارسنجی تقاطعی

رایج ترین تکنیک اعتبارسنجی است که در آن در هر بار یکی یا یک گروه کوچک از داده ها کنار گذاشته شده [۴۶] و سپس برای هر مجموعه داده که باقی مانده، مدلی ایجاد گردیده و پاسخ برای داده های کنار گذاشته شده از روی مدل پیش بینی می شود. مجذور تفاوت های میان پاسخ واقعی و پاسخ پیش بینی شده برای هر داده کنار گذاشته شده با عبارت PRESS (مجموع مربعات باقیمانده ی پیش بینی^۱) بیان می شود. از PRESS نهایی، مقادیر R^2 و SDEP (انحراف استاندارد خطای پیش بینی^۲) محاسبه می شوند [۴۷].

۲-۴-۲- تقسیم کردن مجموعه به آموزش و ارزیابی

این تکنیک بر اساس تقسیم بندی مجموعه ی داده به یک سری آموزش و یک سری ارزیابی است. مدل از سری آموزش محاسبه می شود و قدرت پیش بینی توسط سری ارزیابی بررسی می شود. تقسیم بندی داده ها به دو سری به صورت کاملاً تصادفی انجام می گیرد به طوری که نتایج به میزان زیادی به تقسیم بندی داده ها وابسته اند.

۲-۴-۳- اعتبار سنجی بیرونی [۴۸]^۳

تکنیکی است که در آن یک سری تست نیز برای انجام یک بررسی اضافی بر روی قدرت پیش بینی مدل به دست آمده از سری آموزش و با قدرت پیش بینی بهینه شده توسط یک سری ارزیابی، در نظر

^۱ Predictive Residual Sum of Squares

^۲ Standard Deviation Error of Prediction

^۳ External Validation

گرفته می شود.

۲-۵- رگرسیون خطی چندگانه (MLR)

رگرسیون خطی چندگانه روشی است که برای مدل سازی ارتباط خطی بین متغیر وابسته و یک یا چند متغیر مستقل به کار می رود. متغیرهای مستقل آن هایی هستند که فرض می شود سهمی در تابعی دارند که برای مدل سازی مناسب است. متغیرهای وابسته (متغیرهای پاسخ) متغیرهایی هستند (اغلب از اندازه گیری های تجربی به دست می آیند) که یافتن وابستگی آماری میان آن ها و تعدادی از متغیرهای مستقل مورد نظر است. روش MLR می تواند برای پیش بینی فاکتور بازداری ترکیبات مختلف که با تکنیک های مختلف کروماتوگرافی جداسازی شده اند مورد استفاده قرار گیرد. در این صورت فاکتور بازداری ترکیبات مورد بررسی متغیر وابسته و توصیف کننده های ساختاری ترکیبات، متغیرهای مستقل هستند. مدل برای یک سری از داده ها (سری آموزش) محاسبه می شود.

برای تعداد n داده تجربی و تعداد p متغیر مستقل، مدل رگرسیون خطی چندگانه توسط معادله ی (۱-۲) نمایش داده می شود:

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

که در این معادله $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$ ضرایب رگرسیون و X_1, X_2, \dots, X_p متغیرهای مستقل (توصیف کننده های عددی) می باشند و Y_i متغیر وابسته مورد نظر (برای مثال زمان بازداری) می باشد. طی فرآیند محاسبه ی مدل مناسب، فاکتورهای آماری که صحت مدل رگرسیون برای سری آموزش را نشان می دهند نیز محاسبه می شوند. این فاکتورهای آماری شامل R, R^2, F, t و ضریب هم بستگی میان توصیف کننده ها می باشند.

❖ آماره F: آزمون F یا آزمون فیشر در واقع آزمون معنی دار بودن آماری در تحلیل رگرسیون ساده و چند متغیره و مشابه آزمون های معنی داری آماری در تحلیل واریانس است [۴۹]. نسبت F از رابطه (۲-۲) به دست می آید:

$$F = \frac{SS_{reg} / DF_{reg}}{SS_{res} / DF_{res}} \quad (2-2)$$

SS_{reg} : مجموع مجذورات رگرسیون SS_{res} : مجموع مجذورات باقیمانده ها

DF_{reg} : درجه آزادی رگرسیون DF_{res} : درجه آزادی باقیمانده ها

❖ آماره R: ضریب هم بستگی بین فاکتور تجربی (یا پیش بینی شده) و متغیر مستقل را نشان می دهد. مقدار این آماره بین صفر تا یک متغیر است. مقدار کوچک آن نشان دهنده ی این مسئله است که ارتباط خطی اندکی بین متغیر وابسته و متغیرهای مستقل وجود دارد یا چنین رابطه ای وجود ندارد.

❖ آماره R^2 : مجذور ضریب هم بستگی چند متغیره یا R^2 بیان گر واریانس مشترک بین متغیرهای وابسته و مستقل است. R^2 فصل مشترک دو زیر مجموعه را به صورت مقداری بیان می کند و به آن ضریب تعیین نیز می گویند، چون نسبتی از واریانس متغیر وابسته را که توسط متغیرهای مستقل به حساب آمده معین می کند [۵۰].

❖ آماره t: آزمون معنی داری حضور هر متغیر مستقل در معادله ی رگرسیون می باشد. مقدار t از تقسیم مقدار ضریب هر متغیر مستقل بر خطای استاندارد آن به دست می آید. این مقدار برای کلیه ی متغیرهای موجود در معادله ی رگرسیون و خارج از آن محاسبه می شود [۴۹].

❖ ضریب هم بستگی میان توصیف کننده ها یا هم بستگی پیرسون^۱: معیاری از ارتباط خطی بین دو متغیر مستقل است. مقادیر ضریب هم بستگی بین -۱ تا +۱ متغیر هستند که علامت

^۱ Pearson Correlation

آن نشان دهنده جهت ارتباط خطی (مستقیم(+)) یا عکس بودن(-) آن) و قدر مطلق آن

بزرگی این هم بستگی را نشان می دهد[۴۹].

در ادامه به مراحل انجام رگرسیون خطی پرداخته شده است.

۲-۵-۱- انتخاب سری داده ها

اولین مرحله جمع آوری و انتخاب یک سری ملکولی است که مقادیر تجربی خاصیت/ فعالیت مورد نظر آنها در دسترس باشد. سپس به منظور ارزیابی قابلیت های پیش بینی یک مدل از طریق تکنیک های اعتبار سنجی، سری داده می تواند به بخش های متفاوتی تقسیم شود: سری آموزشی، مجموعه ای که برای مدل سازی استفاده می شود، یک سری تست، مجموعه ای که برای سنجش پیش بینی یک مدل به دست آمده از سری آموزشی استفاده می شود و سری ارزیابی بیرونی یا سری ارزیابی، که یک مجموعه ی داده جدید برای انجام اعتبارسنجی های اضافی برای مدل به دست آمده از سری آموزشی است. هر قدر که سری داده ها بزرگتر و متنوع تر باشد مدل حاصل از آن معتبرتر بوده و قدرت پیش بینی بالاتری خواهد داشت. کاربرد متغیرهای زیاد در سری داده ها پیچیدگی داده و در نتیجه پیچیدگی مدل را بالا می برد بنابراین از کاهش متغیر^۱ و انتخاب متغیر^۲ استفاده می شود که کیفیت اطلاعات و مدل (مخصوصاً قدرت پیش بینی آن) را بهبود می بخشد. کمومتریکس از روش های مفیدی که قادر به استخراج اطلاعات در برگرفته شده در داده ها هستند، استفاده می کند.[۵۰]

۲-۵-۲- انتخاب توصیف کننده ها

اگرچه چندین پارامتر مولکولی از زمان شروع شیمی کوانتومی و نظریه ی گراف تعریف شدند اما اصطلاح "توصیف کننده مولکولی" با پیشرفت مدل های ارتباط دهنده ی ساختار- خاصیت مشهور شد.

^۱ Variable Reduction

^۲ Variable Selection

تعداد پلات^۱ [۵۱] و شاخص وینر^۲ [۵۲] که در سال ۱۹۴۷ تعریف شدند، گهگاه به عنوان اولین توصیف کننده های مولکولی در نظر گرفته می شوند. توصیف کننده های مولکولی مقادیری هستند که ساختار یا شکل مولکول را توصیف می کنند و به پیش بینی فعالیت و خصوصیات مولکول ها در آزمایش های پیچیده کمک می کنند [۵۳]. به عبارت دیگر توصیف کننده های مولکولی نتیجه ی نهایی یک فرآیند منطقی و ریاضی هستند که اطلاعات شیمیایی مربوط به ساختار یک مولکول را به اعداد تبدیل می کنند. این اعداد می توانند برای تفسیر خواص مولکولی استفاده شوند و یا قادر به شرکت کردن در یک مدل برای پیش بینی تعدادی از ویژگی های مولکولی مدنظر باشند. برخی از ویژگی های لازم برای یک توصیف کننده ی مولکولی مناسب عبارتند از [۲۲]:

- (۱) ساده بودن
- (۲) مستقل بودن
- (۳) تفسیر ساختار مولکول (غنی بودن از نظر اطلاعات)
- (۴) عدم هم بستگی با سایر توصیف کننده ها
- (۵) تغییر منظم با تغییر تدریجی در ساختارها
- (۶) وابستگی صحیح به اندازه ی مولکول
- (۷) تمایز بین ایزومرهای مختلف مولکول

انواع کاربردهای توصیف کننده های مولکولی به صورت زیر می باشند:

- آنالیز و مدل سازی فعالیت ترکیبات دارویی
- ارزیابی خصوصیات شیمیایی
- مدل سازی و ارزیابی فعالیت مولکول ها در سم شناسی
- پیش بینی خصوصیات، فعالیت یا رفتارهای مولکول هایی که هنوز سنتز نشده اند.

^۱ Platt Number
^۲ Wiener Index

توصیف کننده های مولکولی به دو دسته ی اصلی تقسیم می شوند: توصیف کننده های حاصل از اندازه گیری های تجربی مانند قطبش پذیری، انکسار مولاری، ممان دوقطبی و توصیف کننده های مولکولی نظری [۵۴] که از ساختار نمادین مولکول مشتق شده و می توانند به دسته های بیشتری مطابق با انواع مختلفی از نمایش مولکولی^۱ یا بر اساس ابعاد توصیف مولکول تقسیم شوند [۲۲]. نمایش مولکولی روشی است که با آن یک مولکول از طریق فرآیند قراردادی و قواعد اختصار به صورت نمادین ارائه می شود.

۲-۵-۲-۱- توصیف کننده های صفر بعدی

ساده ترین نمایش مولکولی فرمول شیمیایی است. این نمایش هیچ گونه اطلاعاتی از ساختار مولکول ارائه نمی کند و از این رو توصیف کننده های مولکولی به دست آمده از فرمول های شیمیایی، توصیف کننده های صفر بعدی نامیده می شوند. این دسته از توصیف کننده ها تعداد و نوع اتم ها، جرم مولکولی و هر عاملی از خصوصیات اتمی را تعیین می کنند (مثلا مجموع حجم های اتمی واندروالس). این نوع توصیف کننده ها به توصیف کننده های ساختاری نیز معروفند که علاوه بر موارد فوق شامل توصیف کننده های مربوط به نوع پیوندها و حضور حلقه ها در مولکول نیز می شوند. تعداد کل اتم ها در مولکول، تعداد یک عنصر شیمیایی خاص (C,N,O,H,F,...) در مولکول، تعداد گروه های عاملی خاص در مولکول، تعداد پیوندهای ساده، دوگانه، سه گانه، آروماتیک و... در مولکول، تعداد کل حلقه ها بر اساس تعداد اتم های آن ها (حلقه های شش تایی، پنج تایی و ...) در مولکول، وزن مولکولی و متوسط وزن اتمی مثال هایی از توصیف کننده های ساختاری می باشند.

۲-۵-۲-۲- توصیف کننده های یک بعدی

نمایش فهرست زیرساختاری^۲ می تواند به عنوان نمایشی یک بعدی از مولکول در نظر گرفته شود و

^۱ Molecular Representation

^۲ Substructure List Representation

شامل فهرستی از اجزای ساختاری از یک مولکول (شامل اجزاء، گروه های عاملی یا استخلافات مد نظر در یک مولکول) است. توصیف کننده های مشتق شده از این شرایط، توصیف کننده های یک بعدی نامیده می شوند. توصیف کننده های گروه های عاملی، قطعات اتم مرکزی، توصیف کننده های تجربی و خصوصیات مولکولی زیر گروه های این دسته می باشند.

۲-۵-۲-۳- توصیف کننده های دوبعدی

نمایش دو بعدی از مولکول چگونگی اتصال اتم ها در مولکول بر حسب حضور و ماهیت باندهای شیمیایی می باشد مانند دیدگاه بر پایه ی گراف مولکولی که یک نمایش دوبعدی را ارائه می کنند و معمولاً به عنوان نمایش توپولوژیکی شناخته می شود. توصیف کننده های مولکولی به دست آمده از الگوریتم های به کار رفته برای یک نمایش توپولوژیکی، توصیف کننده های دو بعدی نامیده می شوند. این دسته از توصیف کننده ها شامل زیرگروه های توپولوژیکی، شمارش های مسیرهای مولکولی^۱، توصیف کننده های *BCUT*، ضرایب بار و توصیف کننده های خود ارتباطی دو بعدی می شود.

۲-۵-۲-۴- توصیف کننده های سه بعدی

نمایش سه بعدی یک مولکول را معمولاً به عنوان یک شیء هندسی انعطاف ناپذیر در فضا می بیند و نه تنها یک نمایش از ماهیت و اتصال اتم ها بلکه از صورت بندی فضائی مولکول نیز فراهم می کند. این نمایش ها هم نمایش های هندسی^۲ نامیده می شوند و توصیف کننده های مولکولی مشتق شده از این نمایش، توصیف کننده های سه بعدی نامیده می شوند. زیرگروه های این دسته شامل اندیسهای آروماتیکی، خصوصیات مولکولی راندیک، توصیف کننده های هندسی، توصیف کننده های *WHIM*، *3D - MORSE*، *RDF* و توصیف کننده های *GETAWAY* می باشند.

^۱ Molecular Walk Count

^۲ Geometrical Representation

۲-۵-۳- تجزیه و تحلیل آماری توصیف کننده ها

کاهش متغیر، انتخاب زیر مجموعه ای از متغیرها (توصیف کننده ها) است که اطلاعات اساسی مربوط به کل سری داده را در بر دارد و متغیرهای اضافی، متغیرهای با هم بستگی خیلی بالا و... را حذف می کند. کاهش متغیر با انتخاب متغیر در این حقیقت متفاوت است که زیر مجموعه ای از توصیف کننده ها به صورت مستقل از خاصیت مورد نظر انتخاب می شود. بنابراین به طور خلاصه پس از محاسبه ی توصیف کننده ها باید از بین توصیف کننده های موجود، توصیف کننده هایی که با متغیر وابسته هم بستگی بیشتری دارند انتخاب شوند. برای این منظور چند فاکتور وجود دارند که عبارتند از:

- ❖ توصیف کننده هایی که بیش از ۹۰٪ مقادیر آن ها یکسان باشند حذف می شوند.
- ❖ از بین توصیف کننده هایی که با یکدیگر هم بستگی بالای ۰/۹ دارند، توصیف کننده هایی که با متغیر وابسته هم بستگی کم تری دارد، حذف می شوند.
- ❖ توصیف کننده هایی که محاسبه و تفسیر آن ها مشکل است حذف می شوند.

۲-۵-۴- آنالیز مدل های آماری و انتخاب مدل مناسب

هدف انتخاب متغیر^۱ (VS) دست یابی به یک مدل مناسب برای پیش بینی مقدار یک متغیر وابسته از طریق یک مجموعه شامل تعداد کمی از متغیرهای مستقل است [۵۵]. مدل های رگرسیون که شامل تعداد کمی از متغیرهای مستقل هستند بر سایر مدل ها برتری دارند زیرا این مدل ها می توانند با سهولت بیش تری تفسیر شوند و قدرت پیش بینی بالاتری دارند، اشکال عمده ی فرآیندهای انتخاب متغیر در احتمال انتخاب متغیرهای با هم بستگی شانس است. از این رو برای اجتناب از هم بستگی شانس باید به تکنیک های اعتبارسنجی توجه ویژه ای شود. از متداول ترین روش ها برای انتخاب

^۱ Variable Selection

متغیرها می توان، روش های رگرسیون مرحله ای^۱ [۵۶]، انتخاب زیر مجموعه ی متغیر- الگوریتم ژنتیکی (GA-VSS) و آنالیز کلاستر را نام برد.

مدل در حقیقت یک رابطه ریاضی است که معرف رابطه ی بین متغیر وابسته و متغیر(های) مستقل است و با استفاده از روش های آماری گوناگون، می توان مدل مورد نظر را به دست آورد. بدین منظور در روش MLR چندین روش رگرسیون مختلف وجود دارد که عبارتند از:

۲-۵-۴-۱- روش ورود اجباری^۲

فرآیندی برای انتخاب متغیرها است که طی آن تمام توصیف کننده ها در یک مرحله وارد می شوند. از آن جا که در این روش اثرات مثبت و منفی متغیرهای مستقل برای ورود در مدل نادیده گرفته می شوند روش مطلوبی نیست.

۲-۵-۴-۲- روش انتخاب جلو برنده^۳

تکنیکی مرحله ای برای انتخاب متغیرها است که طی آن متغیرها یکی پس از دیگری وارد مدل می شوند. اولین متغیری که برای ورود به مدل انتخاب می شود دارای بالاترین هم بستگی مثبت یا منفی با متغیر وابسته است. این روند تا زمانی که دیگر متغیری وجود نداشته باشد که دارای شرط ورود باشد ادامه دارد.

۲-۵-۴-۳- روش عقب برنده^۴

در این تکنیک تمام توصیف کننده ها وارد معادله می شوند و سپس متغیر با کمترین هم بستگی با متغیر وابسته حذف می شود. پس از این که اولین متغیر حذف شد از بین متغیرهای باقیمانده در

^۱ Stepwise Regression Methods

^۲ Enter

^۳ Forward

^۴ Backward

معادله، متغیری که کوچک ترین هم بستگی را با متغیر وابسته دارد برای حذف در نظر گرفته می شود. این فرآیند زمانی متوقف خواهد شد که متغیری که از شرط فرآیند پیروی کند موجود نباشد.

۲-۴-۵-۴- روش مرحله ای^۱

این روش مشابه روش انتخاب جلوبرنده است، با این تفاوت که در این روش در هر مرحله برای متغیرهای وارد شده در مدل، آماره F محاسبه می شود و متغیر با کوچک ترین آماره F بدون معنی حذف خواهد شد و مدل مناسب به دست می آید.

۲-۴-۵-۵- روش حذفی^۲

در این تکنیک تمام توصیف کننده های یک بلوک در یک مرحله حذف می شوند [۵۷].

۲-۶- نرم افزارهای مورد استفاده در این پژوهش

در این تحقیق از بسته های نرم افزاری *Hyperchem 7* [۵۸] برای رسم ساختار ترکیبات مورد بررسی، *Dragon 3.0* [۵۹] برای محاسبه ی توصیف کننده های مولکولی و نرم افزارهای *MOPAC* برای محاسبه ی توصیف کننده های الکترونی، *SPSS 14.0* [۶۰] برای انجام آنالیزهای آماری رگرسیون های خطی چندگانه و *MATLAB 7.5.0.342 (MATLABR 2007b)* [۶۱،۶۲] به منظور برنامه نویسی شبکه ی عصبی مصنوعی استفاده شد که در ادامه به معرفی آن ها پرداخته خواهد شد.

^۱ Stepwise

^۲ Remove

۲-۶-۱- نرم افزار WinMopac 7.21

WinMopac 7.21 [۶۳] یک ابزار قدرتمند برای محاسبات نیمه تجربی مولکول ها می باشد. ورودی های آن با فرمت ماتریسی (مشابه خروجی های Hyperchem) می باشد و خروجی های آن با فرمت *.dat قابل ذخیره سازی است که این فرمت در ادامه در MOPAC 6 قابل کاربرد است.

۲-۶-۲- نرم افزار MOPAC6-RM1 [۶۴]

این برنامه به منظور استخراج توصیف کننده های الکترونی استفاده می شود. توصیف کننده های الکترونی بیانگر خواص الکترونی ملکول ها می باشند و اطلاعات مفیدی راجع به برهم کنش های الکترونی بین ملکولی و درون ملکولی می دهند. برای محاسبه این توصیف کننده ها عموماً از روش های اوربیتال ملکولی استفاده می شود. این روش ها کلاً به دو گروه روش های نظری محض و نیمه تجربی تقسیم می شوند. در روش های نظری جهت محاسبه ی پارامترهای الکترونی ساختاری از حل دقیق معادله ی شرودینگر استفاده می کنند. نظریه های تقریب اوربیتال ملکولی اغلب از داده های تجربی مربوط به اتم ها و سیستم های ملکولی جهت ارزیابی کمیت های قراردادی که پارامترهای محاسباتی محسوب می شوند، استفاده می کنند، از این رو به این تکنیک ها روش های نیمه تجربی گفته می شود. تعدادی از روش های نیمه تجربی مانند *MINDO*، *MNDO*، *MINDO/S*، *AM 1* و *PM3* هامیلتونی نیمه تجربی در بخش محاسبات الکترونی برای به دست آوردن اوربیتال های مولکولی با در نظر گرفتن هندسه ی مولکولی استفاده می شود.

MOPAC یک بسته ی^۱ نرم افزاری اربیتال مولکولی نیمه تجربی^۲ برای مطالعه ی ساختارها و واکنش های شیمیایی است. این نرم افزار با استفاده از خروجی Hyperchem که شامل زوایای پیچشی و زوایای پیوندی و طول پیوندها است محاسبات را انجام می دهد. از نتایج حاصل از چنین محاسباتی می توان اطلاعاتی از قبیل گرمای تشکیل، پتانسیل یونیزاسیون، انرژی الکترونی، انرژی

^۱ Package
^۲ Semi-empirical

دافعه ی هسته- هسته، گشتاور دو قطبی و بسیاری از فاکتورهای دیگر ملکول ها را به دست آورد. با وجود این که این برنامه براساس مفاهیم نظریه ی کوانتومی و مفاهیم ترمودینامیک بنا شده و از محاسبات پیشرفته ی ریاضی کمک می گیرد، کاربران نیازی به دانستن عمیق مفاهیم فوق ندارند. داده های ورودی و خروجی این برنامه در حسد ممکن ساده هستند تا جایی که می توان به راحتی توجه خود را به سایر جنبه های شیمیایی مسئله معطوف کرد.

ساده ترین توصیف MOPAC آن است که کاربر یک پرونده- داده^۱ را ایجاد می کند که سیستم مولکولی را شرح داده و نوع محاسبات و خروجی هایی را که مطلوب است معین می کند. سپس کاربر به MOPAC برای انجام محاسبه با استفاده از پرونده- داده دستور می دهد. سرانجام کاربر خروجی مطلوب در سیستم را از پرونده های خروجی خلق شده توسط MOPAC استخراج می کند.

۲-۶-۳- نرم افزار Hyperchem

با این نرم افزار، ابتدا شکل مولکول به طور تقریبی بر روی صفحه نمایش گر کامپیوتر رسم می گردد، سپس توسط روش های کوانتومی- مکانیکی بهینه می شود. روش های کوانتومی- مکانیکی موجود عبارتند از دینامیک مولکولی و روش های نیمه تجربی که خود از هامیلتونین $AM1$ و $PM3$ ، $CNDO$ ، $MNDO$ و $INDO$ استفاده می کنند. با استفاده از این نرم افزار می توان اطلاعات فراوانی نظیر زوایای پیوندی، طول پیوندها، زوایای پیچشی، بار اتم ها و انرژی تشکیل مولکول و غیره را به دست آورد.

۲-۶-۴- نرم افزار Dragon

بسته ی نرم افزاری Dragon برای محاسبه ی توصیف کننده های مولکولی می باشد که توسط گروه QSAR و کمومتریکس دانشگاه میلانو طراحی شده است [۶۵]. این توصیف کننده های مولکولی

^۱ Data-File

به منظور ارزیابی روابط ساختار-فعالیت یا ساختار-ویژگی مولکولی به کار می روند. اولین ویرایش آن به سال ۱۹۹۷ بر می گردد. به روز کردن ها و افزایش گنجایش توصیف کننده های مولکولی مرتباً به منظور تحقیقات پیشرفته تر در زمینه ی QSAR در این نرم افزار ایجاد شد. نرم افزار Dragon قادر به محاسبه ی بیش از ۱۴۹۷ توصیف کننده می باشد که به ۱۸ دسته ی اصلی تقسیم می شوند که در جدول ۱-۲ فهرست این توصیف کننده ها آورده شده است.

جدول ۱-۲- فهرست توصیف کننده های محاسبه شده توسط نرم افزار Dragon

ردیف	نام توصیف کننده	ردیف	نام توصیف کننده
۱	توصیف کننده های زیر ساختاری	۱۰	توصیف کننده های هندسی
۲	توصیف کننده های توپولوژیکی	۱۱	توصیف کننده های RDF
۳	شمارنده های مولکولی مورس	۱۲	توصیف کننده های سه بعدی
۴	توصیف کننده های BCUT	۱۳	توصیف کننده های WHIM
۵	شاخص های بار	۱۴	توصیف کننده های GETAWAY
۶	خود ارتباطی های دوبعدی	۱۵	گروه های عاملی
۷	توصیف کننده های بار	۱۶	اجزای میان اتمی
۸	شاخص های آروماتیسیته	۱۷	توصیف کننده های تجربی
۹	پروپرونده های مولکولی راندیک	۱۸	خصوصیات مولکولی

کاربر علاوه بر محاسبه ی ساده ترین نوع اتم ها، گروه های عاملی و شمارش اجزا می تواند تعداد زیادی توصیف کننده های توپولوژیکی و هندسی را نیز توسط این نرم افزار محاسبه کند. برای اجرای این نرم افزار کاربر نیاز به پرونده های ساختار مولکولی دارد که قبلاً توسط سایر نرم افزارهای مدل سازی مولکولی تامین شده اند. اکثر پرونده های مولکولی با فرمت های معمول، در این نرم افزار قابل قبول هستند. برای استفاده ی بهتر از محاسبات این نرم افزار باید بهینه سازی سه بعدی

ساختارها با هیدروژن هایشان به کار رود. Dragon به عنوان یک نرم افزار QSAR طراحی نشده است، بلکه تنها توصیف کننده های مولکولی را نمایش می دهد و هیچ آنالیز QSAR انجام نمی دهد. با این حال، Dragon یک پرونده ی خروجی کامل را که به سادگی توسط هر نرم افزار آنالیز هم بستگی قابل کاربرد است، فراهم می سازد. اطلاعات کامل در مورد توصیف کننده های به کار رفته در این نرم افزار (تعاریف، فرمول ها، مراجع و جزئیات توصیف کننده ها) را می توان از کتاب مرجع توصیف کننده های مولکولی که ۳۳۰۰ مرجع برای کل توصیف کننده ها ارائه می دهد، به دست آورد [۲۲].

۲-۶-۷- نرم افزار SPSS

این بسته ی نرم افزاری، توانایی تحلیل کلی اطلاعات را دارا بوده و عمومی ترین نرم افزار آماری است. امروزه آمار، مجموعه ای از مفاهیم و روش هایی است که در هر زمینه ی پژوهشی، برای گردآوری و تحلیل اطلاعات مربوط به آن و انجام نتیجه گیری ها، در شرایطی که عدم قطعیت و تغییر وجود دارد، به کار می رود. SPSS دارای توانایی های بسیار بالایی است. در این جا از این نرم افزار برای حذف متغیرهای با هم بستگی بالا، به دست آوردن بهترین مدل و ارزیابی و اعتبار مدل رگرسیون خطی چندگانه استفاده شده است.

۲-۶-۸- نرم افزار MATLAB

MATLAB نرم افزاری با کارایی بالا برای محاسبات تخصصی است. اولین نگارش های آن در دانشگاه نیومکزیکو و استانفورد در سال های ۱۹۷۰ میلادی جهت حل مسائل نظری ماتریس ها، جبر خطی و آنالیز عددی به وجود آمد. به تدریج و با افزودن امکانات مختلف، MATLAB به عنوان یک نرم افزار قوی و در عین حال ساده برای کاربران تبدیل شد. عناصر اولیه اطلاعات آن آرایه هایی هستند که نیازی به اندازه گیری ندارند. این نرم افزار امکان حل مسائل تخصصی، به خصوص مسائلی

که به صورت ماتریسی هستند را فراهم می کند. یکی از قابلیت های آن برنامه نویسی در محیطی ساده که مسائل و راه حل ها با علائم ریاضی مشابهی تعریف می شوند، می باشد. کاربردهای نوعی آن شامل ریاضیات و الگوریتم محاسباتی، شبیه سازی، مدل سازی و آنالیز اطلاعات و... می باشد. یکی از کاربرد های مهم آن که مورد استقبال شیمیدانان قرار گرفته امکان استفاده از آن برای آنالیز آماری و مدل سازی داده های شیمیایی است. مدل سازی به روش شبکه ی عصبی مصنوعی از جمله کاربردهای مهم دیگر آن است که در تحقیق حاضر مورد استفاده قرار گرفته است. اطلاعات شیمیایی ترکیبات به صورت ماتریس به عنوان ورودی به نرم افزار ارائه می شوند. در محیط MATLAB با استفاده از فرامین، آرایه ها و امکانات ویژه آن مدل سازی غیر خطی فعالیت شیمیایی ترکیبات امکان پذیر است. سایر روش های کمومتریکس شامل آنالیز (رگرسیون) اجزای اصلی، روش کم ترین مربعات جزیی، الگوریتم ژنتیکی [۶۶] و غیره نیز توسط این نرم افزار قابل اجرا هستند.

فصل سوم

شبكة عصبية مصنوعة

۳-۱- مقدمه ای بر شبکه های عصبی مصنوعی

شبکه های عصبی مصنوعی [۶۷] مجموعه ای از روش ها، مدل ها و الگوریتم های ریاضی برای پردازش اطلاعات به صورت تقلید شده از مغز انسان هستند. مکانیسم فراگیری و آموزش مغز اساساً بر تجربه استوار است. مدل های الکترونیکی شبکه های عصبی نیز بر اساس همین الگو بنا شده اند. شبکه های عصبی به ویژه برای سر و کار داشتن با روابط غیر خطی مناسب هستند [۶۸] و برای رویارویی با مسائل ریاضی بسیار زیادی مانند جستجوی داده، تشخیص الگو، مدل سازی پاسخ های مداوم و دسته بندی شده، مسائل چند پاسخی و... مناسب هستند.

مفهوم استفاده از شبکه های عصبی در حل مسائل در اواسط ۱۹۴۰ به وجود آمد. در سال ۱۹۴۳، مک کولوچ^۱ و پیتز^۲ [۶۹] مقاله ای درباره روشی جدید که امروزه از آن تحت عنوان شبکه های عصبی یاد می شود به چاپ رساندند [۷۰]. پس از آن در ۱۹۴۹ هب^۳، روانشناسی در دانشگاه مک گیل، یک قاعده ی یادگیری که (امروزه به قاعده ی هب بیان معروف است) را منتشر کرد و بعضی از جنبه های نظری الگوریتم آموزشی برای شبکه ی عصبی را شکل داد [۷۱]. از آن زمان تا اواسط دهه ی ۱۹۸۰ روش محاسبات عصبی به دلیل نتایج ضعیف آن در حل مسائل تجربی کمتر مورد توجه قرار گرفت. استفاده از شبکه های عصبی از سال ۱۹۸۶ و پس از انتشار کتابی توسط رامل هارت^۴ و مک کلاند^۵ به طور چشم گیری مورد استفاده قرار گرفت [۷۲]. پس از آن زمان کاربردهای شبکه ی عصبی مصنوعی در شیمی و علوم وابسته به آن مانند بیوشیمی، مهندسی شیمی و داروسازی رواج پیدا کرد [۷۳]. از میان شاخه های مختلف شیمی، شیمی تجزیه یکی از بخش هایی است که بیشترین استفاده را از شبکه های عصبی مصنوعی کرده است. شبکه های عصبی چه در بعد آنالیز و چه در بعد پیاده سازی سخت افزاری از نظر کمی و کیفی و توانایی، در حال رشد و پیشرفت می باشند و تکنیک های مختلف محاسبات عصبی از لحاظ تعداد در حال افزایش است [۷۴].

^۱ Mc Culloch

^۲ Pitts

^۳ Hebb

^۴ Rumelhart

^۵ Mc Clelland

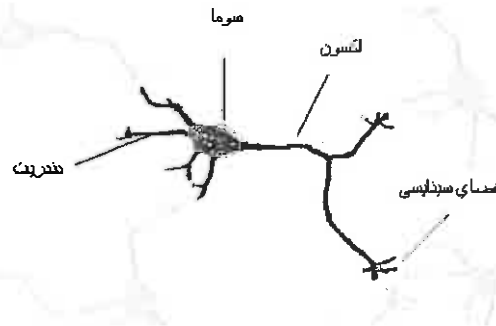
شبکه های عصبی مصنوعی و الگوریتم ژنتیکی همگی جزء دسته ای از علوم کامپیوتری به نام هوش مصنوعی قرار می گیرند [۷۵]. این روش ها تفاوت اساسی با سایر روش های محاسباتی و همچنین با یکدیگر دارند. در سیستم های ریاضی متداول، دانسته ها به صورت قواعد روشن و از پیش مشخص شده ای در سیستم وجود دارد، در حالی که این سیستم ها قواعد را توسط آموزش از مثال هایی که به آنها داده می شود فرا می گیرند. استفاده از شبکه های عصبی مصنوعی به جای روش رگرسیون خطی چندگانه در مطالعات ارتباط کمی ساختار- فعالیت (QSAR) و ارتباط کمی ساختار- ویژگی (QSPR) خصوصاً هنگامی که ارتباط بین توصیف کننده و فعالیت/ ویژگی مورد نظر خطی نبوده و یا اینکه بین آنها برهم کنش هایی وجود داشته باشد باعث بهبود مدل حاصله خواهد شد. کاربرد شبکه های عصبی در صنایع مختلف [۷۶] شامل صنایع فضائی هوایی، صنعت وسایل نقلیه ی موتوری، کار بانکی، رسیدگی فعالیت کارت اعتباری، صنایع دفاع، الکترونیک، سرگرمی، مالی [۷۷]، صنعتی، حق بیمه، فرآیند ساخت، پزشکی، اکتشاف نفت و گاز، ریاتیک، گفتار، اوراق بهادار، ارتباط از راه دور و حمل و نقل می باشد.

۳-۲- شباهت با مغز

یکی از سلول های عصبی، معروف به نورون است که دانش بشری آن را به عنوان سازنده اصلی مغز می انگارد. سلول های عصبی قادرند تا با اتصال به یکدیگر تشکیل شبکه های عظیم بدهند. قدرت خارق العاده مغز انسان از تعداد بسیار زیاد نورون ها و ارتباطات بین آنها ناشی می شود. سلول های عصبی می توانند از طریق مکانیسم های الکتروشیمیایی اطلاعات را انتقال دهند. در واقع، شبکه های عصبی شبیه سازی شده یا کامپیوتری، فقط قادرند بخش کوچکی از ویژگی های شبکه های عصبی بیولوژیک را شبیه سازی کنند. به عبارت دیگر، از دید یک مهندس نرم افزار، هدف از ایجاد یک شبکه عصبی نرم افزاری ایجاد مکانیسمی برای حل مسائل مهندسی با الهام از الگوی رفتاری شبکه های بیولوژیک است [۷۸].

۳-۳- روش کار نورون‌ها

در شکل ۳-۱، نمای ساده شده‌ای از ساختار یک نورون بیولوژیک نمایش داده شده است.



شکل ۳-۱- ساختار یک نورون بیولوژیک

هر نورون طبیعی از سه قسمت اصلی تشکیل شده است:

بدنه ی سلول^۱، دندریت^۲ و اکسون^۳.

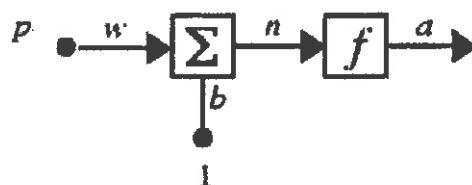
دندریت‌ها سیگنال‌های الکتریکی را به هسته ی سلول منتقل می‌کنند. بدنه ی سلول انرژی لازم را برای فعالیت نورون فراهم کرده و بر روی سیگنال‌های دریافتی عمل می‌کند، که با یک عمل ساده جمع و مقایسه با یک سطح آستانه مدل می‌گردد. اکسون سیگنال‌های الکتروشیمیایی دریافتی از هسته ی سلول را به نورون‌های دیگر منتقل می‌کند. محل تلاقی یک اکسون از یک سلول به دندریت‌های سلول‌های دیگر را سیناپس می‌گویند که توسط آن ارتباطات بین نورون‌ها برقرار می‌شود. به فضای مابین اکسون و دندریت‌ها فضای سیناپسی گویند. در حقیقت دندریت‌ها به عنوان ورودی نورون و اکسون به عنوان خروجی و فضای سیناپسی محل اتصال این دو می‌باشد. نورون‌ها از هریک از اتصالات ورودی خود یک ولتاژ کم دریافت می‌کند (توسط سیگنال عصبی ورودی) و آنها را با هم جمع می‌زنند. اگر این حاصل جمع به یک مقدار آستانه رسید اصطلاحاً نورون آتش می‌کند و روی اکسون خود یک ولتاژ خروجی ارسال می‌کند که این ولتاژ به

^۱ Soma
^۲ Dendrite
^۳ Axon

دندریت هایی که به این اکسون متصل هستند رسیده و باعث یک سری فعل و انفعاله‌های شیمیایی در اتصالات سیناپسی می شود و می تواند باعث آتش کردن نورون های دیگر شود. تمامی فعالیت های مغزی انسان توسط همین آتش کردن ها انجام می شود. البته تحقیقات جدید نمایانگر این واقعیت هستند که نورون های بیولوژیک بسیار پیچیده تر از مدل ساده ای هستند که در بالا تشریح شد. اما همین مدل ساده می تواند زیربنای مستحکمی برای دانش شبکه های عصبی مصنوعی تلقی گردد.

۳-۴- مدل ریاضی

در متون فنی برای نمایش مدل ساده ای که در بالا تشریح گردید، به طور معمول از شکلی مشابه شکل ۳-۲ استفاده می شود.



شکل ۳-۲- مدل ریاضی یک نورون

در این شکل کلاسیک، از علامت p برای نشان دادن یک سیگنال ورودی استفاده می شود. در واقع در این مدل، یک سیگنال ورودی پس از تقویت (یا تضعیف) شدن به اندازه پارامتر w ، به صورت یک سیگنال الکتریکی با اندازه pw وارد نورون می شود. به جهات ساده سازی مدل ریاضی، فرض می شود که در هسته ی سلول عصبی، سیگنال ورودی با سیگنال دیگری به اندازه b جمع می گردد. در واقع سیگنال b خود به معنی آن است که سیگنالی به اندازه واحد در پارامتری مانند b ضرب (تقویت یا تضعیف) می شود. ورودی خالص تابع انتقال^۱ (n) ، که یک عدد است، مجموع ورودی وزن دار pw و بایاس b است. در این جا f یک تابع انتقال است، به طور نمونه تابع خطی یا یک تابع سیگموئید، که

^۱ Transfer Function

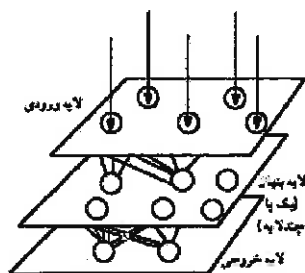
مورد n را می‌گیرد و خروجی a را تولید می‌کند. پارامتر w یا همان ضریبی که سیگنال ورودی p در آن ضرب می‌شود، در اصطلاح ریاضی به نام پارامتر وزن^۱ نیز گفته می‌شود. زمانی که از کنار هم قرار دادن تعداد بسیار زیادی از سلول‌های فوق یک شبکه ی عصبی بزرگ ساخته شود، شبکه‌ای در دست خواهیم داشت که رفتار آن علاوه بر تابع خروجی f ، کاملاً به مقادیر w و b وابسته خواهد بود. w و b هر دو پارامترهای عددی قابل تنظیم از نورون هستند و ایده ی اصلی شبکه ی عصبی آن است که چنین پارامترهایی می‌توانند طوری تنظیم شوند که شبکه رفتارهای مطلوب و جالبی را نشان دهد. در چنین شبکه ی بزرگی، تعداد بسیار زیادی از پارامترهای w و b باید توسط طراح شبکه یا خود شبکه مقداردهی شوند. این فرآیند از کار، در اصطلاح دانش شبکه‌های عصبی، به فرآیند یادگیری (آموزش) معروف است. در واقع در یک آزمایش واقعی، پس از آن که سیگنال‌های ورودی چنین شبکه بزرگی داده شدند، طراح شبکه یا خود شبکه با اندازه‌گیری خروجی و با تنظیم پارامترهای w و b به گونه‌ای که خروجی مطلوب به دست آید، شبکه را آموزش می‌دهد (در نخستین مرحله ی آموزش، مقادیر w و b به طور تصادفی انتخاب می‌شوند. زیرا تا این پارامترها مقدار نداشته باشند، شبکه ی عصبی قابل استفاده نخواهد بود)، در حین آموزش دیدن شبکه ی عصبی (یعنی به تدریج هم زمان با افزایش دفعاتی که مقادیر پارامترها برای رسیدن به خروجی مطلوب‌تر، تنظیم می‌شوند) مقدار پارامترها به مقدار حقیقی و نهایی خود نزدیک‌تر می‌شوند یا هم‌گرایی^۲ رخ می‌دهد. به این ترتیب پس از آن که چنین شبکه ای به ازای مجموعه‌ای از ورودی‌ها برای ساختن خروجی‌های مطلوب آموزش دید، می‌توان از آن برای حل مسائلی که شامل ورودی‌های متفاوتی هستند، بهره برد. سلول‌های عصبی دارای ورودی‌های متعددی هستند و خروجی آنها نیز الزاماً محدود به یک خروجی نیست. بر این اساس زمانی که بخواهیم از مدل‌سازی ریاضی برای مدل کردن یک سلول عصبی استفاده کنیم، به جای آن که همانند شکل ۳-۲ از یک ورودی p و یک خروجی a استفاده کنیم، از یک بردار p و یک بردار a سخن می‌گوییم. به این ترتیب بدون آن که نیاز به اعمال تغییری در این تصویر

^۱ Weight

^۲ Convergence

داشته باشیم، می‌توانیم از آن برای مدل‌سازی سلولی با n ورودی $(p_1, p_2, p_3, \dots, p_n)$ و به همین ترتیب m خروجی (a_1, a_2, \dots, a_m) استفاده کنیم. توجه داشته باشید که در این صورت، تعداد عناصر b و W نیز به تناسب افزایش می‌یابند و هر یک به n عدد افزایش می‌یابند.

ساختار شبکه‌های عصبی امروزی، از لایه‌های نورونی تشکیل شده است. در چنین ساختاری، نورون‌ها علاوه بر آنکه در لایه‌ی خود به شکل محدودی به یکدیگر اتصال داده شده‌اند، از طریق اتصال بین لایه‌ها نیز به نورون‌های طبقات مجاور ارتباط داده می‌شوند. در شکل ۳-۳ نمونه‌ای از ساختار لایه‌ای یک شبکه‌ی عصبی مصنوعی نمایش داده شده است.



شکل ۳-۳- ساختار لایه‌ای شبکه‌ی عصبی مصنوعی

در این توپولوژی، گروهی از نورون‌ها از طریق ورودی‌های خود با جهان واقعی ارتباط دارند. گروه دیگری از نورون‌ها نیز از طریق خروجی‌های خود، جهان خارج را می‌سازند. در توپولوژی فوق، مابقی نورون‌ها از دید پنهان هستند. در بسیاری از شبکه‌های عصبی، اتصالات بین نورونی به گونه‌ای است که نورون‌های لایه‌های میانی، ورودی خود را از تمام نورون‌های لایه‌ی پایینی خود (به طور معمول لایه‌ی نورون‌های ورودی) دریافت می‌کنند. بدین ترتیب در یک شبکه‌ی عصبی، سیگنال‌ها به تدریج از یک لایه‌ی نورونی به لایه‌های بالاتر حرکت می‌کنند و در نهایت به لایه‌ی آخر و خروجی شبکه می‌رسند. چنین مسیری در اصطلاح فنی پیش‌خور^۱ نامیده می‌شود. نوع دیگری از ارتباط بین نورونی در شبکه‌های عصبی به پس‌خور^۲ معروف است. در این نوع از ارتباطات، خروجی یک لایه‌ی نورونی به لایه‌ی قبلی (یا لایه‌های پایین‌تر) اتصال داده می‌شود.

^۱ Feed Forward
^۲ Feedback

به‌طور کلی دو روش برای آموزش دادن شبکه‌های عصبی وجود دارد. روش با سرپرست^۱ و روش بدون سرپرست^۲ [۷۹]. در یادگیری با سرپرست قاعده‌ی یادگیری توسط مجموعه‌ای از مثال‌ها (مجموعه‌ی آموزشی) برای ایجاد شبکه‌ی مناسب فراهم می‌شود. در این شیوه ورودی‌ها و خروجی‌های منطبق بر آن‌ها (هدف‌ها)^۳ در دسترس هستند. زمانی که ورودی‌ها برای شبکه به کار می‌روند، خروجی‌های شبکه با هدف‌ها مقایسه می‌شوند. قاعده‌ی یادگیری سپس برای تنظیم وزن‌ها و بایاس‌های شبکه به منظور نزدیک‌تر کردن خروجی‌های شبکه به هدف‌ها استفاده می‌شود. اما در یادگیری بدون سرپرست شبکه‌ی عصبی باید به تنهایی و بدون کمک داده‌های خروجی و با توجه به شکل سیگنال‌های خروجی خود بتواند درباره‌ی درستی و نادرستی آنها تصمیم‌گیری نماید.

در روش معمول آموزش شبکه‌های عصبی، از مجموعه‌ی شناخته‌شده‌ای از داده‌های ورودی و خروجی‌های متناظر آنها (داده‌های سری آموزشی)^۴ برای آموزش دادن شبکه استفاده می‌شود. در چنین فرایندی، پس از اعمال داده‌های آموزشی، پارامترهای شبکه به تدریج به سمت مقادیر نهایی خود همگرا می‌شوند. در مواردی ممکن است که شبکه‌ی عصبی اصولاً موفق به فراگیری نشود. بدین معنی که پارامترهای شبکه پس از زمان‌های طولانی به مقدار مشخصی همگرا نشود. چنین مواردی ممکن است بر اثر ناکافی بودن داده‌های آموزشی و یا اصولاً نقص طراحی شبکه ایجاد شوند. از طرف دیگر در مواردی شبکه‌ی عصبی دچار آموزش بیش از حد^۵ می‌شود. در صورتی که تعداد داده‌های آموزشی یک شبکه عصبی بیش از اندازه زیاد باشد (در واقع از تمامی داده‌های مسئله برای آموزش دادن به شبکه استفاده شود)، شبکه‌ی عصبی به جای آن که آموزش ببیند، به حالتی می‌رسد که به آن حفظ کردن اطلاعات می‌گویند. در واقع به جای آن که یک شبکه‌ی عصبی برای حل مسئله از هوش خود کمک بگیرد، از محفوظات خود استفاده می‌کند. پس از آن که یک شبکه‌ی عصبی به اندازه‌ی کافی آموزش دید، طراح یا کاربر شبکه می‌تواند پارامترهای شبکه را قفل کند. در این مرحله شبکه‌ی عصبی برای کاربرد واقعی خود و حل مسائل آماده خواهد بود.

^۱ Supervised ^۴ Training Set Data
^۲ Unsupervised ^۵ Over Training
^۳ Targets

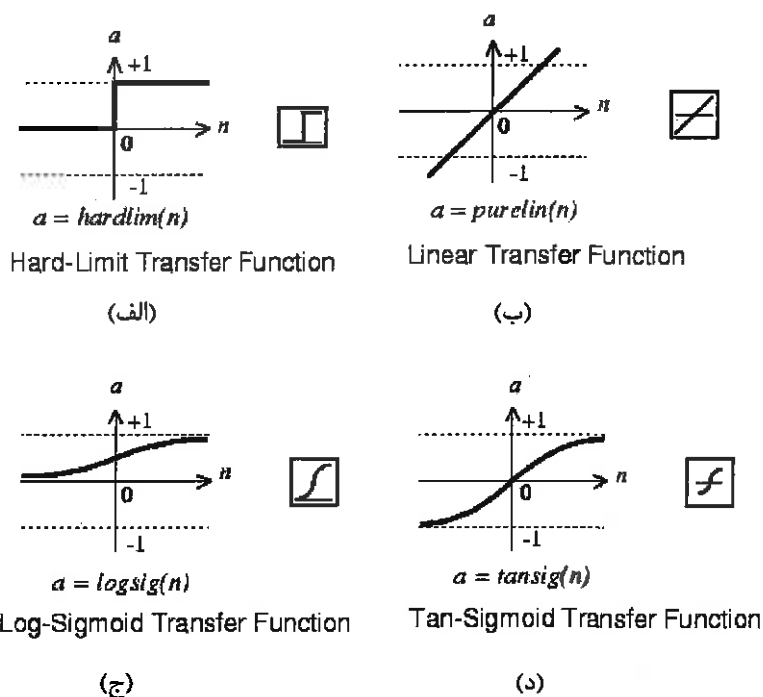
۳-۵- مدل نوروئی و معماری های شبکه^۲

مدل نوروئی و معماری شبکه ی عصبی [۸۰] شرح می دهد که چگونه شبکه ای ورودی اش را به خروجی تبدیل می کند. این تبدیل می تواند به عنوان یک محاسبه در نظر گرفته شود.

۳-۵-۱- مدل نوروئی (عصبی)

۳-۵-۱-۱- توابع انتقال

تعداد زیادی از توابع انتقال در جعبه ابزار MATLAB وجود دارند، چند نمونه از توابع مورد استفاده در شکل ۳-۴ نمایش داده شده اند.

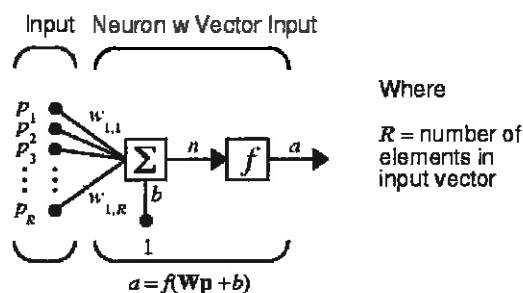


شکل ۳-۴- چهار تابع انتقال مختلف

تابع انتقال hard-lim شکل ۳-۴- الف خروجی نورون را هم به صفر در صورتی که ورودی خالص مورد بحث n کم تر از صفر باشد، یا یک، در صورتی که n بزرگ تر از صفر یا برابر با صفر باشد محدود می کند. این تابع در پرسپترون ها^۱، برای ایجاد نورون هایی که تصمیمات دسته بندی را اتخاذ می کنند استفاده می شود. تابع انتقال خطی در شکل ۳-۴- ب نمایش داده شده است. نورون هایی از این نوع به عنوان محاسبه کننده های خطی در فیلتر های خطی و هم چنین در شبکه های پس انتشار استفاده می شوند. تابع logsig شکل ۳-۴- ج خروجی هایی بین صفر و یک و تابع انتقال tan-sig شکل ۳-۴- د نیز خروجی های بین یک و منفی یک را به ازای ورودی نورون که شامل محدوده ی منفی تا مثبت بی نهایت است، ایجاد می کند. این توابع انتقال به طور متداول در شبکه های چند لایه ای پس انتشار استفاده می شود.

۳-۵-۱-۲- نورون با بردار ورودی

یک نورون با یک بردار ورودی R عنصری در شکل ۳-۵ نمایش داده شده است. در این جا ورودی های تک عنصری p_1, p_2, \dots, p_R در وزن های $w_{1,1}, w_{1,2}, \dots, w_{1,R}$ ضرب می شوند و مقادیر وزن دار شده به محل اتصال مجموع (Σ) خورانده می شوند. جمع آن ها به صورت مخفف wp است، که حاصل ضرب ماتریس w و بردار p است.



شکل ۳-۵- یک نورون با R بردار ورودی تک عنصری

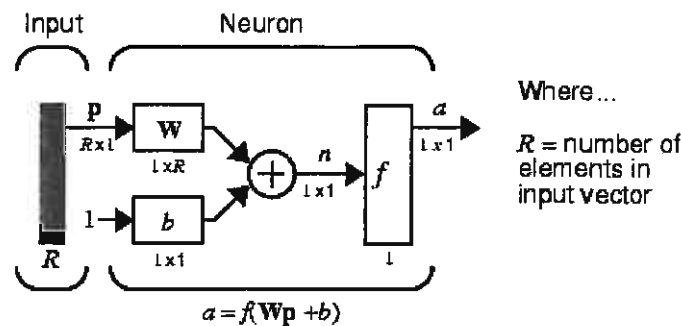
نورون یک بایاس b دارد، که با ورودی های وزن دار شده برای تشکیل ورودی خالص n جمع می شود.

این مجموع، n ، متغیر مستقل تابع انتقال f است:

^۱ Perceptrons

$$n = w_{1,1}p_1 + w_{1,2}p_2 + \dots + w_{1,R}p_R + b \quad (1-3)$$

شکل یک نورون انفرادی نمایش داده شده در بالا شامل جزئیات زیادی است. از این رو، علامت مختصر شده ای برای نورون انفرادی تدبیر شده است (شکل ۳-۶)



شکل ۳-۶- علامت مختصر شده ی نورون انفرادی

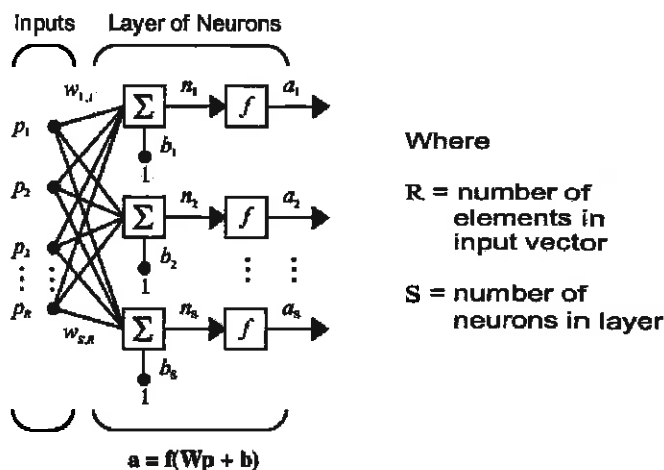
ابعاد p در زیر نماد p در شکل به عنوان $R \times 1$ نمایش داده می شوند. از این رو، p یک بردار از R عنصر ورودی است. این ورودی ها در ماتریس w شامل یک ردیف و R ستون ضرب می شوند. همانند قبل، یک ثابت 1 به عنوان ورودی به نورون وارد می شود و در بایاس عددی b ضرب می شود. ورودی خالص به تابع انتقال f ، n است، که مجموع بایاس b و حاصل wp است. این مجموع از تابع انتقال f عبور داده می شود تا خروجی نورون a را بدهد. اگر بیش از یک نورون وجود داشته باشد، خروجی شبکه یک بردار خواهد بود. یک لایه در بر گیرنده ترکیبی از وزن ها، اعمال ضرب و جمع (این جا به عنوان یک ضرب برداری wp درک می شود)، بایاس b و تابع انتقال f است. آرایش ورودی ها (بردار p) به عنوان یک لایه در نظر گرفته نمی شود.

۳-۵-۲- معماری های شبکه [۸۱]

دو یا تعداد بیش تری از نورون ها که قبلاً نشان داده شده اند می توانند در یک لایه ادغام شوند، و یک شبکه ی مخصوص می تواند یک و یا تعداد بیش تری از چنین لایه هایی را در بر گیرد. در ابتدا یک لایه ی تکی از نورون ها را در نظر می گیریم.

۳-۵-۲-۱- یک لایه از نورون ها

یک شبکه ی تک لایه ای با R عنصر ورودی و S نورون در شکل ۳-۷ می آید.



Where

R = number of elements in input vector

S = number of neurons in layer

شکل ۳-۷- یک شبکه تک لایه ای

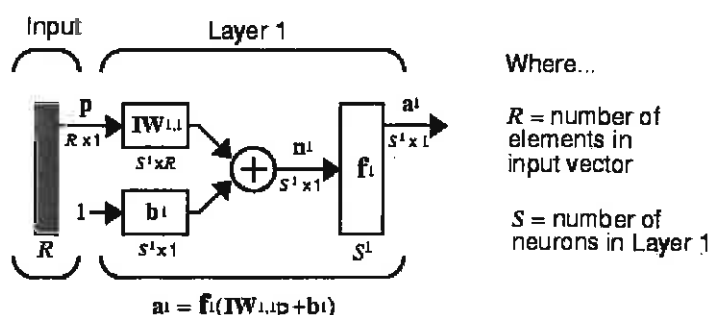
در این شبکه هر عنصر از بردار ورودی p به هر نورون ورودی از طریق ماتریس وزنی W متصل می شود. i امین نورون یک جمع کننده (Σ) دارد که ورودی های وزن دار شده و بایاس را برای تشکیل خروجی عددی خودش n(i) جمع آوری می کند. n(i) های مختلف در کنار یک دیگر از یک بردار ورودی شبکه ی S عنصری بردار n را می دهند. سرانجام لایه ی خروجی نورون یک بردار ستونی a را تشکیل می دهد. مرسوم است که تعداد ورودی های یک لایه، متفاوت از تعداد نورون ها باشد (یعنی R ضرورتاً برابر با S نیست). عناصر بردار ورودی در شبکه از میان ماتریس وزنی W وارد می شوند.

$$W = \begin{bmatrix} w_{1,1} & w_{1,2} & \dots & w_{1,R} \\ w_{2,1} & w_{2,2} & \dots & w_{2,R} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_{S,1} & w_{S,2} & \dots & w_{S,R} \end{bmatrix} \quad (۲-۳)$$

در نماد $W_{i,j}$ اندیس i نشان دهنده نورون مقصد و اندیس j نشان دهنده منبع ورودی است. از این رو، $W_{1,2}$ قدرت سیگنال از عنصر ورودی دوم به نورون اول را نشان می دهد.

۳-۵-۲-۲- ورودی ها و لایه ها

شبکه ی تک لایه ای دارای S نورون با R ورودی هم می تواند با علامت مختصر شده ای رسم شود. برای توصیف شبکه هایی که لایه های چندگانه دارند، علامت باید بسط داده شود. شبکه تک لایه ای که در شکل ۳-۷ نشان داده شده به صورت مختصر در شکل ۳-۸ دوباره کشیده شده است.



Where...

R = number of elements in input vector

S = number of neurons in Layer 1

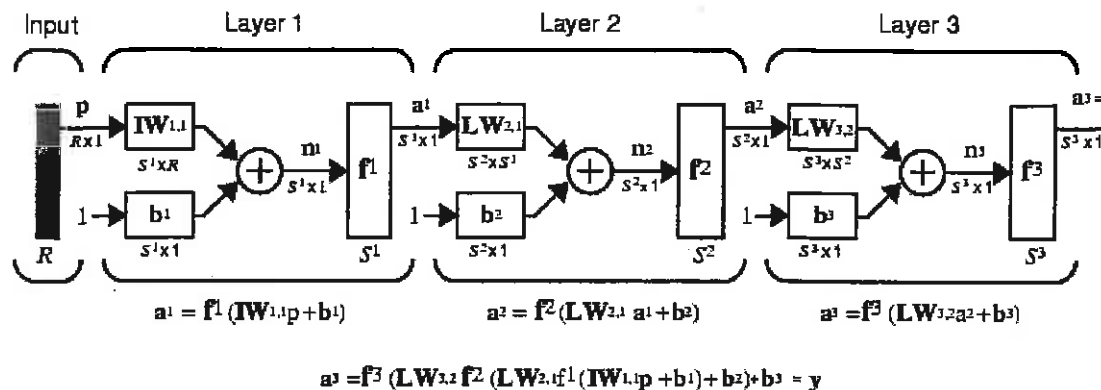
شکل ۳-۸- شبکه تک لایه ای دارای S نورون با R ورودی

در این جا p یک بردار ورودی با طول R و W یک ماتریس $S \times R$ و a و b بردارهای با طول S هستند. ماتریس های وزنی متصل شده به بردار ورودی p به عنوان یک ماتریس وزنی ورودی ($IW_{1,1}$) علامت گذاری می شود که یک منبع^۱ (شاخص دوم) و یک مقصد^۱ (شاخص اول) دارد. عناصر لایه ی ۱، مانند بایاس و خروجی بالا وند یک دارند که بیان می کند آن ها مربوط به لایه ی اول هستند. لایه های چندتایی از نورون ها، از ماتریس های وزن لایه ای (LW)^۱ و هم چنین از ماتریس های وزنی ورودی (IW)^۲ استفاده می کنند.

۳-۵-۲-۳- لایه های چند گانه از نورون ها

یک شبکه می تواند چندین لایه داشته باشد. هر لایه ای ماتریس وزنی w ، یک بردار بایاس b و یک بردار خروجی a دارد. به عنوان مثال یک شبکه ی سه لایه ای هم می تواند به صورت علامت مختصر شده نشان داده شود (شکل ۳-۹).

^۱ Layer Weight
^۲ Input Weight



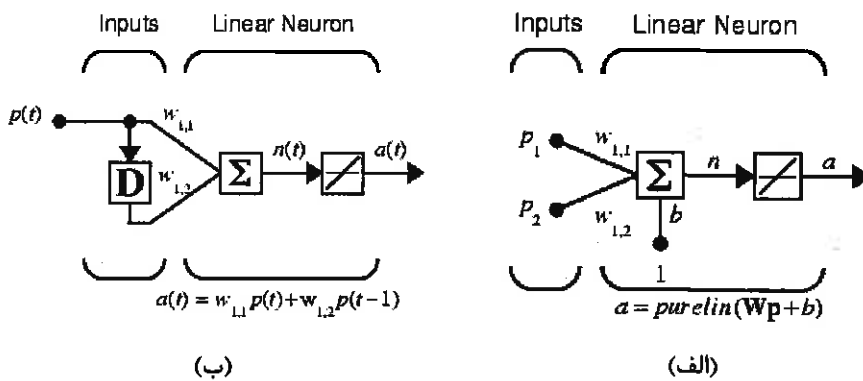
شکل ۳-۹- علامت مختصر شده شبکه ی سه لایه ای

شبکه ی نشان داده شده در بالا R1 ورودی، S1 نورون در لایه ی اول، S2 نورون در لایه ی دوم، ... دارد. مرسوم است که لایه های مختلف تعداد متفاوتی از نورون ها را داشته باشند. یک ورودی ثابت ۱ هم به عنوان بایاس مربوط به هر نورون خورنده می شود. لایه ای که خروجی شبکه را تولید می کند لایه ی خروجی نامیده می شود. تمام لایه های دیگر لایه های مخفی نامیده می شوند. شبکه ی سه لایه ای نشان داده شده در شکل ۳-۹ یک لایه ی خروجی (لایه ی سوم) و دو لایه ی مخفی (لایه ی ۱ و لایه ی ۲) دارد. بعضی از نویسندگان به ورودی به عنوان لایه ی چهارم نگاه می کنند، اما در جعبه ابزار MATLAB از این حالت استفاده نمی شود. شبکه های چند لایه ای کاملاً قدرتمند هستند. این جا فرض می شود که خروجی لایه ی سوم a^3 خروجی مدنظر شبکه است و این خروجی به صورت y نشان داده می شود.

۳-۵-۳- ساختارهای داده ها و شبکه ها

دو نوع اساسی از بردارهای ورودی وجود دارند: آن هایی که به طور یک جا (یا بدون هیچ ترتیب زمانی)، و آن هایی که به طور متناوب با زمان وارد می شوند. شبکه ای که هیچ برگشت به عقب یا تاخیری ندارد شبکه استاتیک نامیده می شود (شکل ۳-۱۰- الف). در این پایان نامه از این شبکه استفاده شده است. زمانی که یک شبکه شامل تاخیرهایی باشد

شبکه ی دینامیک حاصل می شود. یک شبکه ی ساده که شامل یک تاخیر است در شکل ۳-۱۰- ب نشان داده شده است.



شکل ۳-۱۰- شبکه های استاتیک (الف) و دینامیک (ب)

۳-۵-۴- سبک های آموزش

این قسمت دو سبک متفاوت از آموزش را شرح می دهد که برای هر دوی شبکه های استاتیک و دینامیک به کار می روند. در آموزش افزایشی^۱ وزن ها و بایاس های شبکه در هر زمانی که یک ورودی به شبکه ارائه می شود و در آموزش به شیوه ی مجموعه ای^۲، وزن ها و بایاس ها تنها بعد از این که همه ورودی ها و هدف ها ارائه می شوند، به روز^۳ می شوند.

۳-۶- قواعد یادگیری

یک قاعده ی یادگیری به عنوان فرآیندی برای اصلاح وزن ها و بایاس های یک شبکه تعریف می شود (این فرآیند می تواند به عنوان یک الگوریتم آموزشی نیز در نظر گرفته شود). قاعده ی یادگیری برای آموزش شبکه به منظور انجام وظیفه مخصوصی به کار گرفته می شود [۸۲]. قواعد یادگیری به دو دسته تقسیم می شوند: یادگیری با سرپرست و یادگیری بدون سرپرست که قبلاً شرح داده شدند.

^۱ Incremental
^۲ Batch
^۳ Update

۳-۷- پس انتشار

۳-۷-۱- مقدمه

پس انتشار^۱ یا انتشار خطا [۸۳،۸۴] یک روش متداول از یادگیری شبکه های عصبی مصنوعی برای چگونگی انجام یک کار معین است. این مبحث در ابتدا توسط پاول وریس^۲ در ۱۹۴۷ شرح داده شد، اما تا سال ۱۹۸۶ چندان اهمیتی نداشت، تا این که از میان کار دیوید ای. رامل هارت^۳، جفری ای. هینتون^۴ و رونالد جی. ویلیام^۵ منجر به یک رنسانس در زمینه جستجوی شبکه ی عصبی مصنوعی شد. این شیوه یک روش یادگیری با سرپرست بوده و برای شبکه های پیش خور بسیار مفید است. این اصطلاح مختصر شده ی عبارت "انتشار در جهت عقب از خطاها"^۶ است. پس انتشار تعمیم قاعده ی یادگیری ویدرو-هاف به شبکه های با لایه های چندتایی و توابع انتقال متفاوت است.

۳-۷-۲- کم ترین میانگین مربع خطا [۴۲]

الگوریتم کم ترین میانگین مربع خطا (LMS)^۷ یک مثال از آموزش با سرپرست است، که در آن قاعده ی یادگیری با یک مجموعه از مثال ها برای رفتار مطلوب شبکه انجام می شود:

$$\{p_1, t_1\}, \{p_2, t_2\}, \dots, \{p_Q, t_Q\} \quad (3-3)$$

این جا p_Q یک ورودی به شبکه است و t_Q خروجی هدف منطبق بر آن است. هنگامی که هر یک از ورودی ها برای شبکه به کار گرفته می شوند، خروجی شبکه با هدف مقایسه می گردد، خطای محاسبه شده به عنوان تفاوت میان خروجی هدف و خروجی شبکه محاسبه می گردد. هدف کمینه کردن میانگین مجموع این خطاها در k امین تکرار است:

$$mse = \frac{1}{Q} \sum_{k=1}^Q e(k)^2 = \frac{1}{Q} \sum_{k=1}^Q (t(k) - a(k))^2 \quad (4-3)$$

^۱ Backpropagation
^۲ Paul Werbos
^۳ David E. Rumelhart
^۴ Geoffrey E. Hinton

^۵ Ronald J. Williams
^۶ backwards propagation of errors
^۷ Least Mean Square Error

الگوریتم LMS وزن ها و بایاس های شبکه ی خطی را به صورت کمینه کردن این میانگین مربع خطا تنظیم می کند [۸۵].

۳-۷-۳- الگوریتم (learnwb) یا الگوریتم ویدرو- هاف

الگوریتم یادگیری ویدرو-هاف^۱، بر پایه ی فرآیند نزول گرادیانی^۲ تقریبی است [۸۶]. در این جا شبکه های خطی توسط مثال هایی برای رفتار درست آموزش داده می شوند. ویدرو و هاف این بینش را داشتند که توانستند میانگین مربع خطا را با استفاده از خطای مجذور در هر تکرار بر آورد کنند. اگر مشتق جزئی خطای مجذور در رابطه با وزن ها و بایاس ها در تکرار kام گرفته شود، روابط ۳-۵ و ۳-۶ را خواهیم داشت:

$$\frac{\partial e^2(k)}{\partial w_{1,j}} = 2e(k) \frac{\partial e(k)}{\partial w_{1,j}} \quad j = 1, 2, \dots, R \quad (5-3)$$

$$\frac{\partial e^2(k)}{\partial b} = 2e(k) \frac{\partial e(k)}{\partial b} \quad (6-3)$$

سپس به مشتق جزئی در ارتباط با خطا نگاه بیندازید:

$$\frac{\partial e(k)}{\partial w_{1,j}} = \frac{\partial [t(k) - \alpha(k)]}{\partial w_{1,j}} = \frac{\partial}{\partial w_{1,j}} [t(k) - (Wp(k) + b)] \quad (7-3)$$

یا

$$\frac{\partial e(k)}{\partial w_{1,j}} = \frac{\partial}{\partial w_{1,j}} \left[t(k) - \left(\sum_{i=1}^R w_{1,i} p_i(k) + b \right) \right] \quad (8-3)$$

این جا $p_i(k)$ ، آمین عنصر بردار ورودی در kامین تکرار است. رابطه های بالا می توانند به صورت

روابط ۳-۹ و ۳-۱۰ ساده سازی شوند:

$$\frac{\partial e(k)}{\partial w_{1,j}} = -p_j(k) \quad (9-3)$$

و

$$\frac{\partial e(k)}{\partial b} = -1 \quad (10-3)$$

^۱ Widrow- Hoff learning Algorithm
^۲ Steepest Descent

سرانجام، ماتریس وزنی تغییر داده شده و بایاس خواهد شد:

$$2\alpha e(k)p(k) \quad (11-3)$$

و

$$2\alpha e(k) \quad (12-3)$$

این دو معادله اساس الگوریتم ویدرو-هاف (LMS) را تشکیل می دهند. این نتایج می توانند در مورد

نورون های چند گانه بسط داده شوند و به شکل ماتریسی به صورت زیر نوشته شوند:

$$W(k+1) = W(k) + 2\alpha e(k)p^T(k) \quad (13-3)$$

$$b(k+1) = b(k) + 2\alpha e(k) \quad (14-3)$$

این جا خطای e و بایاس b بردار هستند، و α سرعت یادگیری است. اگر α بزرگ باشد، یادگیری به سرعت رخ می دهد، اما اگر خیلی بزرگ باشد می تواند منجر به ناپایداری شده و خطاها حتی ممکن است افزایش یابند.

در پس انتشار بردارهای ورودی و بردارهای هدف منطبق، برای آموزش یک شبکه تا زمانی استفاده می شوند که بتواند تابعی را برآورد کند که بردارهای ورودی را با بردارهای خروجی ویژه، همراه کند. پس انتشار استاندارد یک الگوریتم نزول گرادیانی می باشد به همان صورتی که در قانون یادگیری ویدرو-هاف موجود است که در آن وزن های شبکه همراه با شیب منفی تابع کارآیی حرکت داده می شوند تفاوت هایی در الگوریتم پایه ای که اساس تکنیک های بهینه سازی استاندارد دیگر می باشند مانند گرادیان تواماً^۱ و روش های نیوتن^۲ [۸۷] وجود دارند. در این جا هدف چگونگی استفاده از توابع آموزش پس انتشار برای آموزش شبکه های عصبی پیش خور برای حل مسائل ویژه است. به طور کلی چهار مرحله در فرآیند آموزش وجود دارد:

۱. جمع کردن داده های آموزش

۲. ایجاد شبکه

۳. آموزش شبکه

۴. شبیه سازی پاسخ شبکه به ورودی های جدید

^۱ Conjugate Gradient
^۲ Newton Methods

۳-۷-۴- معماری

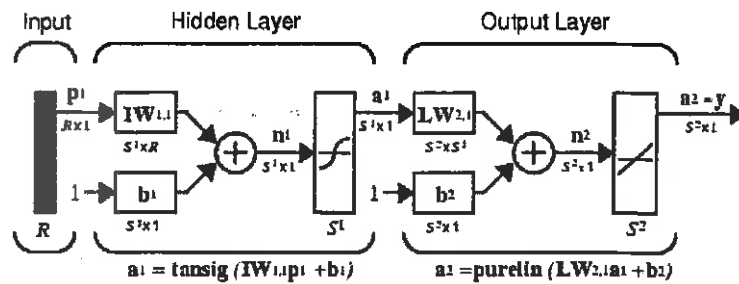
این بخش معماری شبکه ای را که به صورت بسیار متداول با الگوریتم پس انتشار برای شبکه ی پیش خور چند لایه ای استفاده می شود ارائه می دهد. یک شبکه ی دو لایه ای، که لایه ی اول سیگموئیدی و لایه ی دوم خطی است، می تواند به عنوان یک برآورد کننده ی تابع کلی استفاده شود و هر تابعی را با تعداد محدودی از ناپیوستگی های دلخواه، با داشتن نورون های کافی در لایه ی مخفی تخمین بزند [۸۸،۸۹]. این نوع از شبکه ی دو لایه ای به طور گسترده در پس انتشار استفاده می شود.

۳-۷-۴-۱- مدل نورونی

سه تابع انتقال purelin ، logsig و tansig متداول ترین توابع انتقال برای پس انتشار هستند.

۳-۷-۴-۲- شبکه پیش خور

شبکه های پیش خور اغلب یک یا تعداد بیش تری لایه های مخفی از نورون های سیگموئیدی که یک لایه ی خارجی از نورون های خطی به دنبال آن ها می آید، دارند. لایه های چندگانه از نورون ها با توابع انتقال غیر خطی به شبکه اجازه می دهد که روابط خطی و غیر خطی میان بردارهای ورودی و خروجی را یاد بگیرد [۹۰]. لایه ی خروجی خطی به شبکه اجازه می دهد که مقادیر خارج از گستره ۱- تا ۱+ را تولید کند، اگر بخواهیم خروجی های یک شبکه را فشرده نماییم (همانند مقادیر میان ۱ و -۱)، لایه ی خروجی باید از یک تابع انتقال سیگموئیدی استفاده کند. علامت مناسب که قابل استفاده در شبکه ی دو لایه ای tansig/purelin است در شکل ۳-۱۱ نشان داده می شود.



شکل ۳-۱۱- شبکه ی پیش خور دو لایه ای tansig/purelin

۳-۷-۴-۲-۱- ایجاد یک شبکه

اولین مرحله در آموزش یک شبکه ی پیش خور ایجاد شی شبکه^۱ است، تابع newff یک شبکه ی پیش خور را ایجاد می کند و وزن ها و بایاس های شبکه را مقدار اولیه^۲ می دهد، بنابر این شبکه برای آموزش آماده است. این تابع نیازمند سه شناسه است که به ترتیب عبارتند از یک ماتریس از بردارهای ورودی R عنصری نمونه، یک ماتریس از بردارهای هدف S عنصری و آرایه ای که در برگرفته ی اندازه ی لایه ها (تعداد نورون ها در لایه ها) است. شناسه های اضافی نیز می توانند ایجاد شوند.

۳-۷-۴-۲-۲- مقدار دهی اولیه وزن ها

قبل از آموزش یک شبکه ی پیش خور، باید به وزن ها و بایاس ها مقدار اولیه داده شود. فرمان ایجاد شبکه به طور خودکار وزن ها را مقدار اولیه می دهد، اما اگر بخواهیم به آنها دوباره مقدار اولیه دهیم، این کار را با فرمان init انجام می دهیم.

^۱ network object
^۲ Initialize

۳-۷-۴-۲-۳- شبیه سازی

تابع sim یک شبکه را شبیه سازی می کند. این تابع ورودی و شی شبکه را می گیرد و خروجی های شبکه را پس می دهد. شیوه ی مجموعه ای از شبیه سازی که در آن تمام بردارهای ورودی در یک ماتریس واقع می شوند، نسبت به معرفی بردارها به صورت یکی در یک زمان خیلی کارا تر است.

۳-۷-۵- آموزش

زمانی که وزن ها و بایاس های شبکه مقدار اولیه داده می شود، شبکه آماده برای آموزش است. فرآیند آموزش به مجموعه ای از مثال ها برای رفتار مناسب شبکه (ورودی های شبکه و خروجی های هدف) نیاز دارد. در طی آموزش وزن ها و بایاس های شبکه به طور تکراری برای کمینه نمودن تابع کارایی شبکه تنظیم می شوند. تابع کارایی قراردادی برای شبکه های پیش خور میانگین مربع خطا mse (میانگین خطای مجذور شده میان خروجی های شبکه a و خروجی های هدف t) است. چندین الگوریتم آموزشی متفاوت برای شبکه های پیش خور شرح داده می شوند. تمام این الگوریتم ها از گرادیان تابع کارایی برای تعیین چگونگی مقدار اولیه دهی برای کمینه نمودن کارایی استفاده می کنند. گرادیان با استفاده از تکنیکی که پس انتشار نامیده می شود، تعیین می شود که در برگیرنده ی محاسبات انجام شونده در جهت عقب از درون شبکه می باشد. محاسبه پس انتشار با استفاده از قاعده ی تسلسل از حساب دیفرانسیل و انتگرال مشتق شده است [۹۱].

۳-۷-۵-۱- الگوریتم های پس انتشار

ساده ترین اجرای الگوریتم پس انتشار، وزن ها و بایاس های شبکه را در مسیری که در آن تابع کارایی^۱ با بیش ترین سرعت با گرادیان منفی کاهش می یابد، به روز می نماید.

^۱ Performance Function

یک تکرار از این الگوریتم می تواند به این صورت نوشته شود:

$$x_{k+1} = x_k - \alpha_k g_k \quad (15-3)$$

که x_k یک بردار از وزن ها و بایاس های فعلی در k امین تکرار است، g_k گرادیان متداول^۱ بوده، و α_k سرعت یادگیری^۲ است.

دو راه متفاوت که از طریق آن ها الگوریتم نزول گرادیانی^۳ می تواند انجام شود، وجود دارند: شیوه ی افزایشی^۴ و شیوه مجموعه ای^۵. در روش افزایشی، گرادیان محاسبه شده و وزن ها بعد از این که هر ورودی برای شبکه به کار گرفته شد محاسبه می شوند. در شیوه ی مجموعه ای وزن ها و بایاس های شبکه تنها بعد از این که تمام مجموعه ی آموزشی برای شبکه به کار رفتند، به روز می شود. گرادیان ها برای هر نمونه ی آموزشی، که با یکدیگر برای تعیین تغییر در وزن ها و بایاس ها اضافه می شوند، محاسبه می شوند [۹۱]. تعدادی از الگوریتم های پس انتشار شامل نزول گرادیانی مجموعه ای، نزول گرادیانی با مومنتوم و لوبنبرگ-مارکوآرت^۶ می باشند.

۳-۷-۶- آموزش سریع تر

نزول گرادیانی و نزول گرادیانی با مومنتوم برای مسائل عملی خیلی آهسته هستند. اما الگوریتم لوبنبرگ-مارکوآرت الگوریتمی با کارایی بالا است که می تواند از ده تا صد مرتبه سریع تر از الگوریتم های قبلی باشد. این الگوریتم با روش مجموعه ای عمل می کنند.

۳-۷-۶-۱- لوبنبرگ-مارکوآرت

الگوریتم لوبنبرگ-مارکوآرت [۹۲] به منظور رسیدن به سرعت آموزش بالا بدون نیاز به محاسبه ی

^۱ Current Gradient

^۲ Learning Rate

^۳ Gradient Descent Algorithm

^۴ Incremental Mode

^۵ Batch Mode

^۶ Levenberg-Marquardt

ماتریس هسین^۱ طراحی شد. طبق این روش چون تابع کارآیی شکل مجموع مربعات را دارد (همان طور که به طور نمونه در آموزش شبکه های پیش خور است)، ماتریس هسین به صورت معادله ی ۱۶-۳ تخمین زده می شود:

$$\mathbf{H} = \mathbf{J}^T \mathbf{J} \quad (16-3)$$

و گرادیان نیز می تواند با معادله ی ۱۷-۳ محاسبه شود:

$$\mathbf{g} = \mathbf{J}^T \mathbf{e} \quad (17-3)$$

که در آن \mathbf{J} ماتریس ژاکوبین^۲ و \mathbf{J}^T ماتریس ژاکوبین ترانپوز^۳ است که مشتقات اولیه ی خطاهای شبکه با در نظر گرفتن وزن ها و بایاس ها را در برمی گیرد، و \mathbf{e} برداری از خطاهای شبکه است. ماتریس ژاکوبین می تواند از طریق یک تکنیک پس انتشار استاندارد [۹۲] که نسبت به محاسبه ی ماتریس هسیان از پیچیدگی کم تری برخوردار است، محاسبه شود.

الگوریتم لونبرگ-مارکواردت این تخمین را برای ماتریس هسیان در به روز رسانی پارامترهای شبکه همانند روش نیوتن به صورت زیر استفاده می کند:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k - [\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \mu \mathbf{I}]^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{e} \quad (18-3)$$

زمانی که کمیت μ صفر است، این همان روش نیوتن با استفاده از ماتریس هسیان تقریبی است. زمانی که μ بزرگ است، این نزول گرادینانی همراه با یک اندازه ی مرحله ای کوچک است. روش نیوتن در نزدیکی یک مینیمم خطایی سریع تر و صحیح تر است، به طوری که هدف تغییر مکان به سمت روش نیوتن با حداکثر سرعتی که امکان دارد است. بنابراین μ بعد از هر مرحله ای به طور موقتی کاهش می یابد (کاهش در تابع کارآیی) و تنها وقتی که یک مرحله ی آزمایشی تابع کارآیی را افزایش دهد، افزایش داده می شود. در این روش، تابع کارآیی همیشه در هر چرخه ای از الگوریتم کاهش داده می شود. پارامترهای آموزشی برای لونبرگ-مارکواردت (trainlm) عبارتند از:

^۱ Hessian Matrix

^۲ Jacobian Matrix

^۳ Transpose

- دوره ها (epochs)
- نمایش (show)
- هدف (goal)
- زمان (time)
- گرادیان-مینیمم (min-grad)
- رد شدن-ماکزیمم (max-fail)
- mu
- کاهش- mu (mu-dec)
- افزایش-mu (mu-inc)
- ماکزیمم-mu (mu-max)
- کاهش-حافظه (mem-reduc)

وضعیت آموزش برای هر یک از تکرارهای الگوریتم نمایش داده می شود. پارامترهای دیگر زمانی که آموزش توقف می کند، تعیین می شوند. آموزش در صورتی متوقف می گردد که تعداد تکرارها از دوره ها تجاوز کند، اگر تابع کارآیی در زیر هدف بیفتد، اگر بزرگی گرادیان کم تر از گرادیان-مینیمم شود، یا اگر زمان آموزش طولانی تر از ثانیه های زمان (time) شود. max-fail با تکنیک توقف زود هنگام همراه می شود. پارامتر mu مقدار اولیه ای برای μ است. این مقدار هر وقت که تابع کارآیی توسط یک مرحله کاهش داده شود در mu-dec ضرب می شود. هر وقت که یک مرحله تابع کارآیی را افزایش دهد در mu-inc ضرب می شود. اگر mu از mu-max بزرگ تر شود، الگوریتم متوقف می شود. پارامتر mem-reduc برای کنترل مقدار حافظه ای که توسط الگوریتم استفاده می شود به کار می رود. اندازه ماتریس ژاکوبین $Q \times n$ است، که Q تعداد سری های آموزشی و n تعداد وزن ها و بایاس ها در شبکه است. اگر mem-reduc برابر ۱ قرار داده شود، ژاکوبین به طور کامل محاسبه شده و هیچ کاهش حافظه ای انجام نمی شود و اگر برابر ۲ قرار گیرد، آن گاه تنها

نیمی از ژاکوبین در یک زمان محاسبه می شود. این نیمی از حافظه ای را که از طریق محاسبه ی ژاکوبین کامل محاسبه می شود، ذخیره می کند. حتی اگر از کاهش حافظه استفاده شود، الگوریتم لونبرگ-مارکواردت همیشه ماتریس هسیان تقریبی را محاسبه می کند، که ابعاد $n \times n$ دارد. این الگوریتم سریع ترین روش برای آموزش شبکه های عصبی پیش خور با اندازه ی متوسط (تا چند صد وزن) می باشد. هم چنین دارای یک اجرای بسیار موثر در محیط نرم افزار مطلب است.

۳-۷-۷- بهبود تعمیم

شبکه های پس انتشار آموزش داده شده به صورت مناسب، تمایل دارند که در صورت ارائه ی ورودی هایی که هرگز آن ها را ندیده اند، پاسخ های منطقی بدهند، این خاصیت که تعمیم^۱ نامیده می شود، آموزش یک شبکه را برای یک مجموعه ی معرفی شده از جفت های ورودی/ خروجی ممکن می سازد و نتایج خوبی را بدون آموزش شبکه بر روی تمام زوج های ورودی/ خروجی می گیرد. یکی از مشکلاتی که در طی آموزش شبکه ی عصبی رخ می دهد برازش اضافی^۲ است یعنی خطای مربوط به سری آموزشی به یک مقدار خیلی کوچک رسانده می شود، اما زمانی که داده های جدید به شبکه ارائه می شوند، خطا بزرگ می شود. شبکه، مثال های آموزشی را به حافظه سپرده است، اما تعمیم به وضعیت های جدید را یاد نگرفته است. یک روش برای بهبود تعمیم شبکه استفاده از شبکه ای است که برای تامین یک برازش کافی به اندازه ی مناسبی است. اگر از یک شبکه ی به اندازه ی کافی کوچک استفاده شود، قدرت کافی برای برازش اضافی داده ها را ندارد یعنی اگر تعداد پارامترها در شبکه خیلی کوچک تر از تعداد نقاط در سری آموزشی باشد یا به عبارت دیگر اگر داده های بیشتری جمع آوری شود و اندازه سری آموزشی افزایش یابد، آن گاه شانس کمی برای برازش اضافی وجود دارد یا شانس وجود ندارد. دو تکنیک دیگر برای بهبود تعمیم وجود دارند که درون جعبه ابزار

^۱ Generalization

^۲ Overfitting

شبکه ی عصبی تعبیه می شوند: تنظیم^۱ و توقف زود هنگام (در ابتدا)^۲. این دو تکنیک برای آن وضعیت هایی به کار می رود که در آن ها بیش تر عرضه ی داده ها به شکل محدود شده است.

۳-۷-۱- توقف در ابتدا (early stopping)

روش قرار دادی برای بهبود تعمیم توقف در ابتدا نامیده می شود. این تکنیک به طور خودکار یا توسط کاربر برای تمام توابع ایجاد شبکه ی با سرپرست مانند newff فراهم می شود. در این تکنیک داده های در دسترس به سه زیر مجموعه تقسیم می شوند. اولین زیر مجموعه سری آموزشی است، که برای محاسبه ی گرادیان و به روز رسانی وزن ها و بایاس های شبکه استفاده می شود. دومین زیرمجموعه سری اعتبار است، خطای مربوط به سری اعتبار در طی فرآیند آموزش نظارت می شود. خطای اعتبار به طور طبیعی در طول فاز اولیه ی آموزش کاهش می یابد، همان گونه که خطای سری آموزشی کاهش می یابد. به هر حال زمانی که شبکه شروع به برازش اضافی داده ها بکند، خطای سری اعتبار به شروع به بالا رفتن می کند. زمانی که خطای اعتبار برای یک تعداد معین از دوره ها افزایش می یابد، آموزش متوقف می شود و وزن ها و بایاس ها در مینیمم خطای اعتبار پس داده می شوند. خطای سری تست در طی آموزش استفاده نمی شود، بلکه برای مقایسه ی مدل های متفاوت استفاده می شود. رسم خطای سری تست در طی فرآیند آموزش مفید است. اگر خطا در سری تست برای شماره ی دوره ی بسیار متفاوت نسبت به خطای سری اعتبار به یک مینیمم برسد، می تواند یک تقسیم بندی ضعیف مجموعه ی داده ها را نمایش دهد. توابع مختلفی برای تقسیم داده ها به سری های آموزش، اعتبار و تست وجود دارند در این پایان نامه تمام مجموعه ی داده ها را از طریق اندیس هایی که خود تعیین می کنیم به صورت گزینشی به سه سری آموزش، اعتبار و تست تقسیم می کنیم.

^۱ Regularization
^۲ Early Stopping

۳-۷-۲- تنظیم^۱

روش دیگر برای پیشرفت تعمیم، تنظیم نامیده می شود که با اصلاح تابع کارایی متداول (mse) از طریق افزایش یک عبارت که شامل میانگین مجموع مربعات وزن ها و بایاس های شبکه است، انجام می گیرد. روش تنظیم خودکار^۲ (بایاسی) برای تعیین پارامترهای تنظیم بهینه به صورت خودکار مطلوب است.

۳-۷-۸- پیش پردازش^۳ و پس پردازش^۴

آموزش شبکه ی عصبی می تواند خیلی کارا تر باشد اگر مراحل پیش پردازش بر روی ورودی ها و هدف ها اعمال شوند [۹۳]. این توابع مقادیر ورودی و هدفی را که ارائه می شوند به مقادیری که برای شبکه مناسب ترند تغییر داده و خروجی های تغییر شکل یافته را دوباره به ویژگی های داده های هدف اولیه برمی گردانند. تعدادی از این توابع به طور خودکار اجرا می شوند و کاربر نیز می تواند بر حسب نیاز آن ها را تغییر داده یا لغو نماید، تعدادی از این توابع در زیر معرفی شده اند.

۳-۷-۸-۱- مینیمم و ماکزیمم

تابع مینیمم و ماکزیمم ورودی ها و هدف ها را طوری مقیاس بندی می کند که در گستره $[-1,1]$ بیفتند. اگر برای درجه بندی هدف ها به کار رود، آن گاه خروجی شبکه برای تولید خروجی هایی در محدوده ی $[-1,1]$ آموزش خواهد دید.

۳-۷-۸-۲- میانگین و انحراف استاندارد

این تابع ورودی ها و هدف ها را طوری نرمالیزه می کند که میانگین صفر و انحراف استاندارد واحد

داشته باشند

^۱ regularization
^۲ Automated Regularization
^۳ Preprocessing
^۴ Postprocessing

۳-۷-۸-۳- آنالیز اجزای اصلی

در بعضی موقعیت ها، بعد بردار ورودی بزرگ است، اما مولفه های بردارها به میزان زیادی وابسته اند (تکراری هستند) در این حالت کاهش بعد بردارهای ورودی مفید است، یک فرآیند موثر برای انجام این کار آنالیز اجزای اصلی است. آنالیز اجزای اصلی به طور قابل اعتماد برگشت پذیر نیست. بنابراین تنها برای پردازش ورودی ها توصیه می شود. خروجی ها نیاز به توابع پردازشی برگشت پذیر دارند.

۳-۷-۸-۴- پردازش ورودی های ناشناخته

اگر شما داده های ورودی با مقادیر ناشناخته دارید، می توانید آن ها را با مقادیر NaN ارائه نمایید و تابع کارآبی استفاده شده با الگوریتم های پس انتشار این مقادیر را به عنوان مقادیر غیر مهم تشخیص می دهد.

۳-۷-۸-۵- حذف ردیف های ثابت

مقادیری از عناصر ورودی را که همیشه مقدار یکسانی دارند حذف می کند زیرا این عناصر ورودی هیچ اطلاعات مفیدی را برای شبکه در بر ندارند.

۳-۷-۸-۶- آنالیز پس پردازش

کارآبی شبکه آموزش داده شده می تواند تا حدی از طریق خطاهای مربوط به سری های آموزش، اعتبار و تست اندازه گیری شود اما بررسی های بیشتر از طریق انجام یک آنالیز رگرسیون میان پاسخ شبکه و هدف های منطبق بر آن است که توسط آن نموداری ایجاد می شود که در آن خروجی های

^۱ Principal Component Analysis

شبکه نسبت به هدف ها رسم می شوند. با ارائه ی خروجی های شبکه و هدف های منطبق سه پارامتر برگشت داده می شود که شامل شیب، عرض از مبدا و ضریب همبستگی است.

فصل چهارم

مدل سازی QSPR فاکتور بازداری ترکیبات

آلی بر روی فازهای ثابت ۳ و ۳ و ۳-تری

فلوئوروپروپیل متیل سایلوکسان

۴-۱- مقدمه

در این تحقیق شاخص بازداري یک سری از مولکول ها که به وسیله روش های کروماتوگرافی گازی جداسازی شده اند، با استفاده از روش رگرسیون خطی چندگانه و شبکه ی عصبی مصنوعی مورد بررسی قرار گرفته است. بخش تجربی این پژوهش شامل مراحل زیر می باشد: انتخاب سری داده ها، محاسبه توصیف کننده ها، رگرسیون خطی چندگانه و مدل سازی به وسیله شبکه ی عصبی مصنوعی.

۴-۲- انتخاب سری داده ها

سری داده ها از نتایج تعیین شاخص های بازداري ۶۳ مولکول با کروماتوگرافی گازی موئینه با فازهای ساکن TFPS^۱، انجام شده توسط یک گروه تحقیقاتی اسپانیایی، به دست آمد [۹۴]. این گروه تحقیقاتی داده های این آزمایش را برای پنج ستون با درصد قطبیت های متفاوت و برای هر ستون در چهار دمای مختلف به دست آوردند، در نتیجه داده ها در بیست شرایط متفاوت در دسترس ما قرار داشت. به دلیل حضور ۶۳ مولکول درستون های با پنج نوع درصد قطبیت و چهار دمای مختلف مجموعاً ۱۲۶۰ شاخص بازداري خواهیم داشت که با کم کردن تعدادی که شاخص های بازداري آن ها گزارش نشده است این تعداد به ۱۲۳۶ خواهد رسید. اعداد XX در نماد TFPSXX، درصد گروه های ۳و۳و۳- تری فلوروپروپیل (TFP) در TFPS یا درصد قطبیت ستون ها را نشان می دهد که با افزایش آن قطبیت ستون ها نیز افزایش می یابد. در این بخش از کار تجربی درصد گروه های TFP که بدون واحد هستند به عنوان نماینده ی قطبیت هر ستون برای مدل سازی استفاده شدند. از آن جا که با افزایش تعداد نمونه ها در آنالیز رگرسیون اعتبار مدل بالاتر می رود و نیز در شبکه ی عصبی مصنوعی افزایش سری آموزش موجب انطباق بهتر بین مقادیر پیش بینی شده و تجربی می شود، روی داده های هر بیست ستون به طور هم زمان مدل سازی صورت گرفت. در جدول ۴-۱ نام و شاخص بازداري این ترکیبات آورده شده است.

^۱ Poly(۳,۳,۳-trifluoropropylmethylsiloxane)

جدول ۴-۱- شاخص های بازداری در الف (۳۵۳K، ب) ۳۷۳k، ج) ۳۹۳k و د) ۴۱۳k در فاز های ثابت تری فلئوروپروپیل مطالعه شده با درصد گروه های تری فلئورو پروپیل (TFP) متفاوت (جاهای خالی مربوط به مقادیر گزارش نشده هستند).

جدول ۴-۱- الف- شاخص های بازداری در ۳۵۳K

شماره	نام نمونه	شاخص های بازداری در پنج ستون				
		TFPS00	TFPS12	TFPS26	TFPS35	TFPS50
۱	Benzene	۶۵۸/۱	۶۷۸/۹	۷۱۳/۶	۷۴۰/۹	۷۹۳/۷
۲	Toluene	۷۶۰/۸	۷۸۳/۵	۸۲۰/۱	۸۴۸/۵	۹۰۳/۰
۳	Ethylbenzene	۸۵۲/۸	۸۷۴/۴	۹۰۹/۷	۹۳۷/۲	۹۸۹/۸
۴	<i>n</i> -Propylbenzene	۹۴۳/۰	۹۶۴/۳	۹۹۹/۳	۱۰۲۶/۶	۱۰۷۹/۰
۵	<i>n</i> -Butylbenzene	۱۰۴۱/۹	۱۰۶۳/۷	۱۰۹۹/۳	۱۱۲۶/۹	۱۱۷۹/۸
۶	Propanone	۴۷۳/۳	۵۵۰/۲	۶۴۱/۶	۷۰۴/۶	۸۰۴/۷
۷	۲-Butanone	۵۷۵/۷	۶۵۰/۲	۷۳۷/۶	۷۹۶/۹	۸۹۲/۷
۸	۲-Pentanone	۶۶۶/۲	۷۴۱/۷	۸۲۹/۴	۸۸۸/۵	۹۸۴/۳
۹	۲-Hexanone	۷۶۷/۸	۸۴۵/۳	۹۳۴/۷	۹۹۵/۰	۱۰۹۲/۷
۱۰	۲-Heptanone	۸۶۸/۵	۹۴۶/۳	۱۰۳۶/۶	۱۰۹۷/۴	۱۱۹۶/۱
۱۱	۲-Octanone	۹۶۸/۸	۱۰۴۷/۳	۱۱۳۸/۳	۱۱۹۹/۶	۱۲۹۹/۴
۱۲	۲-Nonanone	۱۰۶۹/۶				
۱۳	Cyclobutanone	۶۳۸/۶	۷۱۵/۵	۸۰۸/۹	۸۷۳/۲	۹۸۲/۵
۱۴	Cyclopentanone	۷۶۴/۲	۸۴۹/۵	۹۵۲/۹	۱۰۲۴/۲	۱۱۴۲/۹
۱۵	Cyclohexanone	۸۶۶/۸	۹۵۵/۱	۱۰۶۱/۵	۱۱۳۴/۹	۱۲۵۶/۰
۱۶	Cycloheptanone	۹۸۰/۷	۱۰۶۸/۵	۱۱۷۶/۰		
۱۷	Cyclooctanone	۱۰۸۲/۹				
۱۸	<i>n</i> -Propanol	۵۳۷/۳	۵۷۰/۱	۶۱۶/۲	۶۵۱/۲	۷۱۱/۴
۱۹	<i>n</i> -Butanol	۶۴۲/۶	۶۷۶/۳	۷۲۴/۴	۷۶۰/۲	۸۲۰/۰
۲۰	<i>n</i> -Pentanol	۷۴۶/۹	۷۸۱/۱	۸۳۰/۶	۸۶۷/۴	۹۲۸/۳
۲۱	<i>n</i> -Hexanol	۸۴۹/۵	۸۸۴/۰	۹۳۴/۳	۹۷۱/۷	۱۰۳۳/۳
۲۲	<i>n</i> -Heptanol	۹۵۱/۶	۹۸۶/۴	۱۰۳۷/۰	۱۰۷۵/۱	۱۱۳۷/۰
۲۳	<i>n</i> -Octanol	۱۰۵۳/۱	۱۰۸۸/۱	۱۱۳۹/۲	۱۱۷۸/۳	۱۲۳۹/۹
۲۴	<i>n</i> -Nonanol					
۲۵	Cyclohexanol	۸۶۵/۷	۹۰۴/۷	۹۶۲/۷	۱۰۰۶/۲	۱۰۷۸/۶

ادامه ی جدول ۴-۱

شماره	نام نمونه	TFPS00	TFPS12	TFPS26	TFPS35	TFPS50
۲۶	۲-Methyl-۲-pentanol	۷۱۶/۸	۷۵۷/۰	۸۰۶/۲	۸۴۰/۱	۸۹۳/۲
۲۷	Methyl acetate	۵۱۱/۹	۵۶۴/۸	۶۳۲/۳	۶۷۷/۶	۷۵۸/۷
۲۸	Ethyl acetate	۵۹۳/۹	۶۴۷/۸	۷۱۵/۳	۷۶۱/۱	۸۳۷/۸
۲۹	<i>n</i> -Propyl acetate	۶۹۳/۵	۷۴۹/۳	۸۱۸/۱	۸۶۵/۱	۹۴۲/۸
۳۰	<i>n</i> -Butyl acetate	۷۹۳/۸	۸۵۰/۵	۹۲۰/۰	۹۶۷/۵	۱۰۴۶/۲
۳۱	<i>n</i> -Propylamine	۵۲۶/۴	۵۵۳/۷	۶۰۳/۲	۶۳۹/۰	۶۸۲/۳
۳۲	<i>n</i> -Butylamine	۶۲۶/۶	۶۵۷/۳	۷۰۸/۶	۷۴۵/۸	۷۸۴/۶
۳۳	<i>n</i> -Pentylamine	۷۲۹/۴	۷۶۰/۵	۸۱۳/۲	۸۵۱/۳	۸۹۰/۳
۳۴	<i>n</i> -Hexylamine	۸۳۰/۲	۸۶۲/۵	۹۱۵/۳	۹۵۳/۷	۹۹۴/۵
۳۵	<i>n</i> -Heptylamine	۹۳۱/۸	۹۶۳/۹	۱۰۱۷/۳	۱۰۵۶/۰	۱۰۹۶/۷
۳۶	Cyclohexylamine	۸۴۷/۸	۸۸۳/۰	۹۴۱/۹	۹۸۶/۴	۱۰۳۶/۰
۳۷	Aniline	۹۴۷/۳	۹۹۵/۷	۱۰۷۵/۰	۱۱۳۶/۴	۱۲۵۱/۸
۳۸	<i>n</i> -Butanenitrile	۶۳۸/۵	۷۳۸/۲	۸۴۹/۹	۹۲۳/۵	۱۰۴۴/۷
۳۹	<i>n</i> -Pentanenitrile	۷۴۰/۷	۸۴۳/۲	۹۵۷/۲	۱۰۳۲/۰	۱۱۵۴/۹
۴۰	<i>n</i> -Hexanenitrile	۸۴۲/۸	۹۴۶/۷	۱۰۶۲/۱	۱۱۳۷/۷	۱۲۶۱/۹
۴۱	Benzonitrile	۹۴۷/۶	۱۰۴۰/۹	۱۱۵۴/۱		
۴۲	۱-Nitropropane	۷۰۶/۵	۸۰۲/۷	۹۱۲/۷	۹۸۶/۰	۱۱۱۰/۲
۴۳	Nitrobenzene	۱۰۴۷/۱				
۴۴	<i>n</i> -Butyl iodide	۸۰۶/۹	۸۳۳/۳	۸۶۹/۰	۸۹۵/۱	۹۴۲/۰
۴۵	<i>n</i> -Propyl chloride	۵۳۹/۸	۵۶۹/۴	۶۰۷/۵	۶۳۲/۷	۶۷۷/۷
۴۶	<i>n</i> -Butyl chloride	۶۴۱/۳	۶۷۲/۸	۷۱۱/۷	۷۳۸/۲	۷۸۴/۸
۴۷	<i>n</i> -Pentyl chloride	۷۴۳/۵	۷۷۶/۰	۸۱۵/۹	۸۴۳/۳	۸۹۰/۹
۴۸	<i>n</i> -Hexyl chloride	۸۴۴/۸	۸۷۷/۷	۹۱۸/۳	۹۴۶/۰	۹۹۴/۶
۴۹	Chlorobenzene	۸۳۵/۲	۸۶۵/۱	۹۱۰/۶	۹۴۵/۲	۱۰۰۹/۸
۵۰	۱,۴-Dioxane	۶۸۹/۹	۷۳۸/۰	۸۰۶/۲	۸۵۵/۶	۹۳۹/۹
۵۱	Tetrahydrofuran	۶۱۹/۶	۶۵۹/۲	۷۱۳/۴	۷۵۲/۴	۸۱۵/۸
۵۲	Pyridine	۷۲۶/۰	۷۸۱/۹	۸۶۰/۹	۹۱۶/۸	۹۹۹/۴
۵۳	<i>N,N</i> -Dimethylformamide	۷۴۴/۹	۸۷۲/۱	۱۰۲۲/۳	۱۱۲۳/۲	۱۲۷۱/۸
۵۴	۲-Octyne	۸۶۵/۴	۸۶۹/۲	۸۷۹/۳	۸۸۶/۹	۹۰۰/۴
۵۵	<i>n</i> -Hexane	۶۰۰/۰	۶۰۰/۱	۶۰۰/۱	۶۰۰/۰	۶۰۰/۱
۵۶	<i>n</i> -Heptane	۷۰۰/۰	۷۰۰/۰	۶۹۹/۹	۶۹۹/۹	۷۰۰/۰

ادامه ی جدول ۴-۱

شماره	نام نمونه	TFPS00	TFPS12	TFPS26	TFPS35	TFPS50
۵۷	<i>n</i> -Octane	۸۰۰/۰	۸۰۰/۰	۷۹۹/۹	۸۰۰/۰	۸۰۰/۰
۵۸	<i>n</i> -Nonane	۹۰۰/۰	۹۰۰/۰	۹۰۰/۰	۹۰۰/۰	۹۰۰/۰
۵۹	<i>n</i> -Decane	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰
۶۰	<i>n</i> -Undecane	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰
۶۱	<i>n</i> -Dodecane			۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰
۶۲	Cyclohexane	۶۶۸/۵	۶۷۰/۴	۶۷۷/۲	۶۸۳/۸	۶۹۷/۹
۶۳	<i>cis</i> -Hydrindane	۹۸۴/۷	۹۸۸/۸	۱۰۰۳/۲	۱۰۱۶/۲	۱۰۴۳/۴

جدول ۴-۱-ب - شاخص های بازداری در ۳۷۳K

شماره	نام نمونه	TFPS00	TFPS12	TFPS26	TFPS35	TFPS50
۱	Benzene	۶۶۲/۳	۶۸۳/۱	۷۱۷/۸	۷۴۵/۹	۸۰۰/۱
۲	Toluene	۷۶۵/۶	۷۸۸/۰	۸۲۴/۸	۸۵۳/۸	۹۰۹/۴
۳	Ethylbenzene	۸۵۸/۱	۸۷۹/۵	۹۱۵/۰	۹۴۲/۹	۹۹۶/۷
۴	<i>n</i> -Propylbenzene	۹۴۸/۶	۹۶۹/۹	۱۰۰۵/۱	۱۰۳۲/۹	۱۰۸۶/۴
۵	<i>n</i> -Butylbenzene	۱۰۴۷/۶	۱۰۶۹/۴	۱۱۰۵/۳	۱۱۳۳/۴	۱۱۸۷/۴
۶	Propanone	۴۷۱/۲	۵۵۱/۴	۶۴۴/۰	۷۰۷/۳	۸۱۴/۴
۷	۲-Butanone	۵۷۵/۲	۶۵۰/۷	۷۴۰/۰	۸۰۰/۴	۹۰۱/۵
۸	۲-Pentanone	۶۶۶/۶	۷۴۲/۷	۸۳۲/۴	۸۹۲/۷	۹۹۳/۶
۹	۲-Hexanone	۷۶۸/۶	۸۴۶/۴	۹۳۷/۸	۹۹۹/۸	۱۱۰۲/۶
۱۰	۲-Heptanone	۸۶۹/۳	۹۴۷/۷	۱۰۴۰/۰	۱۱۰۲/۶	۱۲۰۶/۳
۱۱	۲-Octanone	۹۶۹/۸	۱۰۴۸/۸	۱۱۴۱/۹	۱۲۰۵/۳	۱۳۱۰/۰
۱۲	۲-Nonanone	۱۰۷۰/۷	۱۱۵۰/۰	۱۲۴۳/۹	۱۳۰۷/۷	۱۴۱۳/۱
۱۳	Cyclobutanone	۶۴۱/۱	۷۱۹/۱	۸۱۴/۸	۸۸۱/۸	۹۹۶/۲
۱۴	Cyclopentanone	۷۶۸/۹	۸۵۵/۱	۹۶۱/۳	۱۰۳۵/۶	۱۱۶۰/۷
۱۵	Cyclohexanone	۸۷۳/۹	۹۶۳/۳	۱۰۷۲/۹	۱۱۴۹/۴	۱۲۷۷/۹
۱۶	Cycloheptanone	۹۸۹/۲	۱۰۷۸/۳	۱۱۸۹/۰	۱۲۶۶/۹	۱۳۹۸/۳
۱۷	Cyclooctanone	۱۰۹۳/۰	۱۱۷۶/۳	۱۲۸۳/۱	۱۳۵۹/۴	۱۴۸۹/۴
۱۸	<i>n</i> -Propanol	۵۳۶/۰	۵۶۸/۲	۶۱۵/۵	۶۵۳/۳	۷۱۲/۹
۱۹	<i>n</i> -Butanol	۶۴۱/۱	۶۷۵/۰	۷۲۴/۲	۷۶۱/۷	۸۲۳/۳
۲۰	<i>n</i> -Pentanol	۷۴۵/۲	۷۸۰/۳	۸۳۱/۰	۸۶۹/۲	۹۳۲/۵
۲۱	<i>n</i> -Hexanol	۸۴۸/۱	۸۸۳/۵	۹۳۵/۱	۹۷۳/۹	۱۰۳۸/۱

ادامه ی جدول ۴-۱

شماره	نام نمونه	TFPS00	TFPS12	TFPS26	TFPS35	TFPS50
۲۲	<i>n</i> -Heptanol	۹۵۰/۲	۹۸۶/۰	۱۰۳۸/۱	۱۰۷۷/۶	۱۱۴۲/۳
۲۳	<i>n</i> -Octanol	۱۰۵۱/۹	۱۰۸۷/۹	۱۱۴۰/۵	۱۱۸۰/۸	۱۲۴۵/۵
۲۴	<i>n</i> -Nonanol	۱۱۵۳/۱	۱۱۸۹/۴	۱۲۴۲/۳	۱۲۸۳/۶	۱۳۴۸/۱
۲۵	Cyclohexanol	۸۶۹/۹	۹۰۹/۹	۹۶۹/۵	۱۰۱۴/۶	۱۰۹۰/۷
۲۶	۲-Methyl-۲-pentanol	۷۱۷/۲	۷۵۷/۱	۸۰۶/۹	۸۴۰/۸	۸۹۶/۰
۲۷	Methyl acetate	۵۱۰/۲	۵۶۱/۷	۶۳۰/۶	۶۷۸/۶	۷۶۲/۴
۲۸	Ethyl acetate	۵۹۱/۱	۶۴۴/۶	۷۱۳/۵	۷۶۰/۱	۸۴۰/۲
۲۹	<i>n</i> -Propyl acetate	۶۹۱/۲	۷۴۶/۸	۸۱۶/۸	۸۶۴/۷	۹۴۵/۵
۳۰	<i>n</i> -Butyl acetate	۷۹۱/۷	۸۴۸/۴	۹۱۹/۱	۹۶۷/۶	۱۰۴۹/۴
۳۱	<i>n</i> -Propylamine	۵۲۶/۶	۵۵۳/۵	۶۰۳/۳	۶۳۳/۴	۶۸۷/۰
۳۲	<i>n</i> -Butylamine	۶۲۸/۱	۶۵۶/۹	۷۰۶/۴	۷۳۹/۲	۷۸۷/۵
۳۳	<i>n</i> -Pentylamine	۷۳۰/۶	۷۵۹/۷	۸۰۸/۸	۸۴۴/۴	۸۹۰/۳
۳۴	<i>n</i> -Hexylamine	۸۳۱/۴	۸۶۱/۹	۹۱۰/۴	۹۴۷/۰	۹۹۳/۶
۳۵	<i>n</i> -Heptylamine	۹۳۲/۸	۹۶۳/۲	۱۰۱۲/۲	۱۰۴۹/۳	۱۰۹۵/۵
۳۶	Cyclohexylamine	۸۵۵/۲	۸۸۷/۸	۹۴۴/۴	۹۸۵/۵	۱۰۴۲/۱
۳۷	Aniline	۹۵۲/۱	۱۰۰۱/۸	۱۰۸۲/۹	۱۱۴۶/۰	۱۲۶۵/۰
۳۸	<i>n</i> -Butanenitrile	۶۳۹/۸	۷۴۱/۰	۸۵۶/۳	۹۳۳/۱	۱۰۶۰/۳
۳۹	<i>n</i> -Pentanenitrile	۷۴۲/۶	۸۴۶/۶	۹۶۴/۴	۱۰۴۲/۵	۱۱۷۱/۸
۴۰	<i>n</i> -Hexanenitrile	۸۴۴/۸	۹۵۰/۴	۱۰۶۹/۷	۱۱۴۸/۹	۱۲۷۹/۶
۴۱	Benzonitrile	۹۵۴/۴	۱۰۵۰/۱	۱۱۶۷/۷	۱۲۴۹/۱	۱۳۸۸/۷
۴۲	۱-Nitropropane	۷۰۸/۶	۸۰۶/۶	۹۱۹/۹	۹۹۶/۳	۱۱۲۶/۲
۴۳	Nitrobenzene	۱۰۵۶/۲	۱۱۴۹/۵	۱۲۶۶/۰	۱۳۴۷/۵	۱۴۸۹/۱
۴۴	<i>n</i> -Butyl iodide	۸۱۳/۲	۸۴۰/۱	۸۷۶/۷	۹۰۴/۳	۹۵۳/۵
۴۵	<i>n</i> -Propyl chloride	۵۴۱/۵	۵۷۱/۹	۶۱۰/۱	۶۳۶/۴	۶۸۲/۸
۴۶	<i>n</i> -Butyl chloride	۶۴۳/۶	۶۷۵/۶	۷۱۵/۴	۷۴۲/۸	۷۹۱/۲
۴۷	<i>n</i> -Pentyl chloride	۷۴۵/۹	۷۷۹/۰	۸۱۹/۹	۸۴۸/۲	۸۹۸/۰
۴۸	<i>n</i> -Hexyl chloride	۸۴۷/۴	۸۸۰/۹	۹۲۲/۶	۹۵۱/۵	۱۰۰۲/۰
۴۹	Chlorobenzene	۸۴۱/۹	۸۷۲/۶	۹۱۹/۳	۹۵۵/۲	۱۰۲۲/۴
۵۰	۱,۴-Dioxane	۶۹۲/۷	۷۴۰/۳	۸۰۸/۷	۸۵۸/۶	۹۴۶/۰
۵۱	Tetrahydrofuran	۶۲۲/۵	۶۶۱/۸	۷۱۶/۲	۷۵۶/۰	۸۲۲/۱
۵۲	Pyridine	۷۳۱/۸	۷۸۶/۷	۸۶۵/۶	۹۲۱/۸	۱۰۱۱/۰

ادامه ی جدول ۴-۱

شماره	نام نمونه	TFPS00	TFPS12	TFPS26	TFPS35	TFPS50
۵۳	<i>N,N</i> -Dimethylformamide	۷۴۷/۰	۸۷۵/۳	۱۰۲۸/۰	۱۱۳۲/۴	۱۲۹۲/۰
۵۴	۲-Octyne	۸۶۴/۱	۸۶۷/۴	۸۷۶/۷	۸۸۳/۹	۸۹۷/۹
۵۵	<i>n</i> -Hexane	۵۹۹/۹	۶۰۰/۰	۶۰۰/۱	۶۰۰/۲	۵۹۹/۵
۵۶	<i>n</i> -Heptane	۷۰۰/۱	۷۰۰/۰	۷۰۰/۱	۷۰۰/۰	۷۰۰/۰
۵۷	<i>n</i> -Octane	۸۰۰/۰	۸۰۰/۰	۸۰۰/۰	۷۹۹/۹	۸۰۰/۱
۵۸	<i>n</i> -Nonane	۹۰۰/۰	۹۰۰/۰	۹۰۰/۱	۸۹۹/۹	۹۰۰/۱
۵۹	<i>n</i> -Decane	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰
۶۰	<i>n</i> -Undecane	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰
۶۱	<i>n</i> -Dodecane	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰
۶۲	Cyclohexane	۶۷۳/۴	۶۷۵/۷	۶۸۳/۲	۶۹۰/۵	۷۰۵/۸
۶۳	<i>cis</i> -Hydrindane	۹۹۴/۵	۹۹۹/۳	۱۰۱۴/۴	۱۰۲۸/۵	۱۰۵۸/۲

جدول ۴-۱-ج - شاخص های بازداري در ۳۹۳K

شماره	نام نمونه	TFPS00	TFPS12	TFPS26	TFPS35	TFPS50
۱	Benzene	۶۶۸/۴	۶۸۸/۰	۷۲۳/۸	۷۵۳/۳	۸۰۷/۱
۲	Toluene	۷۷۱/۱	۷۹۳/۴	۸۳۰/۴	۸۶۰/۶	۹۱۶/۲
۳	Ethylbenzene	۸۶۳/۹	۸۸۵/۱	۹۲۰/۸	۹۴۹/۹	۱۰۰۳/۸
۴	<i>n</i> -Propylbenzene	۹۵۴/۶	۹۷۵/۸	۱۰۱۱/۳	۱۰۴۰/۰	۱۰۹۴/۰
۵	<i>n</i> -Butylbenzene	۱۰۵۳/۶	۱۰۷۵/۴	۱۱۱۱/۷	۱۱۴۰/۵	۱۱۹۵/۲
۶	Propanone	۴۷۹/۹	۵۵۱/۳	۶۴۵/۷	۷۱۳/۶	۸۲۲/۱
۷	۲-Butanone	۵۸۰/۵	۶۵۱/۹	۷۴۲/۴	۸۰۶/۱	۹۱۰/۰
۸	۲-Pentanone	۶۷۰/۰	۷۴۴/۰	۸۳۵/۱	۸۹۸/۲	۱۰۰۲/۸
۹	۲-Hexanone	۷۷۱/۱	۸۴۸/۱	۹۴۱/۱	۱۰۰۵/۵	۱۱۱۲/۷
۱۰	۲-Heptanone	۸۷۱/۳	۹۴۹/۴	۱۰۴۳/۵	۱۱۰۸/۵	۱۲۱۶/۹
۱۱	۲-Octanone	۹۷۱/۷	۱۰۵۰/۷	۱۱۴۵/۸	۱۲۱۱/۳	۱۳۲۱/۳
۱۲	۲-Nonanone	۱۰۷۲/۴	۱۱۵۲/۱	۱۲۴۷/۹	۱۳۱۳/۸	۱۴۲۴/۶
۱۳	Cyclobutanone	۶۴۴/۸	۷۲۲/۸	۸۲۱/۸	۸۹۰/۶	۱۰۱۱/۱
۱۴	Cyclopentanone	۷۷۴/۶	۸۶۱/۳	۹۷۰/۸	۱۰۴۷/۶	۱۱۷۹/۸
۱۵	Cyclohexanone	۸۸۲/۰	۹۷۲/۱	۱۰۸۵/۵	۱۱۶۴/۹	۱۳۰۱/۵
۱۶	Cycloheptanone	۹۹۸/۷	۱۰۸۸/۷	۱۲۰۳/۱	۱۲۸۴/۰	۱۴۲۳/۴

ادامه ی جدول ۴-۱

شماره	نام نمونه	TFPS00	TFPS12	TFPS26	TFPS35	TFPS50
۱۷	Cyclooctanone	۱۱۰۳/۹	۱۱۸۸/۲	۱۲۹۸/۷	۱۳۷۷/۷	۱۵۱۶/۱
۱۸	<i>n</i> -Propanol	۵۳۳/۳	۵۶۷/۱	۶۱۵/۰	۶۵۳/۳	۷۱۸/۰
۱۹	<i>n</i> -Butanol	۶۳۹/۴	۶۷۴/۸	۷۲۴/۷	۷۶۳/۹	۸۲۸/۱
۲۰	<i>n</i> -Pentanol	۷۴۴/۱	۷۸۰/۴	۸۳۲/۰	۸۷۱/۹	۹۳۷/۹
۲۱	<i>n</i> -Hexanol	۸۴۷/۲	۸۸۳/۹	۹۳۶/۵	۹۷۶/۶	۱۰۴۳/۸
۲۲	<i>n</i> -Heptanol	۹۴۹/۴	۹۸۶/۵	۱۰۳۹/۹	۱۰۸۰/۷	۱۱۴۸/۲
۲۳	<i>n</i> -Octanol	۱۰۵۱/۳	۱۰۸۸/۵	۱۱۴۲/۵	۱۱۸۴/۱	۱۲۵۱/۶
۲۴	<i>n</i> -Nonanol	۱۱۵۲/۶	۱۱۹۰/۱	۱۲۴۴/۵	۱۲۸۷/۴	۱۳۵۴/۴
۲۵	Cyclohexanol	۸۷۵/۱	۹۱۵/۹	۹۷۷/۱	۱۰۲۳/۶	۱۱۰۴/۲
۲۶	۲-Methyl-۲-pentanol	۷۱۸/۳	۷۵۸/۰	۸۰۸/۳	۸۴۲/۷	۹۰۰/۸
۲۷	Methyl acetate	۵۱۰/۸	۵۵۹/۰	۶۳۲/۱	۶۷۹/۹	۷۶۳/۳
۲۸	Ethyl acetate	۵۸۹/۶	۶۴۱/۸	۷۱۱/۹	۷۶۰/۳	۸۴۱/۷
۲۹	<i>n</i> -Propyl acetate	۶۸۹/۷	۷۴۴/۶	۸۱۵/۷	۸۶۴/۹	۹۴۸/۶
۳۰	<i>n</i> -Butyl acetate	۷۹۰/۴	۸۴۶/۷	۹۱۸/۳	۹۶۸/۱	۱۰۵۳/۲
۳۱	<i>n</i> -Propylamine	۵۲۸/۴	۵۵۰/۴	۵۹۵/۵	۶۲۷/۹	۶۹۰/۲
۳۲	<i>n</i> -Butylamine	۶۲۷/۹	۶۵۵/۷	۷۰۰/۱	۷۳۳/۵	۷۸۵/۹
۳۳	<i>n</i> -Pentylamine	۷۳۱/۰	۷۵۹/۰	۸۰۵/۳	۸۴۰/۰	۸۹۰/۱
۳۴	<i>n</i> -Hexylamine	۸۳۲/۴	۸۶۱/۳	۹۰۸/۰	۹۴۳/۰	۹۹۲/۶
۳۵	<i>n</i> -Heptylamine	۹۳۴/۱	۹۶۳/۱	۱۰۰۹/۸	۱۰۴۵/۹	۱۰۹۴/۹
۳۶	Cyclohexylamine	۸۶۲/۴	۸۹۳/۵	۹۴۸/۰	۹۸۹/۴	۱۰۴۹/۷
۳۷	Aniline	۹۵۷/۹	۱۰۰۸/۴	۱۰۹۱/۲	۱۱۵۶/۰	۱۲۷۸/۵
۳۸	<i>n</i> -Butanenitrile	۶۴۰/۶	۷۴۴/۰	۸۶۳/۲	۹۴۳/۴	۱۰۷۶/۸
۳۹	<i>n</i> -Pentanenitrile	۷۴۴/۲	۸۵۰/۵	۹۷۲/۳	۱۰۵۳/۸	۱۱۸۹/۷
۴۰	<i>n</i> -Hexanenitrile	۸۴۷/۰	۹۵۴/۶	۱۰۷۸/۱	۱۱۶۰/۵	۱۲۹۸/۲
۴۱	Benzonitrile	۹۶۱/۵	۱۰۶۰/۰	۱۱۸۲/۲	۱۲۶۷/۴	۱۴۱۴/۴
۴۲	۱-Nitropropane	۷۱۰/۸	۸۱۱/۰	۹۲۸/۰	۱۰۰۷/۱	۱۱۴۳/۱
۴۳	Nitrobenzene	۱۰۶۵/۹	۱۱۶۱/۹	۱۲۸۳/۴	۱۳۶۸/۷	۱۵۱۸/۳
۴۴	<i>n</i> -Butyl iodide	۸۱۹/۶	۸۴۷/۳	۸۸۵/۵	۹۱۴/۶	۹۶۵/۶
۴۵	<i>n</i> -Propyl chloride	۵۴۲/۰	۵۷۲/۶	۶۱۴/۷	۶۴۰/۸	۶۸۸/۲
۴۶	<i>n</i> -Butyl chloride	۶۴۵/۶	۶۷۷/۷	۷۱۹/۷	۷۴۷/۸	۷۹۷/۹
۴۷	<i>n</i> -Pentyl chloride	۷۴۸/۳	۷۸۱/۶	۸۲۴/۷	۸۵۳/۶	۹۰۵/۷

ادامه ی جدول ۴-۱

شماره	نام نمونه	TFPS00	TFPS12	TFPS26	TFPS35	TFPS50
۴۸	<i>n</i> -Hexyl chloride	۸۵۰/۰	۸۸۴/۲	۹۲۷/۵	۹۵۷/۴	۱۰۱۰/۱
۴۹	Chlorobenzene	۸۴۸/۹	۸۸۰/۳	۹۲۸/۷	۹۶۶/۳	۱۰۳۵/۰
۵۰	۱,۴-Dioxane	۶۹۶/۰	۷۴۳/۴	۸۱۲/۱	۸۶۳/۵	۹۵۳/۰
۵۱	Tetrahydrofuran	۶۲۵/۹	۶۶۵/۲	۷۱۹/۶	۷۶۱/۹	۸۲۹/۹
۵۲	Pyridine	۷۳۵/۹	۷۹۱/۹	۸۷۰/۹	۹۲۸/۶	۱۰۲۳/۸
۵۳	<i>N,N</i> -Dimethylformamide	۷۵۰/۳	۸۷۹/۸	۱۰۳۵/۵	۱۱۴۲/۹	۱۳۱۴/۴
۵۴	۲-Octyne	۸۶۲/۸	۸۶۵/۷	۸۷۴/۴	۸۸۱/۹	۸۹۴/۹
۵۵	<i>n</i> -Hexane	۶۰۰/۰	۶۰۰/۲	۶۰۰/۰	۵۹۹/۹	۵۹۹/۲
۵۶	<i>n</i> -Heptane	۷۰۰/۱	۷۰۰/۰	۷۰۰/۱	۷۰۰/۰	۶۹۹/۹
۵۷	<i>n</i> -Octane	۸۰۰/۰	۸۰۰/۰	۸۰۰/۰	۸۰۰/۱	۸۰۰/۳
۵۸	<i>n</i> -Nonane	۹۰۰/۰	۹۰۰/۰	۹۰۰/۰	۹۰۰/۱	۹۰۰/۲
۵۹	<i>n</i> -Decane	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۱
۶۰	<i>n</i> -Undecane	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰
۶۱	<i>n</i> -Dodecane	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰
۶۲	Cyclohexane	۶۷۹/۵	۶۸۱/۱	۶۸۸/۵	۶۹۷/۲	۷۱۳/۰
۶۳	<i>cis</i> -Hydrindane	۱۰۰۴/۷	۱۰۱۰/۰	۱۰۲۶/۴	۱۰۴۱/۹	۱۰۷۳/۳

جدول ۴-۱-۵ - شاخص های بازداری در ۴۱۳K

شماره	نام نمونه	TFPS00	TFPS12	TFPS26	TFPS35	TFPS50
۱	Benzene	۶۷۲/۱	۶۹۳/۳	۷۲۸/۳	۷۵۸/۲	۸۱۴/۰
۲	Toluene	۷۷۵/۷	۷۹۸/۴	۸۳۵/۳	۸۶۶/۴	۹۲۳/۵
۳	Ethylbenzene	۸۶۹/۱	۸۹۰/۶	۹۲۶/۴	۹۵۶/۲	۱۰۱۱/۸
۴	<i>n</i> -Propylbenzene	۹۶۰/۴	۹۸۱/۹	۱۰۱۷/۶	۱۰۴۶/۸	۱۱۰۲/۱
۵	<i>n</i> -Butylbenzene	۱۰۵۹/۵	۱۰۸۱/۵	۱۱۱۸/۱	۱۱۴۷/۶	۱۲۰۳/۶
۶	Propanone	۴۷۲/۰	۵۵۰/۲	۶۴۶/۳	۷۱۴/۶	۸۳۰/۷
۷	۲-Butanone	۵۷۶/۸	۶۵۲/۱	۷۴۳/۸	۸۰۹/۳	۹۱۹/۰
۸	۲-Pentanone	۶۶۸/۹	۷۴۴/۸	۸۳۷/۸	۹۰۲/۷	۱۰۱۲/۷
۹	۲-Hexanone	۷۷۱/۰	۸۴۹/۳	۹۴۴/۳	۱۰۱۰/۸	۱۱۲۳/۲
۱۰	۲-Heptanone	۸۷۱/۸	۹۵۱/۳	۱۰۴۷/۱	۱۱۱۴/۱	۱۲۲۸/۰
۱۱	۲-Octanone	۹۷۲/۶	۱۰۵۲/۷	۱۱۴۹/۹	۱۲۱۷/۵	۱۳۳۲/۷
۱۲	۲-Nonanone	۱۰۷۳/۶	۱۱۵۴/۴	۱۲۵۲/۳	۱۳۲۰/۲	۱۴۳۶/۵

ادامه ی جدول ۴-۱

شماره	نام نمونه	TFPS00	TFPS12	TFPS26	TFPS35	TFPS50
۱۳	Cyclobutanone	۶۴۷/۰	۷۲۷/۲	۸۲۸/۱	۹۰۱/۰	۱۰۲۷/۰
۱۴	Cyclopentanone	۷۷۹/۰	۸۶۷/۷	۹۸۰/۱	۱۰۶۰/۷	۱۱۹۹/۷
۱۵	Cyclohexanone	۸۸۹/۶	۹۸۱/۰	۱۰۹۸/۲	۱۱۸۱/۴	۱۳۲۰/۳
۱۶	Cycloheptanone	۱۰۰۸/۰	۱۰۹۹/۰	۱۲۱۷/۰	۱۳۰۱/۹	۱۴۴۹/۷
۱۷	Cyclooctanone	۱۱۱۵/۰	۱۲۰۰/۹	۱۳۱۴/۷	۱۳۹۷/۰	۱۵۴۴/۰
۱۸	<i>n</i> -Propanol	۵۳۰/۴	۵۶۶/۱	۶۱۵/۶	۶۵۳/۱	۷۱۹/۰
۱۹	<i>n</i> -Butanol	۶۳۸/۱	۶۷۴/۲	۷۲۵/۶	۷۶۵/۲	۸۳۲/۰
۲۰	<i>n</i> -Pentanol	۷۴۳/۰	۷۸۰/۰	۸۳۳/۰	۸۷۴/۹	۹۴۲/۹
۲۱	<i>n</i> -Hexanol	۸۴۶/۶	۸۸۴/۴	۹۳۸/۳	۹۸۰/۴	۱۰۴۹/۰
۲۲	<i>n</i> -Heptanol	۹۴۹/۲	۹۸۷/۶	۱۰۴۱/۸	۱۰۸۴/۴	۱۱۵۴/۳
۲۳	<i>n</i> -Octanol	۱۰۰۱/۲	۱۰۸۹/۸	۱۱۴۴/۹	۱۱۸۸/۰	۱۲۵۸/۱
۲۴	<i>n</i> -Nonanol	۱۱۰۲/۷	۱۱۹۱/۰	۱۲۴۷/۲	۱۲۹۱/۶	۱۳۶۱/۲
۲۵	Cyclohexanol	۸۸۰/۶	۹۲۳/۰	۹۸۵/۳	۱۰۳۴/۲	۱۱۱۸/۹
۲۶	۲-Methyl-۲-pentanol	۷۱۸/۱	۷۵۹/۰	۸۰۹/۰	۸۴۵/۲	۹۰۵/۲
۲۷	Methyl acetate	۵۰۷/۳	۵۵۸/۴	۶۲۶/۴	۶۷۶/۷	۷۶۶/۰
۲۸	Ethyl acetate	۵۸۶/۸	۶۴۰/۱	۷۰۹/۴	۷۵۸/۳	۸۴۲/۹
۲۹	<i>n</i> -Propyl acetate	۶۸۸/۱	۷۴۳/۰	۸۱۴/۱	۸۶۴/۰	۹۵۰/۷
۳۰	<i>n</i> -Butyl acetate	۷۸۸/۴	۸۴۵/۳	۹۱۷/۰	۹۶۸/۸	۱۰۵۶/۴
۳۱	<i>n</i> -Propylamine	۵۲۳/۸	۵۵۱/۳	۵۹۰/۹	۶۲۵/۴	۶۸۷/۰
۳۲	<i>n</i> -Butylamine	۶۲۸/۳	۶۵۵/۰	۶۹۷/۸	۷۳۱/۸	۷۸۶/۰
۳۳	<i>n</i> -Pentylamine	۷۳۰/۴	۷۵۹/۳	۸۰۲/۶	۸۳۸/۰	۸۹۲/۳
۳۴	<i>n</i> -Hexylamine	۸۳۳/۲	۸۶۱/۰	۹۰۶/۶	۹۴۱/۷	۹۹۴/۹
۳۵	<i>n</i> -Heptylamine	۹۳۴/۸	۹۶۳/۶	۱۰۰۹/۶	۱۰۴۴/۶	۱۰۹۷/۲
۳۶	Cyclohexylamine	۸۷۰/۲	۹۰۰/۲	۹۵۳/۱	۹۹۵/۰	۱۰۶۱/۷
۳۷	Aniline	۹۶۴/۳	۱۰۱۵/۷	۱۱۰۰/۰	۱۱۶۶/۷	۱۲۹۲/۶
۳۸	<i>n</i> -Butanenitrile	۶۴۳/۱	۷۴۷/۳	۸۷۰/۴	۹۵۲/۰	۱۰۹۴/۱
۳۹	<i>n</i> -Pentanenitrile	۷۴۷/۲	۸۵۴/۰	۹۸۰/۰	۱۰۶۴/۰	۱۲۰۸/۳
۴۰	<i>n</i> -Hexanenitrile	۸۴۹/۹	۹۵۹/۲	۱۰۸۶/۷	۱۱۷۱/۹	۱۳۱۷/۷
۴۱	Benzonitrile	۹۶۹/۰	۱۰۷۰/۴	۱۱۹۷/۴	۱۲۸۵/۸	۱۴۴۱/۳
۴۲	۱-Nitropropane	۷۱۴/۷	۸۱۵/۳	۹۳۶/۱	۱۰۱۸/۰	۱۱۶۰/۶
۴۳	Nitrobenzene	۱۰۷۶/۲	۱۱۷۴/۸	۱۳۰۱/۳	۱۳۹۰/۲	۱۵۴۸/۸

شماره	نام نمونه	TFPS00	TFPS12	TFPS26	TFPS35	TFPS50
۴۴	<i>n</i> -Butyl iodide	۸۲۵/۹	۸۵۴/۸	۸۹۳/۵	۹۲۴/۳	۹۷۸/۸
۴۵	<i>n</i> -Propyl chloride	۵۴۴/۵	۵۷۵/۷	۶۱۴/۴	۶۴۵/۳	۶۹۳/۲
۴۶	<i>n</i> -Butyl chloride	۶۴۷/۷	۶۸۰/۷	۷۲۱/۹	۷۵۳/۰	۸۰۴/۷
۴۷	<i>n</i> -Pentyl chloride	۷۵۱/۴	۷۸۵/۶	۸۲۷/۸	۸۵۹/۱	۹۱۲/۹
۴۸	<i>n</i> -Hexyl chloride	۸۵۳/۱	۸۸۷/۹	۹۳۱/۷	۹۶۳/۱	۱۰۱۸/۲
۴۹	Chlorobenzene	۸۵۶/۳	۸۸۸/۱	۹۳۷/۸	۹۷۶/۹	۱۰۴۹/۱
۵۰	۱,۴-Dioxane	۶۹۹/۱	۷۴۵/۶	۸۱۵/۴	۸۶۷/۵	۹۵۸/۷
۵۱	Tetrahydrofuran	۶۲۸/۶	۶۶۷/۵	۷۲۳/۸	۷۶۶/۰	۸۳۹/۰
۵۲	Pyridine	۷۴۱/۷	۷۹۷/۶	۸۷۷/۶	۹۳۶/۵	۱۰۳۶/۲
۵۳	<i>N,N</i> -Dimethylformamide	۷۵۳/۳	۸۸۳/۴	۱۰۴۳/۴	۱۱۵۴/۹	۱۳۳۵/۸
۵۴	۲-Octyne	۸۶۱/۴	۸۶۳/۸	۸۷۱/۵	۸۷۹/۱	۸۹۱/۶
۵۵	<i>n</i> -Hexane	۵۹۹/۹	۵۹۹/۷	۶۰۰/۲	۵۹۹/۹	
۵۶	<i>n</i> -Heptane	۷۰۰/۲	۷۰۰/۰	۶۹۹/۶	۶۹۹/۹	۶۹۹/۱
۵۷	<i>n</i> -Octane	۸۰۰/۰	۷۹۹/۹	۸۰۰/۲	۸۰۰/۱	۷۹۹/۸
۵۸	<i>n</i> -Nonane	۸۹۹/۹	۹۰۰/۰	۹۰۰/۰	۸۹۹/۹	۹۰۰/۴
۵۹	<i>n</i> -Decane	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۰	۱۰۰۰/۱	۱۰۰۰/۲
۶۰	<i>n</i> -Undecane	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۰	۱۱۰۰/۱
۶۱	<i>n</i> -Dodecane	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰	۱۲۰۰/۰
۶۲	Cyclohexane	۶۸۴/۶	۶۸۵/۸	۶۹۴/۸	۷۰۲/۸	۷۲۲/۳
۶۳	<i>cis</i> -Hydrindane	۱۰۱۵/۰	۱۰۲۱/۱	۱۰۳۸/۲	۱۰۵۴/۹	۱۰۸۹/۳

۴-۳- انتخاب توصیف کننده ها

توصیف کننده ها مقادیر عددی هستند که بیانگر ویژگی خاصی از مولکول می باشند که با فعالیت شیمیایی آن ارتباط دارد. با توجه به موضوع مورد بررسی (بررسی ارتباط کمی ساختار-ویژگی) ابتدا ساختار مولکول ها به وسیله نرم افزار Hyperchem رسم و ساختار هندسی آن ها با احتساب اتم های هیدروژن و با استفاده از روش نیمه تجربی AM1 بهینه شد. سپس ساختارهای رسم شده توسط این نرم افزار به عنوان ورودی به نرم افزار Dragon وارد شدند. محاسبه ی توصیف کننده ها توسط این

نرم افزار صورت گرفت که در حدود ۱۴۰۰ توصیف کننده از هجده گروه مختلف برای هر ترکیب به دست آمد. به علاوه با استفاده از نرم افزارهای MOPAC و با افزودن کلید واژه های مناسب توصیف کننده های الکترونی نیز استخراج شده و به مجموعه توصیف کننده های قبلی اضافه شد.

۴-۴- آنالیز رگرسیون خطی چندگانه

برای ساختن مدلی که بیان گر ارتباط ساختاری ترکیبات مورد بررسی با شاخص بازداري آن ها باشد، از روش رگرسیون خطی چندگانه (MLR) استفاده شد. طبیعی است که تعداد زیاد توصیف کننده ها باعث پیچیدگی محاسبات شده و هم چنین احتمال وجود فاکتورهایی که با هم برهم کنش دارند افزایش می یابد. لذا تعدادی از این توصیف کننده ها که دارای ۹۰٪ مقادیر یکسان بودند حذف شدند. و هم چنین از بین توصیف کننده هایی که دارای هم بستگی بیش از ۰/۹ بودند توصیف کننده ای که دارای هم بستگی کمتری با متغیر وابسته بود، از سری داده ها حذف شد. سپس مقادیر توصیف کننده های محاسبه شده توسط نرم افزارهای Dragon و MOPAC پس از کاهش متغیرها به عنوان متغیرهای مستقل و مقادیر شاخص بازداري مولکول های موردنظر برای هر یک از بیست ستون به عنوان متغیرهای وابسته به عنوان ورودی به نرم افزار SPSS ارائه شد، در نهایت با استفاده از فهرست آنالیز، گزینه رگرسیون خطی و انتخاب روش مرحله ای^۱ چندین مدل مختلف برای هر ستون به طور جداگانه به دست آمد که با توجه به خصوصیات آماری آن ها از جمله ضریب رگرسیون (R)، فاکتور F و خطای استاندارد و پس از رسم مقادیر R و R^۲ و SE بر حسب تعداد توصیف کننده ها بهترین مدل که دارای بیش ترین مقدار R و F و کم ترین مقدار خطای استاندارد و شامل توصیف کننده های تا حد امکان قابل توجیه باشد به عنوان مدل نهایی برای ارتباط رفتار بازداري مولکول ها با ساختار آن ها برای هر ستون انتخاب می شود. بدیهی است که توصیف کننده های ستون های مختلف تا حدودی با یکدیگر متفاوتند، بنابراین برای محاسبه ی مدل کلی برای تمام ستون ها، توصیف کننده های تمام ستون ها و مقادیر دماها و درصدهای قطبیت هرستون نیز به

^۱ Stepwise

عنوان دو متغیر مستقل دیگر جمعاً به عنوان متغیرهای مستقل و مقادیر شاخص های بازداری هر یک از ستون ها با یکدیگر به عنوان متغیر وابسته به عنوان ورودی به SPSS ارائه شدند. سپس با استفاده از رگرسیون خطی و روش مرحله ای و با توجه به ویژگی های آماری آن ها بهترین مدل که شامل متغیرهای مستقل دما و درصد قطبیت نیز باشد، به عنوان مدل کلی برای ارتباط رفتار بازداری مولکول ها با ساختار آن ها انتخاب می شود. پس از فرآیند انتخاب متغیرها مشاهده شد که توصیف کننده های الکترونی محاسبه شده توسط MOPAC در مدل های به دست آمده از SPSS با تعداد توصیف کننده های کم تر از هفت حضور ندارند بنابراین توصیف کننده های الکترونی در مدل کلی که شامل هفت متغیر مستقل می باشد حضور ندارند. سپس داده ها (شامل مقادیر متغیرهای مستقل مدل کلی و مقادیر زمان بازداری) به صورت گزینشی به سه سری آموزش، تست و اعتبار به ترتیب با نسبت ۶۰٪، ۲۰٪ و ۲۰٪ و به ترتیب با تعداد ۷۴۲، ۲۴۷ و ۲۴۷ مولکول تقسیم می شوند به طوری که هر سری بهترین نماینده کل داده ها باشد. در نهایت مدل منتخب و ضرایب متغیرهای مستقل آن از سری آموزشی با استفاده از روش Enter به دست می آید. سری های تست و اعتبار برای ارزیابی قدرت پیش بینی مدل به دست آمده از سری آموزش به کار می روند. جدول ۴-۲ نام متغیرهای مستقل، ضرایب رگرسیون و اثر متوسط هر متغیر مستقل را برای مدل منتخب این سری از داده ها نشان می دهد.

اثر متوسط یک متغیر مستقل با استفاده از فرمول ۴-۱ به دست می آید:

$$MeanEffect = \frac{\beta_X \times \sum X_n}{\sum RI} \quad (1-4)$$

β_X : ضریب متغیر مستقل X در مدل MLR

X_n : مقدار متغیر مستقل X مورد نظر برای ترکیب n ام

RI: شاخص بازداری

جدول ۴-۲- مشخصات مدل منتخب توسط روش رگرسیون خطی چندگانه

توصیف کننده	علامت	ضریب رگرسیون	اثر متوسط
شاخص توپولوژیکی مولکولی گاتمن با درجه های راس والانس	<i>GMTIV</i>	$0.1178 (\pm 0.016)$	0.063
بالاترین مقدار ویژه $\pi.3$ از ماتریس بوردن	<i>BEHm3</i>	$21.0679 (\pm 12/131)$	0.0597
خود ارتباطی گری مرتبه دوم / وزن شده با الکترونگاتیویته های ساندerson اتمی	<i>GATS 2e</i>	$-1541.068 (\pm 8/589)$	-0.149
CH ₃ R/CH ₄	<i>C001</i>	$-56/551 (\pm 3/488)$	-0.064
محتوای اطلاعات کلی در برابری قدرت نفوذ	<i>ITH</i>	$8/769 (\pm 0.634)$	0.1170
درصد قطبیت هر ستون	<i>Polar</i>	$0.155 (\pm 0.005)$	0.146
دما	<i>T</i>	$0.253 (\pm 0.113)$	0.107

N=722

F= 795/239

R= 0.940

SE=68/12894

همان گونه که قبلاً گفته شد در این جدول توصیف کننده های الکترونی حضور ندارند و به جز دما و قطبیت، بقیه ی متغیرهای مستقل توصیف کننده های مولکولی به دست آمده از Dragon می باشند. در این جدول N تعداد داده های موجود در سری آموزش، F مقدار مربوط به آماره F یا آزمون فیشر و R ضریب هم بستگی خطی بین زمان بازاری پیش بینی شده توسط رگرسیون خطی و توصیف کننده ها و SE خطای استاندارد رگرسیون می باشد. بنابراین معادله ی به دست آمده برای داده های TFPS به صورت معادله ی ۴-۲ می باشد:

$$RI = 121/477 (\pm 49/126) + 0.1178 (\pm 0.016) GMTIV + 21.0679 (\pm 12/131) BEHm3 - 1541.068 (\pm 8/589) GATS 2e - 56/551 (\pm 3/488) C001 + 8/769 (\pm 0.634) ITH + 0.155 (\pm 0.005) Polar + 0.253 (\pm 0.113) T \quad (2-4)$$

طبق جدول ۲-۴ به جز دما و قطبیت، هر یک از توصیف کننده های وارد شده در مدل پیک خصوصیت ساختاری از مولکول را بیان می کنند که نشان دهنده ی تاثیر به سزای ساختار مولکول های مورد بررسی بر شاخص بازداری آن ها در ستون های کروماتوگرافی است. از طرفی ضریب هم بستگی میان متغیرهای مستقل وارد شده در مدل منتخب نشان دهنده ی هم بستگی کمتر از ۰/۹ میان این متغیرها و از طرفی تاثیر کم دما و درصد قطبیت ستون ها بر روی سایر متغیرهای مستقل است. جدول ۳-۴ ماتریس هم بستگی متغیرهای مستقل وارد شده در مدل منتخب را برای سری داده ها نمایش می دهد.

جدول ۳-۴- ماتریس هم بستگی متغیرهای مستقل وارد شده در مدل منتخب

	<i>GMTIV</i>	<i>BEHm3</i>	<i>GATS 2e</i>	<i>C001</i>	<i>ITH</i>	<i>Polar</i>	<i>T</i>
<i>GMTIV</i>	۱	۰/۶۰۶	-۰/۱۲۰	۰/۰۲۴	۰/۷۵۱	-۰/۰۰۶	۰/۰۵۹
<i>BEHm3</i>	۰/۶۰۶	۱	۰/۲۶۱	۰/۰۳۸	۰/۶۹۴	۰/۰۴۹	۰/۰۲۸
<i>GATS 2e</i>	-۰/۱۲۰	۰/۲۶۱	۱	۰/۰۵۱	-۰/۰۹۴	۰/۰۱۵	-۰/۰۲۰
<i>C001</i>	۰/۰۲۴	۰/۰۳۸	۰/۰۵۱	۱	۰/۲۵۵	۰/۰۱۲	-۰/۰۰۸
<i>ITH</i>	۰/۷۵۱	۰/۶۹۴	-۰/۰۹۴	۰/۲۵۵	۱	۰/۰۰۳	۰/۰۳۶
<i>Polar</i>	-۰/۰۰۶	۰/۰۴۹	۰/۰۱۵	۰/۰۱۲	۰/۰۰۳	۱	۰/۰۰۶
<i>T</i>	۰/۰۵۹	۰/۰۲۸	-۰/۰۲۰	-۰/۰۰۸	۰/۰۳۶	۰/۰۰۶	۱

جدول ۴-۴ مقادیر متغیرهای مستقل وارد شده در مدل به غیر از دما و قطبیت را برای مولکول های مورد بررسی نشان می دهد. به دلیل حضور ستون های با قطبیت های متفاوت و کار در دماهای مختلف، مقادیر درصد قطبیت ستون ها و دماها نیز به عنوان دو متغیر مستقل در نظر گرفته می شوند.

جدول ۴-۴ - مقادیر توصیف کننده های وارد شده در مدل منتخب برای ستون های TFPS

شماره	GMTIV	BEHm3	GATS 2e	C001	ITH
۱	۲۴۳	۲/۶۲	۱/۲۲	۰	۰
۲	۳۱۶	۲/۶۲	۱/۰۲	۱	۱۹/۶۵
۳	۴۲۹	۲/۶۲	۱/۰۸	۱	۲۴
۴	۵۸۶	۲/۶۷	۱/۱۳	۱	۲۸/۵۳
۵	۷۹۱	۲/۸۴	۱/۱۷	۱	۳۳/۲۲
۶	۵۸	۱/۹۱	۰/۵۶	۲	۶
۷	۱۰۷	۲/۰۷	۰/۵۴	۲	۱۱/۶۱
۸	۱۸۴	۲/۲۶	۰/۵۳	۲	۱۵/۵۱
۹	۲۹۳	۲/۵۳	۰/۵۳	۲	۱۹/۶۵
۱۰	۴۳۸	۲/۷۵	۰/۵۴	۲	۲۴
۱۱	۶۲۳	۲/۹۱	۰/۵۵	۲	۲۸/۵۳
۱۲	۸۵۲	۳/۰۳	۰/۵۵	۲	۳۳/۲۲
۱۳	۱۵۶	۲/۰۴	۰/۵۳	۰	۹/۶۱
۱۴	۲۲۸	۲/۴۷	۰/۴۹	۰	۱۳/۵۱
۱۵	۳۳۶	۲/۷۶	۰/۵۰	۰	۱۵/۶۵
۱۶	۴۵۶	۲/۹۵	۰/۵۱	۰	۲۴
۱۷	۶۲۰	۳/۰۹	۰/۵۲	۰	۲۸/۵۳
۱۸	۵۵	۱/۷۱	۰/۹۶	۱	۸
۱۹	۱۰۸	۲/۱۱	۰/۹۲	۱	۱۱/۶۱
۲۰	۱۸۵	۲/۴۱	۰/۹۱	۱	۱۵/۵۱
۲۱	۲۹۰	۲/۶۴	۰/۹۰	۱	۱۹/۶۵
۲۲	۴۲۷	۲/۸۱	۰/۹۰	۱	۲۴
۲۳	۶۰۰	۲/۹۴	۰/۹۰	۱	۲۸/۵۳
۲۴	۸۱۳	۳/۰۴	۰/۹۰	۱	۳۳/۲۲
۲۵	۲۸۱	۲/۷۶	۰/۷۶	۰	۱۹/۶۵
۲۶	۱۹۴	۲/۳۵	۰/۷۲	۳	۱۹/۶۵
۲۷	۱۸۳	۲/۰۶	۰/۹۳	۱	۱۱/۶۱
۲۸	۲۷۲	۲/۱۶	۰/۸۰	۲	۱۵/۵۱
۲۹	۴۰۱	۲/۴۶	۰/۷۶	۲	۱۹/۶۵
۳۰	۵۷۴	۲/۷۲	۰/۷۴	۲	۲۴
۳۱	۳۷	۱/۸۱	۰/۹۸	۱	۸
۳۲	۷۶	۲/۱۸	۰/۹۸	۱	۱۱/۶۱
۳۳	۱۳۵	۲/۴۷	۰/۹۸	۱	۱۵/۵۱
۳۴	۲۱۸	۲/۶۸	۰/۹۹	۱	۱۹/۶۵
۳۵	۳۲۹	۲/۸۴	۱/۰۱	۱	۲۴
۳۶	۲۱۹	۲/۷۶	۰/۸۴	۰	۱۹/۶۵

ادامه ی جدول ۴-۴

شماره	GMTIV	BEHm3	GATS 2e	CO01	ITH
۳۷	۴۰۸	۲/۶۲	۰/۶۳	۰	۱۵/۶۵
۳۸	۱۳۶	۲/۰۶	۰/۴۰	۱	۱۱/۶۱
۳۹	۲۲۷	۲/۴۲	۰/۴۴	۱	۱۵/۵۱
۴۰	۳۵۰	۲/۶۶	۰/۴۸	۱	۱۹/۶۵
۴۱	۷۹۹	۲/۶۲	۰/۴۴	۰	۲۰
۴۲	۳۵۵	۲/۱۰	۰/۴۲	۱	۱۵/۵۱
۴۳	۱۴۱۲	۲/۶۲	۰/۳۹	۰	۲۲/۵۳
۴۴	۳۰/۴۹	۲/۵۶	۱/۲۳	۱	۱۱/۶۱
۴۵	۱۷	۱/۹۳	۰/۹۳	۱	۸
۴۶	۴۰/۴۴	۲/۳۵	۰/۹۱	۱	۱۱/۶۱
۴۷	۷۹/۴۴	۲/۶۵	۰/۹۰	۱	۱۵/۵۱
۴۸	۱۳۸	۲/۸۶	۰/۹۰	۱	۱۹/۶۵
۴۹	۳۰۵/۷۸	۲/۶۲	۰/۶۱	۰	۱۵/۶۵
۵۰	۳۰۰	۲/۵۲	۱/۷۲	۰	۵/۵۱
۵۱	۱۰۸	۲/۳۱	۱/۵۴	۰	۹/۶۱
۵۲	۲۹۷	۲/۵۵	۱/۳۳	۰	۱۱/۵۱
۵۳	۱۵۳	۲/۳۵	۱	۰	۱۱/۶۱
۵۴	۳۶۷	۲/۸۲	۱/۱۹	۲	۲۲
۵۵	۸۵	۲/۵۲	۱/۳۸	۲	۹/۵۱
۵۶	۱۴۶	۲/۷۲	۱/۴۰	۲	۱۳/۶۵
۵۷	۲۳۱	۲/۸۷	۱/۴۱	۲	۱۶
۵۸	۳۴۴	۲/۹۸	۱/۴۲	۲	۲۰/۵۳
۵۹	۴۸۹	۳/۰۷	۱/۴۳	۲	۲۳/۲۲
۶۰	۶۷۰	۳/۱۵	۱/۴۳	۲	۲۸/۰۵
۶۱	۸۹۱	۳/۲۰	۱/۴۴	۲	۳۱/۰۲
۶۲	۱۰۸	۲/۷۶	۱/۴۲	۰	۰
۶۳	۳۷۳	۲/۸۴	۱/۳۱	۰	۲۸/۵۳

اثر این توصیف کننده ها بر شاخص های بازداري بازداري در انتهای این فصل مورد بررسی قرار

می گیرد.

۴-۵- مدل سازی به روش شبکه ی عصبی مصنوعی

در این تحقیق مدل شبکه ی عصبی مصنوعی با استفاده از برنامه نویسی در نرم افزار MATLAB به دست آمد. ابتدا مقادیر توصیف کننده های به دست آمده از مدل MLR به صورت ۱۲۳۶ بردار هفت عنصری به عنوان بردارهای ورودی و شاخص های بازداری متناظر با آن ها به صورت ۱۲۳۶ بردار تک عنصری به عنوان بردارهای هدف، هر دو به صورت یک جا برای آموزش مجموعه ای به نرم افزار MATLAB ارائه شدند. سپس شبکه ای ایجاد می گردد که به صورت یک شبکه ی پیش خور از نوع پس انتشار دولایه ای با تابع انتقال tan-sig در لایه ی مخفی و یک تابع انتقال خطی در لایه خارجی و تابع آموزشی لونیبرگ- مارکواردت می باشد. این روش یک ساختار مفید برای مسائل تخمین تابع (رگرسیون) است. برای کارآیی بیش تر شبکه، همراه با دستور ایجاد شبکه داده های ورودی در بازه ی $[-1, 1]$ نرمالیزه می شوند. ماتریس بردارهای ورودی p و بردارهای هدف t به شکل گزینشی مطابق با همان اندیس های به کار رفته برای مدل سازی MLR به سه دسته ی 60% برای آموزش، 20% برای اعتبار تقسیم می شود که شبکه تعمیم داده شود و آموزش قبل از برازش اضافی^۱ متوقف شود. 20% آخری به عنوان تست کاملاً مستقل از تعمیم شبکه استفاده می شود. به وزن ها و بایاس های اولیه به طور تصادفی مقادیر بین -1 و 1 و به پارامترهای آموزشی مقادیر مناسب داده می شود. توجه شود که این مقادیر تنها برای شروع آموزش در نظر گرفته می شوند و کلیه ی این پارامترها در طول آموزش شبکه بهینه می شوند.

سپس با دستور train شبکه آموزش داده می شود. شبکه از الگوریتم لونیبرگ- مارکواردت برای آموزش استفاده می کند. این آموزش زمانی که خطای سری اعتبار افزایش یابد متوقف می شود. آموزش، یک نمودار از خطاهای آموزش، خطاهای اعتبار و خطاهای تست ایجاد می کند. خطاهای پایانی برای هر سری استخراج شده و یادداشت می شوند. نتایج در صورتی منطقی هستند که میانگین مربع خطای پایانی کوچک باشد، خطای سری تست و خطای سری اعتبار ویژگی های مشابهی داشته باشند، و هیچ برازش اضافی عمده ای رخ نداده باشد. سپس تمام مجموعه ی داده ها (مجموعه های

^۱ Overfitting

آموزش، اعتبار و تست) درون شبکه قرار داده شده و یک رگرسیون خطی میان خروجی های شبکه و هدف های متناظر با آن ها انجام می شود، از روی نمودار حاصله، دنبال کردن خروجی ها بر حسب هدف ها صورت گرفته و مقدار R نیز ملاحظه می شود. خروجی های شبکه برای هر سری با دستور sim محاسبه می شوند. اگر نتایج با صحت بیش تری مورد نیاز باشد، می توان این مراحل را انجام داد:

- وزن ها و بایاس های شبکه ی آغازی را دوباره مقداراولیه داده و دوباره آموزش داد.
- تعداد نورون های مخفی را افزایش داد.
- تعداد بردارهای آموزشی را افزایش داد.
- اگر اطلاعات مرتبط تری در دسترس باشند تعداد مقادیر ورودی را افزایش داد.

۴-۵-۱- بهینه سازی پارامترها

طی این برنامه نویسی پس از انتخاب ورودی های شبکه، چندین پارامتر تجربی می بایست بهینه شوند، به ترتیب عبارتند از:

- تعداد نورون های لایه ی پنهان
- مقدار پارامتر μ
- تعداد دوره های آموزش

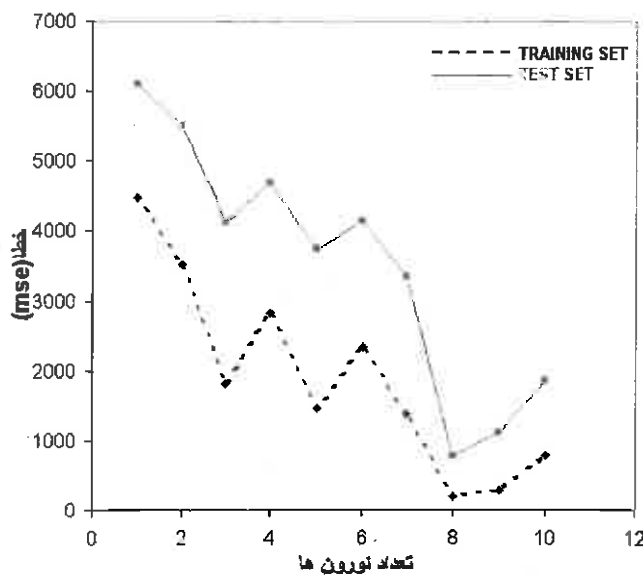
ملاک انتخاب مقدار بهینه برای این پارامترها، زمانی است که میانگین مربع خطا (mse) طبق معادله ی ۳-۴ برای هر دو سری آموزش و تست، مینیمم شود.

$$mse = \frac{1}{Q} \sum_{k=1}^Q (t(k) - a(k))^2 \quad (3-4)$$

در این رابطه $a(k)$ خروجی شبکه در k امین تکرار، $t(k)$ مقدار هدف (واقعی) و Q تعداد مولکول های سری آموزش یا تست، بسته به این که کدام یک مورد نظر است، می باشد.

۴-۵-۱-۱- بهینه سازی تعداد نورون های لایه ی پنهان

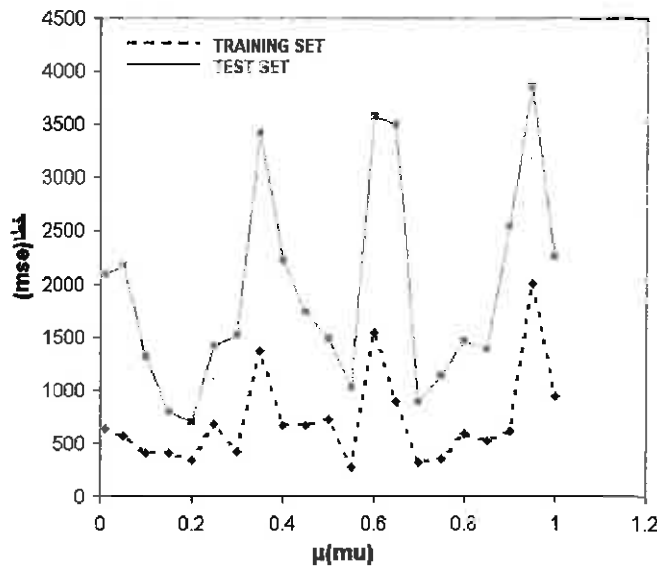
تعداد نورون های لایه ی پنهان بین یک تا ده تغییر داده شد، سپس منحنی میانگین مربع خطا (mse) بر حسب تعداد نورون ها برای سری آموزش و آزمون رسم گردید و نقطه ای که کم ترین خطا را برای هر دو سری داشت به عنوان تعداد نورون های بهینه انتخاب گردید. برای ستون های TFPS تعداد بهینه ی نورون ها ۸ به دست آمد (شکل ۴-۱).



شکل ۴-۱- نمودار میانگین مربع خطا (mse) بر حسب تعداد نورون های لایه پنهان

۴-۵-۱-۲- بهینه سازی مقدار μ

در این مرحله تعداد نورون های شبکه برابر هشت قرار داده شد و برای بهینه سازی μ مقدار این پارامتر بین ۰/۰۱ تا ۱/۰۰ با فاصله ی ۰/۰۵ تغییر داده شد و سپس برای هر مورد مقدار mse سری های آموزشی و تست محاسبه گردید و در نهایت منحنی mse بر حسب μ رسم گردید و نقطه ای که کم ترین خطا را برای هر دو سری داشت به عنوان مقدار بهینه انتخاب گردید. در این مورد مقدار μ بهینه ۰/۲۰ به دست آمد. نمودار آن در شکل ۴-۲ نمایش داده شده است.



شکل ۴-۲- نمودار میانگین مربع خطا (mse) بر حسب پارامتر μ

۴-۵-۱-۳- بهینه سازی تعداد دوره های آموزش (epoch)

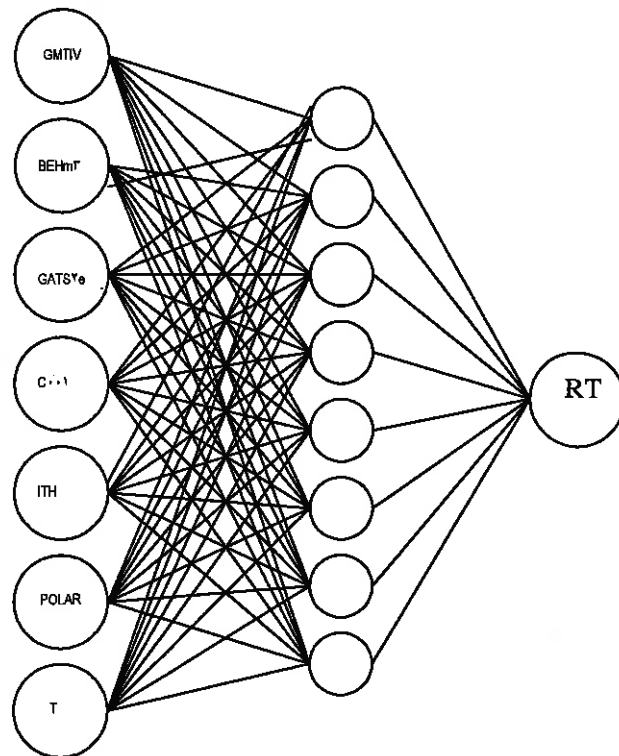
در نهایت با ارائه ی مقادیر بهینه شده تعداد نورون ها و پارامتر μ به شبکه تعداد نهایی دوره ها به دست آمد که در این مورد تعداد بهینه ی دوره ها ۷۹ می باشد.

توابع و مقادیر بهینه ی پارامترهای تجربی برای شبکه ی عصبی به صورتی است که در جدول ۴-۵ برای داده های TFPS نمایش داده شده است.

جدول ۴-۵- توابع و مقادیر پارامترهای مهم شبکه ی عصبی

trainlm	تابع آموزش
tansig	تابع انتقال لایه ی پنهان
purelin	تابع انتقال لایه ی خروجی
MSE	تابع کارایی
rands	تابع مقدار اولیه دهی وزن و بایاس
Early Stopping	بهبود تعمیم
۸	تعداد نورون های لایه ی پنهان
۰/۲۰	پارامتر $\mu(mu)$
۷۹	تعداد دوره ها

ساختار شبکه ی عصبی به دست آمده پس از بهینه سازی فاکتورهای بحث شده در بالا به طور شماتیک در شکل ۳-۴ نشان داده شده است.



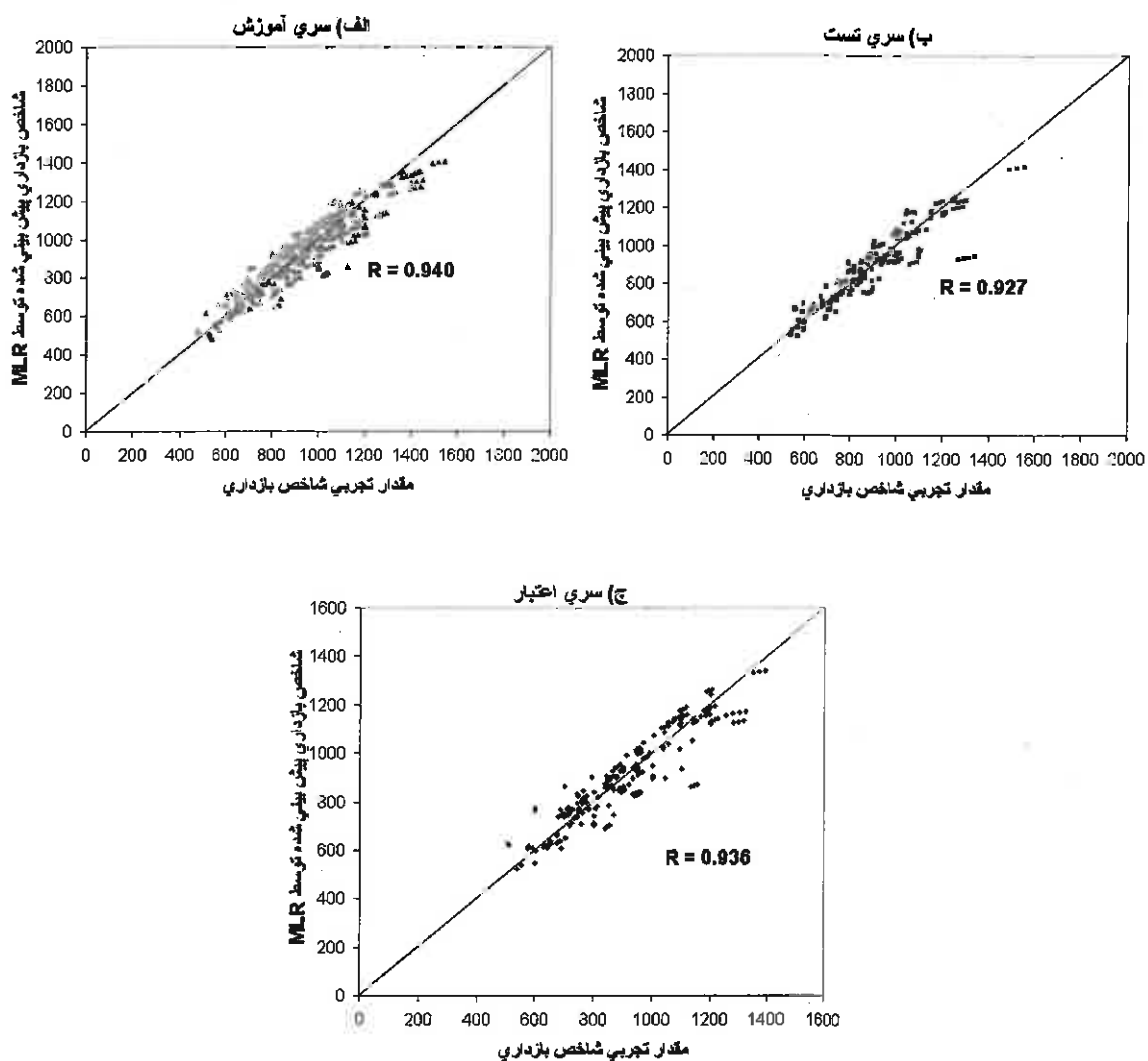
شکل ۳-۴- تصویر شماتیک ساختار شبکه ی عصبی مصنوعی به دست آمده پس از

بهینه سازی

۴-۶- بحث و نتیجه گیری

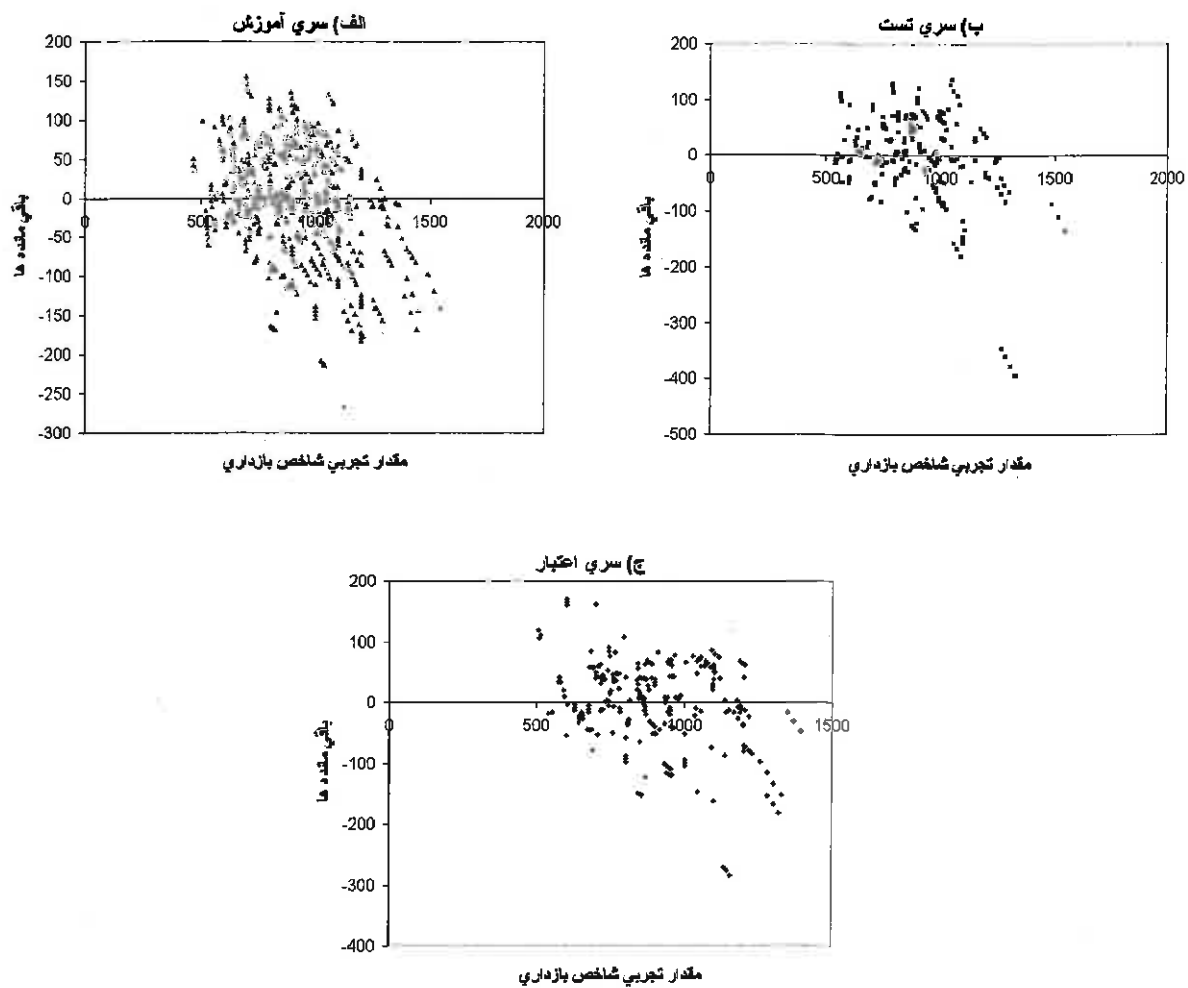
۴-۶-۱- مقایسه ی روش های رگرسیون خطی چندگانه و شبکه ی عصبی مصنوعی

شکل ۴-۴ شاخص بازداری محاسبه شده با استفاده از روش آنالیز رگرسیون چندگانه را برای ترکیبات مورد مطالعه نسبت به شاخص بازداری تجربی نشان می دهد.



شکل ۴-۴- منحنی شاخص های بازداری محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل مقادیر تجربی برای سری آموزش (ب) سری تست (ج) سری اعتبار

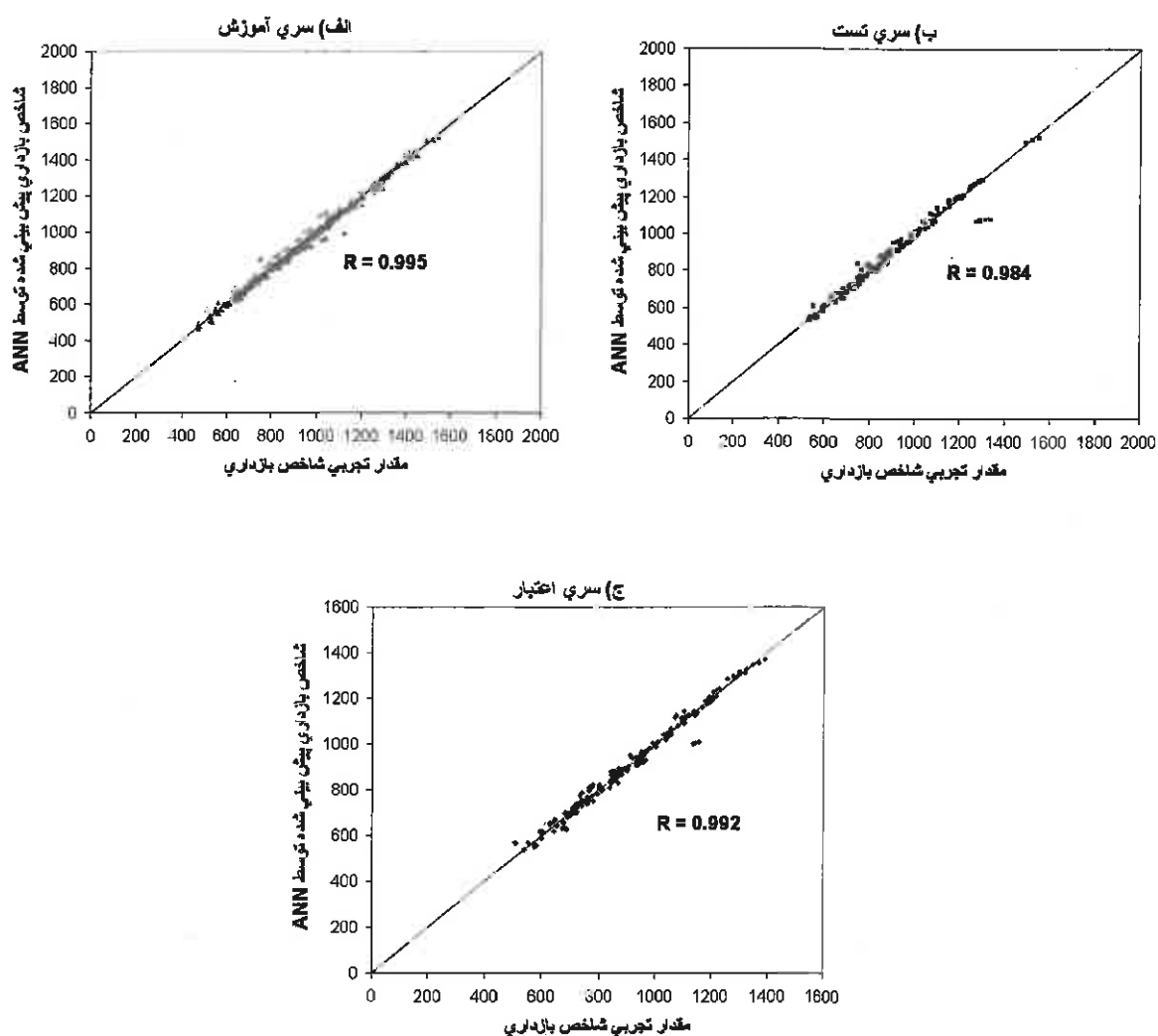
هم چنین در شکل ۴-۵، مقادیر باقیمانده (که از کم کردن مقدار تجربی از مقدار نظری محاسبه می شود) نسبت به مقدار تجربی برای تکنیک MLR رسم شده است.



شکل ۴-۵- منحنی مقادیر باقیمانده ی محاسبه شده توسط روش MLR در مقابل شاخص های

بازداری تجربی برای الف) سری آموزشی ب) سری تست ج) سری اعتبار

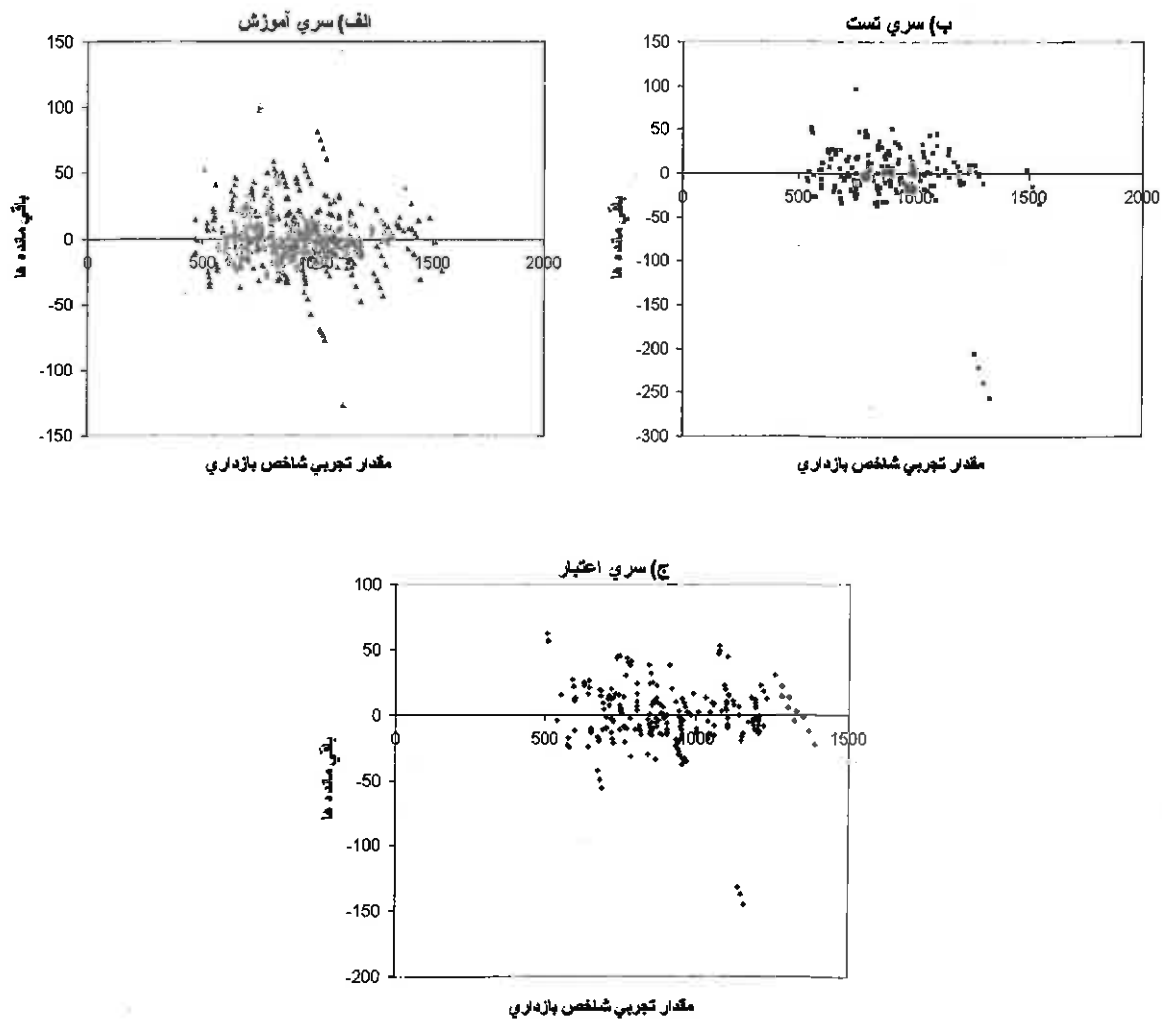
در شکل ۴-۶ مقادیر محاسبه شده ی شاخص بازداری توسط شبکه ی عصبی مصنوعی نسبت به مقادیر تجربی رسم شده است.



شکل ۴-۶- منحنی شاخص های بازداری محاسبه شده توسط تکنیک ANN در مقابل شاخص های

بازداری تجربی برای سری آموزش (ب) سری تست (ج) سری اعتبار

هم چنین نمودار باقی مانده ها در مقابل مقادیر تجربی شاخص بازداری برای تکنیک ANN در شکل ۷-۴ آورده شده است.



شکل ۷-۴- منحنی مقادیر باقیمانده ی محاسبه شده توسط روش ANN در مقابل شاخص های

بازداری تجربی برای الف) سری آموزشی ب) سری تست ج) سری اعتبار

در نمودارهای شکل ۴-۶ نقاط در اطراف خط راست نسبت به نمودارهای ۴-۴ متراکم تر هستند و این نشان دهنده ی پیش بینی بهتر شبکه ی عصبی مصنوعی نسبت به روش رگرسیون خطی

چندگانه است. برای مقایسه ی خطای سیستماتیک، ملاحظه می نمائیم که در شکل ۴-۷ در مدل شبکه ی عصبی مصنوعی نقاط نسبت به شکل ۴-۵ به صورت متقارن تری حول خط صفر انتشار یافته اند، که این مسئله دلالت بر خطای سیستماتیک کم تر در مدل شبکه ی عصبی مصنوعی دارد. بنابراین فرضیه ی ما مبنی بر احتمال وجود رابطه غیر خطی بین شاخص بازداری ترکیبات و توصیف کننده های وارد شده در مدل تا حدود زیادی ثابت می شود.

مقادیر تجربی زمان بازداری و مقادیر پیش بینی شده ی آن توسط تکنیک های رگرسیون خطی چندگانه و شبکه ی عصبی در جدول ۴-۶ آورده شده است.

جدول ۴-۶- مقادیر تجربی شاخص بازداري (RI) و مقادیر پیش بینی شده توسط تکنیک های MLR و ANN. (tr: سری آموزش، t: سری تست، v: سری اعتبار)

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۱	۶۵۸/۱۰	۶۴۹/۵۲	۶۳۵/۷۰	tr	۴۰	۹۴۷/۶۰	۱۰۴۴/۰۴	۹۳۸/۳۰	tr
۲	۷۶۰/۸۰	۸۰۹/۰۹	۸۰۷/۴۰	t	۴۱	۷۰۶/۵۰	۷۱۲/۶۱	۷۰۷/۰۰	tr
۳	۸۵۲/۸۰	۸۵۸/۱۰	۸۴۷/۵۰	tr	۴۲	۱۰۴۷/۱۰	۱۱۸۳/۰۵	۱۰۶۵/۹۰	t
۴	۹۴۳/۰۰	۹۲۸/۶۰	۹۴۶/۱۰	v	۴۳	۸۰۶/۹۰	۶۴۲/۷۷	۸۶۵/۵۰	tr
۵	۱۰۴۱/۹۰	۱۰۳۵/۸۷	۱۰۳۹/۹۰	tr	۴۴	۵۳۹/۸۰	۵۲۲/۲۱	۵۳۵/۹۰	v
۶	۴۷۳/۳۰	۵۰۸/۲۱	۴۶۲/۸۰	tr	۴۵	۶۴۱/۳۰	۶۴۹/۶۰	۶۴۲/۷۰	tr
۷	۵۷۵/۷۰	۶۰۲/۹۱	۵۴۸/۵۰	t	۴۶	۷۴۳/۵۰	۷۵۵/۴۹	۷۴۹/۸۰	tr
۸	۶۶۶/۲۰	۶۹۲/۳۹	۶۶۵/۰۰	tr	۴۷	۸۴۴/۸۰	۸۴۶/۴۶	۸۴۵/۱۰	t
۹	۷۶۷/۸۰	۸۰۴/۹۸	۷۵۷/۲۰	v	۴۸	۸۳۵/۲۰	۸۹۱/۹۱	۸۱۹/۱۰	tr
۱۰	۸۶۸/۵۰	۹۱۳/۷۴	۸۵۹/۵۰	tr	۴۹	۶۸۹/۹۰	۶۰۹/۸۸	۶۷۹/۰۰	v
۱۱	۹۶۸/۸۰	۱۰۱۸/۵۶	۹۶۷/۱۰	tr	۵۰	۶۱۹/۶۰	۵۹۵/۱۵	۶۲۲/۷۰	tr
۱۲	۱۰۶۹/۶۰	۱۱۲۵/۷۳	۱۱۱۲/۴۰	t	۵۱	۷۲۶/۰۰	۷۲۸/۳۷	۷۱۹/۶۰	tr
۱۳	۶۳۸/۶۰	۷۰۲/۴۲	۶۳۹/۸۰	tr	۵۲	۷۴۴/۹۰	۷۱۲/۳۲	۸۴۰/۶۰	t
۱۴	۷۶۴/۲۰	۸۴۶/۱۹	۷۹۴/۷۰	v	۵۳	۸۶۵/۴۰	۷۹۸/۱۷	۸۵۵/۲۰	tr
۱۵	۸۶۶/۸۰	۹۴۳/۷۳	۸۸۴/۴۰	tr	۵۴	۶۰۰/۰۰	۵۴۵/۹۷	۵۸۷/۷۰	v
۱۶	۹۸۰/۷۰	۱۰۷۶/۸۰	۹۹۴/۱۰	tr	۵۵	۷۰۰/۰۰	۶۳۲/۱۹	۶۸۳/۸۰	tr
۱۷	۱۰۸۲/۹۰	۱۱۷۳/۶۷	۱۱۰۶/۰۰	t	۵۶	۸۰۰/۰۰	۶۹۷/۹۸	۸۱۳/۴۰	tr
۱۸	۵۳۷/۳۰	۴۷۸/۰۰	۵۰۱/۴۰	tr	۵۷	۹۰۰/۰۰	۷۷۹/۴۶	۹۰۰/۱۰	t
۱۹	۶۴۲/۶۰	۶۰۹/۵۲	۶۱۸/۲۰	v	۵۸	۱۰۰۰/۰۰	۸۴۶/۲۷	۹۹۷/۰۰	tr
۲۰	۷۴۶/۹۰	۷۲۲/۱۷	۷۱۵/۶۰	tr	۵۹	۱۱۰۰/۰۰	۹۳۷/۷۰	۱۱۴۴/۰۰	v
۲۱	۸۴۹/۵۰	۸۲۷/۱۶	۸۳۳/۹۰	tr	۶۰	۶۶۸/۵۰	۶۲۴/۱۷	۶۳۱/۶۰	tr
۲۲	۹۵۱/۶۰	۹۲۵/۵۱	۹۳۱/۹۰	t	۶۱	۹۸۴/۷۰	۹۵۵/۳۲	۹۸۹/۰۰	tr
۲۳	۱۰۵۲/۱۰	۱۰۲۲/۴۱	۱۰۳۹/۶۰	tr	۶۲	۶۷۸/۹۰	۶۹۳/۸۵	۶۷۵/۲۰	t
۲۴	۸۶۵/۷۰	۹۲۸/۹۶	۸۳۱/۵۰	v	۶۳	۷۸۳/۵۰	۸۵۳/۴۲	۸۳۴/۰۰	tr
۲۵	۷۱۶/۸۰	۶۶۳/۶۱	۷۵۴/۶۰	tr	۶۴	۸۷۴/۴۰	۹۰۲/۴۳	۸۷۰/۴۰	v
۲۶	۵۱۱/۹۰	۶۱۰/۸۰	۵۶۴/۸۰	tr	۶۵	۹۶۴/۳۰	۹۷۲/۹۳	۹۶۶/۶۰	tr
۲۷	۵۹۳/۹۰	۶۴۵/۳۸	۵۹۷/۱۰	t	۶۶	۱۰۶۳/۷۰	۱۰۸۰/۲۰	۱۰۶۴/۶۰	tr
۲۸	۶۹۳/۵۰	۷۷۴/۰۲	۶۹۵/۷۰	tr	۶۷	۵۵۰/۲۰	۵۵۲/۵۴	۵۵۱/۵۰	t
۲۹	۷۹۳/۸۰	۹۰۰/۸۱	۷۸۲/۷۰	v	۶۸	۶۵۰/۲۰	۶۴۷/۲۴	۶۲۵/۷۰	tr
۳۰	۵۲۶/۴۰	۴۹۲/۷۸	۵۳۳/۵۰	tr	۶۹	۷۴۱/۷۰	۷۳۶/۷۲	۷۳۰/۳۰	v
۳۱	۶۲۶/۶۰	۶۰۹/۳۳	۶۴۹/۵۰	tr	۷۰	۸۴۵/۳۰	۸۴۹/۳۱	۸۲۸/۷۰	tr
۳۲	۷۲۹/۴۰	۷۱۵/۱۳	۷۳۶/۵۰	t	۷۱	۹۴۶/۳۰	۹۵۸/۰۷	۹۳۱/۹۰	tr
۳۳	۸۳۰/۲۰	۸۰۸/۹۱	۸۴۶/۸۰	tr	۷۲	۱۰۴۷/۳۰	۱۰۶۲/۸۹	۱۰۲۸/۱۰	t
۳۴	۹۳۱/۸۰	۸۹۷/۴۴	۹۴۲/۱۰	v	۷۳	۷۱۵/۵۰	۷۴۶/۷۵	۷۱۲/۶۰	tr
۳۵	۸۴۷/۸۰	۹۰۵/۶۰	۸۲۳/۳۰	tr	۷۴	۸۴۹/۵۰	۸۹۰/۵۲	۸۵۷/۳۰	v
۳۶	۹۴۷/۳۰	۹۰۷/۰۳	۹۰۶/۴۰	tr	۷۵	۹۵۵/۱۰	۹۸۸/۰۶	۹۵۸/۰۰	tr
۳۷	۶۳۸/۵۰	۶۸۴/۰۹	۶۶۵/۴۰	t	۷۶	۱۰۶۸/۵۰	۱۱۲۱/۱۳	۱۰۷۶/۵۰	tr
۳۸	۷۴۰/۷۰	۸۰۴/۱۷	۷۳۸/۱۰	tr	۷۷	۵۷۰/۱۰	۵۲۲/۳۳	۵۴۳/۲۰	t
۳۹	۸۴۲/۸۰	۹۰۶/۷۶	۸۶۶/۵۰	v	۷۸	۶۷۶/۳۰	۶۵۳/۸۵	۶۵۳/۹۰	tr

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۷۹	۷۸۱/۱۰	۷۶۶/۵۰	۷۴۹/۲۰	v	۱۲۱	۸۲۰/۱۰	۹۱۱/۲۳	۸۷۰/۵۰	tr
۸۰	۸۸۴/۰۰	۸۷۱/۴۹	۸۶۷/۰۰	tr	۱۲۲	۹۰۹/۷۰	۹۶۰/۲۵	۹۰۵/۷۰	t
۸۱	۹۸۶/۴۰	۹۶۹/۸۴	۹۶۶/۱۰	tr	۱۲۳	۹۹۹/۳۰	۱۰۳۰/۷۵	۹۹۸/۲۰	tr
۸۲	۱۰۸۸/۱۰	۱۰۶۷/۷۴	۱۰۷۳/۶۰	t	۱۲۴	۱۰۹۹/۳۰	۱۱۳۸/۰۲	۱۰۹۷/۰۰	v
۸۳	۹۰۴/۷۰	۹۷۳/۲۹	۸۸۳/۳۰	tr	۱۲۵	۶۴۱/۶۰	۶۱۰/۳۵	۶۵۴/۵۰	tr
۸۴	۷۵۷/۰۰	۷۰۷/۹۴	۷۷۰/۵۰	v	۱۲۶	۷۳۷/۶۰	۷۰۵/۰۶	۷۲۷/۸۰	tr
۸۵	۵۶۴/۸۰	۶۵۵/۱۳	۶۰۵/۶۰	tr	۱۲۷	۸۲۹/۴۰	۷۹۴/۵۳	۸۲۱/۲۰	t
۸۶	۶۴۷/۸۰	۶۸۹/۷۱	۶۴۸/۶۰	tr	۱۲۸	۹۳۴/۷۰	۹۰۷/۱۲	۹۲۴/۶۰	tr
۸۷	۷۴۹/۳۰	۸۱۸/۳۵	۷۴۸/۹۰	t	۱۲۹	۱۰۳۶/۶۰	۱۰۱۵/۸۸	۱۰۳۱/۵۰	v
۸۸	۸۵۰/۵۰	۹۴۵/۱۴	۸۳۹/۵۰	tr	۱۳۰	۱۱۳۸/۳۰	۱۱۲۰/۷۱	۱۱۱۵/۸۰	tr
۸۹	۵۵۳/۷۰	۵۳۷/۱۱	۵۶۹/۲۰	v	۱۳۱	۸۰۸/۹۰	۸۰۴/۵۶	۸۰۸/۰۰	tr
۹۰	۶۵۷/۳۰	۶۵۳/۶۶	۶۷۸/۴۰	tr	۱۳۲	۹۵۲/۹۰	۹۴۸/۳۳	۹۴۱/۹۰	t
۹۱	۷۶۰/۵۰	۷۵۹/۴۶	۷۶۱/۶۰	tr	۱۳۳	۱۰۶۱/۵۰	۱۰۴۵/۸۸	۱۰۵۹/۷۰	tr
۹۲	۸۶۲/۵۰	۸۵۳/۲۴	۸۷۰/۳۰	t	۱۳۴	۱۱۷۶/۰۰	۱۱۷۸/۹۵	۱۱۸۸/۷۰	v
۹۳	۹۶۳/۹۰	۹۴۱/۷۷	۹۶۶/۶۰	tr	۱۳۵	۶۱۶/۲۰	۵۸۰/۱۴	۵۹۷/۹۰	tr
۹۴	۸۸۳/۰۰	۹۴۹/۹۳	۸۶۷/۶۰	v	۱۳۶	۷۲۴/۴۰	۷۱۱/۶۷	۷۰۲/۴۰	tr
۹۵	۹۹۵/۷۰	۹۵۱/۳۶	۹۷۵/۶۰	tr	۱۳۷	۸۳۰/۶۰	۸۲۴/۳۲	۷۹۶/۷۰	t
۹۶	۷۳۸/۲۰	۷۲۸/۴۲	۷۳۸/۸۰	tr	۱۳۸	۹۳۴/۳۰	۹۲۹/۳۱	۹۱۶/۰۰	tr
۹۷	۸۴۳/۲۰	۸۴۸/۵۰	۸۲۷/۳۰	t	۱۳۹	۱۰۳۷/۰۰	۱۰۲۷/۶۵	۱۰۱۸/۴۰	v
۹۸	۹۴۶/۷۰	۹۵۱/۰۹	۹۵۱/۸۰	tr	۱۴۰	۱۱۳۹/۲۰	۱۱۲۵/۵۶	۱۱۲۶/۴۰	tr
۹۹	۱۰۴۰/۹۰	۱۰۸۸/۳۷	۱۰۲۶/۶۰	v	۱۴۱	۹۶۲/۷۰	۱۰۳۱/۱۱	۹۵۴/۰۰	tr
۱۰۰	۸۰۲/۷۰	۸۰۶/۹۴	۷۹۸/۶۰	tr	۱۴۲	۸۰۶/۲۰	۷۶۵/۷۵	۷۹۸/۹۰	t
۱۰۱	۸۳۳/۳۰	۶۸۷/۱۰	۸۷۷/۲۰	tr	۱۴۳	۶۳۲/۳۰	۷۱۲/۹۴	۶۵۷/۸۰	tr
۱۰۲	۵۶۹/۴۰	۵۶۶/۵۴	۵۶۷/۲۰	t	۱۴۴	۷۱۵/۳۰	۷۴۷/۵۳	۷۱۱/۹۰	v
۱۰۳	۶۷۲/۸۰	۶۹۳/۹۳	۶۶۷/۳۰	tr	۱۴۵	۸۱۸/۱۰	۸۷۶/۱۶	۸۱۴/۴۰	tr
۱۰۴	۷۷۶/۰۰	۷۹۹/۸۲	۷۷۳/۷۰	v	۱۴۶	۹۲۰/۰۰	۱۰۰۲/۹۶	۹۱۶/۰۰	tr
۱۰۵	۸۷۷/۷۰	۸۹۰/۷۹	۸۸۰/۳۰	tr	۱۴۷	۶۰۳/۲۰	۵۹۴/۹۳	۶۱۵/۳۰	t
۱۰۶	۸۶۵/۱۰	۹۳۶/۲۴	۸۷۶/۱۰	tr	۱۴۸	۷۰۸/۶۰	۷۱۱/۴۷	۷۱۷/۵۰	tr
۱۰۷	۷۳۸/۰۰	۶۵۴/۲۱	۷۳۰/۹۰	t	۱۴۹	۸۱۳/۲۰	۸۱۷/۲۷	۷۹۸/۳۰	v
۱۰۸	۶۵۹/۲۰	۶۳۹/۴۸	۶۶۱/۷۰	tr	۱۵۰	۹۱۵/۳۰	۹۱۱/۰۵	۹۰۸/۳۰	tr
۱۰۹	۷۸۱/۹۰	۷۷۲/۷۰	۸۲۳/۲۰	v	۱۵۱	۱۰۱۷/۳۰	۹۹۹/۵۸	۱۰۰۶/۹۰	tr
۱۱۰	۸۷۲/۱۰	۷۵۶/۶۵	۸۹۰/۷۰	tr	۱۵۲	۹۴۱/۹۰	۱۰۰۷/۷۵	۹۲۹/۷۰	t
۱۱۱	۸۶۹/۲۰	۸۴۲/۵۰	۸۵۷/۷۰	tr	۱۵۳	۱۰۷۵/۰۰	۱۰۰۹/۱۷	۱۰۶۳/۴۰	tr
۱۱۲	۶۰۰/۱۰	۵۹۰/۳۰	۵۹۳/۲۰	t	۱۵۴	۸۴۹/۹۰	۷۸۶/۲۳	۸۳۴/۰۰	v
۱۱۳	۷۰۰/۰۰	۶۷۶/۵۲	۶۸۶/۷۰	tr	۱۵۵	۹۵۷/۲۰	۹۰۶/۳۱	۹۴۴/۷۰	tr
۱۱۴	۸۰۰/۰۰	۷۴۲/۳۱	۸۱۶/۵۰	v	۱۵۶	۱۰۶۲/۱۰	۱۰۰۸/۹۱	۱۰۶۲/۹۰	tr
۱۱۵	۹۰۰/۰۰	۸۲۳/۷۹	۸۹۶/۴۰	tr	۱۵۷	۱۱۵۴/۱۰	۱۱۴۶/۱۹	۱۱۴۹/۲۰	t
۱۱۶	۱۰۰۰/۰۰	۸۹۰/۶۰	۹۹۲/۲۰	tr	۱۵۸	۹۱۲/۷۰	۸۶۴/۷۶	۹۱۰/۵۰	tr
۱۱۷	۱۱۰۰/۰۰	۹۸۲/۰۳	۱۱۳۱/۳۰	t	۱۵۹	۸۶۹/۰۰	۷۴۴/۹۱	۸۹۱/۸۰	v
۱۱۸	۶۷۰/۴۰	۶۶۸/۵۰	۶۵۵/۱۰	tr	۱۶۰	۶۰۷/۵۰	۶۲۴/۳۵	۶۰۸/۴۰	tr
۱۱۹	۹۸۸/۸۰	۹۹۹/۶۵	۱۰۰۴/۸۰	v	۱۶۱	۷۱۱/۷۰	۷۵۱/۷۵	۷۰۲/۳۰	tr
۱۲۰	۷۱۳/۶۰	۷۵۱/۶۷	۷۲۳/۵۰	tr	۱۶۲	۸۱۵/۹۰	۸۵۷/۶۲	۸۱۱/۹۰	t

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۱۶۳	۹۱۸/۳۰	۹۴۸/۶۰	۹۲۸/۷۰	tr	۲۰۵	۶۳۹/۰۰	۶۳۶/۴۷	۶۴۹/۰۰	tr
۱۶۴	۹۱۰/۶۰	۹۹۴/۰۶	۹۴۹/۱۰	v	۲۰۶	۷۴۵/۸۰	۷۵۳/۰۱	۷۴۷/۵۰	tr
۱۶۵	۸۰۶/۲۰	۷۱۲/۰۳	۷۹۵/۴۰	tr	۲۰۷	۸۵۱/۳۰	۸۵۸/۸۱	۸۲۸/۴۰	t
۱۶۶	۷۱۳/۴۰	۶۹۷/۲۹	۷۱۰/۸۰	tr	۲۰۸	۹۵۳/۷۰	۹۵۲/۵۹	۹۴۰/۶۰	tr
۱۶۷	۸۶۰/۹۰	۸۳۰/۵۱	۸۹۰/۶۰	t	۲۰۹	۱۰۵۶/۰۰	۱۰۴۱/۱۲	۱۰۳۹/۷۰	v
۱۶۸	۱۰۲۲/۳۰	۸۱۴/۴۷	۹۵۳/۳۰	tr	۲۱۰	۹۸۶/۴۰	۱۰۴۹/۲۹	۹۷۸/۳۰	tr
۱۶۹	۸۷۹/۳۰	۹۰۰/۳۱	۸۶۵/۰۰	v	۲۱۱	۱۱۳۶/۴۰	۱۰۵۰/۷۱	۱۱۲۴/۶۰	tr
۱۷۰	۶۰۰/۱۰	۶۴۸/۱۱	۶۰۰/۰۰	tr	۲۱۲	۹۲۳/۵۰	۸۲۷/۷۷	۹۰۴/۲۰	t
۱۷۱	۶۹۹/۹۰	۷۳۴/۳۳	۶۹۰/۵۰	tr	۲۱۳	۱۰۳۲/۰۰	۹۴۷/۸۵	۱۰۳۰/۱۰	tr
۱۷۲	۷۹۹/۹۰	۸۰۰/۱۳	۸۲۰/۹۰	t	۲۱۴	۱۱۳۷/۷۰	۱۰۵۰/۴۵	۱۱۴۳/۶۰	v
۱۷۳	۹۰۰/۰۰	۸۸۱/۶۰	۸۹۲/۹۰	tr	۲۱۵	۹۸۶/۰۰	۹۰۶/۳۰	۹۸۵/۸۰	tr
۱۷۴	۱۰۰۰/۰۰	۹۴۸/۴۲	۹۸۷/۵۰	v	۲۱۶	۸۹۵/۱۰	۷۸۶/۴۵	۹۰۱/۸۰	tr
۱۷۵	۱۱۰۰/۰۰	۱۰۳۹/۸۵	۱۱۱۵/۸۰	tr	۲۱۷	۶۳۲/۷۰	۶۶۵/۸۹	۶۳۹/۳۰	t
۱۷۶	۱۲۰۰/۰۰	۱۱۱۴/۲۲	۱۱۸۹/۰۰	tr	۲۱۸	۷۳۸/۲۰	۷۹۳/۲۹	۷۳۰/۷۰	tr
۱۷۷	۶۷۷/۲۰	۷۲۶/۳۲	۶۸۳/۵۰	t	۲۱۹	۸۴۳/۳۰	۸۹۹/۱۷	۸۴۳/۹۰	v
۱۷۸	۱۰۰۳/۲۰	۱۰۵۷/۴۷	۱۰۲۴/۱۰	tr	۲۲۰	۹۴۶/۰۰	۹۹۰/۱۴	۹۶۱/۵۰	tr
۱۷۹	۷۴۰/۹۰	۷۹۳/۲۱	۷۵۶/۰۰	v	۲۲۱	۹۴۵/۲۰	۱۰۳۵/۶۰	۱۰۰۱/۲۰	tr
۱۸۰	۸۴۸/۵۰	۹۵۲/۷۷	۸۹۸/۸۰	tr	۲۲۲	۸۵۵/۶۰	۷۵۳/۵۷	۸۳۹/۶۰	t
۱۸۱	۹۳۷/۲۰	۱۰۰۱/۷۹	۹۳۶/۰۰	tr	۲۲۳	۷۵۲/۴۰	۷۳۸/۸۳	۷۴۴/۸۰	tr
۱۸۲	۱۰۲۶/۶۰	۱۰۷۲/۲۹	۱۰۲۵/۶۰	t	۲۲۴	۹۱۶/۸۰	۸۷۲/۰۵	۹۳۷/۲۰	v
۱۸۳	۱۱۲۶/۹۰	۱۱۷۹/۵۶	۱۱۲۱/۶۰	tr	۲۲۵	۱۱۲۳/۲۰	۸۵۶/۰۱	۹۹۶/۲۰	tr
۱۸۴	۷۰۴/۶۰	۶۵۱/۸۹	۷۱۶/۸۰	v	۲۲۶	۸۸۶/۹۰	۹۴۱/۸۵	۸۷۴/۱۰	tr
۱۸۵	۷۹۶/۹۰	۷۴۶/۶۰	۸۰۰/۱۰	tr	۲۲۷	۶۰۰/۰۰	۶۸۹/۶۵	۶۰۴/۶۰	t
۱۸۶	۸۸۸/۵۰	۸۳۶/۰۷	۸۸۸/۷۰	tr	۲۲۸	۶۹۹/۹۰	۷۷۵/۸۷	۶۹۳/۴۰	tr
۱۸۷	۹۹۵/۰۰	۹۴۸/۶۶	۹۹۲/۳۰	t	۲۲۹	۸۰۰/۰۰	۸۴۱/۶۷	۸۲۴/۳۰	v
۱۸۸	۱۰۹۷/۴۰	۱۰۵۷/۴۲	۱۱۰۴/۴۰	tr	۲۳۰	۹۰۰/۰۰	۹۲۳/۱۴	۸۹۱/۳۰	tr
۱۸۹	۱۱۹۹/۶۰	۱۱۶۲/۲۵	۱۱۸۴/۹۰	v	۲۳۱	۱۰۰۰/۰۰	۹۸۹/۹۶	۹۸۵/۰۰	tr
۱۹۰	۸۷۳/۲۰	۸۴۶/۱۰	۸۷۸/۰۰	tr	۲۳۲	۱۱۰۰/۰۰	۱۰۸۱/۳۹	۱۱۰۵/۶۰	t
۱۹۱	۱۰۲۴/۲۰	۹۸۹/۸۷	۱۰۰۶/۴۰	tr	۲۳۳	۱۲۰۰/۰۰	۱۱۵۵/۷۶	۱۱۸۷/۹۰	tr
۱۹۲	۱۱۳۴/۹۰	۱۰۸۷/۴۲	۱۱۳۸/۳۰	t	۲۳۴	۶۸۳/۸۰	۶۷۷/۸۶	۷۰۲/۳۰	v
۱۹۳	۶۵۱/۲۰	۶۲۱/۶۸	۶۳۸/۲۰	tr	۲۳۵	۱۰۱۶/۲۰	۱۰۹۹/۰۱	۱۰۳۸/۶۰	tr
۱۹۴	۷۶۰/۲۰	۷۵۳/۲۱	۷۳۹/۸۰	v	۲۳۶	۷۹۳/۷۰	۸۶۳/۵۸	۸۰۷/۷۰	tr
۱۹۵	۸۶۷/۴۰	۸۶۵/۸۶	۸۳۴/۶۰	tr	۲۳۷	۹۰۳/۰۰	۱۰۲۳/۱۴	۹۵۳/۲۰	t
۱۹۶	۹۷۱/۷۰	۹۷۰/۸۵	۹۵۵/۶۰	tr	۲۳۸	۹۸۹/۸۰	۱۰۷۲/۱۶	۹۹۷/۵۰	tr
۱۹۷	۱۰۷۵/۱۰	۱۰۶۹/۱۹	۱۰۶۰/۹۰	t	۲۳۹	۱۰۷۹/۰۰	۱۱۴۲/۶۶	۱۰۸۱/۸۰	v
۱۹۸	۱۱۷۸/۳۰	۱۱۶۷/۱۰	۱۱۷۰/۰۰	tr	۲۴۰	۱۱۷۹/۸۰	۱۲۴۹/۹۳	۱۱۶۸/۶۰	tr
۱۹۹	۱۰۰۶/۲۰	۱۰۷۲/۶۵	۱۰۰۸/۰۰	v	۲۴۱	۸۰۴/۷۰	۷۲۲/۲۶	۷۹۸/۴۰	tr
۲۰۰	۸۴۰/۱۰	۸۰۷/۲۹	۸۲۵/۹۰	tr	۲۴۲	۸۹۲/۷۰	۸۱۶/۹۷	۹۱۴/۳۰	t
۲۰۱	۶۷۷/۶۰	۷۵۴/۴۸	۶۹۵/۲۰	tr	۲۴۳	۹۸۴/۳۰	۹۰۶/۴۴	۱۰۰۰/۴۰	tr
۲۰۲	۷۶۱/۱۰	۷۸۹/۰۷	۷۵۲/۰۰	t	۲۴۴	۱۰۹۲/۷۰	۱۰۱۹/۰۳	۱۰۹۷/۸۰	v
۲۰۳	۸۶۵/۱۰	۹۱۷/۷۰	۸۵۶/۷۰	tr	۲۴۵	۱۱۹۶/۱۰	۱۱۲۷/۷۹	۱۲۲۲/۹۰	tr
۲۰۴	۹۶۷/۵۰	۱۰۴۴/۵۰	۹۶۹/۸۰	v	۲۴۶	۱۲۹۹/۴۰	۱۲۳۲/۶۲	۱۳۱۰/۵۰	tr

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۲۴۷	۹۸۲/۵۰	۹۱۶/۴۷	۱۰۰۱/۵۰	t	۲۸۹	۱۱۰۰/۰۰	۱۱۵۱/۷۶	۱۰۹۰/۴۰	v
۲۴۸	۱۱۴۲/۹۰	۱۰۶۰/۲۴	۱۱۲۵/۰۰	tr	۲۹۰	۱۲۰۰/۰۰	۱۲۲۶/۱۳	۱۱۸۶/۲۰	tr
۲۴۹	۱۲۵۶/۰۰	۱۱۵۷/۷۹	۱۲۸۶/۲۰	v	۲۹۱	۶۹۷/۹۰	۸۳۸/۲۳	۷۳۱/۴۰	tr
۲۵۰	۷۱۱/۴۰	۶۹۲/۰۰	۷۱۱/۲۰	tr	۲۹۲	۱۰۴۳/۴۰	۱۱۶۹/۳۸	۱۰۶۷/۶۰	t
۲۵۱	۸۲۰/۰۰	۸۲۳/۵۸	۸۱۰/۲۰	tr	۲۹۳	۶۶۲/۳۰	۶۵۴/۵۸	۶۴۲/۴۰	tr
۲۵۲	۹۲۸/۳۰	۹۳۲/۲۳	۹۰۶/۰۰	t	۲۹۴	۷۶۵/۶۰	۸۱۴/۱۵	۸۰۹/۴۰	v
۲۵۳	۱۰۳۳/۳۰	۱۰۴۱/۲۲	۱۰۲۸/۱۰	tr	۲۹۵	۸۵۸/۱۰	۸۶۳/۱۶	۸۵۱/۸۰	tr
۲۵۴	۱۱۳۷/۰۰	۱۱۳۹/۵۶	۱۱۳۶/۹۰	v	۲۹۶	۹۴۸/۶۰	۹۳۳/۶۶	۹۵۱/۰۰	tr
۲۵۵	۱۲۳۹/۹۰	۱۲۳۷/۴۷	۱۲۴۹/۰۰	tr	۲۹۷	۱۰۴۷/۶۰	۱۰۴۰/۹۳	۱۰۴۶/۹۰	t
۲۵۶	۱۰۷۸/۶۰	۱۱۴۳/۰۲	۱۱۰۶/۹۰	tr	۲۹۸	۴۷۱/۲۰	۵۱۳/۲۷	۴۷۰/۶۰	tr
۲۵۷	۸۹۳/۲۰	۸۷۷/۶۶	۸۸۶/۰۰	t	۲۹۹	۵۷۵/۲۰	۶۰۷/۹۷	۵۵۲/۰۰	v
۲۵۸	۷۵۸/۷۰	۸۲۴/۸۵	۷۶۰/۸۰	tr	۳۰۰	۶۶۶/۶۰	۶۹۷/۴۵	۶۶۷/۷۰	tr
۲۵۹	۸۳۷/۸۰	۸۵۹/۴۴	۸۰۷/۹۰	v	۳۰۱	۷۶۸/۶۰	۸۱۰/۰۴	۷۶۱/۵۰	tr
۲۶۰	۹۴۲/۸۰	۹۸۸/۰۷	۹۱۸/۵۰	tr	۳۰۲	۸۶۹/۳۰	۹۱۸/۸۰	۸۶۴/۳۰	t
۲۶۱	۱۰۴۶/۲۰	۱۱۱۴/۸۷	۱۰۵۵/۲۰	tr	۳۰۳	۹۶۹/۸۰	۱۰۲۳/۶۲	۹۷۱/۶۰	tr
۲۶۲	۶۸۲/۳۰	۷۰۶/۸۴	۷۰۹/۸۰	t	۳۰۴	۱۰۷۰/۷۰	۱۱۳۰/۷۹	۱۱۱۷/۱۰	v
۲۶۳	۷۸۴/۶۰	۸۲۳/۳۸	۸۰۴/۸۰	tr	۳۰۵	۶۴۱/۱۰	۷۰۷/۴۸	۶۴۴/۸۰	tr
۲۶۴	۸۹۰/۳۰	۹۲۹/۱۸	۸۸۷/۷۰	v	۳۰۶	۷۶۸/۹۰	۸۵۱/۲۵	۸۰۲/۳۰	tr
۲۶۵	۹۹۴/۵۰	۱۰۲۲/۹۶	۱۰۰۰/۹۰	tr	۳۰۷	۸۷۳/۹۰	۹۴۸/۷۹	۸۹۴/۴۰	t
۲۶۶	۱۰۹۶/۷۰	۱۱۱۱/۴۹	۱۰۹۵/۵۰	tr	۳۰۸	۹۸۹/۲۰	۱۰۸۱/۸۶	۱۰۰۰/۳۰	tr
۲۶۷	۱۰۳۶/۰۰	۱۱۱۹/۶۶	۱۰۶۸/۶۰	t	۳۰۹	۱۰۹۳/۰۰	۱۱۷۸/۷۳	۱۱۱۲/۵۰	v
۲۶۸	۱۲۵۱/۸۰	۱۱۲۱/۰۸	۱۲۲۵/۴۰	tr	۳۱۰	۵۳۶/۰۰	۴۸۳/۰۶	۵۰۲/۷۰	tr
۲۶۹	۱۰۴۴/۷۰	۸۹۸/۱۴	۱۰۲۹/۷۰	v	۳۱۱	۶۴۱/۱۰	۶۱۴/۵۸	۶۱۹/۴۰	tr
۲۷۰	۱۱۵۴/۹۰	۱۰۱۸/۲۲	۱۱۷۵/۰۰	tr	۳۱۲	۷۴۵/۲۰	۷۲۷/۲۳	۷۱۷/۵۰	t
۲۷۱	۱۲۶۱/۹۰	۱۱۲۰/۸۲	۱۲۸۴/۲۰	tr	۳۱۳	۸۴۸/۱۰	۸۳۲/۲۲	۸۳۳/۶۰	tr
۲۷۲	۱۱۱۰/۲۰	۹۷۶/۶۷	۱۱۰۷/۹۰	t	۳۱۴	۹۵۰/۲۰	۹۳۰/۵۷	۹۳۵/۰۰	v
۲۷۳	۹۴۲/۰۰	۸۵۶/۸۲	۹۱۸/۳۰	tr	۳۱۵	۱۰۵۱/۹۰	۱۰۲۸/۴۷	۱۰۴۳/۹۰	tr
۲۷۴	۶۷۷/۷۰	۷۳۶/۲۶	۶۹۶/۹۰	v	۳۱۶	۱۱۵۳/۱۰	۱۱۲۸/۵۸	۱۱۶۵/۴۰	tr
۲۷۵	۷۸۴/۸۰	۸۶۳/۶۶	۷۸۶/۹۰	tr	۳۱۷	۸۶۹/۹۰	۹۳۴/۰۲	۸۳۷/۰۰	t
۲۷۶	۸۹۰/۹۰	۹۶۹/۵۴	۹۰۱/۸۰	tr	۳۱۸	۷۱۷/۲۰	۶۶۸/۶۷	۷۵۲/۷۰	tr
۲۷۷	۹۹۴/۶۰	۱۰۶۰/۵۱	۱۰۰۸/۰۰	t	۳۱۹	۵۱۰/۲۰	۶۱۵/۸۶	۵۶۶/۴۰	v
۲۷۸	۱۰۰۹/۸۰	۱۱۰۵/۹۷	۱۰۹۱/۲۰	tr	۳۲۰	۵۹۱/۱۰	۶۵۰/۴۴	۵۹۶/۵۰	tr
۲۷۹	۹۳۹/۹۰	۸۲۳/۹۴	۹۱۰/۰۰	v	۳۲۱	۶۹۱/۲۰	۷۷۹/۰۸	۶۹۶/۱۰	tr
۲۸۰	۸۱۵/۸۰	۸۰۹/۲۰	۷۹۹/۸۰	tr	۳۲۲	۷۹۱/۷۰	۹۰۵/۸۷	۷۸۴/۵۰	t
۲۸۱	۹۹۹/۴۰	۹۴۲/۴۲	۱۰۱۲/۳۰	tr	۳۲۳	۵۲۶/۶۰	۴۹۷/۸۴	۵۳۴/۴۰	tr
۲۸۲	۱۲۷۱/۸۰	۹۲۶/۳۸	۱۰۶۵/۲۰	t	۳۲۴	۶۲۸/۱۰	۶۱۴/۳۹	۶۵۰/۷۰	v
۲۸۳	۹۰۰/۴۰	۱۰۱۲/۲۲	۸۹۹/۲۰	tr	۳۲۵	۷۳۰/۶۰	۷۲۰/۱۹	۷۳۷/۹۰	tr
۲۸۴	۶۰۰/۱۰	۷۶۰/۰۲	۶۱۲/۰۰	v	۳۲۶	۸۳۱/۴۰	۸۱۳/۹۷	۸۴۷/۵۰	tr
۲۸۵	۷۰۰/۰۰	۸۴۶/۲۴	۶۹۸/۵۰	tr	۳۲۷	۹۳۲/۸۰	۹۰۲/۵۰	۹۴۴/۹۰	t
۲۸۶	۸۰۰/۰۰	۹۱۲/۰۴	۸۳۰/۳۰	tr	۳۲۸	۸۵۵/۲۰	۹۱۰/۶۶	۸۲۸/۹۰	tr
۲۸۷	۹۰۰/۰۰	۹۹۳/۵۱	۸۹۰/۴۰	t	۳۲۹	۹۵۲/۱۰	۹۱۲/۰۹	۹۱۳/۹۰	v
۲۸۸	۱۰۰۰/۰۰	۱۰۶۰/۳۳	۹۸۲/۷۰	tr	۳۳۰	۶۳۹/۸۰	۶۸۹/۱۵	۶۷۳/۳۰	tr

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۳۳۱	۷۴۲/۶۰	۸۰۹/۲۳	۷۴۲/۸۰	tr	۳۷۳	۵۶۸/۲۰	۵۲۷/۳۹	۵۴۴/۶۰	tr
۳۳۲	۸۴۴/۸۰	۹۱۱/۸۲	۸۷۲/۸۰	t	۳۷۴	۶۷۵/۰۰	۶۵۸/۹۱	۶۵۵/۲۰	v
۳۳۳	۹۵۴/۴۰	۱۰۴۹/۱۰	۹۴۹/۸۰	tr	۳۷۵	۷۸۰/۳۰	۷۷۱/۵۶	۷۵۱/۲۰	tr
۳۳۴	۷۰۸/۶۰	۷۶۷/۶۷	۷۱۶/۰۰	v	۳۷۶	۸۸۳/۵۰	۸۷۶/۵۵	۸۶۶/۹۰	tr
۳۳۵	۱۰۵۶/۲۰	۱۱۸۸/۱۱	۱۰۷۵/۲۰	tr	۳۷۷	۹۸۶/۰۰	۹۷۴/۹۰	۹۶۹/۵۰	t
۳۳۶	۸۱۳/۲۰	۶۴۷/۸۳	۸۶۶/۲۰	tr	۳۷۸	۱۰۸۷/۹۰	۱۰۷۲/۸۰	۱۰۷۸/۲۰	tr
۳۳۷	۵۴۱/۵۰	۵۲۷/۲۷	۵۳۵/۸۰	t	۳۷۹	۱۱۸۹/۴۰	۱۱۷۲/۹۱	۱۱۹۵/۰۰	v
۳۳۸	۶۴۳/۶۰	۶۵۴/۶۶	۶۴۲/۰۰	tr	۳۸۰	۹۰۹/۹۰	۹۷۸/۳۵	۸۸۸/۹۰	tr
۳۳۹	۷۴۵/۹۰	۷۶۰/۵۵	۷۵۰/۸۰	v	۳۸۱	۷۵۷/۱۰	۷۱۳/۰۰	۷۶۹/۲۰	tr
۳۴۰	۸۴۷/۴۰	۸۵۱/۵۲	۸۴۷/۴۰	tr	۳۸۲	۵۶۱/۷۰	۶۶۰/۱۹	۶۰۷/۲۰	t
۳۴۱	۸۴۱/۹۰	۸۹۶/۹۷	۸۲۴/۹۰	tr	۳۸۳	۶۴۴/۶۰	۶۹۴/۷۷	۶۴۸/۱۰	tr
۳۴۲	۶۹۲/۷۰	۶۱۴/۹۴	۶۸۴/۰۰	t	۳۸۴	۷۴۶/۸۰	۸۲۳/۴۱	۷۴۹/۳۰	v
۳۴۳	۶۲۲/۵۰	۶۰۰/۲۱	۶۲۵/۱۰	tr	۳۸۵	۸۴۸/۴۰	۹۵۰/۲۰	۸۴۱/۶۰	tr
۳۴۴	۷۳۱/۸۰	۷۳۳/۴۳	۷۷۵/۳۰	v	۳۸۶	۵۵۳/۵۰	۵۴۲/۱۷	۵۷۰/۱۰	tr
۳۴۵	۷۴۷/۰۰	۷۱۷/۳۸	۸۴۵/۱۰	tr	۳۸۷	۶۵۶/۹۰	۶۵۸/۷۲	۶۷۹/۷۰	t
۳۴۶	۸۶۴/۱۰	۸۰۳/۲۳	۸۵۶/۲۰	tr	۳۸۸	۷۵۹/۷۰	۷۶۴/۵۲	۷۶۳/۱۰	tr
۳۴۷	۵۹۹/۹۰	۵۵۱/۰۳	۵۸۶/۵۰	t	۳۸۹	۸۶۱/۹۰	۸۵۸/۳۰	۸۷۱/۳۰	v
۳۴۸	۷۰۰/۱۰	۶۳۷/۲۵	۶۸۳/۳۰	tr	۳۹۰	۹۶۳/۲۰	۹۴۶/۸۳	۹۶۹/۸۰	tr
۳۴۹	۸۰۰/۰۰	۷۰۳/۰۴	۸۱۰/۱۰	v	۳۹۱	۸۸۷/۸۰	۹۵۴/۹۹	۸۷۳/۴۰	tr
۳۵۰	۹۰۰/۰۰	۷۸۴/۵۲	۸۹۷/۵۰	tr	۳۹۲	۱۰۰۱/۸۰	۹۵۶/۴۲	۹۸۳/۲۰	t
۳۵۱	۱۰۰۰/۰۰	۸۵۱/۳۳	۹۹۴/۵۰	tr	۳۹۳	۷۴۱/۰۰	۷۳۳/۴۸	۷۴۷/۱۰	tr
۳۵۲	۱۱۰۰/۰۰	۹۴۲/۷۶	۱۱۴۴/۴۰	t	۳۹۴	۸۴۶/۶۰	۸۵۳/۵۶	۸۲۲/۷۰	v
۳۵۳	۱۲۰۰/۰۰	۱۰۱۷/۱۴	۱۱۹۲/۸۰	tr	۳۹۵	۹۵۰/۴۰	۹۵۶/۱۵	۹۵۸/۶۰	tr
۳۵۴	۶۷۳/۴۰	۶۲۹/۲۳	۶۳۰/۶۰	v	۳۹۶	۱۰۵۰/۱۰	۱۰۹۳/۴۳	۱۰۳۸/۴۰	tr
۳۵۵	۹۹۴/۵۰	۹۶۰/۳۸	۹۹۱/۷۰	tr	۳۹۷	۸۰۶/۶۰	۸۱۲/۰۰	۸۰۷/۸۰	t
۳۵۶	۶۸۳/۱۰	۶۹۸/۹۱	۶۸۱/۹۰	tr	۳۹۸	۱۱۴۹/۵۰	۱۲۳۲/۴۴	۱۱۴۹/۹۰	tr
۳۵۷	۷۸۸/۰۰	۸۵۸/۴۸	۸۳۶/۱۰	t	۳۹۹	۸۴۰/۱۰	۶۹۲/۱۶	۸۷۸/۰۰	v
۳۵۸	۸۷۹/۵۰	۹۰۷/۴۹	۸۷۴/۹۰	tr	۴۰۰	۵۷۱/۹۰	۵۷۱/۶۰	۵۶۷/۱۰	tr
۳۵۹	۹۶۹/۹۰	۹۷۷/۹۹	۹۷۱/۷۰	v	۴۰۱	۶۷۵/۶۰	۶۹۸/۹۹	۶۶۶/۶۰	tr
۳۶۰	۱۰۶۹/۴۰	۱۰۸۵/۲۶	۱۰۷۱/۶۰	tr	۴۰۲	۷۷۹/۰۰	۸۰۴/۸۸	۷۷۴/۹۰	t
۳۶۱	۵۵۱/۴۰	۵۵۷/۶۰	۵۵۸/۶۰	tr	۴۰۳	۸۸۰/۹۰	۸۹۵/۸۵	۸۸۲/۸۰	tr
۳۶۲	۶۵۰/۷۰	۶۵۲/۳۰	۶۲۹/۷۰	t	۴۰۴	۸۷۲/۶۰	۹۴۱/۳۰	۸۸۱/۹۰	v
۳۶۳	۷۴۲/۷۰	۷۴۱/۷۸	۷۳۳/۷۰	tr	۴۰۵	۷۴۰/۳۰	۶۵۹/۲۷	۷۳۶/۰۰	tr
۳۶۴	۸۴۶/۴۰	۸۵۴/۳۷	۸۳۳/۵۰	v	۴۰۶	۶۶۱/۸۰	۶۴۴/۵۴	۶۶۴/۲۰	tr
۳۶۵	۹۴۷/۷۰	۹۶۳/۱۳	۹۳۷/۴۰	tr	۴۰۷	۷۸۶/۷۰	۷۷۷/۷۶	۸۲۹/۰۰	t
۳۶۶	۱۰۴۸/۸۰	۱۰۶۷/۹۵	۱۰۳۳/۴۰	tr	۴۰۸	۸۷۵/۳۰	۷۶۱/۷۱	۸۹۵/۲۰	tr
۳۶۷	۱۱۵۰/۰۰	۱۱۷۵/۱۲	۱۱۷۱/۶۰	t	۴۰۹	۸۶۷/۴۰	۸۴۷/۵۶	۸۵۸/۸۰	v
۳۶۸	۷۱۹/۱۰	۷۵۱/۸۱	۷۱۷/۶۰	tr	۴۱۰	۶۰۰/۰۰	۵۹۵/۳۶	۵۹۲/۰۰	tr
۳۶۹	۸۵۵/۱۰	۸۹۵/۵۸	۸۶۵/۹۰	v	۴۱۱	۷۰۰/۰۰	۶۸۱/۵۸	۶۸۶/۲۰	tr
۳۷۰	۹۶۳/۳۰	۹۹۳/۱۲	۹۶۸/۶۰	tr	۴۱۲	۸۰۰/۰۰	۷۴۷/۳۷	۸۱۳/۳۰	t
۳۷۱	۱۰۷۸/۳۰	۱۱۲۶/۱۹	۱۰۸۳/۰۰	tr	۴۱۳	۹۰۰/۰۰	۸۲۸/۸۵	۸۹۳/۹۰	tr
۳۷۲	۱۱۷۶/۳۰	۱۲۲۳/۰۶	۱۱۸۹/۱۰	t	۴۱۴	۱۰۰۰/۰۰	۸۹۵/۶۶	۹۸۹/۸۰	v

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۴۱۵	۱۱۰۰/۰۰	۹۸۷/۰۹	۱۱۳۱/۹۰	tr	۴۵۷	۹۶۴/۴۰	۹۱۱/۳۷	۹۵۱/۰۰	t
۴۱۶	۱۲۰۰/۰۰	۱۰۶۱/۴۷	۱۱۹۲/۸۰	tr	۴۵۸	۱۰۶۹/۷۰	۱۰۱۳/۹۷	۱۰۷۰/۶۰	tr
۴۱۷	۶۷۵/۷۰	۶۷۳/۵۶	۶۵۴/۱۰	t	۴۵۹	۱۱۶۷/۷۰	۱۱۵۱/۲۵	۱۱۶۱/۶۰	v
۴۱۸	۹۹۹/۳۰	۱۰۰۴/۷۱	۱۰۰۷/۴۰	tr	۴۶۰	۹۱۹/۹۰	۸۶۹/۸۲	۹۱۹/۸۰	tr
۴۱۹	۷۱۷/۸۰	۷۵۶/۷۳	۷۳۰/۲۰	v	۴۶۱	۱۲۶۶/۰۰	۱۲۹۰/۲۵	۱۲۶۰/۱۰	tr
۴۲۰	۸۲۴/۸۰	۹۱۶/۲۹	۸۷۲/۷۰	tr	۴۶۲	۸۷۶/۷۰	۷۴۹/۹۷	۸۹۲/۷۰	t
۴۲۱	۹۱۵/۰۰	۹۶۵/۳۱	۹۱۰/۷۰	tr	۴۶۳	۶۱۰/۱۰	۶۲۹/۴۱	۶۰۸/۵۰	tr
۴۲۲	۱۰۰۵/۱۰	۱۰۳۵/۸۱	۱۰۰۳/۶۰	t	۴۶۴	۷۱۵/۴۰	۷۵۶/۸۱	۷۰۱/۷۰	v
۴۲۳	۱۱۰۵/۳۰	۱۱۴۳/۰۸	۱۱۰۴/۰۰	tr	۴۶۵	۸۱۹/۹۰	۸۶۲/۶۹	۸۱۳/۴۰	tr
۴۲۴	۶۴۴/۰۰	۶۱۵/۴۱	۶۶۰/۵۰	v	۴۶۶	۹۲۲/۶۰	۹۵۳/۶۶	۹۳۱/۲۰	tr
۴۲۵	۷۴۰/۰۰	۷۱۰/۱۲	۷۳۲/۲۰	tr	۴۶۷	۹۱۹/۳۰	۹۹۹/۱۲	۹۵۵/۰۰	t
۴۲۶	۸۳۲/۴۰	۷۹۹/۵۹	۸۲۵/۴۰	tr	۴۶۸	۸۰۸/۷۰	۷۱۷/۰۹	۸۰۰/۵۰	tr
۴۲۷	۹۳۷/۸۰	۹۱۲/۱۸	۹۲۹/۶۰	t	۴۶۹	۷۱۶/۲۰	۷۰۲/۳۵	۷۱۳/۵۰	v
۴۲۸	۱۰۴۰/۰۰	۱۰۲۰/۹۴	۱۰۳۷/۷۰	tr	۴۷۰	۸۶۵/۶۰	۸۳۵/۵۷	۸۹۶/۴۰	tr
۴۲۹	۱۱۴۱/۹۰	۱۱۲۵/۷۷	۱۱۲۲/۴۰	v	۴۷۱	۱۰۲۸/۰۰	۸۱۹/۵۳	۹۵۷/۸۰	tr
۴۳۰	۱۲۴۳/۹۰	۱۲۳۲/۹۴	۱۲۴۷/۳۰	tr	۴۷۲	۸۷۶/۷۰	۹۰۵/۳۷	۸۶۶/۴۰	t
۴۳۱	۸۱۴/۸۰	۸۰۹/۶۲	۸۱۳/۱۰	tr	۴۷۳	۶۰۰/۱۰	۶۵۳/۱۷	۵۹۸/۸۰	tr
۴۳۲	۹۶۱/۳۰	۹۵۳/۳۹	۹۵۰/۱۰	t	۴۷۴	۷۰۰/۱۰	۷۳۹/۳۹	۶۹۰/۱۰	v
۴۳۳	۱۰۷۲/۹۰	۱۰۵۰/۹۴	۱۰۷۱/۱۰	tr	۴۷۵	۸۰۰/۰۰	۸۰۵/۱۹	۸۱۷/۸۰	tr
۴۳۴	۱۱۸۹/۰۰	۱۱۸۴/۰۱	۱۱۹۵/۴۰	v	۴۷۶	۹۰۰/۱۰	۸۸۶/۶۶	۸۹۰/۵۰	tr
۴۳۵	۱۲۸۳/۱۰	۱۲۸۰/۸۸	۱۲۹۶/۸۰	tr	۴۷۷	۱۰۰۰/۰۰	۹۵۳/۴۸	۹۸۵/۳۰	t
۴۳۶	۶۱۵/۵۰	۵۸۵/۲۰	۵۹۹/۴۰	tr	۴۷۸	۱۱۰۰/۰۰	۱۰۴۴/۹۱	۱۱۱۶/۶۰	tr
۴۳۷	۷۲۴/۲۰	۷۱۶/۷۳	۷۰۳/۹۰	t	۴۷۹	۱۲۰۰/۰۰	۱۱۱۹/۲۸	۱۱۹۱/۹۰	v
۴۳۸	۸۳۱/۰۰	۸۶۹/۳۸	۷۹۹/۰۰	tr	۴۸۰	۶۸۳/۲۰	۷۳۱/۳۸	۶۸۲/۵۰	tr
۴۳۹	۹۳۵/۱۰	۹۳۴/۳۷	۹۱۶/۲۰	v	۴۸۱	۱۰۱۴/۴۰	۱۰۶۲/۵۳	۱۰۲۶/۸۰	tr
۴۴۰	۱۰۳۸/۱۰	۱۰۳۲/۷۱	۱۰۲۲/۲۰	tr	۴۸۲	۷۴۵/۹۰	۷۹۸/۲۷	۷۶۲/۹۰	t
۴۴۱	۱۱۴۰/۵۰	۱۱۳۰/۶۲	۱۱۳۱/۵۰	tr	۴۸۳	۸۵۳/۸۰	۹۵۷/۸۳	۹۰۱/۲۰	tr
۴۴۲	۱۲۴۲/۳۰	۱۲۳۰/۷۳	۱۲۴۱/۸۰	t	۴۸۴	۹۴۲/۹۰	۱۰۰۶/۸۵	۹۴۱/۳۰	v
۴۴۳	۹۶۹/۵۰	۱۰۳۶/۱۷	۹۵۹/۹۰	tr	۴۸۵	۱۰۳۲/۹۰	۱۰۷۷/۳۵	۱۰۳۱/۳۰	tr
۴۴۴	۸۰۶/۹۰	۷۷۰/۸۱	۷۹۸/۵۰	v	۴۸۶	۱۱۳۳/۴۰	۱۱۸۴/۶۲	۱۱۲۸/۶۰	tr
۴۴۵	۶۳۰/۶۰	۷۱۸/۰۰	۶۵۹/۵۰	tr	۴۸۷	۷۰۷/۳۰	۶۵۶/۹۵	۷۲۲/۰۰	t
۴۴۶	۷۱۳/۵۰	۷۵۲/۵۹	۷۱۱/۳۰	tr	۴۸۸	۸۰۰/۴۰	۷۵۱/۶۶	۸۰۴/۵۰	tr
۴۴۷	۸۱۶/۸۰	۸۸۱/۲۲	۸۱۴/۹۰	t	۴۸۹	۸۹۲/۷۰	۸۴۱/۱۳	۸۹۳/۱۰	v
۴۴۸	۹۱۹/۱۰	۱۰۰۸/۰۲	۹۱۸/۵۰	tr	۴۹۰	۹۹۹/۸۰	۹۵۳/۷۲	۹۹۷/۱۰	tr
۴۴۹	۶۰۳/۳۰	۵۹۹/۹۹	۶۱۶/۴۰	v	۴۹۱	۱۱۰۲/۶۰	۱۰۶۲/۴۸	۱۱۱۰/۶۰	tr
۴۵۰	۷۰۶/۴۰	۷۱۶/۵۳	۷۱۸/۹۰	tr	۴۹۲	۱۲۰۵/۳۰	۱۱۶۷/۳۱	۱۱۹۲/۲۰	t
۴۵۱	۸۰۸/۸۰	۸۲۲/۳۳	۸۰۰/۰۰	tr	۴۹۳	۱۳۰۷/۷۰	۱۲۷۴/۴۸	۱۳۰۶/۹۰	tr
۴۵۲	۹۱۰/۴۰	۹۱۶/۱۱	۹۰۹/۶۰	t	۴۹۴	۸۸۱/۸۰	۸۵۱/۱۶	۸۸۳/۲۰	v
۴۵۳	۱۰۱۲/۲۰	۱۰۰۴/۶۴	۱۰۱۰/۴۰	tr	۴۹۵	۱۰۳۵/۶۰	۹۹۴/۹۳	۱۰۱۴/۸۰	tr
۴۵۴	۹۴۴/۴۰	۱۰۱۲/۸۱	۹۳۵/۸۰	v	۴۹۶	۱۱۴۹/۴۰	۱۰۹۲/۴۸	۱۱۵۰/۴۰	tr
۴۵۵	۱۰۸۲/۹۰	۱۰۱۴/۲۳	۱۰۷۱/۰۰	tr	۴۹۷	۱۲۶۶/۹۰	۱۲۲۵/۵۵	۱۲۷۶/۲۰	t
۴۵۶	۸۵۶/۳۰	۷۹۱/۲۹	۸۴۳/۲۰	tr	۴۹۸	۱۳۵۹/۴۰	۱۳۲۲/۴۲	۱۳۷۶/۰۰	tr

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۴۹۹	۶۵۳/۳۰	۶۶۶/۷۴	۶۳۹/۸۰	v
۵۰۰	۷۶۱/۷۰	۷۵۸/۲۷	۷۴۱/۴۰	tr
۵۰۱	۸۶۹/۲۰	۸۷۰/۹۲	۸۳۷/۰۰	tr
۵۰۲	۹۷۳/۹۰	۹۷۵/۹۱	۹۵۶/۰۰	t
۵۰۳	۱۰۷۷/۶۰	۱۰۷۴/۲۵	۱۰۶۵/۰۰	tr
۵۰۴	۱۱۸۰/۸۰	۱۱۷۲/۱۶	۱۱۷۵/۴۰	v
۵۰۵	۱۲۸۳/۶۰	۱۲۷۲/۲۷	۱۲۸۱/۹۰	tr
۵۰۶	۱۰۱۴/۶۰	۱۰۷۷/۷۱	۱۰۱۴/۱۰	tr
۵۰۷	۸۴۰/۸۰	۸۱۲/۳۵	۸۲۶/۳۰	t
۵۰۸	۶۷۸/۶۰	۷۵۹/۵۴	۶۹۷/۰۰	tr
۵۰۹	۷۶۰/۱۰	۷۹۴/۱۳	۷۵۱/۳۰	v
۵۱۰	۸۶۴/۷۰	۹۲۲/۷۶	۸۵۷/۱۰	tr
۵۱۱	۹۶۷/۶۰	۱۰۴۹/۵۶	۹۷۲/۵۰	tr
۵۱۲	۶۳۳/۴۰	۶۴۱/۵۳	۶۵۰/۲۰	t
۵۱۳	۷۳۹/۲۰	۷۵۸/۰۷	۷۴۹/۱۰	tr
۵۱۴	۸۴۴/۴۰	۸۶۳/۸۷	۸۳۰/۴۰	v
۵۱۵	۹۴۷/۰۰	۹۵۷/۶۵	۹۴۲/۲۰	tr
۵۱۶	۱۰۴۹/۳۰	۱۰۴۶/۱۸	۱۰۴۳/۵۰	tr
۵۱۷	۹۸۵/۵۰	۱۰۵۴/۳۵	۹۸۴/۶۰	t
۵۱۸	۱۱۴۶/۰۰	۱۰۵۵/۷۷	۱۱۳۲/۳۰	tr
۵۱۹	۹۳۳/۱۰	۸۳۲/۸۳	۹۱۴/۲۰	v
۵۲۰	۱۰۴۲/۵۰	۹۵۲/۹۱	۱۰۳۶/۹۰	tr
۵۲۱	۱۱۴۸/۹۰	۱۰۵۵/۵۱	۱۱۵۲/۰۰	tr
۵۲۲	۱۲۴۹/۱۰	۱۱۹۲/۷۹	۱۲۵۵/۸۰	t
۵۲۳	۹۹۶/۳۰	۹۱۱/۳۶	۹۹۵/۴۰	tr
۵۲۴	۱۳۴۷/۵۰	۱۳۳۱/۷۹	۱۳۴۵/۳۰	v
۵۲۵	۹۰۴/۳۰	۷۹۱/۵۱	۹۰۲/۸۰	tr
۵۲۶	۶۳۶/۴۰	۶۷۰/۹۵	۶۳۹/۵۰	tr
۵۲۷	۷۴۲/۸۰	۷۹۸/۳۵	۷۳۰/۳۰	t
۵۲۸	۸۴۸/۲۰	۹۰۴/۲۳	۸۴۵/۵۰	tr
۵۲۹	۹۵۱/۵۰	۹۹۵/۲۰	۹۶۴/۱۰	v
۵۳۰	۹۵۵/۲۰	۱۰۴۰/۶۶	۱۰۰۷/۳۰	tr
۵۳۱	۸۵۸/۶۰	۷۵۸/۶۳	۸۴۴/۷۰	tr
۵۳۲	۷۵۶/۰۰	۷۴۳/۸۹	۷۴۷/۷۰	t
۵۳۳	۹۲۱/۸۰	۸۷۷/۱۱	۹۴۳/۰۰	tr
۵۳۴	۱۱۳۲/۴۰	۸۶۱/۰۷	۱۰۰۰/۸۰	v
۵۳۵	۸۸۳/۹۰	۹۴۶/۹۱	۸۷۵/۷۰	tr
۵۳۶	۶۰۰/۲۰	۶۹۴/۷۱	۶۰۳/۴۰	tr
۵۳۷	۷۰۰/۰۰	۷۸۰/۹۳	۶۹۳/۰۰	t
۵۳۸	۷۹۹/۹۰	۸۴۶/۷۳	۸۲۱/۳۰	tr
۵۳۹	۸۹۹/۹۰	۹۲۸/۲۰	۸۸۹/۰۰	v
۵۴۰	۱۰۰۰/۰۰	۹۹۵/۵۲	۹۸۳/۰۰	tr

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۵۴۱	۱۱۰۰/۰۰	۱۰۸۶/۴۵	۱۱۰۶/۵۰	tr
۵۴۲	۱۲۰۰/۰۰	۱۱۶۰/۸۲	۱۱۹۱/۰۰	t
۵۴۳	۶۹۰/۵۰	۷۷۲/۹۲	۷۰۱/۳۰	tr
۵۴۴	۱۰۲۸/۵۰	۱۱۰۴/۰۷	۱۰۴۱/۴۰	v
۵۴۵	۸۰۰/۱۰	۸۶۸/۶۴	۸۱۴/۶۰	tr
۵۴۶	۹۰۹/۴۰	۱۰۲۸/۲۰	۹۵۵/۹۰	tr
۵۴۷	۹۹۶/۷۰	۱۰۷۷/۲۲	۱۰۰۳/۲۰	t
۵۴۸	۱۰۸۶/۴۰	۱۱۴۷/۷۲	۱۰۸۸/۰۰	tr
۵۴۹	۱۱۸۷/۴۰	۱۲۵۴/۹۹	۱۱۷۵/۹۰	v
۵۵۰	۸۱۴/۴۰	۷۲۷/۳۲	۸۰۲/۴۰	tr
۵۵۱	۹۰۱/۵۰	۸۲۲/۰۳	۹۱۷/۹۰	tr
۵۵۲	۹۹۳/۶۰	۹۱۱/۵۰	۱۰۰۴/۵۰	t
۵۵۳	۱۱۰۲/۶۰	۱۰۲۴/۰۹	۱۱۰۱/۸۰	tr
۵۵۴	۱۲۰۶/۳۰	۱۱۳۲/۸۵	۱۲۲۸/۶۰	v
۵۵۵	۱۳۱۰/۰۰	۱۲۳۷/۶۸	۱۳۱۸/۶۰	tr
۵۵۶	۱۴۱۳/۱۰	۱۳۴۴/۸۵	۱۴۲۰/۵۰	tr
۵۵۷	۹۹۶/۲۰	۹۲۱/۵۳	۱۰۰۶/۹۰	t
۵۵۸	۱۱۶۰/۷۰	۱۰۶۵/۳۰	۱۱۳۴/۱۰	tr
۵۵۹	۱۲۷۷/۹۰	۱۱۶۲/۸۵	۱۲۹۹/۸۰	v
۵۶۰	۱۳۹۸/۳۰	۱۲۹۵/۹۲	۱۴۰۵/۴۰	tr
۵۶۱	۱۴۸۹/۴۰	۱۳۹۲/۷۹	۱۵۰۵/۷۰	tr
۵۶۲	۷۱۲/۹۰	۶۹۷/۱۱	۷۱۳/۰۰	t
۵۶۳	۸۲۳/۳۰	۸۲۸/۶۴	۸۱۲/۱۰	tr
۵۶۴	۹۳۲/۵۰	۹۴۱/۲۹	۹۰۸/۷۰	v
۵۶۵	۱۰۳۸/۱۰	۱۰۴۶/۲۸	۱۰۲۸/۸۰	tr
۵۶۶	۱۱۴۲/۳۰	۱۱۴۴/۶۲	۱۱۴۱/۳۰	tr
۵۶۷	۱۲۴۵/۵۰	۱۲۴۲/۵۳	۱۲۵۴/۷۰	t
۵۶۸	۱۳۴۸/۱۰	۱۳۴۲/۶۴	۱۳۵۹/۵۰	tr
۵۶۹	۱۰۹۰/۷۰	۱۱۴۸/۰۸	۱۱۱۳/۳۰	v
۵۷۰	۸۹۶/۰۰	۸۸۲/۷۲	۸۸۷/۷۰	tr
۵۷۱	۷۶۲/۴۰	۸۲۹/۹۱	۷۶۲/۸۰	tr
۵۷۲	۸۴۰/۲۰	۸۶۴/۵۰	۸۰۷/۱۰	t
۵۷۳	۹۴۵/۵۰	۹۹۳/۱۳	۹۱۹/۰۰	tr
۵۷۴	۱۰۴۹/۴۰	۱۱۱۹/۹۳	۱۰۵۸/۳۰	v
۵۷۵	۶۸۷/۰۰	۷۱۱/۹۰	۷۱۱/۱۰	tr
۵۷۶	۷۸۷/۵۰	۸۲۸/۴۴	۸۰۶/۷۰	tr
۵۷۷	۸۹۰/۳۰	۹۳۴/۲۴	۸۸۹/۸۰	t
۵۷۸	۹۹۳/۶۰	۱۰۲۸/۰۲	۱۰۰۲/۸۰	tr
۵۷۹	۱۰۹۵/۵۰	۱۱۱۶/۵۵	۱۰۹۹/۴۰	v
۵۸۰	۱۰۴۲/۱۰	۱۱۲۴/۷۲	۱۰۷۵/۳۰	tr
۵۸۱	۱۲۶۵/۰۰	۱۱۲۶/۱۴	۱۲۳۳/۲۰	tr
۵۸۲	۱۰۶۰/۳۰	۹۰۳/۲۰	۱۰۴۰/۹۰	t

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۵۸۳	۱۱۷۱/۸۰	۱۰۲۳/۲۸	۱۱۸۲/۲۰	tr	۶۲۵	۵۲۳/۳۰	۴۸۸/۱۲	۵۰۴/۰۰	tr
۵۸۴	۱۲۷۹/۶۰	۱۱۲۵/۸۸	۱۲۹۳/۶۰	v	۶۲۶	۶۳۹/۴۰	۶۱۹/۶۴	۶۲۰/۶۰	tr
۵۸۵	۱۳۸۸/۷۰	۱۲۶۳/۱۶	۱۴۲۸/۱۰	tr	۶۲۷	۷۴۴/۱۰	۷۳۲/۲۹	۷۱۹/۴۰	t
۵۸۶	۱۱۲۶/۲۰	۹۸۱/۷۳	۱۱۱۸/۰۰	tr	۶۲۸	۸۴۷/۲۰	۸۳۷/۲۸	۸۳۳/۳۰	tr
۵۸۷	۱۴۸۹/۱۰	۱۴۰۲/۱۶	۱۴۹۳/۱۰	t	۶۲۹	۹۴۹/۴۰	۹۳۵/۶۳	۹۳۸/۰۰	v
۵۸۸	۹۵۳/۵۰	۸۶۱/۸۸	۹۱۹/۳۰	tr	۶۳۰	۱۰۵۱/۳۰	۱۰۳۳/۵۳	۱۰۴۸/۱۰	tr
۵۸۹	۶۸۲/۸۰	۷۴۱/۳۲	۶۹۷/۳۰	v	۶۳۱	۱۱۵۲/۶۰	۱۱۳۳/۶۴	۱۱۶۹/۳۰	tr
۵۹۰	۷۹۱/۲۰	۸۶۸/۷۲	۷۸۶/۷۰	tr	۶۳۲	۸۷۵/۱۰	۹۳۹/۰۸	۸۴۲/۵۰	t
۵۹۱	۸۹۸/۰۰	۹۷۴/۶۰	۹۰۳/۵۰	tr	۶۳۳	۷۱۸/۳۰	۶۷۳/۷۳	۷۵۰/۸۰	tr
۵۹۲	۱۰۰۲/۰۰	۱۰۶۵/۵۷	۱۰۱۰/۴۰	t	۶۳۴	۵۱۰/۸۰	۶۲۰/۹۲	۵۶۸/۰۰	v
۵۹۳	۱۰۲۲/۴۰	۱۱۱۱/۰۳	۱۰۹۷/۵۰	tr	۶۳۵	۵۸۹/۶۰	۶۵۵/۵۰	۵۹۵/۹۰	tr
۵۹۴	۹۴۶/۰۰	۸۲۹/۰۰	۹۱۵/۱۰	v	۶۳۶	۶۸۹/۷۰	۷۸۴/۱۴	۶۹۶/۴۰	tr
۵۹۵	۸۲۲/۱۰	۸۱۴/۲۶	۸۰۲/۸۰	tr	۶۳۷	۷۹۰/۴۰	۹۱۰/۹۳	۷۸۶/۳۰	t
۵۹۶	۱۰۱۱/۰۰	۹۴۷/۴۸	۱۰۱۸/۲۰	tr	۶۳۸	۵۲۸/۴۰	۵۰۲/۹۰	۵۳۵/۳۰	tr
۵۹۷	۱۲۹۲/۰۰	۹۳۱/۴۴	۱۰۶۹/۸۰	t	۶۳۹	۶۲۷/۹۰	۶۱۹/۴۵	۶۵۱/۹۰	v
۵۹۸	۸۹۷/۹۰	۱۰۱۷/۲۸	۹۰۱/۲۰	tr	۶۴۰	۷۳۱/۰۰	۷۲۵/۲۵	۷۳۹/۳۰	tr
۵۹۹	۵۹۹/۵۰	۷۶۵/۰۸	۶۱۰/۸۰	v	۶۴۱	۸۳۲/۴۰	۸۱۹/۰۳	۸۴۸/۰۰	tr
۶۰۰	۷۰۰/۰۰	۸۵۱/۳۰	۶۹۸/۱۰	tr	۶۴۲	۹۳۴/۱۰	۹۰۷/۵۶	۹۴۷/۷۰	t
۶۰۱	۸۰۰/۱۰	۹۱۷/۱۰	۸۲۷/۴۰	tr	۶۴۳	۸۶۲/۴۰	۹۱۵/۷۲	۸۳۴/۶۰	tr
۶۰۲	۹۰۰/۱۰	۹۹۸/۵۷	۸۸۸/۳۰	t	۶۴۴	۹۵۷/۹۰	۹۱۷/۱۵	۹۲۱/۴۰	v
۶۰۳	۱۰۰۰/۰۰	۱۰۶۵/۳۹	۹۸۰/۹۰	tr	۶۴۵	۶۴۰/۶۰	۶۹۴/۲۱	۶۸۱/۴۰	tr
۶۰۴	۱۱۰۰/۰۰	۱۱۵۶/۸۲	۱۰۹۱/۶۰	v	۶۴۶	۷۴۴/۲۰	۸۱۴/۲۹	۷۴۷/۸۰	tr
۶۰۵	۱۲۰۰/۰۰	۱۲۳۱/۱۹	۱۱۸۹/۵۰	tr	۶۴۷	۸۴۷/۰۰	۹۱۶/۸۸	۸۷۹/۲۰	t
۶۰۶	۷۰۵/۸۰	۸۴۳/۲۹	۷۳۰/۳۰	tr	۶۴۸	۹۶۱/۵۰	۱۰۵۴/۱۶	۹۶۱/۳۰	tr
۶۰۷	۱۰۵۸/۲۰	۱۱۷۴/۴۴	۱۰۷۰/۶۰	t	۶۴۹	۷۱۰/۸۰	۷۷۲/۷۳	۷۲۵/۲۰	v
۶۰۸	۶۶۸/۴۰	۶۵۹/۶۴	۶۴۹/۳۰	tr	۶۵۰	۱۰۶۵/۹۰	۱۱۹۳/۱۷	۱۰۸۴/۶۰	tr
۶۰۹	۷۷۱/۱۰	۸۱۹/۲۱	۸۱۱/۴۰	v	۶۵۱	۸۱۹/۶۰	۶۵۲/۸۹	۸۶۷/۰۰	tr
۶۱۰	۸۶۳/۹۰	۸۶۸/۲۲	۸۵۶/۱۰	tr	۶۵۲	۵۴۲/۰۰	۵۳۲/۳۳	۵۳۵/۷۰	t
۶۱۱	۹۵۴/۶۰	۹۳۸/۷۲	۹۵۶/۰۰	tr	۶۵۳	۶۴۵/۶۰	۶۵۹/۷۲	۶۴۱/۲۰	tr
۶۱۲	۱۰۵۳/۶۰	۱۰۴۵/۹۹	۱۰۵۴/۰۰	t	۶۵۴	۷۴۸/۳۰	۷۶۵/۶۱	۷۵۱/۸۰	v
۶۱۳	۴۷۹/۹۰	۵۱۸/۳۳	۴۷۸/۵۰	tr	۶۵۵	۸۵۰/۰۰	۸۵۶/۵۸	۸۴۹/۷۰	tr
۶۱۴	۵۸۰/۵۰	۶۱۳/۰۳	۵۵۵/۶۰	v	۶۵۶	۸۴۸/۹۰	۹۰۲/۰۳	۸۳۰/۷۰	tr
۶۱۵	۶۷۰/۰۰	۷۰۲/۵۱	۶۷۰/۵۰	tr	۶۵۷	۶۹۶/۰۰	۶۲۰/۰۰	۶۸۹/۱۰	t
۶۱۶	۷۷۱/۱۰	۸۱۵/۱۰	۷۶۵/۸۰	tr	۶۵۸	۶۲۵/۹۰	۶۰۵/۲۷	۶۲۷/۴۰	tr
۶۱۷	۸۷۱/۳۰	۹۲۳/۸۶	۸۶۹/۳۰	t	۶۵۹	۷۳۵/۹۰	۷۳۸/۴۹	۷۸۱/۰۰	v
۶۱۸	۹۷۱/۷۰	۱۰۲۸/۶۸	۹۷۶/۲۰	tr	۶۶۰	۷۵۰/۳۰	۷۲۲/۴۴	۸۴۹/۶۰	tr
۶۱۹	۱۰۷۲/۴۰	۱۱۳۵/۸۵	۱۱۲۱/۸۰	v	۶۶۱	۸۶۲/۸۰	۸۰۸/۲۹	۸۵۷/۱۰	tr
۶۲۰	۶۴۴/۸۰	۷۱۲/۵۴	۶۵۰/۰۰	tr	۶۶۲	۶۰۰/۰۰	۵۵۶/۰۹	۵۸۵/۲۰	t
۶۲۱	۷۷۴/۶۰	۸۵۶/۳۱	۸۱۰/۰۰	tr	۶۶۳	۷۰۰/۱۰	۶۴۲/۳۱	۶۸۲/۸۰	tr
۶۲۲	۸۸۲/۰۰	۹۵۳/۸۵	۹۰۴/۶۰	t	۶۶۴	۸۰۰/۰۰	۷۰۸/۱۰	۸۰۶/۸۰	v
۶۲۳	۹۹۸/۷۰	۱۰۸۶/۹۲	۱۰۰۶/۵۰	tr	۶۶۵	۹۰۰/۰۰	۷۸۹/۵۸	۸۹۵/۰۰	tr
۶۲۴	۱۱۰۳/۹۰	۱۱۸۳/۷۹	۱۱۱۸/۹۰	v	۶۶۶	۱۰۰۰/۰۰	۸۵۶/۳۹	۹۹۲/۰۰	tr

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۶۶۷	۱۱۰۰/۰۰	۹۴۷/۸۲	۱۱۴۴/۹۰	t	۷۰۹	۸۵۰/۵۰	۸۵۸/۶۲	۸۳۸/۴۰	v
۶۶۸	۱۲۰۰/۰۰	۱۰۲۲/۲۰	۱۱۹۵/۵۰	tr	۷۱۰	۹۵۴/۶۰	۹۶۱/۲۱	۹۶۵/۶۰	tr
۶۶۹	۶۷۹/۵۰	۶۳۴/۲۹	۶۲۹/۶۰	v	۷۱۱	۱۰۶۰/۰۰	۱۰۹۸/۴۹	۱۰۵۰/۳۰	tr
۶۷۰	۱۰۰۴/۷۰	۹۶۵/۴۴	۹۹۴/۴۰	tr	۷۱۲	۸۱۱/۰۰	۸۱۷/۰۶	۸۱۷/۱۰	t
۶۷۱	۶۸۸/۰۰	۷۰۳/۹۷	۶۸۸/۹۰	tr	۷۱۳	۱۱۶۱/۹۰	۱۲۳۷/۵۰	۱۱۶۰/۱۰	tr
۶۷۲	۷۹۳/۴۰	۸۶۳/۵۴	۸۳۸/۳۰	t	۷۱۴	۸۴۷/۳۰	۶۹۷/۲۲	۸۷۸/۸۰	v
۶۷۳	۸۸۵/۱۰	۹۱۲/۵۵	۸۷۹/۵۰	tr	۷۱۵	۵۷۲/۶۰	۵۷۶/۶۶	۵۶۷/۱۰	tr
۶۷۴	۹۷۵/۸۰	۹۸۳/۰۵	۹۷۶/۸۰	v	۷۱۶	۶۷۷/۷۰	۷۰۴/۰۵	۶۶۵/۹۰	tr
۶۷۵	۱۰۷۵/۴۰	۱۰۹۰/۳۲	۱۰۷۸/۶۰	tr	۷۱۷	۷۸۱/۶۰	۸۰۹/۹۴	۷۷۶/۱۰	t
۶۷۶	۵۵۱/۳۰	۵۶۲/۶۶	۵۶۵/۹۰	tr	۷۱۸	۸۸۴/۲۰	۹۰۰/۹۱	۸۸۵/۳۰	tr
۶۷۷	۶۵۱/۹۰	۶۵۷/۳۶	۶۳۳/۸۰	t	۷۱۹	۸۸۰/۳۰	۹۴۶/۳۶	۸۸۷/۸۰	v
۶۷۸	۷۴۴/۰۰	۷۴۶/۸۴	۷۳۷/۳۰	tr	۷۲۰	۷۴۳/۴۰	۶۶۴/۳۲	۷۴۱/۰۰	tr
۶۷۹	۸۴۸/۱۰	۸۵۹/۴۳	۸۳۸/۴۰	v	۷۲۱	۶۶۵/۲۰	۶۴۹/۶۰	۶۶۶/۷۰	tr
۶۸۰	۹۴۹/۴۰	۹۶۸/۱۹	۹۴۳/۱۰	tr	۷۲۲	۷۹۱/۹۰	۷۸۲/۸۲	۸۳۴/۷۰	t
۶۸۱	۱۰۵۰/۷۰	۱۰۷۳/۰۱	۱۰۳۸/۹۰	tr	۷۲۳	۸۷۹/۸۰	۷۶۶/۷۷	۸۹۹/۷۰	tr
۶۸۲	۱۱۵۲/۱۰	۱۱۸۰/۱۸	۱۱۷۶/۹۰	t	۷۲۴	۸۶۵/۷۰	۸۵۲/۶۲	۸۶۰/۰۰	v
۶۸۳	۷۲۲/۸۰	۷۵۶/۸۷	۷۲۲/۸۰	tr	۷۲۵	۶۰۰/۲۰	۶۰۰/۴۲	۵۹۰/۸۰	tr
۶۸۴	۸۶۱/۳۰	۹۰۰/۶۴	۸۷۳/۰۰	v	۷۲۶	۷۰۰/۰۰	۶۸۶/۶۴	۶۸۵/۷۰	tr
۶۸۵	۹۷۲/۱۰	۹۹۸/۱۸	۹۷۹/۳۰	tr	۷۲۷	۸۰۰/۰۰	۷۵۲/۴۳	۸۱۰/۱۰	t
۶۸۶	۱۰۸۸/۷۰	۱۱۳۱/۲۵	۱۰۸۹/۵۰	tr	۷۲۸	۹۰۰/۰۰	۸۳۳/۹۱	۸۹۱/۵۰	tr
۶۸۷	۱۱۸۸/۲۰	۱۲۲۸/۱۲	۱۱۹۵/۹۰	t	۷۲۹	۱۰۰۰/۰۰	۹۰۰/۷۲	۹۸۷/۵۰	v
۶۸۸	۵۶۷/۱۰	۵۳۲/۴۵	۵۴۶/۰۰	tr	۷۳۰	۱۱۰۰/۰۰	۹۹۲/۱۵	۱۱۳۲/۵۰	tr
۶۸۹	۶۷۴/۸۰	۶۶۳/۹۷	۶۵۶/۵۰	v	۷۳۱	۱۲۰۰/۰۰	۱۰۶۶/۵۳	۱۱۹۵/۵۰	tr
۶۹۰	۷۸۰/۴۰	۷۷۶/۶۲	۷۵۳/۲۰	tr	۷۳۲	۶۸۱/۱۰	۶۷۸/۶۲	۶۵۳/۲۰	t
۶۹۱	۸۸۳/۹۰	۸۸۱/۶۱	۸۶۶/۸۰	tr	۷۳۳	۱۰۱۰/۰۰	۱۰۰۹/۷۷	۱۰۱۰/۱۰	tr
۶۹۲	۹۸۶/۵۰	۹۷۹/۹۶	۹۷۲/۹۰	t	۷۳۴	۷۲۳/۸۰	۷۶۱/۷۹	۷۳۷/۲۰	v
۶۹۳	۱۰۸۸/۵۰	۱۰۷۷/۸۶	۱۰۸۲/۷۰	tr	۷۳۵	۸۳۰/۴۰	۹۲۱/۳۵	۸۷۵/۱۰	tr
۶۹۴	۱۱۹۰/۱۰	۱۱۷۷/۹۷	۱۱۹۹/۲۰	v	۷۳۶	۹۲۰/۸۰	۹۷۰/۳۷	۹۱۵/۷۰	tr
۶۹۵	۹۱۵/۹۰	۹۸۳/۴۱	۸۹۴/۶۰	tr	۷۳۷	۱۰۱۱/۳۰	۱۰۴۰/۸۷	۱۰۰۹/۱۰	t
۶۹۶	۷۵۸/۰۰	۷۱۸/۰۶	۷۶۷/۸۰	tr	۷۳۸	۱۱۱۱/۷۰	۱۱۴۸/۱۴	۱۱۱۱/۱۰	tr
۶۹۷	۵۵۹/۰۰	۶۶۵/۲۵	۶۰۸/۸۰	t	۷۳۹	۶۴۵/۷۰	۶۲۰/۴۷	۶۶۶/۷۰	v
۶۹۸	۶۴۱/۸۰	۶۹۹/۸۳	۶۴۷/۵۰	tr	۷۴۰	۷۴۲/۴۰	۷۱۵/۱۸	۷۳۶/۷۰	tr
۶۹۹	۷۴۴/۶۰	۸۲۸/۴۷	۷۴۹/۷۰	v	۷۴۱	۸۳۵/۱۰	۸۰۴/۶۵	۸۲۹/۶۰	tr
۷۰۰	۸۴۶/۷۰	۹۵۵/۲۶	۸۴۳/۷۰	tr	۷۴۲	۹۴۱/۱۰	۹۱۷/۲۴	۹۳۴/۷۰	t
۷۰۱	۵۵۰/۴۰	۵۴۷/۲۳	۵۷۱/۱۰	tr	۷۴۳	۱۰۴۳/۵۰	۱۰۲۶/۰۰	۱۰۴۳/۹۰	tr
۷۰۲	۶۵۵/۷۰	۶۶۳/۷۸	۶۸۱/۰۰	t	۷۴۴	۱۱۴۵/۸۰	۱۱۳۰/۸۳	۱۱۲۹/۰۰	v
۷۰۳	۷۵۹/۰۰	۷۶۹/۵۸	۷۶۴/۷۰	tr	۷۴۵	۱۲۴۷/۹۰	۱۲۳۸/۰۰	۱۲۵۳/۶۰	tr
۷۰۴	۸۶۱/۳۰	۸۶۳/۳۶	۸۷۲/۲۰	v	۷۴۶	۸۲۱/۸۰	۸۱۴/۶۸	۸۱۸/۴۰	tr
۷۰۵	۹۶۳/۱۰	۹۵۱/۸۹	۹۷۳/۰۰	tr	۷۴۷	۹۷۰/۸۰	۹۵۸/۴۵	۹۵۸/۳۰	t
۷۰۶	۸۹۳/۵۰	۹۶۰/۰۵	۸۷۹/۳۰	tr	۷۴۸	۱۰۸۵/۵۰	۱۰۵۶/۰۰	۱۰۸۲/۷۰	tr
۷۰۷	۱۰۰۸/۴۰	۹۶۱/۴۸	۹۹۰/۸۰	t	۷۴۹	۱۲۰۳/۱۰	۱۱۸۹/۰۷	۱۲۰۲/۲۰	v
۷۰۸	۷۴۴/۰۰	۷۳۸/۵۴	۷۵۵/۸۰	tr	۷۵۰	۱۲۹۸/۷۰	۱۲۸۵/۹۴	۱۳۰۳/۹۰	tr

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۷۵۱	۶۱۵/۰۰	۵۹۰/۷۶	۶۰۰/۸۰	tr	۷۹۳	۱۱۰۰/۰۰	۱۰۴۹/۹۷	۱۱۱۷/۴۰	tr
۷۵۲	۷۲۴/۷۰	۷۲۱/۷۹	۷۰۵/۳۰	t	۷۹۴	۱۲۰۰/۰۰	۱۱۲۴/۳۴	۱۱۹۴/۸۰	v
۷۵۳	۸۳۲/۰۰	۸۳۴/۴۴	۸۰۱/۲۰	tr	۷۹۵	۶۸۸/۵۰	۷۳۶/۴۴	۶۸۱/۵۰	tr
۷۵۴	۹۳۶/۵۰	۹۳۹/۴۳	۹۱۶/۴۰	v	۷۹۶	۱۰۲۶/۴۰	۱۰۶۷/۵۹	۱۰۲۹/۵۰	tr
۷۵۵	۱۰۳۹/۹۰	۱۰۳۷/۷۷	۱۰۲۶/۰۰	tr	۷۹۷	۷۵۳/۳۰	۸۰۳/۳۳	۷۶۹/۹۰	t
۷۵۶	۱۱۴۲/۵۰	۱۱۳۵/۶۸	۱۱۳۶/۶۰	tr	۷۹۸	۸۶۰/۶۰	۹۶۲/۸۹	۹۰۳/۷۰	tr
۷۵۷	۱۲۴۴/۵۰	۱۲۳۵/۷۹	۱۲۴۶/۴۰	t	۷۹۹	۹۴۹/۹۰	۱۰۱۱/۹۱	۹۴۶/۶۰	v
۷۵۸	۹۷۷/۱۰	۱۰۴۱/۲۳	۹۶۵/۸۰	tr	۸۰۰	۱۰۴۰/۰۰	۱۰۸۲/۴۱	۱۰۳۷/۱۰	tr
۷۵۹	۸۰۸/۳۰	۷۷۵/۸۷	۷۹۸/۱۰	v	۸۰۱	۱۱۴۰/۵۰	۱۱۸۹/۶۸	۱۱۳۵/۸۰	tr
۷۶۰	۶۳۲/۱۰	۷۲۳/۰۶	۶۶۱/۱۰	tr	۸۰۲	۷۱۳/۶۰	۶۶۲/۰۱	۷۲۷/۴۰	t
۷۶۱	۷۱۱/۹۰	۷۵۷/۶۵	۷۱۰/۷۰	tr	۸۰۳	۸۰۶/۱۰	۷۵۶/۷۲	۸۰۸/۹۰	tr
۷۶۲	۸۱۵/۷۰	۸۸۶/۲۸	۸۱۵/۳۰	t	۸۰۴	۸۹۸/۲۰	۸۴۶/۱۹	۸۹۷/۵۰	v
۷۶۳	۹۱۸/۳۰	۱۰۱۳/۰۸	۹۲۰/۹۰	tr	۸۰۵	۱۰۰۵/۵۰	۹۵۸/۷۸	۱۰۰۲/۰۰	tr
۷۶۴	۵۹۵/۵۰	۶۰۵/۰۵	۶۱۷/۴۰	v	۸۰۶	۱۱۰۸/۵۰	۱۰۶۷/۵۴	۱۱۱۶/۸۰	tr
۷۶۵	۷۰۰/۱۰	۷۲۱/۵۹	۷۲۰/۳۰	tr	۸۰۷	۱۲۱۱/۳۰	۱۱۷۲/۳۷	۱۱۹۹/۵۰	t
۷۶۶	۸۰۵/۳۰	۸۲۷/۳۹	۸۰۱/۸۰	tr	۸۰۸	۱۳۱۳/۸۰	۱۲۷۹/۵۴	۱۳۱۴/۰۰	tr
۷۶۷	۹۰۸/۰۰	۹۲۱/۱۷	۹۱۰/۹۰	t	۸۰۹	۸۹۰/۶۰	۸۵۶/۲۲	۸۸۸/۶۰	v
۷۶۸	۱۰۰۹/۸۰	۱۰۰۹/۷۰	۱۰۱۴/۰۰	tr	۸۱۰	۱۰۴۷/۶۰	۹۹۹/۹۹	۱۰۲۳/۴۰	tr
۷۶۹	۹۴۸/۰۰	۱۰۱۷/۸۷	۹۴۱/۹۰	v	۸۱۱	۱۱۶۴/۹۰	۱۰۹۷/۵۴	۱۱۶۲/۸۰	tr
۷۷۰	۱۰۹۱/۲۰	۱۰۱۹/۲۹	۱۰۷۸/۷۰	tr	۸۱۲	۱۲۸۴/۰۰	۱۲۳۰/۶۱	۱۲۸۳/۰۰	t
۷۷۱	۸۶۳/۲۰	۷۹۶/۳۵	۸۵۲/۷۰	tr	۸۱۳	۱۳۷۷/۷۰	۱۳۲۷/۴۸	۱۳۸۲/۲۰	tr
۷۷۲	۹۷۲/۳۰	۹۱۶/۴۳	۹۵۷/۵۰	t	۸۱۴	۶۵۳/۳۰	۶۳۱/۸۰	۶۴۱/۴۰	v
۷۷۳	۱۰۷۸/۱۰	۱۰۱۹/۰۳	۱۰۷۸/۵۰	tr	۸۱۵	۷۶۳/۹۰	۷۶۳/۳۳	۷۴۳/۰۰	tr
۷۷۴	۱۱۸۲/۲۰	۱۱۵۶/۳۱	۱۱۷۴/۰۰	v	۸۱۶	۸۷۱/۹۰	۸۷۵/۹۸	۸۳۹/۴۰	tr
۷۷۵	۹۲۸/۰۰	۸۷۴/۸۸	۹۲۹/۳۰	tr	۸۱۷	۹۷۶/۶۰	۹۸۰/۹۷	۹۵۶/۴۰	t
۷۷۶	۱۲۸۳/۴۰	۱۲۹۵/۳۱	۱۲۷۰/۹۰	tr	۸۱۸	۱۰۸۰/۷۰	۱۰۷۹/۳۱	۱۰۶۹/۰۰	tr
۷۷۷	۸۸۵/۵۰	۷۵۵/۰۳	۸۹۳/۵۰	t	۸۱۹	۱۱۸۴/۱۰	۱۱۷۷/۲۲	۱۱۸۰/۷۰	v
۷۷۸	۶۱۴/۷۰	۶۳۴/۴۷	۶۰۸/۵۰	tr	۸۲۰	۱۲۸۷/۴۰	۱۲۷۷/۳۳	۱۲۸۶/۷۰	tr
۷۷۹	۷۱۹/۷۰	۷۶۱/۸۷	۷۰۱/۱۰	v	۸۲۱	۱۰۲۳/۶۰	۱۰۸۲/۷۷	۱۰۲۰/۲۰	tr
۷۸۰	۸۲۴/۷۰	۸۶۷/۷۵	۸۱۴/۸۰	tr	۸۲۲	۸۴۲/۷۰	۸۱۷/۴۱	۸۲۶/۶۰	t
۷۸۱	۹۲۷/۵۰	۹۵۸/۷۲	۹۳۳/۸۰		۸۲۳	۶۷۹/۹۰	۷۶۴/۶۰	۶۹۸/۷۰	tr
۷۸۲	۹۲۸/۷۰	۱۰۰۴/۱۸	۹۶۱/۰۰	t	۸۲۴	۷۶۰/۳۰	۷۹۹/۱۹	۷۵۰/۵۰	v
۷۸۳	۸۱۲/۱۰	۷۲۲/۱۵	۸۰۵/۶۰	tr	۸۲۵	۸۶۴/۹۰	۹۲۷/۸۲	۸۵۷/۶۰	tr
۷۸۴	۷۱۹/۶۰	۷۰۷/۴۱	۷۱۶/۲۰	v	۸۲۶	۹۶۸/۱۰	۱۰۵۴/۶۲	۹۷۵/۲۰	tr
۷۸۵	۸۷۰/۹۰	۸۴۰/۶۳	۹۰۲/۳۰	tr	۸۲۷	۶۲۷/۹۰	۶۴۶/۵۹	۶۵۱/۳۰	t
۷۸۶	۱۰۳۵/۵۰	۸۲۴/۵۹	۹۶۲/۳۰	tr	۸۲۸	۷۳۳/۵۰	۷۶۳/۱۳	۷۵۰/۶۰	tr
۷۸۷	۸۷۴/۴۰	۹۱۰/۴۳	۸۶۷/۸۰	t	۸۲۹	۸۴۰/۰۰	۸۶۸/۹۳	۸۳۲/۳۰	v
۷۸۸	۶۰۰/۰۰	۶۵۸/۲۳	۵۹۷/۶۰	tr	۸۳۰	۹۴۳/۰۰	۹۶۲/۷۱	۹۴۳/۷۰	tr
۷۸۹	۷۰۰/۱۰	۷۴۴/۴۵	۶۸۹/۷۰	v	۸۳۱	۱۰۴۵/۹۰	۱۰۵۱/۲۴	۱۰۴۷/۳۰	tr
۷۹۰	۸۰۰/۰۰	۸۱۰/۲۵	۸۱۴/۷۰	tr	۸۳۲	۹۸۹/۴۰	۱۰۵۹/۴۱	۹۹۰/۹۰	t
۷۹۱	۹۰۰/۰۰	۸۹۱/۷۲	۸۸۸/۲۰	tr	۸۳۳	۱۱۵۶/۰۰	۱۰۶۰/۸۳	۱۱۴۰/۱۰	tr
۷۹۲	۱۰۰۰/۰۰	۹۵۸/۵۴	۹۸۳/۱۰	t	۸۳۴	۹۴۳/۴۰	۸۳۷/۸۹	۹۲۴/۴۰	v

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۸۳۵	۱۰۵۳/۸۰	۹۵۷/۹۷	۱۰۴۳/۹۰	tr	۸۷۷	۷۱۸/۰۰	۷۰۲/۱۷	۷۱۴/۸۰	t
۸۳۶	۱۱۶۰/۵۰	۱۰۶۰/۵۷	۱۱۶۰/۶۰	tr	۸۷۸	۸۲۸/۱۰	۸۳۳/۷۰	۸۱۳/۹۰	tr
۸۳۷	۱۲۶۷/۴۰	۱۱۹۷/۸۵	۱۲۶۸/۷۰	t	۸۷۹	۹۳۷/۹۰	۹۴۶/۳۵	۹۱۱/۴۰	v
۸۳۸	۱۰۰۷/۱۰	۹۱۶/۴۲	۱۰۰۵/۱۰	tr	۸۸۰	۱۰۴۳/۸۰	۱۰۵۱/۳۴	۱۰۲۹/۵۰	tr
۸۳۹	۱۳۶۸/۷۰	۱۳۳۶/۸۵	۱۳۵۶/۲۰	v	۸۸۱	۱۱۴۸/۲۰	۱۱۴۹/۶۸	۱۱۴۵/۵۰	tr
۸۴۰	۹۱۴/۶۰	۷۹۶/۵۷	۹۰۳/۷۰	tr	۸۸۲	۱۲۵۱/۶۰	۱۲۴۷/۵۹	۱۲۶۰/۴۰	t
۸۴۱	۶۴۰/۸۰	۶۷۶/۰۱	۶۳۹/۶۰	tr	۸۸۳	۱۳۵۴/۴۰	۱۳۴۷/۷۰	۱۳۶۴/۸۰	tr
۸۴۲	۷۴۷/۸۰	۸۰۳/۴۱	۷۲۹/۸۰	t	۸۸۴	۱۱۰۴/۲۰	۱۱۵۳/۱۴	۱۱۱۹/۷۰	v
۸۴۳	۸۵۳/۶۰	۹۰۹/۲۹	۸۴۷/۰۰	tr	۸۸۵	۹۰۰/۸۰	۸۸۷/۷۸	۸۸۹/۴۰	tr
۸۴۴	۹۵۷/۴۰	۱۰۰۰/۲۶	۹۶۶/۶۰	v	۸۸۶	۷۶۳/۳۰	۸۳۴/۹۷	۷۶۴/۷۰	tr
۸۴۵	۹۶۶/۳۰	۱۰۴۵/۷۲	۱۰۱۳/۴۰	tr	۸۸۷	۸۴۱/۷۰	۸۶۹/۵۶	۸۰۶/۲۰	t
۸۴۶	۸۶۳/۵۰	۷۶۳/۶۹	۸۴۹/۸۰	tr	۸۸۸	۹۴۸/۶۰	۹۹۸/۱۹	۹۱۹/۶۰	tr
۸۴۷	۷۶۱/۹۰	۷۴۸/۹۵	۷۵۰/۴۰	t	۸۸۹	۱۰۵۳/۲۰	۱۱۲۴/۹۹	۱۰۶۱/۵۰	v
۸۴۸	۹۲۸/۶۰	۸۸۲/۱۷	۹۴۸/۹۰	tr	۸۹۰	۶۹۰/۲۰	۷۱۶/۹۶	۷۱۲/۴۰	tr
۸۴۹	۱۱۴۲/۹۰	۸۶۶/۱۳	۱۰۰۵/۳۰	v	۸۹۱	۷۸۵/۹۰	۸۳۳/۵۰	۸۰۸/۵۰	tr
۸۵۰	۸۸۱/۹۰	۹۵۱/۹۷	۸۷۷/۴۰	tr	۸۹۲	۸۹۰/۱۰	۹۳۹/۳۰	۸۹۲/۰۰	t
۸۵۱	۵۹۹/۹۰	۶۹۹/۷۷	۶۰۲/۲۰	tr	۸۹۳	۹۹۲/۶۰	۱۰۳۳/۰۸	۱۰۰۴/۶۰	tr
۸۵۲	۷۰۰/۰۰	۷۸۵/۹۹	۶۹۲/۶۰	t	۸۹۴	۱۰۹۴/۹۰	۱۱۲۱/۶۱	۱۱۰۳/۳۰	v
۸۵۳	۸۰۰/۱۰	۸۵۱/۷۹	۸۱۸/۲۰	tr	۸۹۵	۱۰۴۹/۷۰	۱۱۲۹/۷۸	۱۰۸۱/۹۰	tr
۸۵۴	۹۰۰/۱۰	۹۳۳/۲۶	۸۸۶/۸۰	v	۸۹۶	۱۲۷۸/۵۰	۱۱۳۱/۲۰	۱۲۴۱/۲۰	tr
۸۵۵	۱۰۰۰/۰۰	۱۰۰۰/۰۸	۹۸۰/۹۰	tr	۸۹۷	۱۰۷۶/۸۰	۹۰۸/۲۶	۱۰۵۲/۳۰	t
۸۵۶	۱۱۰۰/۰۰	۱۰۹۱/۵۱	۱۱۰۷/۵۰	tr	۸۹۸	۱۱۸۹/۷۰	۱۰۲۸/۳۴	۱۱۸۹/۶۰	tr
۸۵۷	۱۲۰۰/۰۰	۱۱۶۵/۸۸	۱۱۹۴/۰۰	t	۸۹۹	۱۲۹۸/۲۰	۱۱۳۰/۹۴	۱۳۰۳/۳۰	v
۸۵۸	۶۹۷/۲۰	۷۷۷/۹۸	۷۰۰/۳۰	tr	۹۰۰	۱۴۱۴/۴۰	۱۲۶۸/۲۲	۱۴۴۲/۰۰	tr
۸۵۹	۱۰۴۱/۹۰	۱۱۰۹/۱۳	۱۰۴۴/۲۰	v	۹۰۱	۱۱۴۳/۱۰	۹۸۶/۷۹	۱۱۲۸/۴۰	tr
۸۶۰	۸۰۷/۱۰	۸۷۲/۷۰	۸۲۱/۷۰	tr	۹۰۲	۱۵۱۸/۳۰	۱۴۰۷/۲۲	۱۵۰۳/۵۰	t
۸۶۱	۹۱۶/۲۰	۱۰۳۳/۲۶	۹۵۸/۶۰	tr	۹۰۳	۹۶۵/۶۰	۸۶۶/۹۴	۹۲۰/۳۰	tr
۸۶۲	۱۰۰۳/۸۰	۱۰۸۲/۲۸	۱۰۰۹/۱۰	t	۹۰۴	۶۸۸/۲۰	۷۴۶/۳۸	۶۹۷/۶۰	v
۸۶۳	۱۰۹۴/۰۰	۱۱۵۲/۷۸	۱۰۹۴/۲۰	tr	۹۰۵	۷۹۷/۹۰	۸۷۳/۷۸	۷۸۶/۵۰	tr
۸۶۴	۱۱۹۵/۲۰	۱۲۶۰/۰۵	۱۱۸۳/۳۰	v	۹۰۶	۹۰۵/۷۰	۹۷۹/۶۶	۹۰۵/۱۰	tr
۸۶۵	۸۲۲/۱۰	۷۳۲/۳۸	۸۰۶/۷۰	tr	۹۰۷	۱۰۱۰/۱۰	۱۰۷۰/۶۳	۱۰۱۲/۸۰	t
۸۶۶	۹۱۰/۰۰	۸۲۷/۰۹	۹۲۱/۶۰	tr	۹۰۸	۱۰۳۵/۰۰	۱۱۱۶/۰۹	۱۱۰۳/۹۰	tr
۸۶۷	۱۰۰۲/۸۰	۹۱۶/۵۶	۱۰۰۸/۶۰	t	۹۰۹	۹۵۳/۰۰	۸۳۴/۰۶	۹۲۰/۲۰	v
۸۶۸	۱۱۱۲/۷۰	۱۰۲۹/۱۵	۱۱۰۵/۷۰	tr	۹۱۰	۸۲۹/۹۰	۸۱۹/۳۲	۸۰۵/۸۰	tr
۸۶۹	۱۲۱۶/۹۰	۱۱۳۷/۹۱	۱۲۳۴/۳۰	v	۹۱۱	۱۰۲۳/۸۰	۹۵۲/۵۴	۱۰۲۴/۱۰	tr
۸۷۰	۱۳۲۱/۳۰	۱۲۴۲/۷۴	۱۳۲۶/۷۰	tr	۹۱۲	۱۳۱۴/۴۰	۹۳۶/۵۰	۱۰۷۴/۳۰	t
۸۷۱	۱۴۲۴/۶۰	۱۳۴۹/۹۱	۱۴۲۹/۱۰	tr	۹۱۳	۸۹۴/۹۰	۱۰۲۲/۳۴	۹۰۳/۳۰	tr
۸۷۲	۱۰۱۱/۱۰	۹۲۶/۵۹	۱۰۱۲/۶۰	t	۹۱۴	۵۹۹/۲۰	۷۷۰/۱۴	۶۰۹/۶۰	v
۸۷۳	۱۱۷۹/۸۰	۱۰۷۰/۳۶	۱۱۴۳/۳۰	tr	۹۱۵	۶۹۹/۹۰	۸۵۶/۳۶	۶۹۷/۷۰	tr
۸۷۴	۱۳۰۱/۰۰	۱۱۶۷/۹۱	۱۳۱۳/۷۰	v	۹۱۶	۸۰۰/۳۰	۹۲۲/۱۶	۸۲۴/۴۰	tr
۸۷۵	۱۴۲۳/۴۰	۱۳۰۰/۹۸	۱۴۱۲/۲۰	tr	۹۱۷	۹۰۰/۲۰	۱۰۰۳/۶۳	۸۸۶/۲۰	t
۸۷۶	۱۵۱۶/۱۰	۱۳۹۷/۸۵	۱۵۱۳/۰۰	tr	۹۱۸	۱۰۰۰/۱۰	۱۰۷۰/۴۵	۹۷۹/۰۰	tr

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۹۱۹	۱۱۰۰/۰۰	۱۱۶۱/۸۸	۱۰۹۲/۸۰	v	۹۶۱	۷۴۷/۲۰	۸۱۹/۳۵	۷۵۲/۱۰	tr
۹۲۰	۱۲۰۰/۰۰	۱۲۳۶/۲۵	۱۱۹۲/۹۰	tr	۹۶۲	۸۴۹/۹۰	۹۲۱/۹۴	۸۸۵/۸۰	t
۹۲۱	۷۱۳/۰۰	۸۴۸/۳۵	۷۲۹/۴۰	tr	۹۶۳	۹۶۹/۵۰	۱۰۰۹/۲۲	۹۷۲/۹۰	tr
۹۲۲	۱۰۷۳/۳۰	۱۱۷۹/۵۰	۱۰۷۳/۷۰	t	۹۶۴	۷۱۴/۷۰	۷۷۷/۷۹	۷۳۴/۵۰	v
۹۲۳	۶۷۲/۱۰	۶۶۴/۷۰	۶۵۶/۴۰	tr	۹۶۵	۱۰۷۶/۲۰	۱۱۹۸/۲۳	۱۰۹۴/۰۰	tr
۹۲۴	۷۷۵/۷۰	۸۲۴/۲۷	۸۱۳/۶۰	v	۹۶۶	۸۲۵/۹۰	۶۵۷/۹۵	۸۶۷/۷۰	tr
۹۲۵	۸۶۹/۱۰	۸۷۳/۲۸	۸۶۰/۵۰	tr	۹۶۷	۵۴۴/۵۰	۵۳۷/۳۹	۵۳۵/۶۰	t
۹۲۶	۹۶۰/۴۰	۹۴۳/۷۸	۹۶۱/۰۰	tr	۹۶۸	۶۴۷/۷۰	۶۶۴/۷۸	۶۴۰/۴۰	tr
۹۲۷	۱۰۰۹/۵۰	۱۰۵۱/۰۵	۱۰۶۱/۱۰	t	۹۶۹	۷۵۱/۴۰	۷۷۰/۶۷	۷۵۲/۸۰	v
۹۲۸	۴۷۲/۰۰	۵۲۳/۳۹	۴۸۶/۶۰	tr	۹۷۰	۸۵۲/۱۰	۸۶۱/۶۴	۸۵۲/۰۰	tr
۹۲۹	۵۷۶/۸۰	۶۱۸/۰۹	۵۵۹/۴۰	v	۹۷۱	۸۵۶/۳۰	۹۰۷/۰۹	۸۳۶/۶۰	tr
۹۳۰	۶۶۸/۹۰	۷۰۷/۵۷	۶۷۳/۵۰	tr	۹۷۲	۶۹۹/۱۰	۶۲۵/۰۶	۶۹۴/۱۰	t
۹۳۱	۷۷۱/۰۰	۸۲۰/۱۶	۷۷۰/۳۰	tr	۹۷۳	۶۲۸/۶۰	۶۱۰/۳۳	۶۲۹/۷۰	tr
۹۳۲	۸۷۱/۸۰	۹۲۸/۹۲	۸۷۴/۳۰	t	۹۷۴	۷۴۱/۷۰	۷۴۳/۵۵	۷۸۶/۸۰	v
۹۳۳	۹۷۲/۶۰	۱۰۳۳/۷۴	۹۸۱/۰۰	tr	۹۷۵	۷۵۳/۳۰	۷۲۷/۵۰	۸۵۴/۰۰	tr
۹۳۴	۱۰۷۳/۶۰	۱۱۴۰/۹۱	۱۱۲۶/۶۰	v	۹۷۶	۸۶۱/۴۰	۸۱۳/۳۵	۸۵۸/۱۰	tr
۹۳۵	۶۴۷/۰۰	۷۱۷/۶۰	۶۵۵/۴۰	tr	۹۷۷	۵۹۹/۹۰	۵۶۱/۱۵	۵۸۳/۹۰	t
۹۳۶	۷۷۹/۵۰	۸۶۱/۳۷	۸۱۷/۹۰	tr	۹۷۸	۷۰۰/۲۰	۶۴۷/۳۷	۶۸۲/۴۰	tr
۹۳۷	۸۸۹/۶۰	۹۵۸/۹۱	۹۱۴/۹۰	t	۹۷۹	۸۰۰/۰۰	۷۱۳/۱۶	۸۰۳/۵۰	v
۹۳۸	۱۰۰۸/۰۰	۱۰۹۱/۹۸	۱۰۱۲/۸۰	tr	۹۸۰	۸۹۹/۹۰	۷۹۴/۶۴	۸۹۲/۷۰	tr
۹۳۹	۱۱۱۵/۰۰	۱۱۸۸/۸۵	۱۱۲۵/۴۰	v	۹۸۱	۱۰۰۰/۰۰	۸۶۱/۴۵	۹۸۹/۶۰	tr
۹۴۰	۵۳۰/۴۰	۴۹۳/۱۸	۵۰۵/۳۰	tr	۹۸۲	۱۱۰۰/۰۰	۹۵۲/۸۸	۱۱۴۵/۴۰	t
۹۴۱	۶۳۸/۱۰	۶۲۴/۷۰	۶۲۱/۷۰	tr	۹۸۳	۱۲۰۰/۰۰	۱۰۲۷/۲۶	۱۱۹۸/۲۰	tr
۹۴۲	۷۴۳/۵۰	۷۳۷/۳۵	۷۲۱/۲۰	t	۹۸۴	۶۸۴/۶۰	۶۳۹/۳۵	۶۲۸/۷۰	v
۹۴۳	۸۴۶/۶۰	۸۴۲/۳۴	۸۳۳/۰۰	tr	۹۸۵	۱۰۱۵/۰۰	۹۷۰/۵۰	۹۹۷/۱۰	tr
۹۴۴	۹۴۹/۲۰	۹۴۰/۶۹	۹۴۰/۹۰	v	۹۸۶	۶۹۳/۳۰	۷۰۹/۰۳	۶۹۶/۰۰	tr
۹۴۵	۱۰۵۱/۲۰	۱۰۳۸/۵۹	۱۰۵۲/۲۰	tr	۹۸۷	۷۹۸/۴۰	۸۶۸/۶۰	۸۴۰/۵۰	t
۹۴۶	۱۱۵۲/۷۰	۱۱۳۸/۷۰	۱۱۷۳/۲۰	tr	۹۸۸	۸۹۰/۶۰	۹۱۷/۶۱	۸۸۴/۲۰	tr
۹۴۷	۸۸۰/۶۰	۹۴۴/۱۴	۸۴۷/۹۰	t	۹۸۹	۹۸۱/۹۰	۹۸۸/۱۱	۹۸۲/۰۰	v
۹۴۸	۷۱۸/۱۰	۶۷۸/۷۹	۷۴۸/۹۰	tr	۹۹۰	۱۰۸۱/۵۰	۱۰۹۵/۳۸	۱۰۸۵/۷۰	tr
۹۴۹	۵۰۷/۳۰	۶۲۵/۹۸	۵۶۹/۵۰	v	۹۹۱	۵۵۰/۲۰	۵۶۷/۷۲	۵۷۳/۲۰	tr
۹۵۰	۵۸۶/۸۰	۶۶۰/۵۶	۵۹۵/۳۰	tr	۹۹۲	۶۵۲/۱۰	۶۶۲/۴۲	۶۳۸/۲۰	t
۹۵۱	۶۸۸/۱۰	۷۸۹/۲۰	۶۹۶/۷۰	tr	۹۹۳	۷۴۴/۸۰	۷۵۱/۹۰	۷۴۱/۰۰	tr
۹۵۲	۷۸۸/۴۰	۹۱۵/۹۹	۷۸۸/۱۰	t	۹۹۴	۸۴۹/۳۰	۸۶۴/۴۹	۸۴۳/۴۰	v
۹۵۳	۵۲۳/۸۰	۵۰۷/۹۶	۵۳۶/۱۰	tr	۹۹۵	۹۵۱/۳۰	۹۷۳/۲۵	۹۴۸/۸۰	tr
۹۵۴	۶۲۸/۳۰	۶۲۴/۵۱	۶۵۳/۱۰	v	۹۹۶	۱۰۵۲/۷۰	۱۰۷۸/۰۷	۱۰۴۴/۵۰	tr
۹۵۵	۷۳۰/۴۰	۷۳۰/۳۱	۷۴۰/۸۰	tr	۹۹۷	۱۱۵۴/۴۰	۱۱۸۵/۲۴	۱۱۸۲/۳۰	t
۹۵۶	۸۳۳/۲۰	۸۲۴/۰۹	۸۴۸/۵۰	tr	۹۹۸	۷۲۷/۲۰	۷۶۱/۹۳	۷۲۸/۳۰	tr
۹۵۷	۹۳۴/۸۰	۹۱۲/۶۲	۹۵۰/۴۰	t	۹۹۹	۸۶۷/۷۰	۹۰۵/۷۰	۸۸۱/۰۰	v
۹۵۸	۸۷۰/۲۰	۹۲۰/۷۸	۸۴۰/۲۰	tr	۱۰۰۰	۹۸۱/۵۰	۱۰۰۳/۲۴	۹۹۰/۲۰	tr
۹۵۹	۹۶۴/۳۰	۹۲۲/۲۱	۹۲۹/۰۰	v	۱۰۰۱	۱۰۹۹/۵۰	۱۱۳۶/۳۱	۱۰۹۶/۰۰	tr
۹۶۰	۶۴۳/۱۰	۶۹۹/۲۷	۶۸۹/۷۰	tr	۱۰۰۲	۱۲۰۰/۹۰	۱۲۳۳/۱۸	۱۲۰۲/۷۰	t

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۱۰۰۳	۰۶۶/۱۰	۰۳۷/۰۱	۰۴۷/۳۰	tr	۱۰۴۵	۱۱۰۰/۰۰	۹۹۷/۲۱	۱۱۳۳/۲۰	tr
۱۰۰۴	۶۷۴/۲۰	۶۶۹/۰۳	۶۵۷/۷۰	v	۱۰۴۶	۱۲۰۰/۰۰	۱۰۷۱/۵۹	۱۱۹۸/۴۰	tr
۱۰۰۵	۷۸۰/۵۰	۷۸۱/۶۸	۷۵۵/۲۰	tr	۱۰۴۷	۶۸۵/۸۰	۶۸۳/۶۸	۶۵۲/۲۰	t
۱۰۰۶	۸۸۴/۴۰	۸۸۶/۶۷	۸۶۶/۷۰	tr	۱۰۴۸	۱۰۲۱/۱۰	۱۰۱۴/۸۳	۱۰۱۲/۸۰	tr
۱۰۰۷	۹۸۷/۶۰	۹۸۵/۰۲	۹۷۶/۱۰	t	۱۰۴۹	۷۲۸/۳۰	۷۶۶/۸۵	۷۴۴/۴۰	v
۱۰۰۸	۱۰۸۹/۸۰	۱۰۸۲/۹۲	۱۰۸۷/۲۰	tr	۱۰۵۰	۸۳۵/۳۰	۹۲۶/۴۱	۸۷۷/۵۰	tr
۱۰۰۹	۱۱۹۱/۵۰	۱۱۸۳/۰۳	۱۲۰۳/۳۰	v	۱۰۵۱	۹۲۶/۴۰	۹۷۵/۴۳	۹۲۰/۷۰	tr
۱۰۱۰	۹۲۳/۰۰	۹۸۸/۴۷	۹۰۰/۲۰	tr	۱۰۵۲	۱۰۱۷/۶۰	۱۰۴۵/۹۳	۱۰۱۴/۶۰	t
۱۰۱۱	۷۵۹/۰۰	۷۲۳/۱۲	۷۶۶/۵۰	tr	۱۰۵۳	۱۱۱۸/۱۰	۱۱۵۳/۲۰	۱۱۱۸/۲۰	tr
۱۰۱۲	۵۵۸/۴۰	۶۷۰/۳۱	۶۱۰/۴۰	t	۱۰۵۴	۶۴۶/۳۰	۶۲۵/۵۳	۶۷۳/۰۰	v
۱۰۱۳	۶۴۰/۱۰	۷۰۴/۸۹	۶۴۷/۰۰	tr	۱۰۵۵	۷۴۳/۸۰	۷۲۰/۲۴	۷۴۱/۳۰	tr
۱۰۱۴	۷۴۳/۰۰	۸۳۳/۵۳	۷۵۰/۲۰	v	۱۰۵۶	۸۳۷/۸۰	۸۰۹/۷۱	۸۳۴/۰۰	tr
۱۰۱۵	۸۴۵/۳۰	۹۶۰/۳۲	۸۴۵/۹۰	tr	۱۰۵۷	۹۴۴/۳۰	۹۲۲/۳۰	۹۳۹/۸۰	t
۱۰۱۶	۵۵۱/۳۰	۵۵۲/۲۹	۵۷۲/۰۰	tr	۱۰۵۸	۱۰۴۷/۱۰	۱۰۳۱/۰۶	۱۰۵۰/۱۰	tr
۱۰۱۷	۶۵۵/۵۰	۶۶۸/۸۴	۶۸۲/۳۰	t	۱۰۵۹	۱۱۴۹/۹۰	۱۱۳۵/۸۹	۱۱۳۵/۷۰	v
۱۰۱۸	۷۵۹/۳۰	۷۷۴/۶۴	۷۶۶/۳۰	tr	۱۰۶۰	۱۲۵۲/۳۰	۱۲۴۳/۰۶	۱۲۶۰/۱۰	tr
۱۰۱۹	۸۶۱/۵۰	۸۶۸/۴۲	۸۷۲/۹۰	v	۱۰۶۱	۸۲۸/۱۰	۸۱۹/۷۴	۸۲۴/۰۰	tr
۱۰۲۰	۹۶۳/۶۰	۹۵۶/۹۵	۹۷۶/۱۰	tr	۱۰۶۲	۹۸۰/۱۰	۹۶۳/۵۱	۹۶۶/۷۰	t
۱۰۲۱	۹۰۰/۲۰	۹۶۵/۱۱	۸۸۵/۱۰	tr	۱۰۶۳	۱۰۹۸/۲۰	۱۰۶۱/۰۶	۱۰۹۴/۵۰	tr
۱۰۲۲	۱۰۱۵/۷۰	۹۶۶/۵۴	۹۹۸/۵۰	t	۱۰۶۴	۱۲۱۷/۵۰	۱۱۹۴/۱۳	۱۲۰۸/۹۰	v
۱۰۲۳	۷۴۷/۳۰	۷۴۳/۶۰	۷۶۴/۷۰	tr	۱۰۶۵	۱۳۱۴/۷۰	۱۲۹۱/۰۰	۱۳۱۰/۹۰	tr
۱۰۲۴	۸۵۴/۵۰	۸۶۳/۶۸	۸۴۴/۳۰	v	۱۰۶۶	۶۱۵/۶۰	۵۹۵/۳۲	۶۰۲/۳۰	tr
۱۰۲۵	۹۵۹/۲۰	۹۶۶/۲۷	۹۷۲/۸۰	tr	۱۰۶۷	۷۲۵/۶۰	۷۲۶/۸۵	۷۰۶/۷۰	t
۱۰۲۶	۱۰۷۰/۴۰	۱۱۰۳/۵۵	۱۰۶۲/۲۰	tr	۱۰۶۸	۸۳۳/۵۰	۸۳۹/۵۰	۸۰۲/۴۰	tr
۱۰۲۷	۸۱۵/۳۰	۸۲۲/۱۲	۸۲۶/۵۰	t	۱۰۶۹	۹۳۸/۳۰	۹۴۴/۴۹	۹۱۶/۶۰	v
۱۰۲۸	۱۱۷۴/۸۰	۱۲۴۲/۵۶	۱۱۷۰/۲۰	tr	۱۰۷۰	۱۰۴۱/۸۰	۱۰۴۲/۸۳	۱۰۲۹/۷۰	tr
۱۰۲۹	۸۵۴/۸۰	۷۰۲/۲۸	۸۷۹/۵۰	v	۱۰۷۱	۱۱۴۴/۹۰	۱۱۴۰/۷۴	۱۱۴۱/۵۰	tr
۱۰۳۰	۵۷۵/۷۰	۵۸۱/۷۲	۵۶۷/۰۰	tr	۱۰۷۲	۱۲۴۷/۲۰	۱۲۴۰/۸۵	۱۲۵۱/۰۰	t
۱۰۳۱	۶۸۰/۷۰	۷۰۹/۱۱	۶۶۵/۲۰	tr	۱۰۷۳	۹۸۵/۳۰	۱۰۴۶/۲۹	۹۷۱/۷۰	tr
۱۰۳۲	۷۸۵/۶۰	۸۱۵/۰۰	۷۷۷/۳۰	t	۱۰۷۴	۸۰۹/۵۰	۷۸۰/۹۳	۷۹۷/۷۰	v
۱۰۳۳	۸۸۷/۹۰	۹۰۵/۹۷	۸۸۷/۸۰	tr	۱۰۷۵	۶۲۶/۴۰	۷۲۸/۱۲	۶۶۲/۸۰	tr
۱۰۳۴	۸۸۸/۱۰	۹۵۱/۴۲	۸۹۳/۸۰	v	۱۰۷۶	۷۰۹/۴۰	۷۶۲/۷۱	۷۱۰/۰۰	tr
۱۰۳۵	۷۴۵/۶۰	۶۶۹/۳۹	۷۴۶/۱۰	tr	۱۰۷۷	۸۱۴/۱۰	۸۹۱/۳۴	۸۱۵/۸۰	t
۱۰۳۶	۶۶۷/۵۰	۶۵۴/۶۶	۶۶۹/۱۰	tr	۱۰۷۸	۹۱۷/۵۰	۱۰۱۸/۱۴	۹۲۳/۵۰	tr
۱۰۳۷	۷۹۷/۶۰	۷۸۷/۸۸	۸۴۰/۵۰	t	۱۰۷۹	۵۹۰/۹۰	۶۱۰/۱۱	۶۱۸/۳۰	v
۱۰۳۸	۸۸۳/۴۰	۷۷۱/۸۳	۹۰۴/۲۰	tr	۱۰۸۰	۶۹۷/۸۰	۷۲۶/۶۵	۷۲۱/۷۰	tr
۱۰۳۹	۸۶۳/۸۰	۸۵۷/۶۸	۸۶۱/۱۰	v	۱۰۸۱	۸۰۲/۶۰	۸۳۲/۴۵	۸۰۳/۶۰	tr
۱۰۴۰	۵۹۹/۷۰	۶۰۵/۴۸	۵۸۹/۵۰	tr	۱۰۸۲	۹۰۶/۶۰	۹۲۶/۲۳	۹۱۲/۰۰	t
۱۰۴۱	۷۰۰/۰۰	۶۹۱/۷۰	۶۸۵/۳۰	tr	۱۰۸۳	۱۰۰۹/۶۰	۱۰۱۴/۷۶	۱۰۱۷/۵۰	tr
۱۰۴۲	۷۹۹/۹۰	۷۵۷/۴۹	۸۰۶/۸۰	t	۱۰۸۴	۹۵۳/۱۰	۱۰۲۲/۹۳	۹۴۸/۰۰	v
۱۰۴۳	۹۰۰/۰۰	۸۳۸/۹۷	۸۸۹/۲۰	tr	۱۰۸۵	۱۱۰۰/۰۰	۱۰۲۴/۳۵	۱۰۸۶/۵۰	tr
۱۰۴۴	۱۰۰۰/۰۰	۹۰۵/۷۸	۹۸۵/۳۰	v	۱۰۸۶	۸۷۰/۴۰	۸۰۱/۴۱	۸۶۲/۵۰	tr

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۱۰۸۷	۹۸۰/۵۰	۹۲۱/۴۹	۹۶۴/۳۰	t	۱۱۲۹	۶۵۳/۱۰	۶۳۶/۸۶	۶۴۲/۹۰	v
۱۰۸۸	۱۰۸۶/۷۰	۱۰۲۴/۰۹	۱۰۸۶/۶۰	tr	۱۱۳۰	۷۶۵/۲۰	۷۶۸/۳۹	۷۴۴/۵۰	tr
۱۰۸۹	۱۱۹۷/۴۰	۱۱۶۱/۳۷	۱۱۸۶/۵۰	v	۱۱۳۱	۸۷۴/۹۰	۸۸۱/۰۴	۸۴۱/۸۰	tr
۱۰۹۰	۹۳۶/۱۰	۸۷۹/۹۴	۹۳۸/۹۰	tr	۱۱۳۲	۹۸۰/۴۰	۹۸۶/۰۳	۹۵۶/۸۰	t
۱۰۹۱	۱۳۰۱/۳۰	۱۳۰۰/۳۷	۱۲۸۱/۷۰	tr	۱۱۳۳	۱۰۸۴/۴۰	۱۰۸۴/۳۷	۱۰۷۲/۹۰	tr
۱۰۹۲	۸۹۳/۵۰	۷۶۰/۰۹	۸۹۴/۳۰	t	۱۱۳۴	۱۱۸۸/۵۰	۱۱۸۲/۲۸	۱۱۸۶/۰۰	v
۱۰۹۳	۶۱۴/۴۰	۶۳۹/۵۳	۶۰۸/۵۰	tr	۱۱۳۵	۱۲۹۱/۶۰	۱۲۸۲/۳۹	۱۲۹۱/۶۰	tr
۱۰۹۴	۷۲۱/۹۰	۷۶۶/۹۳	۷۰۰/۶۰	v	۱۱۳۶	۱۰۳۴/۲۰	۱۰۸۷/۸۳	۱۰۲۶/۲۰	tr
۱۰۹۵	۸۲۷/۸۰	۸۷۲/۸۱	۸۱۶/۲۰	tr	۱۱۳۷	۸۴۵/۲۰	۸۲۲/۴۷	۸۲۷/۰۰	t
۱۰۹۶	۹۳۱/۷۰	۹۶۳/۷۸	۹۳۶/۴۰	tr	۱۱۳۸	۶۷۶/۷۰	۷۶۹/۶۶	۷۰۰/۵۰	tr
۱۰۹۷	۹۳۷/۸۰	۱۰۰۹/۲۴	۹۶۷/۱۰	t	۱۱۳۹	۷۵۸/۳۰	۸۰۴/۲۵	۷۴۹/۸۰	v
۱۰۹۸	۸۱۵/۴۰	۷۲۷/۲۱	۸۱۰/۷۰	tr	۱۱۴۰	۸۶۴/۰۰	۹۳۲/۸۸	۸۵۸/۱۰	tr
۱۰۹۹	۷۲۳/۸۰	۷۱۲/۴۷	۷۱۸/۸۰	v	۱۱۴۱	۹۶۸/۸۰	۱۰۵۹/۶۸	۹۷۷/۹۰	tr
۱۱۰۰	۸۷۷/۶۰	۸۴۵/۶۹	۹۰۸/۱۰	tr	۱۱۴۲	۶۲۵/۴۰	۶۵۱/۶۵	۶۵۲/۳۰	t
۱۱۰۱	۱۰۴۳/۴۰	۸۲۹/۶۵	۹۶۶/۸۰	tr	۱۱۴۳	۷۳۱/۸۰	۷۶۸/۱۹	۷۵۲/۱۰	tr
۱۱۰۲	۸۷۱/۵۰	۹۱۵/۴۹	۸۶۹/۲۰	t	۱۱۴۴	۸۳۸/۰۰	۸۷۳/۹۹	۸۳۴/۳۰	v
۱۱۰۳	۶۰۰/۲۰	۶۶۳/۲۹	۵۹۶/۳۰	tr	۱۱۴۵	۹۴۱/۷۰	۹۶۷/۷۷	۹۴۵/۱۰	tr
۱۱۰۴	۶۹۹/۶۰	۷۴۹/۵۱	۶۸۹/۲۰	v	۱۱۴۶	۱۰۴۴/۶۰	۱۰۵۶/۳۰	۱۰۵۱/۰۰	tr
۱۱۰۵	۸۰۰/۲۰	۸۱۵/۳۱	۸۱۱/۵۰	tr	۱۱۴۷	۹۹۵/۰۰	۱۰۶۴/۴۷	۹۹۷/۳۰	t
۱۱۰۶	۹۰۰/۰۰	۸۹۶/۷۸	۸۸۶/۰۰	tr	۱۱۴۸	۱۱۶۶/۷۰	۱۰۶۵/۸۹	۱۱۴۸/۰۰	tr
۱۱۰۷	۱۰۰۰/۰۰	۹۶۳/۶۰	۹۸۱/۰۰	t	۱۱۴۹	۹۵۲/۵۰	۸۴۲/۹۵	۹۳۴/۹۰	v
۱۱۰۸	۱۱۰۰/۰۰	۱۰۵۵/۰۳	۱۱۱۸/۳۰	tr	۱۱۵۰	۱۰۶۴/۵۰	۹۶۳/۰۲	۱۰۵۱/۱۰	tr
۱۱۰۹	۱۲۰۰/۰۰	۱۱۲۹/۴۰	۱۱۹۷/۸۰	v	۱۱۵۱	۱۱۷۱/۹۰	۱۰۶۵/۶۳	۱۱۶۹/۳۰	tr
۱۱۱۰	۶۹۴/۸۰	۷۴۱/۵۰	۶۸۰/۶۰	tr	۱۱۵۲	۱۲۸۵/۸۰	۱۲۰۲/۹۱	۱۲۸۱/۷۰	t
۱۱۱۱	۱۰۳۸/۲۰	۱۰۷۲/۶۵	۱۰۳۲/۳۰	tr	۱۱۵۳	۱۰۱۸/۰۰	۹۲۱/۴۸	۱۰۱۵/۰۰	tr
۱۱۱۲	۷۵۸/۲۰	۸۰۸/۳۹	۷۷۷/۱۰	t	۱۱۵۴	۱۳۹۰/۲۰	۱۳۴۱/۹۱	۱۳۶۷/۰۰	v
۱۱۱۳	۸۶۶/۴۰	۹۶۷/۹۵	۹۰۶/۲۰	tr	۱۱۵۵	۹۲۴/۳۰	۸۰۱/۶۳	۹۰۴/۵۰	tr
۱۱۱۴	۹۵۶/۲۰	۱۰۱۶/۹۷	۹۵۲/۰۰	v	۱۱۵۶	۶۴۵/۳۰	۶۸۱/۰۷	۶۳۹/۷۰	tr
۱۱۱۵	۱۰۴۶/۸۰	۱۰۸۷/۴۷	۱۰۴۲/۹۰	tr	۱۱۵۷	۷۵۳/۰۰	۸۰۸/۴۷	۷۲۹/۴۰	t
۱۱۱۶	۱۱۴۷/۶۰	۱۱۹۴/۷۴	۱۱۴۳/۰۰	tr	۱۱۵۸	۸۵۹/۱۰	۹۱۴/۳۵	۸۴۸/۵۰	tr
۱۱۱۷	۷۱۴/۶۰	۶۶۷/۰۷	۷۳۲/۹۰	t	۱۱۵۹	۹۶۳/۱۰	۱۰۰۵/۳۲	۹۶۹/۱۰	v
۱۱۱۸	۸۰۹/۳۰	۷۶۱/۷۸	۸۱۳/۴۰	tr	۱۱۶۰	۹۷۶/۹۰	۱۰۰۰/۷۸	۱۰۱۹/۶۰	tr
۱۱۱۹	۹۰۲/۷۰	۸۵۱/۲۵	۹۰۲/۱۰	v	۱۱۶۱	۸۶۷/۵۰	۷۶۸/۷۵	۸۵۴/۸۰	tr
۱۱۲۰	۱۰۱۰/۸۰	۹۶۳/۸۴	۱۰۰۶/۸۰	tr	۱۱۶۲	۷۶۶/۰۰	۷۵۴/۰۱	۷۵۳/۱۰	t
۱۱۲۱	۱۱۱۴/۱۰	۱۰۷۲/۶۰	۱۱۲۳/۱۰	tr	۱۱۶۳	۹۳۶/۵۰	۸۸۷/۲۳	۹۵۴/۷۰	tr
۱۱۲۲	۱۲۱۷/۵۰	۱۱۷۷/۴۳	۱۲۰۷/۰۰	t	۱۱۶۴	۱۱۵۴/۹۰	۸۷۱/۱۹	۱۰۰۹/۸۰	v
۱۱۲۳	۱۳۲۰/۲۰	۱۲۸۴/۶۰	۱۳۲۱/۳۰	tr	۱۱۶۵	۸۷۹/۱۰	۹۵۷/۰۳	۸۷۹/۰۰	tr
۱۱۲۴	۹۰۱/۰۰	۸۶۱/۲۸	۸۹۴/۳۰	v	۱۱۶۶	۵۹۹/۹۰	۷۰۴/۸۳	۶۰۰/۹۰	tr
۱۱۲۵	۱۰۶۰/۷۰	۱۰۰۵/۰۵	۱۰۳۲/۱۰	tr	۱۱۶۷	۶۹۹/۹۰	۷۹۱/۰۵	۶۹۲/۲۰	t
۱۱۲۶	۱۱۸۱/۴۰	۱۱۰۲/۶۰	۱۱۷۵/۴۰	tr	۱۱۶۸	۸۰۰/۱۰	۸۵۶/۸۵	۸۱۵/۰۰	tr
۱۱۲۷	۱۳۰۱/۹۰	۱۲۳۵/۶۷	۱۲۸۹/۹۰	t	۱۱۶۹	۸۹۹/۹۰	۹۳۸/۳۲	۸۸۴/۷۰	v
۱۱۲۸	۱۳۹۷/۵۰	۱۳۳۲/۵۴	۱۳۹۰/۴۰	tr	۱۱۷۰	۱۰۰۰/۱۰	۱۰۰۵/۱۴	۹۷۹/۰۰	tr

ادامه ی جدول ۴-۶

شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری	شماره ی ترکیب	RI	MLR	ANN	سری
۱۱۷۱	۱۱۰۰/۰۰	۱۰۹۶/۵۷	۱۱۰۸/۵۰	tr	۱۲۱۳	۱۲۰۸/۳۰	۱۰۳۳/۴۰	۱۱۹۷/۱۰	tr
۱۱۷۲	۱۲۰۰/۰۰	۱۱۷۰/۹۴	۱۱۹۷/۲۰	t	۱۲۱۴	۱۳۱۷/۷۰	۱۱۳۶/۰۰	۱۳۱۳/۱۰	v
۱۱۷۳	۷۰۲/۸۰	۷۸۳/۰۴	۶۹۹/۳۰	tr	۱۲۱۵	۹۴۴۱/۳۰	۱۲۷۳/۲۸	۱۴۵۶/۱۰	tr
۱۱۷۴	۱۰۵۴/۹۰	۱۱۱۴/۱۹	۱۰۴۷/۰۰	v	۱۲۱۶	۱۱۶۰/۶۰	۹۹۱/۸۵	۱۱۳۹/۰۰	tr
۱۱۷۵	۸۱۴/۰۰	۸۷۸/۷۶	۸۲۹/۰۰	tr	۱۲۱۷	۱۵۴۸/۸۰	۱۴۱۲/۲۸	۱۵۱۳/۸۰	t
۱۱۷۶	۹۲۳/۵۰	۱۰۳۸/۳۲	۹۶۱/۵۰	tr	۱۲۱۸	۹۷۸/۸۰	۸۷۲/۰۰	۹۲۱/۲۰	tr
۱۱۷۷	۱۰۱۱/۸۰	۱۰۸۷/۳۴	۱۰۱۴/۹۰	t	۱۲۱۹	۶۹۳/۲۰	۷۵۱/۴۴	۶۹۸/۰۰	v
۱۱۷۸	۱۱۰۲/۱۰	۱۱۵۷/۸۴	۱۱۰۰/۵۰	tr	۱۲۲۰	۸۰۴/۷۰	۸۷۸/۸۴	۷۸۶/۳۰	tr
۱۱۷۹	۱۲۰۳/۶۰	۱۲۶۵/۱۱	۱۱۹۰/۷۰	v	۱۲۲۱	۹۱۲/۹۰	۹۸۴/۷۲	۹۰۶/۶۰	tr
۱۱۸۰	۸۳۰/۷۰	۷۳۷/۴۴	۸۱۱/۱۰	tr	۱۲۲۲	۱۰۱۸/۲۰	۱۰۷۵/۶۹	۱۰۱۵/۱۰	t
۱۱۸۱	۹۱۹/۰۰	۸۳۲/۱۵	۹۲۵/۳۰	tr	۱۲۲۳	۱۰۴۹/۱۰	۱۱۲۱/۱۵	۱۱۱۰/۴۰	tr
۱۱۸۲	۱۰۱۲/۷۰	۹۲۱/۶۲	۱۰۱۲/۸۰	t	۱۲۲۴	۹۵۸/۷۰	۸۳۹/۱۲	۹۲۵/۳۰	v
۱۱۸۳	۱۱۲۳/۲۰	۱۰۳۴/۲۱	۱۱۰۹/۶۰	tr	۱۲۲۵	۸۳۹/۰۰	۸۲۴/۳۸	۸۰۸/۷۰	tr
۱۱۸۴	۱۲۲۸/۰۰	۱۱۴۲/۹۷	۱۲۴۰/۰۰	v	۱۲۲۶	۱۰۳۶/۲۰	۹۵۷/۶۰	۱۰۳۰/۰۰	tr
۱۱۸۵	۱۳۳۲/۷۰	۱۲۴۷/۸۰	۱۳۳۴/۹۰	tr	۱۲۲۷	۱۳۳۵/۸۰	۹۴۱/۵۶	۱۰۷۸/۹۰	t
۱۱۸۶	۱۴۳۶/۵۰	۱۳۵۴/۹۷	۱۴۳۷/۹۰	tr	۱۲۲۸	۸۹۱/۶۰	۱۰۲۷/۴۰	۹۰۵/۳۰	tr
۱۱۸۷	۱۰۲۷/۰۰	۹۳۱/۶۵	۱۰۱۸/۵۰	t	۱۲۲۹	۶۹۹/۱۰	۸۶۱/۴۲	۶۹۷/۳۰	v
۱۱۸۸	۱۱۹۹/۷۰	۱۰۷۵/۴۲	۱۱۵۲/۸۰	tr	۱۲۳۰	۷۹۹/۸۰	۹۲۷/۲۲	۸۲۱/۴۰	tr
۱۱۸۹	۱۳۲۵/۳۰	۱۱۷۲/۹۷	۱۳۲۷/۷۰	v	۱۲۳۱	۹۰۰/۴۰	۱۰۰۸/۶۹	۸۸۴/۱۰	tr
۱۱۹۰	۱۴۴۹/۷۰	۱۳۰۶/۰۴	۱۴۱۹/۰۰	tr	۱۲۳۲	۱۰۰۰/۲۰	۱۰۷۵/۵۱	۹۷۷/۲۰	t
۱۱۹۱	۱۵۴۴/۰۰	۱۴۰۲/۹۱	۱۵۲۰/۲۰	tr	۱۲۳۳	۱۱۰۰/۱۰	۱۱۶۶/۹۴	۱۰۹۴/۱۰	tr
۱۱۹۲	۷۱۹/۵۰	۷۰۷/۲۳	۷۱۶/۶۰	t	۱۲۳۴	۱۲۰۰/۰۰	۱۲۴۱/۳۱	۱۱۹۶/۳۰	v
۱۱۹۳	۸۳۲/۵۰	۸۳۸/۷۶	۸۱۵/۷۰	tr	۱۲۳۵	۷۲۲/۳۰	۸۵۳/۴۱	۷۲۸/۴۰	tr
۱۱۹۴	۹۴۲/۹۰	۹۵۱/۴۱	۹۱۴/۱۰	v	۱۲۳۶	۱۰۸۹/۳۰	۱۱۸۴/۵۶	۱۰۷۶/۹۰	tr
۱۱۹۵	۱۰۴۹/۵۰	۱۰۵۶/۴۰	۱۰۳۰/۱۰	tr					
۱۱۹۶	۱۱۵۴/۳۰	۱۱۵۴/۷۴	۱۱۴۹/۷۰	tr					
۱۱۹۷	۱۲۵۸/۱۰	۱۲۵۲/۶۵	۱۲۶۶/۰۰	t					
۱۱۹۸	۱۳۶۱/۲۰	۱۳۵۲/۷۶	۱۳۷۰/۱۰	tr					
۱۱۹۹	۱۱۱۸/۹۰	۱۱۵۸/۲۰	۱۱۲۶/۱۰	v					
۱۲۰۰	۹۰۵/۲۰	۸۹۲/۸۴	۸۹۱/۱۰	tr					
۱۲۰۱	۷۶۶/۰۰	۸۴۰/۰۳	۷۶۶/۶۰	tr					
۱۲۰۲	۸۴۲/۹۰	۸۷۴/۶۲	۸۰۵/۳۰	t					
۱۲۰۳	۹۵۰/۷۰	۱۰۰۳/۲۵	۹۲۰/۲۰	tr					
۱۲۰۴	۱۰۵۶/۴۰	۱۱۳۰/۰۵	۱۰۶۴/۷۰	v					
۱۲۰۵	۶۸۷/۰۰	۷۲۲/۰۲	۷۱۳/۷۰	tr					
۱۲۰۶	۷۸۶/۰۰	۸۳۸/۵۶	۸۱۰/۲۰	tr					
۱۲۰۷	۸۹۲/۳۰	۹۴۴/۳۶	۸۹۴/۲۰	t					
۱۲۰۸	۹۹۴/۹۰	۱۰۳۸/۱۴	۱۰۰۶/۲۰	tr					
۱۲۰۹	۱۰۹۷/۲۰	۱۱۲۶/۶۷	۱۱۰۷/۲۰	v					
۱۲۱۰	۱۰۶۱/۷۰	۱۱۳۴/۸۴	۱۰۸۸/۶۰	tr					
۱۲۱۱	۱۲۹۲/۶۰	۱۱۳۶/۲۶	۱۲۴۹/۳۰	tr					
۱۲۱۲	۱۰۹۴/۱۰	۹۱۳/۳۲	۱۰۶۴/۰۰	t					

آماره های دو روش رگرسیون خطی چندگانه و شبکه ی عصبی مصنوعی در جدول ۴-۷ به منظور مقایسه ی دو روش آورده شده است.

جدول ۴-۷- مقایسه ی آماره های به دست آمده از دو روش ANN و MLR

روش	R_v	R_t	R_{tr}	F_v	F_t	F_{tr}	SE_v	SE_t	SE_{tr}
MLR	۰/۹۳۶	۰/۹۲۷	۰/۹۴۰	۲۴۳/۳۴۰	۲۰۷/۶۸۴	۷۹۵/۳۳۹	۷۰/۳۳۳	۷۵/۵۴۹	۶۸/۱۴۹
ANN	۰/۹۹۲	۰/۹۸۴	۰/۹۹۵	۱۵۴۸۳/۳۲۶	۷۳۴۰/۸۱۰	۷۲۸۲۲/۴۵۸	۲۴/۷۱۶	۳۴/۷۱۴	۱۹/۸۵۱

v: سری اعتبار

t: سری تست

tr: سری آموزش

آن چه که از این جداول استنباط می شود، با توجه به ضرایب هم بستگی بزرگ تر و خطای استاندارد کوچک تر برای شبکه ی عصبی مصنوعی، برتری این روش بر روش MLR در پیش بینی زمان بازداری می باشد.

۴-۶-۲- بررسی ارتباط توصیف کننده های ساختاری وارد شده در مدل با زمان بازداری مولکول ها

در این قسمت با توجه به توصیف کننده های وارد شده در مدل های ANN و MLR یک بررسی اجمالی روی اثرات مختلف موجود در شاخص بازداری ترکیبات مورد مطالعه صورت خواهد گرفت. بهترین مدل انتخاب شده شامل هفت توصیف کننده است که هر کدام بیان گر خصوصیات متفاوتی از مولکول های مورد بررسی است. در ابتدا لازم است قبل از بررسی توصیف کننده ها، مختصری درباره نظریه ی گراف^۱ شرح داده شود. گراف مولکولی را با علامت $G=G(V,E)$ تعریف می کنند که در این رابطه V به عنوان رئوس که نشان دهنده تعداد اتم های موجود در ساختار مولکول، و E به عنوان یال ها که نشان دهنده پیوند های متصل کننده این رئوس (اتم ها) به یکدیگر، معرفی می شوند.

^۱ Graph Theory

تعداد یال های متصل به یک راس را درجه ی آن راس گویند. یک گراف مولکولی حاصل شده از در نظر نگرفتن تمام اتم های هیدروژن، گراف مولکولی تهی شده از هیدروژن^۱ نامیده می شود. با استفاده از نظریه ی گراف و با در نظر گرفتن موقعیت رئوس مولکول نسبت به یکدیگر می توان ساختار یک مولکول را به صورت یک ماتریس نشان داد. این ماتریس با افزایش تعداد اتم ها در مولکول (رئوس) و نیز با بزرگ تر شدن مولکول و ورود حلقه ها به ساختار آن و هم چنین پرشاخه تر شدن مولکول پیچیده تر می شود [۲۲].

اولین توصیف کننده GMTIV می باشد که از نوع توصیف کننده های توپولوژیکی یا توصیف کننده های به دست آمده از گراف مولکولی (معمولا تهی شده از هیدروژن) یعنی توصیف کننده های دو بعدی مستقل از نظر صورت بندی است. این توصیف کننده شاخص توپولوژیکی مولکولی (MTI) گاتمن^۲ با درجه های راس والانس نامیده می شود.

شاخص توپولوژیکی یا شاخص توپولوژیکی مولکولی شولتز^۳ با فرمول کلی ۴-۴ ارائه می شود:

$$MTI = \sum_{i=1}^A [(A + D)_v] \quad (4-4)$$

که در آن بردارهای A و D به ترتیب ماتریس مجاورت و ماتریس مسافت و بردار v یک بردار تعداد اتم های A بعدی ایجاد شده توسط درجه ی راس (δ) از اتم های A در گراف مولکولی تهی شده از هیدروژن است [۹۵]. شاخص توپولوژیکی مولکولی گاتمن (SG) یک شاخص توپولوژیکی از نوع شولتز است که توسط گاتمن [۹۶] به صورت زیر تعریف شد.

$$S_G = \sum_{i=1}^A \sum_{j=1}^A \delta_i \delta_j \cdot d_{ij} \quad (5-4)$$

که در آن $\delta_i \delta_j \cdot d_{ij}$ مسافت توپولوژیکی میان راس های v_i و v_j وزن شده با حاصل ضرب درجه های راس نقاط انتهایی (والانس) است. با توجه به اثر مثبت این توصیف کننده با افزایش آن زمان بازداری

^۱ Hydrogen Depleted

^۲ Gutman Molecular Topological Index

^۳ Scholtz Molecular Topological Index

افزایش می یابد. زیرا با افزایش آن توزیع فضایی مولکول گسترده تر و ممانعت فضایی کمتر شده و برهم کنش حل شونده با فاز ساکن قطبی راحت تر صورت می گیرد.

دومین توصیف کننده $BEHm3$ می باشد نام این توصیف کننده بالاترین مقدار ویژه $n.3$ از ماتریس بردن^۱ که عناصر قطری آن با جرم های اتمی وزن دار شده اند، است. از دسته ی توصیف کننده های BCUT یعنی توصیف کننده ای مولکولی به دست آمده از مقادیر ویژه ی مثبت و منفی از ماتریس مجاورت^۲ که عناصر قطری این ماتریس با وزن های اتمی وزن دار می شوند، است.

ماتریس مجاورت از گراف مولکولی مشتق شده است این ماتریس با نماد A نشان داده می شود که تمام مجموعه اتصالات میان زوج های اتمی مجاور را ارائه می کند [۹۷]. ورودی های این ماتریس a_{ij} در صورتی که دو راس i و j همسایه باشند مقدار یک و در غیر این صورت مقدار صفر را می گیرد. توصیف کننده های بر پایه ی مقدار ویژه از ماتریس های مربعی (معمولاً متقارن) نمایش دهنده ی گراف مولکولی مشتق می شوند و مقادیر ویژه ای از این ماتریس (معمولاً کمترین و بیش ترین) انتخاب می شوند [۹۸].

مقدار ویژه ی بردن^۳: این توصیف کننده ها به عنوان مقدار ویژه از یک ماتریس اتصال اصلاح شده به نام ماتریس بردن (B) حاصل می شوند [۹۹]. این ماتریس یک گراف مولکولی تهی شده از هیدروژن را ارائه می کند که در آن ماتریس B_{ii} یعنی عناصر قطری می توانند در ارتباط با اعداد اتمی یا الکترونگاتیویته و ... و عناصر غیر قطری B_{ij} در ارتباط با مرتبه ی پیوند دو اتم پیوند شده هستند. بالاترین مقدار ویژه n از ماتریس B بر اساس الکترونگاتیویته های اتمی در عناصر قطری و مرتبه ی پیوند بین دو اتم در عناصر غیر قطری است.

اثر متوسط این توصیف کننده مثبت است بنابراین با افزایش آن زمان بازداری افزایش می یابد. هر چه جرم اتمی مولکول ها بیش تر می شود و تعداد حلقه های آروماتیک و باندهای دوگانه افزایش

^۱ Burden Matrix
^۲ Adjacency Matrix
^۳ Burden Eigenvalue

می یابند مقدار $BEHm3$ افزایش می یابد. هر چه قطبیت بیش تر شود برهم کنش فاز ساکن با مولکول های سنگین تر و الکترونگاتیوتر بیش تر می شود.

توصیف کننده ی سوم $GATS 2e$ می باشد که نام آن خود هم بستگی گری^۱ با تاخیر^۲ دو که با الکترونگاتیویته های ساندرسون اتمی وزن دار شده است. این توصیف کننده از نوع توصیف کننده های خود هم بستگی دو بعدی ($2D - autocorrelation$) می باشد که از گراف های مولکولی و از طریق جمع حاصل ضرب وزن های اتمی های انتهایی از تمام طول مسیرهای در نظر گرفته شده محاسبه می شود. توصیف کننده های مولکولی بر اساس تابع خود هم بستگی (AC_l) عبارتند از:

$$AC_l = \int_a^b f(x).f(x+l).dx \quad (۴-۶)$$

$f(x)$ هر تابعی از متغیر x و l تاخیری است که یک بازه ی x را ارائه می کند، a و b بازه ی کلی مطالعه شده از تابع را معرفی می نمایند. تابع $f(x)$ معمولاً تابع وابسته به زمان مانند سیگنال الکتریکی یا تابع وابسته به فضا مانند دانسیته ی جمعیت در فضا است. تابع AC_l بیان می کند که چگونه مقادیر عددی از تابع در بازه های برابر با تاخیر وابسته هستند.

AC_l برای ترتیبی از n مقدار $f(x_i)$ می تواند از طریق جمع حاصل ضرب های مقدار n با مقدار $(i+l)$ ام توسط معادله ی ۴-۷ محاسبه شود:

$$AC_l = \sum_{i=1}^{n-l} f(x_i).f(x_{i+l}) \quad (۴-۷)$$

که l ، تاخیر است که مقادیر 1 و L را در بر دارد و ماکزیمم مقدار L می تواند $n-1$ باشد. L معمولاً یک عدد کوچک ($L < 8$) است. تابع $f(x_i)$ یک خاصیت فیزیکی شیمیایی محاسبه شده برای هر اتم از مولکول مانند جرم اتمی، قطبش پذیری و ... است. برای توصیف کننده های مولکولی خود هم بستگی محاسبه شده از گراف مولکولی، تاخیر l به عنوان مسافت توپولوژیکی d تعریف می شود.

^۱ Geary Auto Correlation

^۲ Lag

ضریب گری^۱ (c(d)) : شاخص کلی از خود هم بستگی فضائی که اگر برای یک گراف مولکولی به کار رود با معادله ی ۸-۴ تعریف می شود:

$$c(d) = \frac{\frac{1}{2\Delta} \cdot \sum_{i=1}^A \sum_{j=1}^A \delta_{ij} \cdot (w_i - w_j)^2}{\frac{1}{(A-1)} \cdot \sum_{i=1}^A (w_i - \bar{w})^2} \quad (8-4)$$

w_i یک خاصیت اتمی (الکترونگاتیویته ی ساندرسون اتمی)، \bar{w} مقدار میانگین آن در مولکول، A تعداد اتم ها، d مسافت توپولوژیکی (یا همان تاخیر در خود هم بستگی)، δ_{ij} دلتای رونکر (اگر $d_{ij}=d$ آن گاه $\delta_{ij}=1$ و در غیر این صورت صفر است). Δ مجموع δ_{ij} یعنی تعداد زوج های راس در مسافت برابر با d است [۱۰۰]. $C(d)$ یک تابع از نوع فاصله است که از صفر تا بی نهایت تغییر می کند. خود هم بستگی قوی مقادیر کم از این شاخص را تولید می کند. مقادیر خود هم بستگی مثبت به مقادیر بین صفر و یک در حالی که خود هم بستگی های منفی مقادیر بزرگتر از یک را ایجاد می کند. اثر متوسط این توصیف کننده منفی است یعنی با افزایش آن (خود هم بستگی کم) زمان بازداری کاهش می یابد و افزایش آن با افزایش الکترونگاتیویته یا اتم های الکترونگاتیو و افزایش اندازه ی مولکول میسر است.

توصیف کننده ی چهارم $C001$ است که بیان کننده ی گروه های CH_3R/CH_4 می باشد. این توصیف کننده از نوع اجزای با مرکزیت اتمی^۲ که بر اساس شمارش ۱۲۰ جز با مرکزیت اتمی همان طور که توسط خوزه-کریپن^۳ تعریف شده، هستند.

کدهای اجزای با مرکزیت اتمی^۴: یک کد با مرکزیت اتمی با دامنه ی کوتاه است که هر اتم را با نوع اتمی اش و انواع پیوند و انواع اتمی از همسایگانش توصیف می کند. جز CH_3R/CH_4 شامل پنج اتم است که دارای چهار پیوند است که شامل یک اتم کربن مرکزی و اتم های پیوند یافته همسایه اش

^۱ Geary Coefficient

^۲ Atom Centered Fragments

^۳ Ghose – Crippen

^۴ Atom Centered Fragment Codes

است. اتم های هیدروژن در نظر گرفته نمی شوند. هر مولکول کاملاً با یک کد اجزا که تعداد اتم های غیر هیدروژنی است معرفی می شود [۱۰۱]. استفاده از این توصیف کننده ها به میزان زیادی اطلاعات شیمیایی ویژه را در ارتباط با گروه های عاملی در یک مولکول افزایش داده است. ثابت های اتمی آب گریزی خوزه- کریپن (توصیف کننده های چربی دوستی): چربی دوستی میزانی از تقسیم بندی ترکیبات میان یک فاز آلی و آبی است [۱۰۲] که معمولاً با ضرایب جداسازی P به صورت غلظت یک ترکیب در فازهای آلی و آبی از سیستم دو بخشی تحت شرایط تعادلی زیر تعریف می شود:

$$P = \frac{[C]_{org}}{[C]_{aq}} \quad (9-4)$$

که $[C]_{aq}$ و $[C]_{org}$ غلظت های حل شده در فازهای آلی و آبی هستند.

چربی دوستی می تواند به دو عبارت اصلی تقسیم بندی شود: قطبیت- آب گریزی = چربی دوستی آب گریزی اشاره به برهم کنش های غیر قطبی از حل شده با فازهای آلی و آبی و قطبیت به برهم کنش های قطبی (برهم کنش یون-دوقطبی، باندهای هیدروژنی) دارد. اثر متوسط این توصیف کننده منفی است بنابراین انتظار می رود که با افزایش آن زمان بازداری کاهش یابد، زیرا افزایش مقدار این توصیف کننده به معنی افزایش تعداد گروه های CH_3R/CH_4 غیرقطبی می باشد در نتیجه همراه با آن خاصیت آب گریزی مولکول نیز افزایش یافته و مقدار برهم کنش ترکیب با فاز ساکن قطبی کمتر شده و زمان بازداری کاهش می یابد.

توصیف کننده ی پنجم ITH است که نام آن محتوای اطلاعات کلی در قدرت نفوذ برابر می باشد. از دسته ی توصیف کننده های GETAWAY یعنی توصیف کننده های محاسبه شده از عناصر ماتریس نفوذ به دست آمده از کوئوردینه های اتمی مرکزی (ماتریس نفوذ مولکولی) می باشد.

محتوای اطلاعات^۱ یک سیستم n عنصری اندازه ای از درجه ی تنوع عناصر در مجموعه [۱۰۳] است و با معادله ی ۱۰-۴ تعریف می شود:

$$I_C = \sum_{g=1}^G n_g \log_2 n_g \quad (10-4)$$

G تعداد دسته های هم ارز مختلف و n_g تعداد عناصر در g امین دسته بوده و n خواهد بود:

$$n = \sum_{g=1}^G n_g \quad (11-4)$$

هر کلاس هم ارزی از طریق تعریف تعدادی از روابط میان عناصر سیستم ساخته می شود. لگاریتم در مبنای دو است تا محتوای اطلاعات به صورت بیتی باشد. محتوای اطلاعات در صورتی صفر می شود یعنی هیچ رابطه هم ارزی وجود ندارد اگر تمام عناصر از یکدیگر متفاوت باشند یعنی $G=n$ دسته ی هم ارزی متفاوت وجود دارند. برعکس محتوای اطلاعات زمانی ماکزیمم است که تمام عناصر مجموعه متعلق به همان دسته باشند ($G=1$) که در این حالت محتوای اطلاعات بیشینه I_C^{\max} را داریم.

$$\max I_C = n \log_2 n \quad (12-4)$$

محتوای اطلاعات کلی یک سیستم شامل n عنصر به صورت معادله ی ۱۳-۴ تعریف می شود:

$$I = \max I_C - I_C = n \log_2 n - \sum_{g=1}^G n_g \log_2 n_g = n.H \quad (13-4)$$

ماتریس نفوذ^۲ ماتریسی $A \times A$ است که در آن A تعداد اتم ها بوده و عناصر قطری (h_{ij}) نفوذ اتم های مولکول را نشان می دهند اتم های دورتر از مرکز دارای مقادیر h_{ij} بزرگ تری نسبت به عناصر نزدیک به مرکز مولکول هستند. بنابراین توصیف کننده های سه بعدی به دست آمده از این ماتریس با معادله ی ۱۴-۴ نوشته می شوند:

$$I_{TC} = A \cdot \log_2 A - \sum_{g=1}^G N_g \cdot \log_2 N_g \quad (14-4)$$

^۱ Information Content

^۲ Maximal Information Content

^۳ Influence Matrix or Leverage Matrix

A تعداد اتم های تقسیم بندی شده در دسته های هم ارز G با بزرگی مقادیر h_{ij} و N_g تعداد راس ها با عناصر قطری برابر h_{ij} از ماتریس نفوذ هستند.

اثر متوسط ITH مثبت است یعنی با افزایش آن زمان بازداری افزایش می یابد و این افزایش زمانی اتفاق می افتد که تعداد کل عناصر افزایش یابد و I_c به صفر نزدیک شود یعنی تمام عناصر در یک دسته قرار گیرند (یا مشابه باشند). با افزایش آن میزان نفوذ اتم ها افزایش می یابد در نتیجه ممانعت فضایی کمتر شده و برهم کنش با فاز ساکن راحت تر صورت می گیرد.

فصل پنجم

مدل سازی زمان بازداری ۱۲۶ دی فنیل اتر

پلی برومینه شده (PBDE) مشابه بر روی فاز

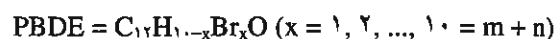
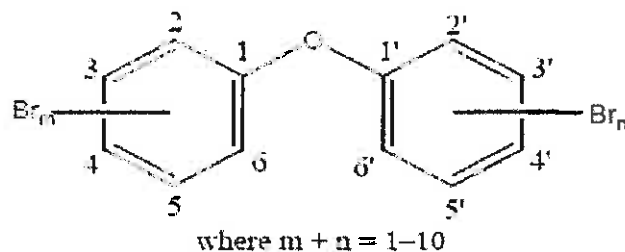
ثابت کروماتوگرافی گازی موئینه ۱-DB

۵-۱- مقدمه

در این تحقیق فاکتور بازداری یک سری از مولکول ها که به وسیله روش های کروماتوگرافی گازی جداسازی شده اند، با استفاده از روش رگرسیون خطی چندگانه و شبکه ی عصبی مصنوعی مورد بررسی قرار گرفته است. بخش تجربی این پژوهش شامل مراحل زیر می باشد: انتخاب سری داده ها، انتخاب توصیف کننده ها، رگرسیون خطی چندگانه و مدل سازی به وسیله شبکه ی عصبی مصنوعی.

۵-۲- انتخاب سری داده ها

سری داده ها از نتایج کروماتوگرافی گازی برای تعیین زمان بازداری ۱۲۶ دی فنیل اتر پلی برمینه شده^۱ در ستون موئینه ی DB-۱ که توسط یک گروه تحقیقاتی هلندی با سرپرستی پیتر کوریتار^۲ انجام شد، به دست آمد [۱۰۴]. PBDE ها، ترکیباتی آلی هستند که به عنوان بازدارنده های احتراق استفاده می شوند. مانند سایر بازدارنده های احتراق برمینه شده، PBDE ها در محصولات بسیاری مانند مواد ساختمانی، مدارهای الکترونیکی، مبلمان، وسایل نقلیه ی موتوری، پلاستیک ها و ... استفاده می شوند و شامل دو حلقه ی آروماتیک برم دار شده و متصل شده توسط یک گروه اتری هستند (شکل ۵-۱).



شکل ۵-۱- ساختار و فرمول شیمیایی دی فنیل اتر پلی برمینه شده (PBDE)

خانواده ی PBDE ها شامل ۲۰۹ استخلاف ممکن است که مشابه^۳ نامیده می شوند و روش نامگذاری

^۱ Polybrominated Diphenyl Ether (PBDE)

^۲ Peter Koryt'ar

^۳ Congener

آن ها در جدول (۱-۵) آورده شده است.

جدول ۱-۵- روش نامگذاری ۲۰۹ دی فنیل اتر پلی برمینه شده (PBDE) مشابه (اولین ردیف موقعیت اتم های برم بر روی یک حلقه ی آروماتیک و اولین ستون موقعیت اتم های برم بر روی حلقه ی دیگر را نشان می دهد. مثلاً BDE۱۵۶ دارای چهار اتم برم در موقعیت های ۲ و ۳ و ۴ و ۵ بر روی یک حلقه و دو اتم برم دیگر در موقعیت های ۳ و ۴ حلقه ی دیگر است).

موقعیت برمهاری هر حلقه	None	۲	۳	۴	۲۳	۲۴	۲۵	۲۶	۳۴	۳۵	۲۳۴	۲۳۵	۲۳۶	۲۴۵	۲۴۶	۳۴۵	۲۳۴۵	۲۳۴۶	۲۳۵۶	۲۳۴۵۶		
۲۳۴۵۶																				۲۰۹		
۲۳۵۶																				۲۰۲	۲۰۸	
۲۳۴۶																		۱۹۷	۲۰۱	۲۰۷		
۲۳۴۵																	۱۹۴	۱۹۶	۱۹۹	۲۰۶		
۳۴۵																۱۶۹	۱۸۹	۱۹۱	۱۹۳	۲۰۵		
۲۴۶															۱۵۵	۱۶۸	۱۸۲	۱۸۴	۱۸۸	۲۰۴		
۲۴۵														۱۵۳	۱۵۴	۱۶۷	۱۸۰	۱۸۳	۱۸۷	۲۰۳		
۲۳۶													۱۳۶	۱۴۹	۱۵۰	۱۶۴	۱۷۲	۱۷۶	۱۷۹	۲۰۰		
۲۳۵												۱۳۳	۱۳۵	۱۴۶	۱۴۸	۱۶۲	۱۷۲	۱۷۵	۱۷۸	۱۹۸		
۲۳۴											۱۲۸	۱۳۰	۱۳۲	۱۳۸	۱۴۰	۱۵۷	۱۷۰	۱۷۱	۱۷۷	۱۹۵		
۳۵										۸۰	۱۰۷	۱۱۱	۱۱۳	۱۲۰	۱۲۱	۱۲۷	۱۵۹	۱۶۱	۱۶۵	۱۹۲		
۳۴											۷۷	۷۹	۱۰۰	۱۰۹	۱۱۰	۱۱۸	۱۱۹	۱۲۶	۱۵۶	۱۵۸	۱۶۳	۱۹۰
۲۶																					۱۸۶	
۲۵																					۱۸۵	
۲۴																					۱۸۱	
۲۳																					۱۷۳	
۴																					۱۶۶	
۳																					۱۶۰	
۲																					۱۴۲	
None																					۱۱۶	

از میان این ۲۰۹ مولکول مشابه ۱۲۶ مولکول که امروزه به طور گسترده در ستون های مؤینه گوناگون برای آنالیز BDE^۱ استفاده می شوند، توسط این گروه تحقیقاتی مورد بررسی قرار گرفته اند. در کار این گروه مقادیر زمان های بازداری نسبی^۲ گزارش شده اند که زمان های بازداری هر BDE نسبت به مجموع زمان های بازداری^۳ مربوط به BDE های شماره ۴۷ و ۱۸۳ می باشند. در جدول ۲-۵ نام (نوع BDE) و زمان بازداری نسبی (RRT) این ترکیبات آورده شده است.

^۱ Brominated Diphenyl Ether (BDE)
^۲ Relative Retention Time (RRT)
^۳ Retention Time (RT)

جدول ۵-۲- نام ۱۲۶ دی فنیل اتر برمینه شده (BDE) مشابه و زمان های بازداری نسبی (RRT)
 آن ها بر حسب BDE های ۴۷ و ۱۸۳

شماره ی ترکیب	نام BDE	RRT	شماره ی ترکیب	نام BDE	RRT
۱	BDE۱	۰/۱۰	۳۸	BDE۴۶	۰/۲۹
۲	BDE۲	۰/۱۰	۳۹	BDE۴۷	۰/۳۰
۳	BDE۳	۰/۱۰	۴۰	BDE۴۸	۰/۲۹
۴	BDE۴	۰/۱۳	۴۱	BDE۴۹	۰/۲۸
۵	BDE۶	۰/۱۴	۴۲	BDE۵۰	۰/۲۶
۶	BDE۷	۰/۱۳	۴۳	BDE۵۱	۰/۲۸
۷	BDE۸	۰/۱۴	۴۴	BDE۵۲	۰/۲۵
۸	BDE۹	۰/۱۳	۴۵	BDE۵۵	۰/۳۳
۹	BDE۱۰	۰/۱۳	۴۶	BDE۵۸	۰/۳۱
۱۰	BDE۱۱	۰/۱۴	۴۷	BDE۶۲	۰/۲۸
۱۱	BDE۱۲	۰/۱۴	۴۸	BDE۶۶	۰/۳۲
۱۲	BDE۱۳	۰/۱۴	۴۹	BDE۶۷	۰/۲۹
۱۳	BDE۱۴	۰/۱۳	۵۰	BDE۶۸	۰/۲۹
۱۴	BDE۱۵	۰/۱۵	۵۱	BDE۶۹	۰/۲۶
۱۵	BDE۱۶	۰/۲۱	۵۲	BDE۷۱	۰/۲۹
۱۶	BDE۱۷	۰/۲۰	۵۳	BDE۷۲	۰/۲۷
۱۷	BDE۱۸	۰/۱۹	۵۴	BDE۷۳	۰/۲۶
۱۸	BDE۱۹	۰/۱۸	۵۵	BDE۷۴	۰/۳۱
۱۹	BDE۲۰	۰/۲۱	۵۶	BDE۷۵	۰/۲۸
۲۰	BDE۲۲	۰/۲۲	۵۷	BDE۷۶	۰/۳۱
۲۱	BDE۲۵	۰/۲۰	۵۸	BDE۷۷	۰/۳۴
۲۲	BDE۲۶	۰/۱۹	۵۹	BDE۷۸	۰/۳۳
۲۳	BDE۲۷	۰/۱۸	۶۰	BDE۷۹	۰/۳۱
۲۴	BDE۲۸	۰/۲۱	۶۱	BDE۸۰	۰/۲۸
۲۵	BDE۲۹	۰/۱۹	۶۲	BDE۸۱	۰/۳۴
۲۶	BDE۳۰	۰/۱۷	۶۳	BDE۸۵	۰/۴۸
۲۷	BDE۳۱	۰/۲۰	۶۴	BDE۸۶	۰/۴۵
۲۸	BDE۳۲	۰/۱۹	۶۵	BDE۸۷	۰/۴۵
۲۹	BDE۳۳	۰/۲۱	۶۶	BDE۸۸	۰/۴۱
۳۰	BDE۳۴	۰/۱۹	۶۷	BDE۹۷	۰/۴۵
۳۱	BDE۳۵	۰/۲۲	۶۸	BDE۹۸	۰/۴۱
۳۲	BDE۳۶	۰/۲۰	۶۹	BDE۹۹	۰/۴۳
۳۳	BDE۳۷	۰/۲۲	۷۰	BDE۱۰۰	۰/۴۰
۳۴	BDE۳۸	۰/۲۱	۷۱	BDE۱۰۱	۰/۴۰
۳۵	BDE۳۹	۰/۲۰	۷۲	BDE۱۰۲	۰/۳۹
۳۶	BDE۴۰	۰/۳۴	۷۳	BDE۱۰۳	۰/۳۶
۳۷	BDE۴۲	۰/۳۲	۷۴	BDE۱۰۴	۰/۳۶

ادامه ی جدول ۵-۲

شماره ی ترکیب	نام BDE	RRT	شماره ی ترکیب	نام BDE	RRT
۷۵	BDE۱۰۵	۰/۵۰	۱۱۳	BDE۱۸۳	۰/۷۰
۷۶	BDE۱۰۶	۰/۴۶	۱۱۴	BDE۱۸۴	۰/۶۷
۷۷	BDE۱۰۸	۰/۴۵	۱۱۵	BDE۱۸۵	۰/۷۱
۷۸	BDE۱۰۹	۰/۴۱	۱۱۶	BDE۱۹۰	۰/۷۸
۷۹	BDE۱۱۴	۰/۴۸	۱۱۷	BDE۱۹۱	۰/۷۳
۸۰	BDE۱۱۵	۰/۴۳	۱۱۸	BDE۱۹۲	۰/۷۲
۸۱	BDE۱۱۶	۰/۴۳	۱۱۹	BDE۱۹۸	۰/۸۸
۸۲	BDE۱۱۸	۰/۴۵	۱۲۰	BDE۲۰۳	۰/۸۹
۸۳	BDE۱۱۹	۰/۴۱	۱۲۱	BDE۲۰۴	۰/۸۶
۸۴	BDE۱۲۰	۰/۴۱	۱۲۲	BDE۲۰۵	۰/۹۲
۸۵	BDE۱۲۱	۰/۳۶	۱۲۳	BDE۲۰۶	۱/۰۷
۸۶	BDE۱۲۳	۰/۴۵	۱۲۴	BDE۲۰۷	۱/۰۴
۸۷	BDE۱۲۴	۰/۴۴	۱۲۵	BDE۲۰۸	۱/۰۳
۸۸	BDE۱۲۵	۰/۴۱	۱۲۶	BDE۲۰۹	۱/۲۲
۸۹	BDE۱۲۶	۰/۴۹			
۹۰	BDE۱۲۷	۰/۴۵			
۹۱	BDE۱۲۸	۰/۶۸			
۹۲	BDE۱۳۱	۰/۵۹			
۹۳	BDE۱۳۸	۰/۶۲			
۹۴	BDE۱۳۹	۰/۵۸			
۹۵	BDE۱۴۰	۰/۵۹			
۹۶	BDE۱۴۱	۰/۵۹			
۹۷	BDE۱۴۲	۰/۶۰			
۹۸	BDE۱۴۴	۰/۵۳			
۹۹	BDE۱۵۳	۰/۵۶			
۱۰۰	BDE۱۵۴	۰/۵۲			
۱۰۱	BDE۱۵۵	۰/۴۹			
۱۰۲	BDE۱۵۶	۰/۶۴			
۱۰۳	BDE۱۵۸	۰/۵۹			
۱۰۴	BDE۱۵۹	۰/۵۹			
۱۰۵	BDE۱۶۰	۰/۵۹			
۱۰۶	BDE۱۶۱	۰/۵۳			
۱۰۷	BDE۱۶۶	۰/۶۲			
۱۰۸	BDE۱۶۷	۰/۶۰			
۱۰۹	BDE۱۶۸	۰/۵۵			
۱۱۰	BDE۱۷۳	۰/۷۸			
۱۱۱	BDE۱۸۱	۰/۷۷			
۱۱۲	BDE۱۸۲	۰/۷۱			

۵-۳- انتخاب توصیف کننده ها

با توجه به موضوع مورد بررسی (بررسی ارتباط کمی ساختار-ویژگی) ابتدا ساختار مولکول ها به وسیله نرم افزار Hyperchem رسم و ساختار هندسی آن ها با احتساب اتم های هیدروژن و با استفاده از روش نیمه تجربی AMI بهینه شد. سپس ساختارهای رسم شده توسط این نرم افزار به عنوان ورودی به نرم افزار Dragon وارد شدند. محاسبه ی توصیف کننده ها توسط این نرم افزار صورت گرفت که در حدود ۱۴۰۰ توصیف کننده برای هر ترکیب به دست آمد. این نرم افزار قادر است ۱۸ گروه توصیف کننده را برای ترکیبات مختلف محاسبه کند.

۵-۴- آنالیز رگرسیون خطی چندگانه

برای ساختن مدلی که بیان گر ارتباط ساختاری ترکیبات مورد بررسی با زمان بازداری آن ها باشد، از روش رگرسیون خطی چندگانه (MLR) استفاده شد. طبیعی است که تعداد توصیف کننده ها باعث پیچیدگی محاسبات شده و هم چنین احتمال وجود فاکتورهایی که با هم برهم کنش دارند افزایش می یابد، لذا تعدادی از این توصیف کننده ها که دارای ۹۰٪ مقادیر یکسان، یا تنها دارای ۱۰٪ مقادیر غیر صفر بودند حذف شدند. و هم چنین از بین توصیف کننده هایی که دارای هم بستگی بیش از ۰/۹ بودند توصیف کننده ای که دارای هم بستگی کم تری با متغیر وابسته بود، از سری داده ها حذف شد. در این تحقیق مقادیر توصیف کننده های محاسبه شده توسط نرم افزار Dragon پس از کاهش متغیرها به عنوان متغیرهای مستقل و زمان های بازداری نسبی مولکول های موردنظر به عنوان متغیر وابسته، به عنوان ورودی به نرم افزار SPSS ارائه شد. در نهایت با استفاده از فهرست آنالیز، گزینه ی رگرسیون خطی و انتخاب روش مرحله ای^۱ چندین مدل مختلف به دست آمد که با توجه به خصوصیات آماری آن ها از جمله ضریب رگرسیون (R)، فاکتور F و خطای استاندارد، بهترین مدل که دارای بیش ترین مقدار R و F و کم ترین مقدار خطای استاندارد و شامل توصیف کننده های تا حد

امکان قابل توجه باشد به عنوان مدل کلی برای ارتباط رفتار بازداري مولکول ها با ساختار آن ها انتخاب می شود. سپس داده ها (شامل مقادير توصيف کننده های مدل کلی و مقادير زمان بازداري نسبی) به دسته های پنج تایی تقسیم بندی شده و در هر دسته شماره های یک، سه و پنج برای سری آموزش و شماره ی دو برای سری تست و شماره ی چهار برای سری اعتبار در نظر گرفته می شوند. بنابراین داده ها به صورت انتخابی به سه دسته ی آموزش، تست و اعتبار به ترتیب با نسبت ۶۰٪، ۲۰٪ و ۲۰٪ و به ترتیب به تعداد ۷۶، ۲۵ و ۲۵ مولکول تقسیم می شوند به طوری که هر سری بهترین نماینده ی کل داده ها است. در نهایت مدل منتخب و ضرایب توصيف کننده های آن از سری آموزشی با استفاده از روش Enter به دست می آید. سری های تست و اعتبار برای ارزیابی قدرت پیش بینی مدل به دست آمده از سری آموزش به کار می روند. ملاحظه می شود که مقادير با ضريب هم بستگی (R) بالا از توصيف کننده های مولکولی حاصل شده اند و حضور توصيف کننده های الکترونی این مقادير را بهبود نمی بخشد، بنابراین توصيف کننده های الکترونی در این مدل وارد نشده اند. جدول ۳-۵ نام توصيف کننده ها، ضرایب رگرسیون و اثر متوسط هر توصيف کننده را برای مدل منتخب این سری از داده ها نشان می دهد.

جدول ۵-۳- مشخصات مدل منتخب توسط رگرسیون خطی چندگانه

اثر متوسط	ضریب رگرسیون	علامت	توصیف کننده
۰/۹۹۰	۰/۰۰۴ (± ۰/۰۰۰)	HTm	شاخص مجموع H /وزن شده با جرم های اتمی
-۲/۶۰۳	-۱/۰۲۲ (± ۰/۱۹۴)	BELv3	کم ترین مقدار ویژه n.۳ از ماتریس خوردن/وزن شده با حجم های وان در والس اتمی
-۰/۲۵۷	-۲/۳۰۸ (± ۰/۳۲۹)	R6u +	خودارتباطی بیشینه R با تاخیر ۶/وزن نشده
-۰/۱۵۸	-۰/۰۰۱ (± ۰/۰۰۰)	Am	یک شاخص اندازه کلی/وزن شده با جرم های اتمی
۰/۴۹۱	۰/۰۱۳ (± ۰/۰۰۳)	G2	شاخص جاذبه گرانشی G۲ (پیوند- محدود شده)

N=۷۶

F= ۹۹۸/۹۲۱

R= ۰/۹۹۳

SE=۰/۰۲۹

که در این جدول N تعداد داده های موجود در سری آموزش، F مقدار مربوط به آماره ی F یا آزمون فیشر و R ضریب هم بستگی خطی بین زمان بازداری پیش بینی شده توسط رگرسیون خطی چندگانه و توصیف کننده ها و SE خطای استاندارد رگرسیون می باشند.

بنابراین معادله ی به دست آمده برای داده های PBDE به صورت رابطه ی ۵-۱ می باشد:

$$RRT = ۱/۰۹۱ (\pm ۰/۲۳۱) + ۰/۰۰۴ (\pm ۰/۰۰۰) HTm - ۱/۰۲۲ (\pm ۰/۱۹۴) BELv3 \quad (۱-۵)$$

$$- ۲/۳۰۸ (\pm ۰/۳۲۹) R6u + - ۰/۰۰۱ (\pm ۰/۰۰۰) Am + ۰/۰۱۳ (\pm ۰/۰۰۳) G2$$

طبق جدول ۵-۲ هر کدام از توصیف کننده های وارد شده در مدل یک خصوصیت ساختاری از مولکول ها را بیان می کنند که نشان دهنده ی تاثیر به سزای ساختار مولکول های مورد بررسی بر زمان بازداری نسبی آن ها در ستون کروماتوگرافی است. از طرفی، ضریب هم بستگی میان

توصیف کننده های وارد شده در مدل منتخب نشان دهنده هم بستگی کم تر از ۰/۹ میان این توصیف کننده ها است. جدول ۴-۵ ماتریس هم بستگی توصیف کننده های وارد شده در مدل نهایی را برای سری داده ها نمایش می دهد.

جدول ۴-۵- ماتریس هم بستگی توصیف کننده های وارد شده در مدل

	<i>HTm</i>	<i>BELv3</i>	<i>R6u_A</i>	<i>Am</i>	<i>G2</i>
<i>HTm</i>	۱	-۰/۷۸۴	۰/۳۰۳	۰/۷۶۹	۰/۸۷۶
<i>BELv3</i>	-۰/۷۸۴	۱	-۰/۱۰۷	-۰/۶۲۳	-۰/۸۲۷
<i>R6u +</i>	۰/۳۰۳	-۰/۱۰۷	۱	۰/۱۲۶	۰/۱۷۲
<i>Am</i>	۰/۷۶۹	-۰/۶۲۳	۰/۱۲۶	۱	۰/۷۱۳
<i>G2</i>	۰/۸۷۶	-۰/۸۲۷	۰/۱۷۲	۰/۷۱۳	۱

جدول ۵-۵ مقادیر توصیف کننده های وارد شده در مدل را برای مولکول های مورد بررسی نشان

می دهد.

جدول ۵-۵- مقادیر توصیف کننده های وارد شده در مدل منتخب برای PBDE ها

شماره ی ترکیب	BDE	HTm	BELv 3	R6u +	Am	G 2
۱	BDE۱	۱۸/۲۵	۱/۱۱	۰/۰۴	۲۱/۰۸	۱۰/۰۳
۲	BDE۲	۱۸/۰۲	۱/۱۱	۰/۰۴	۱۷/۸۶	۱۰/۰۶
۳	BDE۳	۱۵/۹۷	۱/۰۸	۰/۰۴	۱۳/۰۷	۱۰/۰۷
۴	BDE۴	۴۴/۰۵	۱/۱۱	۰/۰۵	۳۱/۲۱	۱۱/۸۶
۵	BDE۶	۳۸/۸۵	۱/۱۱	۰/۰۴	۴۳/۹۱	۱۱/۸۶
۶	BDE۷	۳۱/۱۰	۱/۰۸	۰/۰۴	۴۱/۶۵	۱۱/۸۷
۷	BDE۸	۳۰/۷۹	۱/۰۸	۰/۰۴	۳۳/۶۶	۱۱/۸۸
۸	BDE۹	۳۲/۴۰	۱/۱۱	۰/۰۴	۳۹/۹۲	۱۱/۸۷
۹	BDE۱۰	۲۶/۴۷	۱/۱۱	۰/۰۵	۱۹/۸۸	۱۰/۰۹
۱۰	BDE۱۱	۳۲/۵۹	۱/۱۰	۰/۰۴	۴۶/۹۹	۱۱/۹۰
۱۱	BDE۱۲	۳۷/۴۹	۱/۰۸	۰/۰۴	۳۳/۶۶	۱۱/۸۸
۱۲	BDE۱۳	۳۰/۰۶	۱/۰۸	۰/۰۴	۲۰/۱۳	۱۱/۹۱
۱۳	BDE۱۴	۳۳/۰۲	۱/۰۹	۰/۰۴	۵۲/۰۴	۱۱/۸۹
۱۴	BDE۱۵	۲۸/۲۴	۱/۰۴	۰/۰۴	۱۸/۷۵	۱۱/۹۲
۱۵	BDE۱۶	۷۳/۹۴	۱/۱۰	۰/۰۵	۴۵/۴۰	۱۳/۶۹
۱۶	BDE۱۷	۵۶/۷۹	۱/۰۸	۰/۰۵	۴۹/۲۸	۱۳/۶۹
۱۷	BDE۱۸	۵۶/۳۴	۱/۱۰	۰/۰۵	۳۹/۳۲	۱۳/۶۹
۱۸	BDE۱۹	۴۹/۴۴	۱/۱۰	۰/۰۵	۲۵/۷۳	۱۲/۴۰
۱۹	BDE۲۰	۶۵/۱۴	۱/۰۹	۰/۰۴	۵۶/۰۷	۱۳/۷۰
۲۰	BDE۲۲	۵۶/۴۶	۱/۰۷	۰/۰۴	۳۴/۴۵	۱۳/۷۱
۲۱	BDE۲۵	۵۱/۰۵	۱/۰۸	۰/۰۴	۵۰/۳۴	۱۳/۷۰
۲۲	BDE۲۶	۵۱/۳۵	۱/۱۰	۰/۰۴	۴۹/۷۲	۱۳/۷۰
۲۳	BDE۲۷	۴۸/۱۴	۱/۱۰	۰/۰۴	۴۱/۹۴	۱۲/۴۲
۲۴	BDE۲۸	۴۳/۲۵	۱/۰۴	۰/۰۴	۴۵/۸۵	۱۳/۷۲
۲۵	BDE۲۹	۵۵/۸۰	۱/۰۸	۰/۰۴	۵۳/۳۸	۱۳/۶۹
۲۶	BDE۳۰	۴۰/۳۴	۱/۰۸	۰/۰۴	۴۱/۵۷	۱۲/۴۲
۲۷	BDE۳۱	۴۴/۹۰	۱/۰۸	۰/۰۴	۵۷/۱۱	۱۳/۷۲
۲۸	BDE۳۲	۴۲/۴۱	۱/۰۷	۰/۰۴	۳۷/۶۷	۱۲/۴۲
۲۹	BDE۳۳	۵۸/۷۳	۱/۰۷	۰/۰۴	۵۳/۷۴	۱۳/۷۰
۳۰	BDE۳۴	۵۲/۱۶	۱/۰۹	۰/۰۴	۵۷/۰۱	۱۳/۷۱
۳۱	BDE۳۵	۵۱/۵۷	۱/۰۷	۰/۰۴	۴۸/۶۶	۱۳/۷۲

شماره ی ترکیب	BDE	HTm	BELv 3	R6u +	Am	G 2
۳۲	BDE۳۶	۴۶/۴۶	۱/۰۹	۰/۰۳	۶۱/۱۱	۱۳/۷۲
۳۳	BDE۳۷	۴۸/۹۰	۱/۰۴	۰/۰۴	۳۲/۷۰	۱۳/۷۳
۳۴	BDE۳۸	۶۳/۳۱	۱/۰۶	۰/۰۳	۵۶/۹۰	۱۳/۷۳
۳۵	BDE۳۹	۴۵/۰۴	۱/۰۶	۰/۰۳	۵۷/۱۳	۱۳/۷۳
۳۶	BDE۴۰	۱۰۳/۷۱	۱/۰۹	۰/۰۵	۶۰/۶۸	۱۵/۵۴
۳۷	BDE۴۲	۸۶/۱۴	۱/۰۷	۰/۰۵	۵۳/۶۹	۱۵/۵۱
۳۸	BDE۴۶	۸۰/۱۴	۱/۰۹	۰/۰۵	۴۱/۱۱	۱۴/۲۳
۳۹	BDE۴۷	۶۹/۱۴	۱/۰۴	۰/۰۵	۵۹/۰۵	۱۵/۵۱
۴۰	BDE۴۸	۷۹/۷۲	۱/۰۷	۰/۰۵	۵۳/۹۷	۱۵/۴۹
۴۱	BDE۴۹	۶۹/۰۶	۱/۰۸	۰/۰۵	۶۰/۶۸	۱۵/۵۳
۴۲	BDE۵۰	۸۱/۶۲	۱/۰۸	۰/۰۶	۵۸/۵۹	۱۳/۵۴
۴۳	BDE۵۱	۶۷/۱۴	۱/۰۷	۰/۰۵	۴۴/۸۰	۱۴/۲۴
۴۴	BDE۵۳	۸۵/۱۱	۱/۱۰	۰/۰۶	۵۴/۱۸	۱۲/۴۳
۴۵	BDE۵۵	۸۴/۴۶	۱/۰۷	۰/۰۴	۶۲/۵۱	۱۵/۵۳
۴۶	BDE۵۸	۷۶/۹۴	۱/۰۸	۰/۰۴	۶۲/۱۶	۱۵/۵۵
۴۷	BDE۶۲	۹۵/۱۹	۱/۰۷	۰/۰۶	۶۳/۵۳	۱۳/۶۲
۴۸	BDE۶۶	۷۰/۳۴	۱/۰۴	۰/۰۴	۵۶/۸۶	۱۵/۵۴
۴۹	BDE۶۷	۷۴/۱۶	۱/۰۷	۰/۰۴	۵۶/۳۷	۱۵/۵۲
۵۰	BDE۶۸	۶۴/۴۴	۱/۰۶	۰/۰۴	۶۷/۹۰	۱۵/۵۵
۵۱	BDE۶۹	۷۸/۸۳	۱/۰۷	۰/۰۷	۶۶/۰۴	۱۳/۷۸
۵۲	BDE۷۱	۷۲/۳۸	۱/۰۶	۰/۰۴	۵۴/۴۴	۱۴/۲۴
۵۳	BDE۷۲	۷۲/۴۲	۱/۰۸	۰/۰۴	۶۶/۵۶	۱۵/۵۴
۵۴	BDE۷۳	۸۵/۱۷	۱/۰۸	۰/۰۴	۸۴/۱۷	۱۲/۴۷
۵۵	BDE۷۴	۶۷/۷۱	۱/۰۴	۰/۰۴	۶۲/۴۶	۱۵/۵۳
۵۶	BDE۷۵	۷۳/۹۹	۱/۰۴	۰/۰۵	۶۵/۸۴	۱۳/۵۶
۵۷	BDE۷۶	۸۲/۵۱	۱/۰۶	۰/۰۴	۶۳/۵۰	۱۵/۵۴
۵۸	BDE۷۷	۶۹/۷۰	۱/۰۳	۰/۰۴	۵۰/۴۵	۱۵/۵۵
۵۹	BDE۷۸	۷۵/۸۰	۱/۰۵	۰/۰۳	۶۱/۵۴	۱۵/۵۶
۶۰	BDE۷۹	۶۵/۵۰	۱/۰۵	۰/۰۳	۶۷/۶۳	۱۵/۵۶
۶۱	BDE۸۰	۶۸/۱۵	۱/۰۷	۰/۰۳	۷۵/۸۶	۱۵/۵۶
۶۲	BDE۸۱	۷۴/۶۸	۱/۰۱	۰/۰۳	۵۹/۲۰	۱۵/۵۷
۶۳	BDE۸۵	۱۰۵/۶۳	۱/۰۳	۰/۰۵	۶۳/۸۵	۱۷/۳۶
۶۴	BDE۸۶	۱۱۷/۰۳	۱/۰۶	۰/۰۴	۶۸/۶۹	۱۷/۳۷
۶۵	BDE۸۷	۱۰۴/۷۰	۱/۰۷	۰/۰۴	۶۵/۶۶	۱۷/۳۷
۶۶	BDE۸۸	۱۲۴/۴۴	۱/۰۷	۰/۰۶	۵۶/۱۶	۱۵/۸۱
۶۷	BDE۹۷	۱۰۶/۹۸	۱/۰۶	۰/۰۵	۵۶/۳۶	۱۷/۳۶
۶۸	BDE۹۸	۱۲۵/۷۶	۱/۰۶	۰/۰۶	۶۳/۱۵	۱۵/۳۹
۶۹	BDE۹۹	۹۱/۸۶	۱/۰۴	۰/۰۵	۶۷/۳۴	۱۷/۳۴

ادامه ی جدول ۵-۵

شماره ی ترکیب	BDE	HTm	BELv 3	R6u +	Am	G 2
۷۰	BDE۱۰۰	۹۷/۷۲	۱/۰۴	۰/۰۷	۶۴/۵۴	۱۵/۳۹
۷۱	BDE۱۰۱	۹۹/۵۶	۱/۰۷	۰/۰۴	۶۷/۶۳	۱۷/۳۶
۷۲	BDE۱۰۲	۱۲۴/۷۳	۱/۰۶	۰/۰۶	۸۰/۳۷	۱۴/۳۰
۷۳	BDE۱۰۳	۱۱۴/۲۴	۱/۰۷	۰/۰۵	۱۰۲/۹۵	۱۴/۲۵
۷۴	BDE۱۰۴	۸۲/۵۳	۱/۰۷	۰/۰۴	۵۴/۲۲	۱۴/۵۲
۷۵	BDE۱۰۵	۱۰۲/۷۴	۱/۰۲	۰/۰۴	۶۳/۸۲	۱۷/۳۷
۷۶	BDE۱۰۶	۱۰۷/۵۲	۱/۰۵	۰/۰۴	۷۲/۳۵	۱۷/۳۷
۷۷	BDE۱۰۸	۹۶/۳۰	۱/۰۴	۰/۰۴	۷۲/۵۹	۱۷/۳۷
۷۸	BDE۱۰۹	۱۱۵/۴۸	۱/۰۷	۰/۰۷	۷۵/۵۰	۱۵/۶۳
۷۹	BDE۱۱۴	۱۰۰/۸۱	۱/۰۱	۰/۰۴	۶۹/۳۳	۱۷/۳۸
۸۰	BDE۱۱۵	۱۱۶/۲۴	۱/۰۳	۰/۰۵	۶۲/۱۹	۱۵/۸۰
۸۱	BDE۱۱۶	۱۳۳/۵۵	۱/۰۶	۰/۰۶	۶۶/۷۸	۱۵/۷۷
۸۲	BDE۱۱۸	۹۳/۳۲	۱/۰۳	۰/۰۴	۶۶/۴۹	۱۷/۳۵
۸۳	BDE۱۱۹	۱۱۵/۴۸	۱/۰۳	۰/۰۵	۶۹/۶۸	۱۵/۷۸
۸۴	BDE۱۲۰	۹۵/۲۴	۱/۰۵	۰/۰۴	۷۴/۱۰	۱۷/۳۵
۸۵	BDE۱۲۱	۹۳/۲۱	۱/۰۵	۰/۰۳	۱۰۴/۹۵	۱۵/۱۷
۸۶	BDE۱۲۳	۹۴/۱۰	۱/۰۱	۰/۰۴	۷۰/۳۵	۱۷/۳۸
۸۷	BDE۱۲۴	۱۰۲/۷۱	۱/۰۵	۰/۰۴	۷۵/۲۵	۱۷/۳۸
۸۸	BDE۱۲۵	۱۲۷/۷۳	۱/۰۴	۰/۰۵	۱۰۰/۵۲	۱۴/۲۹
۸۹	BDE۱۲۶	۹۴/۰۰	۱/۰۱	۰/۰۳	۶۶/۳۲	۱۷/۴۰
۹۰	BDE۱۲۷	۹۷/۴۵	۱/۰۳	۰/۰۳	۷۸/۴۲	۱۷/۳۹
۹۱	BDE۱۲۸	۱۴۱/۷۱	۱/۰۱	۰/۰۴	۷۰/۹۸	۱۹/۱۹
۹۲	BDE۱۳۱	۱۵۵/۰۷	۱/۰۵	۰/۰۷	۷۶/۷۷	۱۷/۴۸
۹۳	BDE۱۳۸	۱۲۶/۵۵	۱/۰۲	۰/۰۴	۶۹/۰۹	۱۹/۱۸
۹۴	BDE۱۳۹	۱۴۲/۲۰	۱/۰۳	۰/۰۶	۶۲/۱۶	۱۷/۶۴
۹۵	BDE۱۴۰	۱۴۹/۴۷	۱/۰۲	۰/۰۶	۶۶/۴	۱۷/۶۵
۹۶	BDE۱۴۱	۱۳۵/۰۴	۱/۰۵	۰/۰۴	۷۵/۷۷	۱۹/۲۰
۹۷	BDE۱۴۲	۱۵۸/۰۸	۱/۰۵	۰/۰۶	۶۳/۷۰	۱۷/۶۵
۹۸	BDE۱۴۴	۱۴۷/۲۱	۱/۰۷	۰/۰۵	۹۷/۱۴	۱۶/۰۹
۹۹	BDE۱۵۳	۱۲۲/۲۵	۱/۰۳	۰/۰۴	۷۶/۱۲	۱۹/۱۸
۱۰۰	BDE۱۵۴	۱۴۴/۰۲	۱/۰۳	۰/۰۵	۹۸/۶۸	۱۶/۱۰
۱۰۱	BDE۱۵۵	۱۳۹/۰۸	۱/۰۳	۰/۱۰	۶۶/۸۵	۱۷/۶۲
۱۰۲	BDE۱۵۶	۱۲۵/۸۵	۱/۰۱	۰/۰۴	۷۶/۳۲	۱۹/۲۰
۱۰۳	BDE۱۵۸	۱۴۲/۳۴	۱/۰۲	۰/۰۵	۶۷/۱۲	۱۷/۵۲
۱۰۴	BDE۱۵۹	۱۲۷/۰۹	۱/۰۳	۰/۰۳	۸۲/۳۰	۱۹/۲۱
۱۰۵	BDE۱۶۰	۱۵۵/۱۲	۱/۰۵	۰/۰۵	۷۵/۱۰	۱۷/۶۷
۱۰۶	BDE۱۶۱	۱۵۳/۶۵	۱/۰۴	۰/۰۵	۱۱۴/۹۹	۱۶/۰۶
۱۰۷	BDE۱۶۶	۱۴۲/۸۸	۱/۰۱	۰/۰۵	۷۲/۴۰	۱۷/۲۴

شماره ی ترکیب	BDE	HTm	BELv 3	R6u +	Am	G 2
۱۰۸	BDE۱۶۷	۱۲۴/۷۲	۱/۰۱	۰/۰۴	۷۸/۹۴	۱۹/۲۱
۱۰۹	BDE۱۶۸	۱۲۶/۰۲	۱/۰۰	۰/۰۳	۱۰۱/۲۴	۱۶/۲۴
۱۱۰	BDE۱۷۳	۱۹۳/۲۸	۱/۰۴	۰/۰۶	۷۲/۷۳	۱۹/۴۸
۱۱۱	BDE۱۸۱	۱۷۰/۵۴	۱/۰۱	۰/۰۶	۷۰/۴۸	۱۹/۰۶
۱۱۲	BDE۱۸۲	۱۷۴/۴۶	۱/۰۰	۰/۰۶	۱۰۹/۸۰	۱۷/۹۸
۱۱۳	BDE۱۸۳	۱۶۸/۸۷	۱/۰۲	۰/۰۶	۱۰۳/۶۵	۱۷/۹۵
۱۱۴	BDE۱۸۴	۱۸۴/۳۲	۱/۰۲	۰/۱۱	۸۲/۳۱	۱۷/۹۰
۱۱۵	BDE۱۸۵	۱۸۵/۲۴	۱/۰۵	۰/۰۵	۹۴/۲۱	۱۷/۹۴
۱۱۶	BDE۱۹۰	۱۸۶/۵۶	۱/۰۱	۰/۰۵	۸۲/۶۳	۱۹/۴۶
۱۱۷	BDE۱۹۱	۱۵۴/۵۸	۰/۹۹	۰/۰۳	۱۰۰/۷۳	۱۸/۰۷
۱۱۸	BDE۱۹۲	۱۵۷/۲۳	۱/۰۳	۰/۰۳	۱۰۴/۷۴	۱۸/۰۱
۱۱۹	BDE۱۹۸	۲۲۱/۴۲	۱/۰۲	۰/۰۵	۱۰۶/۰۰	۱۹/۷۷
۱۲۰	BDE۲۰۳	۲۱۶/۱۸	۱/۰۱	۰/۰۶	۹۸/۷۶	۱۹/۹۰
۱۲۱	BDE۲۰۴	۱۷۹/۶۲	۱/۰۰	۰/۰۳	۷۸/۴۵	۱۸/۳۷
۱۲۲	BDE۲۰۵	۲۰۷/۳۶	۰/۹۷	۰/۰۴	۱۰۸/۱۵	۱۹/۸۷
۱۲۳	BDE۲۰۶	۲۵۴/۰۳	۰/۹۷	۰/۰۵	۱۰۷/۱۹	۲۱/۷۳
۱۲۴	BDE۲۰۷	۲۵۴/۳۰	۰/۹۹	۰/۰۷	۸۴/۷۴	۲۰/۲۰
۱۲۵	BDE۲۰۸	۲۴۵/۷۸	۱/۰۱	۰/۰۴	۸۹/۹۱	۱۸/۹۴
۱۲۶	BDE۲۰۹	۲۸۳/۱۷	۰/۹۶	۰/۰۴	۹۳/۱۷	۲۰/۸۹

اثر این توصیف کننده ها بر زمان بازداري در پایان این فصل بررسی می شود.

۵-۵- مدل سازی به روش شبکه ی عصبی

در این تحقیق مدل شبکه ی عصبی مصنوعی با استفاده از برنامه نویسی در نرم افزار MATLAB به دست آمد. ابتدا مقادیر توصیف کننده های به دست آمده از مدل MLR به صورت ۱۲۶ بردار پنج عنصری به عنوان بردارهای ورودی و زمان های بازداري نسبی متناظر با آن ها به صورت ۱۲۶ بردار تک عنصری به عنوان بردارهای هدف، هر دو به صورت یک جا برای آموزش مجموعه ای به نرم افزار MATLAB ارائه شدند. مرحله بعدی ایجاد شبکه و آموزش آن تا زمانی که رابطه ی میان ورودی ها و هدف ها را یاد بگیرد است. شبکه ی مورد استفاده با پس انتشار، شبکه ی پیش خور دو لایه ای با

تابع انتقال tan-sig در لایه ی مخفی و یک تابع انتقال خطی در لایه ی خارجی و تابع آموزشی لونبرگ-مارکوارت است.

با فراخوانی newff یک شبکه ی دولایه ای با تعداد نورون های دلخواه در لایه ی مخفی ایجاد می شود. شبکه های پیش خور دو لایه ای به طور بالقوه ای هر رابطه ی ورودی-خروجی همراه با تعداد محدودی از ناپیوستگی ها را ارائه می کنند، با فرض این که نورون های کافی در لایه ی مخفی وجود دارند. برای کارایی بیش تر شبکه، همراه با دستور ایجاد شبکه داده های ورودی در بازه ی [۱،-۱] مقیاس بندی می شوند.

بردارها در ورودی ها و هدف ها به صورت گزینشی مطابق با همان اندیس های به کار رفته برای تقسیم بندی داده ها در MLR به سه سری تقسیم می شوند که این کار با استفاده از تابع divideind و با تقسیم بندی ورودی ها و هدف ها به دسته های پنج تایی و در هر دسته انتخاب داده های یک و سه و پنج برای سری آموزش و داده ی شماره دو برای تست و داده ی شماره چهار برای اعتبار صورت می گیرد، بدین ترتیب ۶۰٪ بردارها برای آموزش شبکه استفاده شده و ۲۰٪ بردارها برای اعتبار شبکه یعنی این که تا چه حدی شبکه عمومیت دارد به کار می روند، ۲۰٪ آخری نیز به عنوان تست کاملاً مستقل از تعمیم شبکه استفاده می شود.

به وزن ها و بایاس های اولیه به طور تصادفی مقادیر بین -۱ و ۱ و به پارامترهای آموزشی مقادیر مناسب داده می شود. توجه شود که این مقادیر تنها برای شروع آموزش در نظر گرفته می شوند و کلیه ی این پارامترها در طول آموزش شبکه بهینه می شوند.

مرحله ی بعدی کار، آموزش دادن شبکه با استفاده از داده ها است. آموزش یک نمودار کارایی بر حسب تعداد دوره ها ایجاد می کند. این نمودار، میانگین مربع خطای مربوط به شبکه را که با یک مقدار بزرگ شروع شده و به یک مقدار کوچک تر ختم می شود نمایش می دهد، به عبارت دیگر نشان می دهد که شبکه در حال یادگیری است. نمودار شامل سه خطا است. آموزش بر روی بردارهای آموزشی تا زمانی ادامه می یابد که آموزش خطای شبکه را در بردارهای اعتبار کاهش دهد. هنگامی

که خطای شبکه در بردارهای اعتبار شروع به زیاد شدن کند، آموزش متوقف می شود. این فن به صورت خودکار از مسئله ی برازش بیش از حد که بسیاری از بهینه سازی ها و الگوریتم های یادگیری را مبتلا می کند، اجتناب می کند. در نهایت ۲۰٪ آخری از بردارها یک تست مستقل از تعمیم شبکه را به داده هایی که شبکه هرگز ندیده است، فراهم می کنند. با انجام دستور train خط دستوری ای که حاصل می شود شامل همان پیشرفت میانگین مربع خطای بزرگ به یک مقدار خیلی کوچک تر است، هم چنین نشان می دهد که آموزش در نقطه ای که شبکه بهترین عمومیت را برای بردارهای اعتبار دارد، متوقف می شود. خطاهای پایانی مربوط به سه سری در هر بار آموزش، استخراج و یادداشت می شوند. از sim برای تولید بردارهای خروجی شبکه استفاده می شود.

اگر شبکه به میزان کافی صحت ندارد برای بهبود نتایج می توان از سه راه حل کمک جست:

۱) می توان برای تنظیم مقدار شبکه و آموزش دوباره تلاش نمود. هر وقت که به یک شبکه ی پیش خور مقدار اولیه داده می شود، پارامترهای شبکه متفاوت بوده و ممکن است حل های متفاوتی را تولید کنند.

۲) به عنوان دیدگاه دوم، می توان تعداد نورون های مخفی را افزایش داد. نورون های خیلی کم می توانند منجر به برازش پایین تر از حد شوند. نورون های بسیار زیاد می توانند در برازش بیش از حد شرکت نمایند و به مشکل تشخیص پائین برخورد می نمائیم یعنی در تمام نقاط برازش به خوبی صورت می گیرد، اما منحنی برازش به میزان زیادی میان این نقاط نوسان می کند [۱۰۴].

۳) سرانجام، استفاده از داده های آموزشی اضافی را امتحان می نمائیم. تامین داده های اضافی برای شبکه بیش تر شبیه به تولید شبکه ای است که برای داده های جدید، خوب عمومیت می یابد.

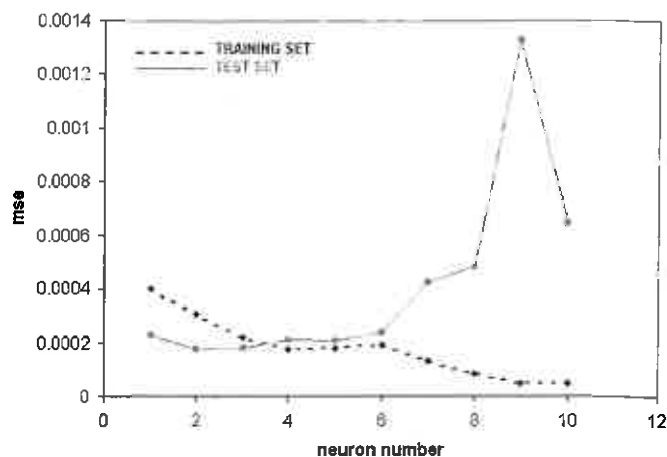
۵-۶- بهینه سازی پارامترهای شبکه

طی این برنامه نویسی پس از انتخاب ورودی های شبکه، چندین پارامتر تجربی می بایست بهینه شوند که به ترتیب عبارتند از:

- تعداد نورون های لایه ی پنهان
- مقدار پارامتر μ
- تعداد دوره های آموزش

۵-۶-۱- بهینه سازی تعداد نورون های لایه ی پنهان

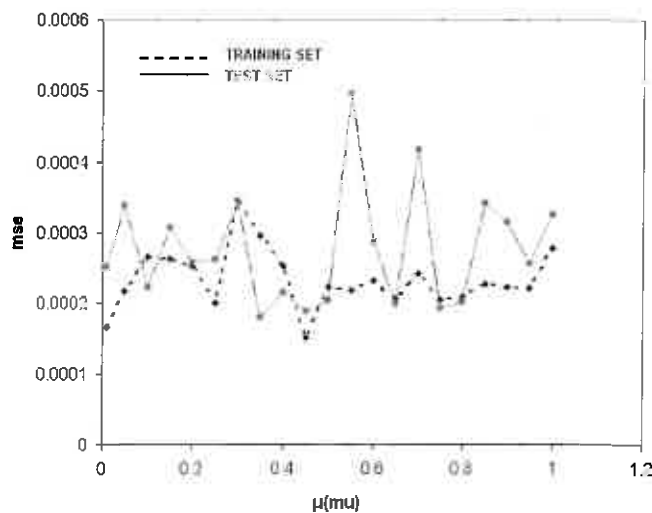
تعداد نورون های لایه ی مخفی بین ۱ تا ۱۰ تغییر داده شد، سپس منحنی میانگین مربع خطا (mse) بر حسب تعداد نورون ها برای سری آموزش و تست رسم گردید و نقطه ای که کم ترین خطا را برای هر دو سری داشت به عنوان تعداد بهینه انتخاب گردید. برای داده های PBDE تعداد بهینه ی نورون ها ۴ به دست آمد (شکل ۵-۲).



شکل ۵-۲- نمودار میانگین مربع خطا (mse) بر حسب تعداد نورون های لایه ی پنهان

۵-۶-۲- بهینه سازی مقدار μ

در این مرحله تعداد نورون های شبکه برابر چهار قرار داده شد و برای بهینه کردن مقدار μ ، مقدار این پارامتر بین ۰/۰۱ تا ۱/۰۰ با فاصله ی ۰/۰۵ تغییر داده شد و سپس برای هر مورد مقدار mse محاسبه گردید و در نهایت منحنی mse بر حسب μ رسم گردید و نقطه ای که کم ترین خطا را برای هر دو سری داشت ($\mu=۰/۴۵$) به عنوان مقدار بهینه انتخاب گردید. نمودار آن در شکل ۳-۵ نمایش داده شده است.



شکل ۳-۵- نمودار میانگین مربع خطا (mse) بر حسب مقادیر μ

۵-۶-۳- بهینه سازی تعداد دوره های آموزش (epoch)

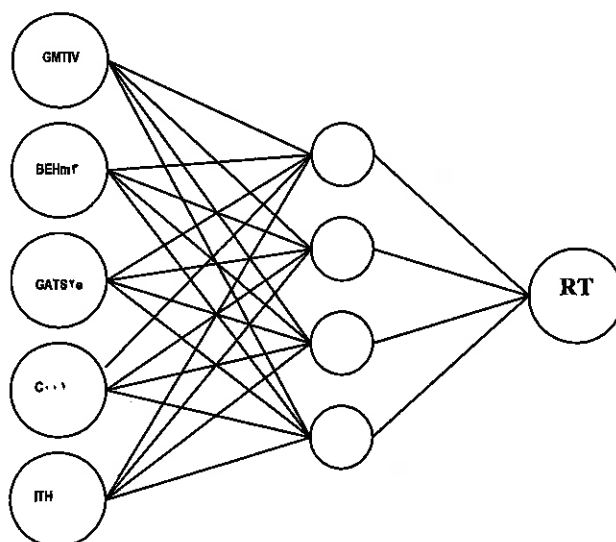
در نهایت با ارائه ی مقادیر بهینه شده تعداد نورون ها و پارامتر μ به شبکه تعداد نهایی دوره ها به دست آمد که در این مورد تعداد بهینه ی دوره ها، دوازده (۱۲) می باشد.

توابع و مقادیر بهینه ی پارامترهای تجربی برای شبکه ی عصبی به صورتی است که در جدول ۵-۶ برای داده های PBDE نمایش داده شده است.

جدول ۵-۶- توابع و مقادیر پارامترهای مهم شبکه ی عصبی

trainlm	تابع آموزش
tansig	تابع انتقال لایه ی پنهان
purelin	تابع انتقال لایه ی خروجی
MSE	تابع کارایی
rands	تابع مقدار دهی اولیه وزن و بایاس
Early Stopping	بهبود تعمیم
۴	تعداد نورون های لایه ی پنهان
۰/۴۵	پارامتر $\mu(\mu)$
۱۲	تعداد دوره ها

ساختار شبکه ی عصبی به دست آمده پس از انجام بهینه سازی های فوق به طور شماتیک در شکل ۵-۴ نشان داده شده است.

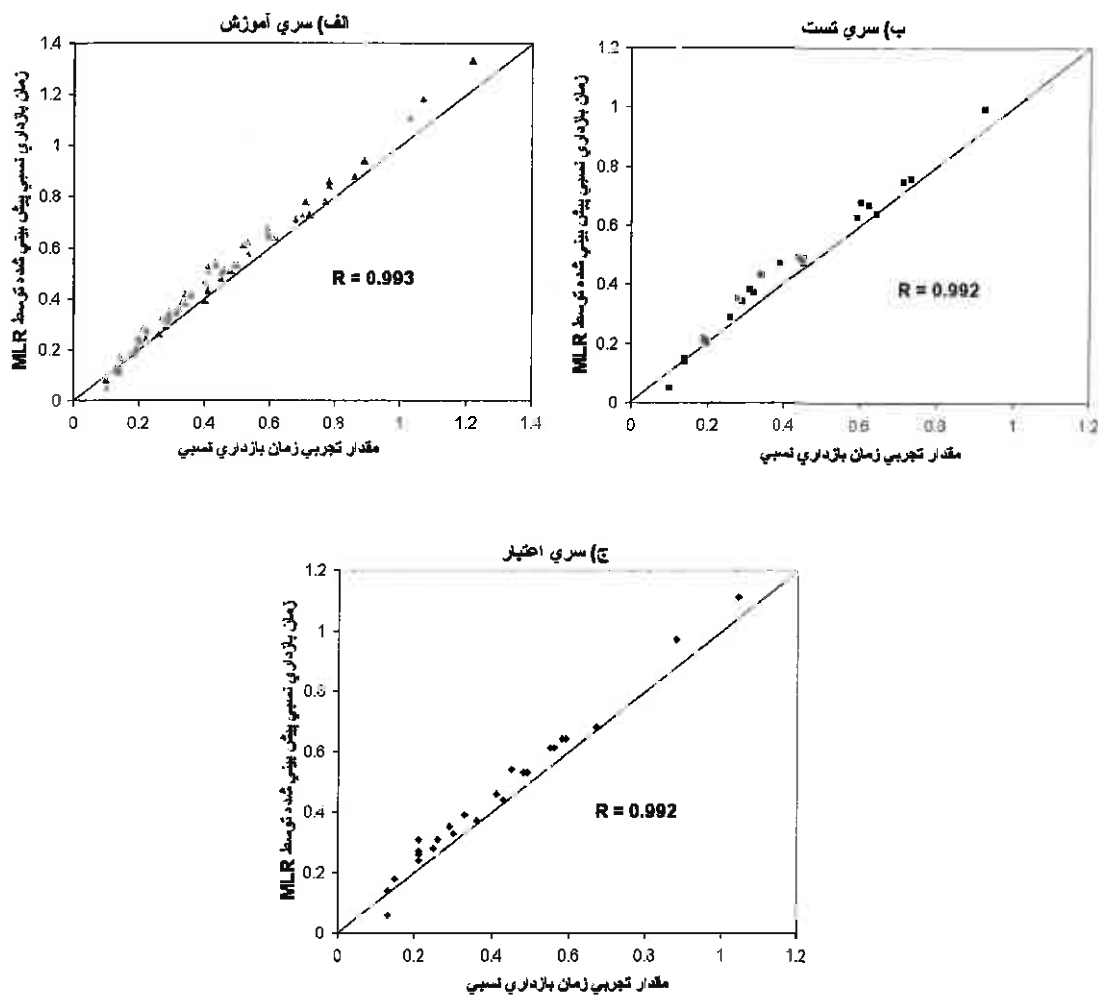


شکل ۵-۴- تصویر شماتیک ساختار شبکه ی عصبی مصنوعی به دست آمده پس از بهینه سازی

۷-۵- بحث و نتیجه گیری

۷-۵-۱- مقایسه روش های رگرسیون خطی چندگانه و شبکه ی عصبی مصنوعی

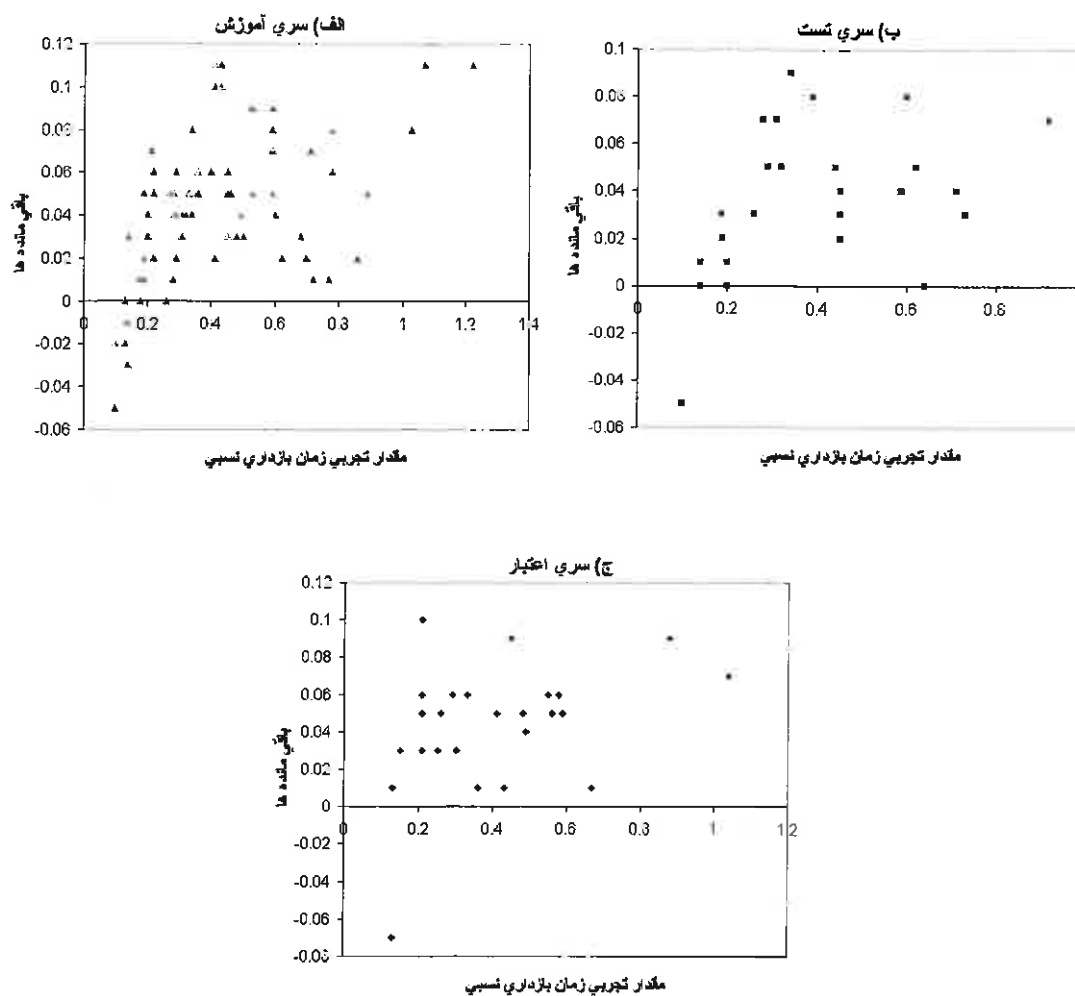
شکل ۵-۵ نمودارهای زمان بازداری محاسبه شده با استفاده از روش آنالیز رگرسیون چندگانه را برای ترکیبات مورد مطالعه نسبت به زمان بازداری تجربی نشان می دهد.



شکل ۵-۵- منحنی زمان بازداری نسبی محاسبه شده توسط روش MLR برای سری آموزش

(ب) سری تست (ج) سری اعتبار

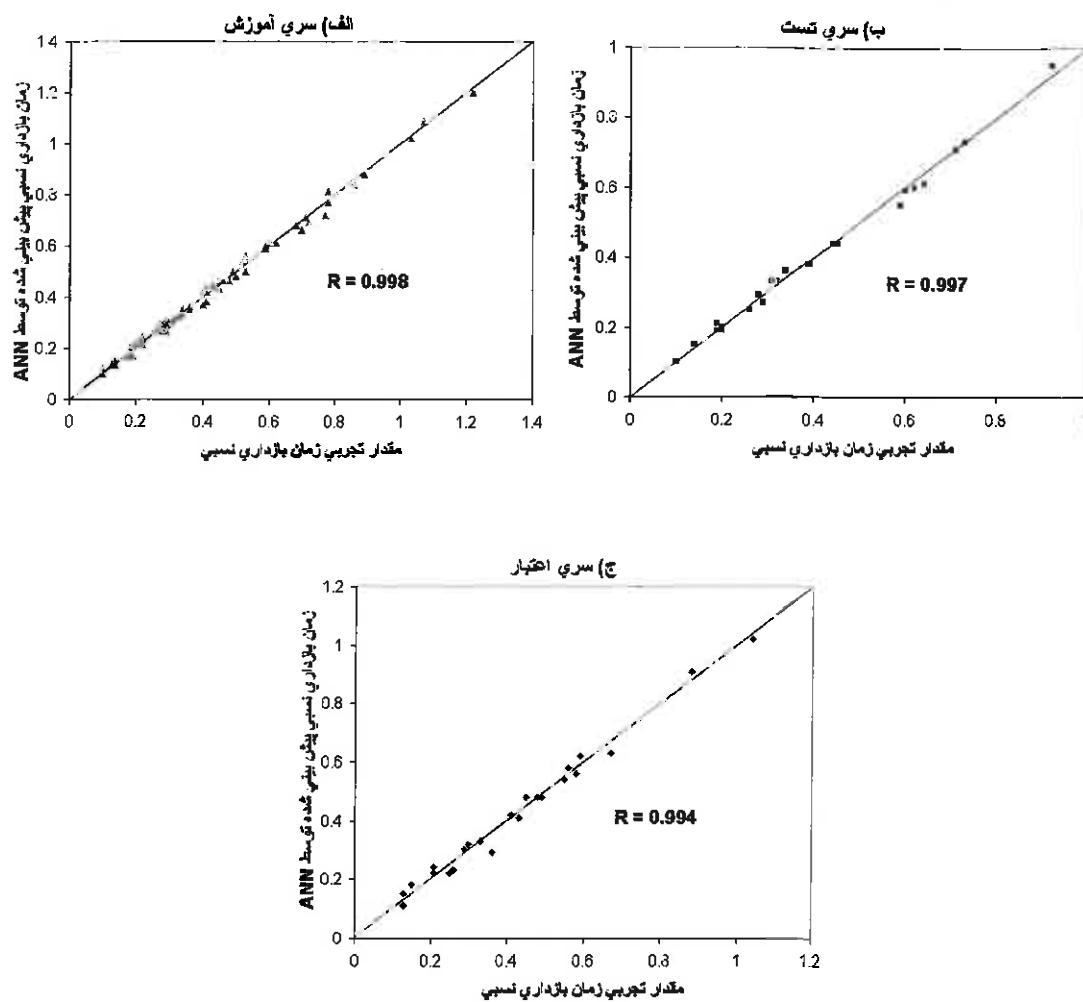
هم چنین در شکل ۵-۶ مقادیر باقیمانده (که از کم کردن مقدار تجربی از مقدار نظری حاصل می شوند) نسبت به مقادیر تجربی برای تکنیک MLR رسم شده اند.



شکل ۵-۶- منحنی مقادیر باقیمانده در مقابل زمان بازداري نسبی تجربی برای روش MLR در

الف) سری آموزش ب) سری تست ج) سری اعتبار

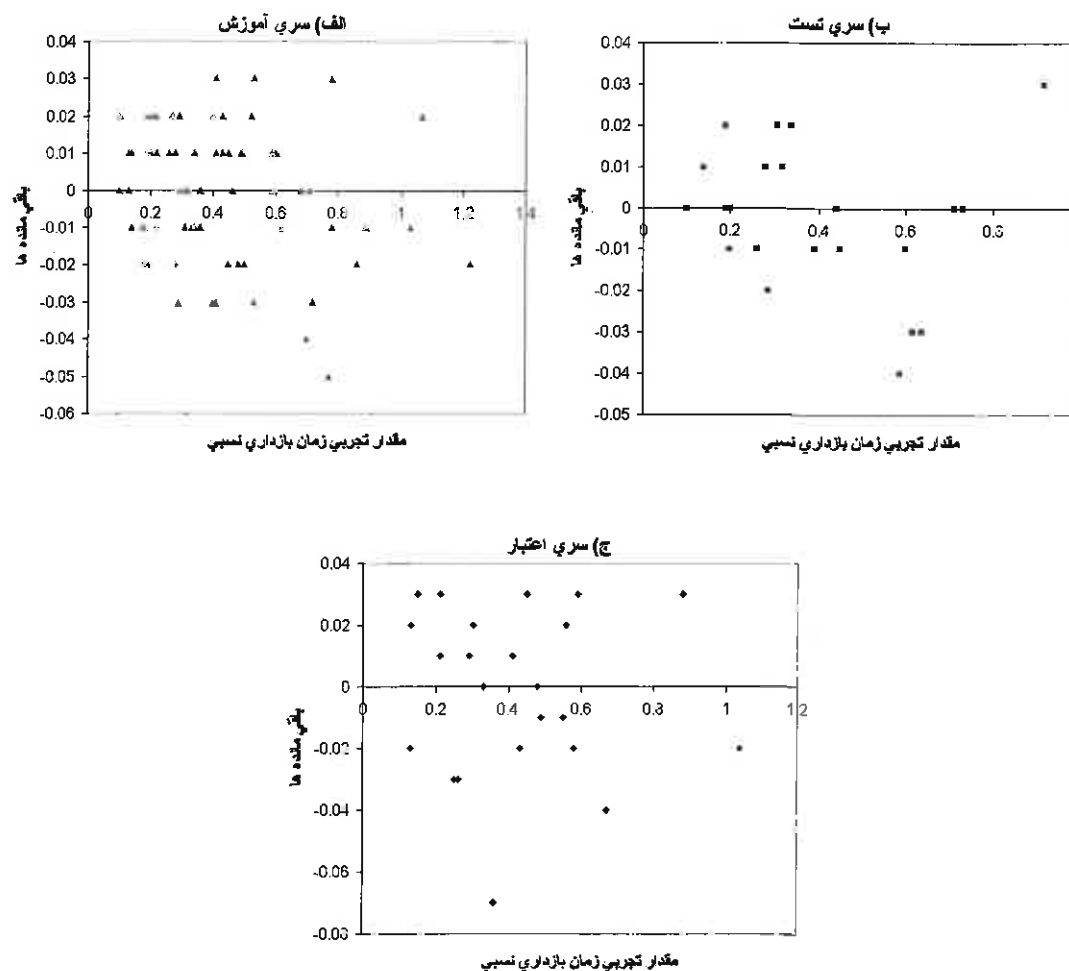
در شکل ۵-۷ مقادیر محاسبه شده زمان بازداری توسط تکنیک شبکه ی عصبی نسبت به مقادیر تجربی رسم شده است.



شکل ۵-۷- منحنی زمان بازداری نسبی محاسبه شده توسط روش ANN برای سری آموزش

ب) سری تست ج) سری اعتبار

هم چنین نمودار باقیمانده ها در مقابل مقادیر تجربی برای تکنیک ANN در شکل ۵-۸ آورده شده است.



شکل ۵-۸- منحنی مقادیر باقیمانده در مقابل مقادیر تجربی زمان بازداري توسط روش ANN برای

الف) سری آموزش ب) سری تست ج) سری اعتبار

نقاط در نمودارهای شکل ۵-۷ نسبت به نمودارهای شکل ۵-۵ در اطراف خط راست متراکم تر هستند و این نشان دهنده ی پیش بینی بهتر شبکه ی عصبی مصنوعی نسبت به روش MLR است. در شکل ۵-۸ مشاهده می کنیم که نقاط نسبت به شکل ۵-۶ به صورت متقارن تری حول خط صفر

انتشار یافته اند، که این مسئله دلالت بر خطای سیستماتیک کمتر در مدل شبکه ی عصبی دارد. بنابراین فرضیه ی ما مبنی بر احتمال وجود رابطه ی غیر خطی بین زمان بازداری ترکیبات و توصیف کننده های وارد شده در مدل تا حدود زیادی ثابت می شود.

مقادیر تجربی زمان بازداری و مقادیر پیش بینی شده ی آن توسط تکنیک های رگرسیون خطی چندگانه و شبکه ی عصبی در جدول ۵-۷ برای داده های PBDE آورده شده است.

جدول ۵-۷- مقادیر تجربی زمان بازداری نسبی (RRT) و مقادیر پیش بینی شده توسط تکنیک های

ANN و MLR. (tr: سری آموزش، t: سری تست، v: سری اعتبار)

شماره	BDE	RRT	MLR	ANN	سری
۱	BDE۱	۰/۱۰	۰/۰۴	۰/۱۰	tr
۲	BDE۲	۰/۱۰	۰/۰۵	۰/۱۰	t
۳	BDE۳	۰/۱۰	۰/۰۸	۰/۱۲	tr
۴	BDE۴	۰/۱۳	۰/۱۴	۰/۱۵	v
۵	BDE۶	۰/۱۴	۰/۱۴	۰/۱۳	tr
۶	BDE۷	۰/۱۳	۰/۱۳	۰/۱۴	tr
۷	BDE۸	۰/۱۴	۰/۱۴	۰/۱۵	t
۸	BDE۹	۰/۱۳	۰/۱۲	۰/۱۳	tr
۹	BDE۱۰	۰/۱۳	۰/۰۸	۰/۱۱	v
۱۰	BDE۱۱	۰/۱۴	۰/۱۲	۰/۱۳	tr
۱۱	BDE۱۲	۰/۱۴	۰/۱۷	۰/۱۵	tr
۱۲	BDE۱۳	۰/۱۴	۰/۱۶	۰/۱۵	t
۱۳	BDE۱۴	۰/۱۳	۰/۱۳	۰/۱۴	tr
۱۴	BDE۱۵	۰/۱۵	۰/۱۹	۰/۱۸	v
۱۵	BDE۱۶	۰/۲۱	۰/۲۹	۰/۲۳	tr
۱۶	BDE۱۷	۰/۲۰	۰/۲۳	۰/۲۲	tr
۱۷	BDE۱۸	۰/۱۹	۰/۲۲	۰/۲۱	t
۱۸	BDE۱۹	۰/۱۸	۰/۱۸	۰/۱۷	tr
۱۹	BDE۲۰	۰/۲۱	۰/۲۷	۰/۲۲	v
۲۰	BDE۲۲	۰/۲۲	۰/۲۸	۰/۲۳	tr
۲۱	BDE۲۵	۰/۲۰	۰/۲۴	۰/۲۱	tr
۲۲	BDE۲۶	۰/۱۹	۰/۲۲	۰/۱۹	t
۲۳	BDE۲۷	۰/۱۸	۰/۱۸	۰/۱۶	tr
۲۴	BDE۲۸	۰/۲۱	۰/۲۴	۰/۲۲	v
۲۵	BDE۲۹	۰/۱۹	۰/۲۵	۰/۲۱	tr

ادامه ی جدول ۵-۷

شماره	BDE	RRT	MLR	ANN	سری
۲۶	BDE۳۰	۰/۱۷	۰/۱۷	۰/۱۶	tr
۲۷	BDE۳۱	۰/۲۰	۰/۲۰	۰/۲۰	t
۲۸	BDE۳۲	۰/۱۹	۰/۱۹	۰/۱۷	tr
۲۹	BDE۳۳	۰/۲۱	۰/۲۷	۰/۲۲	v
۳۰	BDE۳۴	۰/۱۹	۰/۲۲	۰/۲۰	tr
۳۱	BDE۳۵	۰/۲۲	۰/۲۵	۰/۲۱	tr
۳۲	BDE۳۶	۰/۲۰	۰/۲۱	۰/۱۹	t
۳۳	BDE۳۷	۰/۲۲	۰/۲۹	۰/۲۴	tr
۳۴	BDE۳۸	۰/۲۱	۰/۳۱	۰/۲۴	v
۳۵	BDE۳۹	۰/۲۰	۰/۲۳	۰/۲۱	tr
۳۶	BDE۴۰	۰/۳۴	۰/۴۳	۰/۳۵	tr
۳۷	BDE۴۲	۰/۳۲	۰/۳۹	۰/۳۳	t
۳۸	BDE۴۶	۰/۲۹	۰/۳۳	۰/۲۶	tr
۳۹	BDE۴۷	۰/۳۰	۰/۳۴	۰/۳۲	v
۴۰	BDE۴۸	۰/۲۹	۰/۳۵	۰/۳۱	tr
۴۱	BDE۴۹	۰/۲۸	۰/۳۰	۰/۲۹	tr
۴۲	BDE۵۰	۰/۲۶	۰/۲۹	۰/۲۵	t
۴۳	BDE۵۱	۰/۲۸	۰/۲۹	۰/۲۶	tr
۴۴	BDE۵۳	۰/۲۵	۰/۲۹	۰/۲۲	v
۴۵	BDE۵۵	۰/۳۳	۰/۳۹	۰/۳۲	tr
۴۶	BDE۵۸	۰/۳۱	۰/۳۵	۰/۳۰	tr
۴۷	BDE۶۲	۰/۲۸	۰/۳۶	۰/۲۹	t
۴۸	BDE۶۶	۰/۳۲	۰/۳۷	۰/۳۲	tr
۴۹	BDE۶۷	۰/۲۹	۰/۳۶	۰/۳۰	v
۵۰	BDE۶۸	۰/۲۹	۰/۳۲	۰/۲۹	tr
۵۱	BDE۶۹	۰/۲۶	۰/۲۷	۰/۲۷	tr
۵۲	BDE۷۱	۰/۲۹	۰/۳۳	۰/۲۷	t
۵۳	BDE۷۲	۰/۲۷	۰/۳۳	۰/۲۹	tr
۵۴	BDE۷۳	۰/۲۶	۰/۳۱	۰/۲۳	v
۵۵	BDE۷۴	۰/۳۱	۰/۳۵	۰/۳۱	tr
۵۶	BDE۷۵	۰/۲۸	۰/۳۲	۰/۲۷	tr
۵۷	BDE۷۶	۰/۳۱	۰/۴۰	۰/۳۳	t
۵۸	BDE۷۷	۰/۳۴	۰/۳۸	۰/۳۳	tr
۵۹	BDE۷۸	۰/۳۳	۰/۳۸	۰/۳۳	v
۶۰	BDE۷۹	۰/۳۱	۰/۳۴	۰/۳۰	tr
۶۱	BDE۸۰	۰/۲۸	۰/۳۳	۰/۲۹	tr
۶۲	BDE۸۱	۰/۳۴	۰/۴۲	۰/۳۶	t
۶۳	BDE۸۵	۰/۴۸	۰/۵۲	۰/۴۶	tr

ادامه ی جدول ۵-۷

شماره	BDE	RRT	MLR	ANN	سری
۶۴	BDE۸۶	۰/۴۵	۰/۵۴	۰/۴۸	v
۶۵	BDE۸۷	۰/۴۵	۰/۴۸	۰/۴۳	tr
۶۶	BDE۸۸	۰/۴۱	۰/۵۰	۰/۴۲	tr
۶۷	BDE۹۷	۰/۴۵	۰/۵۰	۰/۴۴	t
۶۸	BDE۹۸	۰/۴۱	۰/۵۱	۰/۴۲	tr
۶۹	BDE۹۹	۰/۴۳	۰/۴۵	۰/۴۱	v
۷۰	BDE۱۰۰	۰/۴۰	۰/۴۱	۰/۳۷	tr
۷۱	BDE۱۰۱	۰/۴۰	۰/۴۵	۰/۴۲	tr
۷۲	BDE۱۰۲	۰/۳۹	۰/۴۸	۰/۳۸	t
۷۳	BDE۱۰۳	۰/۳۶	۰/۴۲	۰/۳۵	tr
۷۴	BDE۱۰۴	۰/۳۶	۰/۳۸	۰/۲۹	v
۷۵	BDE۱۰۵	۰/۵۰	۰/۵۳	۰/۴۸	tr
۷۶	BDE۱۰۶	۰/۴۶	۰/۵۲	۰/۴۶	tr
۷۷	BDE۱۰۸	۰/۴۵	۰/۴۸	۰/۴۴	t
۷۸	BDE۱۰۹	۰/۴۱	۰/۴۴	۰/۳۸	tr
۷۹	BDE۱۱۴	۰/۴۸	۰/۵۳	۰/۴۸	v
۸۰	BDE۱۱۵	۰/۴۳	۰/۵۳	۰/۴۴	tr
۸۱	BDE۱۱۶	۰/۴۳	۰/۵۴	۰/۴۵	tr
۸۲	BDE۱۱۸	۰/۴۵	۰/۴۹	۰/۴۴	t
۸۳	BDE۱۱۹	۰/۴۱	۰/۵۱	۰/۴۴	tr
۸۴	BDE۱۲۰	۰/۴۱	۰/۴۷	۰/۴۲	v
۸۵	BDE۱۲۱	۰/۳۶	۰/۴۲	۰/۳۶	tr
۸۶	BDE۱۲۳	۰/۴۵	۰/۵۱	۰/۴۶	tr
۸۷	BDE۱۲۴	۰/۴۴	۰/۵۰	۰/۴۴	t
۸۸	BDE۱۲۵	۰/۴۱	۰/۵۱	۰/۴۲	tr
۸۹	BDE۱۲۶	۰/۴۹	۰/۵۲	۰/۴۸	v
۹۰	BDE۱۲۷	۰/۴۵	۰/۵۱	۰/۴۶	tr
۹۱	BDE۱۲۸	۰/۶۸	۰/۷۰	۰/۶۸	tr
۹۲	BDE۱۳۱	۰/۵۹	۰/۶۲	۰/۵۵	t
۹۳	BDE۱۳۸	۰/۶۲	۰/۶۳	۰/۶۱	tr
۹۴	BDE۱۳۹	۰/۵۸	۰/۶۴	۰/۵۶	v
۹۵	BDE۱۴۰	۰/۵۹	۰/۶۸	۰/۶۰	tr
۹۶	BDE۱۴۱	۰/۵۹	۰/۶۳	۰/۶۰	tr
۹۷	BDE۱۴۲	۰/۶۰	۰/۶۸	۰/۵۹	t
۹۸	BDE۱۴۴	۰/۵۳	۰/۶۰	۰/۵۰	tr
۹۹	BDE۱۵۳	۰/۵۶	۰/۶۰	۰/۵۸	v
۱۰۰	BDE۱۵۴	۰/۵۲	۰/۶۲	۰/۵۴	tr
۱۰۱	BDE۱۵۵	۰/۴۹	۰/۵۴	۰/۵۰	tr

ادامه ی جدول ۵-۷

شماره	BDE	RRT	MLR	ANN	سری
۱۰۲	BDE۱۵۶	۰/۶۴	۰/۶۶	۰/۶۱	t
۱۰۳	BDE۱۵۸	۰/۵۹	۰/۶۶	۰/۵۹	tr
۱۰۴	BDE۱۵۹	۰/۵۹	۰/۶۴	۰/۶۲	v
۱۰۵	BDE۱۶۰	۰/۵۹	۰/۶۷	۰/۶۰	tr
۱۰۶	BDE۱۶۱	۰/۵۳	۰/۶۲	۰/۵۶	tr
۱۰۷	BDE۱۶۶	۰/۶۲	۰/۶۷	۰/۶۰	t
۱۰۸	BDE۱۶۷	۰/۶۰	۰/۶۵	۰/۶۱	tr
۱۰۹	BDE۱۶۸	۰/۵۵	۰/۶۱	۰/۵۴	v
۱۱۰	BDE۱۷۳	۰/۷۸	۰/۸۶	۰/۷۷	tr
۱۱۱	BDE۱۸۱	۰/۷۷	۰/۷۷	۰/۷۲	tr
۱۱۲	BDE۱۸۲	۰/۷۱	۰/۷۶	۰/۷۱	t
۱۱۳	BDE۱۸۳	۰/۷۰	۰/۷۱	۰/۶۶	tr
۱۱۴	BDE۱۸۴	۰/۶۷	۰/۶۸	۰/۶۳	v
۱۱۵	BDE۱۸۵	۰/۷۱	۰/۷۹	۰/۷۱	tr
۱۱۶	BDE۱۹۰	۰/۷۸	۰/۸۶	۰/۸۱	tr
۱۱۷	BDE۱۹۱	۰/۷۳	۰/۷۶	۰/۷۳	t
۱۱۸	BDE۱۹۲	۰/۷۲	۰/۷۳	۰/۶۹	tr
۱۱۹	BDE۱۹۸	۰/۸۸	۰/۹۷	۰/۹۱	v
۱۲۰	BDE۲۰۳	۰/۸۹	۰/۹۴	۰/۸۸	tr
۱۲۱	BDE۲۰۴	۰/۸۶	۰/۸۸	۰/۸۴	tr
۱۲۲	BDE۲۰۵	۰/۹۲	۱/۰۰	۰/۹۵	t
۱۲۳	BDE۲۰۶	۱/۰۷	۱/۱۸	۱/۰۹	tr
۱۲۴	BDE۲۰۷	۱/۰۴	۱/۱۱	۱/۰۲	v
۱۲۵	BDE۲۰۸	۱/۰۳	۱/۱۰	۱/۰۲	tr
۱۲۶	BDE۲۰۹	۱/۲۲	۱/۳۳	۱/۲۰	tr

آماره های دو روش رگرسیون خطی چندگانه و شبکه ی عصبی مصنوعی در جدول ۵-۸ به منظور مقایسه ی دو روش آورده شده است.

جدول ۵-۸- مقایسه ی آماره های به دست آمده از دو روش ANN و MLR

SE_v	SE_t	SE_{tr}	F_v	F_t	F_{tr}	R_v	R_t	R_{tr}	روش
۰/۰۳۰	۰/۰۲۸	۰/۰۲۹	۱۳۶۹/۱۱۸	۱۳۷۵/۲۴۵	۵۰۸۴/۰۸۸	۰/۹۹۲	۰/۹۹۲	۰/۹۹۳	MLR
۰/۰۲۶	۰/۰۱۷	۰/۰۱۷	۱۷۹۶/۴۸۰	۴۰۰۹/۱۷۶	۱۵۷۲۳/۶۴۹	۰/۹۹۴	۰/۹۹۷	۰/۹۹۸	ANN

v: سری اعتبار

t: سری تست

tr: سری آموزش

آن چه از این جدول استنباط می شود، با توجه به ضرایب هم بستگی و مقدار F بزرگ تر و خطاهای استاندارد کوچک تر برای شبکه ی عصبی مصنوعی، برتری این روش بر روش MLR در پیش بینی زمان بازداری مولکول های مورد مطالعه می باشد.

۵-۷-۲- بررسی ارتباط توصیف کننده های ساختاری وارد شده در مدل با زمان های بازداری تجربی

اولین توصیف کننده HTm است که شاخص کلی H که با جرم های اتمی وزن دار شده، می باشد از دسته ی توصیف کننده های GETAWAY است که توصیف کننده های محاسبه شده از عناصر ماتریس نفوذ به دست آمده توسط کوئوردینه های اتم مرکزی (ماتریس نفوذ مولکولی) هستند. ماتریس نفوذ H که ماتریس نفوذ نیز نامیده می شود یک ابزار مهم در تشخیص رگرسیون است که شامل اطلاعاتی درباره متغیرهای مستقل که بر اساس آن ها مدل ساخته می شود است. اگر X یک ماتریس مولکولی با n ردیف و p ستون باشد که n تعداد عناصر و p تعداد پارامترهای مدل باشد، ماتریس H یک ماتریس متقارن $n \times n$ به صورت معادله ۵-۲ است:

$$H = X \cdot (X^T \cdot X)^{-1} \cdot X^T \quad (۲-۵)$$

اثر متوسط HTm مثبت است یعنی با افزایش آن زمان بازداری افزایش می یابد، زیرا در این جا جرم های اتمی موثر است و در واقع تعداد اتم های الکتروننگاتیو برم و متعاقب آن جرم های اتمی افزایش می یابد و برهم کنش با فاز ساکن قطبی بیش تر می شود.

دومین توصیف کننده $BELv3$ است که کم ترین مقدار ویژه $n.3$ از ماتریس بوردن است که با حجم های واندروالس اتمی وزن دار شده است. از دسته ی توصیف کننده های BCUT یعنی توصیف کننده های به دست آمده از مقادیر ویژه ی مثبت و منفی از ماتریس مجاورت که در آن عناصر قطری با وزن های اتمی وزن دار شده اند که مقدار ویژه ی بوردن در $BEHm3$ توضیح داده شد. کم ترین مقدار ویژه n از ماتریس B به عنوان توصیف کننده مولکولی با قدرت تمایز بالا است که در تشخیص و مرتب سازی ساختار مولکولی استفاده می شود. فرض اصلی این است که کم ترین مقدار ویژه در برگیرنده مشارکت تمام اتم ها (حتی هیدروژن) بوده و از این رو توپولوژی تمام مولکول را ارائه می کند. عناصر قطری از ماتریس B متناسب با الکتروننگاتیویته و عناصر غیر قطری منطبق بر مرتبه ی پیوند بین دو اتم پیوند یافته است.

اثر متوسط $BELv3$ منفی است یعنی با افزایش آن زمان بازداری کاهش می یابد. زیرا حجم های واندروالسی افزایش می یابند و احتمال بر هم کنش ترکیبات با فازهای ساکن کاهش یافته و در نتیجه زمان بازداری کم می شود.

توصیف کننده ی سوم $R6u +$ خود هم بستگی بیشینه ی R^1 با تاخیر ϵ که وزن دار نشده است، نامیده می شود. از دسته ی توصیف کننده های GETAWAY یعنی توصیف کننده های محاسبه شده از عناصر ماتریس نفوذ به دست آمده توسط کوئوردینه های اتمی مرکزی (ماتریس نفوذ مولکولی) است.

تابع خود هم بستگی در مبحث *GATS 2e* معرفی شد که در این مورد مقدار تاخیر 1 آن که بیان کننده ی مسافت توپولوژیکی است برابر 6 می باشد و ماتریس نفوذ بدون وزن است یعنی عناصر قطری در ارتباط با الکتروننگاتیویته و عناصر غیر قطری این ماتریس در ارتباط با پیوندها هستند.

اثر متوسط آن منفی بوده بنابراین با کاهش آن زمان بازداری افزایش می یابد. زیرا این توصیف کننده از ماتریس نفوذ با فرمول 3-5 محاسبه می شود :

$$I_{TC} = A \cdot \log_2 A - \sum_{g=1}^G N_g \cdot \log_2 N_g \quad (3-5)$$

کاهش آن در صورتی است که تعداد اتم های برم در ساختار آروماتیک یعنی تعداد کل اتم ها افزایش می یابد اما N_g ثابت می ماند پس I_{TC} افزایش می یابد و زمان بازداری افزایش می یابد.

توصیف کننده ی چهارم Am یک شاخص اندازه ی مجموع¹ است که با جرم های اتمی وزن دار شده است از دسته ی توصیف کننده های WHIM یعنی توصیف کننده های به دست آمده به عنوان اندیس های آماری از اتم های تصور شده به 3 جز اساسی که از ماتریس های کوواریانس وزن شده از کوئوردینه های اتمی حاصل شده اند، می باشد. توصیف کننده های WHIM توصیف کننده های مولکولی هستند که بر اساس تصویر اتم ها در طول محورهای اصلی محاسبه می شوند [105]. این توصیف کننده ها با روشی ایجاد می شوند که اطلاعات مولکولی سه بعدی معتبری را با در نظر گرفتن اندازه، شکل، تقارن و توزیع اتم ها در ارتباط با چارچوب های منبع ثابت بدهند. الگوریتم شامل آنالیز اجزای اصلی بر روی کوئوردینه های کارتیزین مرکزی یک مولکول (ماتریس مولکولی) با استفاده از ماتریس کوواریانس وزن دار شده به دست آمده از طرح های وزن دار شده مختلف برای اتم ها به صورت معادله 4-5 است:

$$S_{jk} = \frac{\sum_{i=1}^A w_i (q_{ij} - \bar{q}_j)(q_{ik} - \bar{q}_k)}{\sum_{i=1}^A w_i} \quad (4-5)$$

¹Total Size Index

که S_{jk} کوواریانس وزن دار شده میان کوئوردینه های اتمی زام و k ام و A تعداد اتم ها و w_i وزن اتم i ام و Q_{ij} و Q_{ik} به ترتیب کوئوردینه زام و k ام ($j,k=x,y,z$) از اتم i ام را ارائه می کنند و \bar{q} مقدار میانگین متناظر است. یکی از طرح های وزن داری پیشنهاد شده توسط جرم اتمی (m) است، تمام وزن ها بر اساس اتم کربن مقیاس بندی می شوند (جدول ۵-۹).

جدول ۵-۹- مقادیر جرم اتمی برای سه اتم

	M	W/M (C)
H	۱,۰۱	۰,۰۸۴
C	۱۲,۰۱	۱,۰۰۰
Br	۷۹,۹۰	۶,۶۵۳

با استفاده از جرم های اتمی به عنوان طرح وزنی مسیرهای سه محور اصلی مسیرهای محورهای اینرسی اصلی هستند. در این موارد اتم های غیر هیدروژنی در نظر گرفته می شوند و بار توپولوژیکی هر اتم وابسته به اتم همسایه اش است.

اثر متوسط این توصیف کننده منفی است یعنی با افزایش آن زمان بازداري کاهش می یابد، زیرا افزایش جرم اتمی به معنی افزایش تعداد اتم های برم در جهت های مختلف بوده و در نتیجه به دلیل افزایش ممانعت فضایی میان PBDE ها و فاز ساکن و عدم برهم کنش مناسب روبرو هستیم بنابراین زمان بازداري کاهش می یابد.

پنجمین توصیف کننده $G2$ شاخص جاذبه ی گرانشی^۱ که تنها به اتم های متصل شده با پیوند، محدود می باشد. از دسته ی توصیف کننده های هندسی است که شامل انواع مختلفی از توصیف کننده های وابسته از لحاظ صورت بندی بر اساس هندسه ی مولکولی هستند.

^۱ Gravitational Index

G_2 از شاخص های گرانشی است که این توصیف کننده های هندسی توزیع جرم در یک مولکول را منعکس می کنند و به صورت معادله ی ۵-۵ تعریف می شوند:

$$G_2 = \sum_{b=1}^B \left(\frac{m_i \cdot m_j}{r_{ij}^2} \right) \quad (5-5)$$

m_i و m_j جرم های اتمی های مدنظر، r_{ij} مسافت های بین اتمی متناظر و B تعداد باندهای مولکول می باشد یعنی شاخص G_2 به زوج اتم های پیوند شده محدود می شود.

اثر متوسط این توصیف کننده مثبت است که با افزایش آن انتظار داریم زمان بازداری افزایش یابد یعنی هر چه تعداد اتم های برم در ساختار PBDE افزایش یابد به دلیل افزایش بیش تر صورت کسر نسبت به مخرج کسر و از طرفی افزایش تعداد جمله ها G_2 افزایش می یابد. با افزایش برم ها قطبش پذیری افزایش یافته و بر هم کنش بیش تری با فاز ساکن برقرار شده و زمان بازداری افزایش می یابد.

آینده نگری

از جمله مسائلی که در کمومتریکس و مطالعات QSAR و QSPR وجود دارد این است که آیا مدل به دست آمده در حضور ترکیباتی که کاملاً جدا از سری ترکیبات مورد استفاده برای مدل سازی هستند نیز قدرت پیش بینی خوبی خواهد داشت. این بدان معنا است که می توان یک محدوده ی کاربرد پذیری^۱ برای مدل مربوطه تعریف کرد که خارج از آن مدل مربوطه نتواند برای پیش بینی ترکیبات درخواستی مفید واقع شود. در این راستا می توان از روش های دسته بندی^۲ در کنار روشهای توسعه ی مدل بهره گرفت.

از آن جا که در این تحقیق از توصیف کننده های موجود در مدل MLR به عنوان ورودی برای شبکه ی عصبی استفاده شده است و چون در روش MLR تنها برهم کنش های خطی بین پارامترها لحاظ می شود، لذا می توان از روش های انتخاب فاکتور مهم دیگر مانند روش الگوریتم ژنتیکی (GA) و الگوریتم طرح ریزی متوالی^۳ (SPA) استفاده کرد. به جای شبکه ی عصبی مصنوعی می توان از روش های SVM^۴ و LS-SVM^۵ نیز استفاده نمود.

از آن جا که به غیر از روش MLR روش های خطی دیگری نیز از جمله حداقل مربعات جزئی (PLS) و آنالیز اجزای اصلی (PCA) قابل استفاده هستند، پیشنهاد می شود از این تکنیک ها نیز در این زمینه استفاده شود و نتایج با هم مقایسه شوند.

^۱ Aplicapability Domain

^۲ Clustering

^۳ Successive Projection Algorithm

^۴ Supported Vector Machine

^۵ Least Squares Suported Vector Machine

- [١] Sattari M., Gharagheizi F. (2008) "Prediction of molecular diffusivity of pure components into air: A QSPR approach", *Chemosphere*, 72, pp:1298-1302
- [٢] Luan F., Liu H.T., Ma W.P., Fan B.T., (2008) "QSPR analysis of air-to-blood distribution of volatile organic compounds", *Ecotoxicology and Environmental Safety*, 71, pp:731-739
- [٣] Luan F., Liu H.T., Wen Y., Zhang X., (2008) "Quantitative structure-property relationship study for estimation of quantitative calibration factors of some organic compounds in gas chromatography", *Anal. Chim. Acta*, 612, pp:126-135.
- [٤] Hemmateenejad B., Shamsipur M., Miri R., Elyasi M., Foroghinia F., Sharghi H., (2008) "Linear and nonlinear quantitative structure-property relationship models for solubility of some anthraquinone, anthrone and xanthone derivatives in supercritical carbon dioxide", *Anal. Chim. Acta*, 610, pp:25-34.
- [٥] Carlucci G., D'Archivio A.A., Maggi M.A., Mazzeo P., Ruggieri F., (2007) "Investigation of retention behaviour of non-steroidal anti-inflammatory drugs in high-performance liquid chromatography by using quantitative structure-retention relationships", *Anal. Chim. Acta*, 601, pp:68-76
- [٦] Li H., Zhang Y.X., Xu L., (2005) "The study of the relationship between the new topological index A_m and the gas chromatographic retention indices of hydrocarbons by artificial neural networks", *Talanta*, 67, pp:741-748.
- [٧] Wold S. "chemometrics: what do we mean with it, and what do we want from it?" And Brown, S. D., "Has the 'Chemometrics revolution' ended? Some views on the past, present and future of Chemometrics", *papers on chemometrics: Philosophy, History and Directions of InCINC'94*. <http://WWW.emsl.pnl.gov:2080/docs/hncinic/homepage.html>
- [٨] Howery D.G., Hirsch R.F., (1983), "Chemometrics in the chemistry curriculum", *J. Chem. Ed.* 60, pp: 656-659.
- [٩] Zupan J., Gasteiger J., (1991), "Neural networks-a new method for solving chemical problems or just a passing phase", *Anal. Chem. Acta*, 248, pp 1-30.
- [١٠] Andersson G.G., Kaufmann P., (2000), "Development of a generalized neural network", *Chemometr. Intell. Lab. Syst.* 50, pp 101-105.
- [١١] Hibert D.b., (1993), "Genetic algorithms in chemistry", *Chemometr. Intell. Lab. Syst.*, 19, pp 277-293.

- [١٢] Katritzky A.R., Maran U., Lobanov V.S., Karelson M., (2000). "Structurally diverse quantitative structure–property relationship correlations of technologically relevant physical properties". *J. Chem. Inf. Comp. Sci.* 40, pp 1–18.
- [١٣] Hansch C., Leo A. (1995), "Exploring QSAR. Fundamentals and Applications in Chemistry and Biology", *American Chemical Society*, Washington, DC.
- [١٤] Katritzky et al., (1995), (2000), (2006); Karelson et al., (1996); Katritzky and Fara, (2005).
- [١٥] Hemmateenejad B., Javadnia K., Elyasi M. (2007) *Anal. Chim. Acta* , 592, pp 72–81.
- [١٦] Hemmateenejad B., Shamsipur M., Miri R., Elyasi M., Foroghinia F., Sharghi H. (2008), *Anal. Chim. Acta* 61, pp 25–34.
- [١٧] Gedeck P., Lewis R.A. (2008), *Curr. Opin. Drug Des.* 11, pp 569–575.
- [١٨] Freitas M.P. (2007), *Curr. Comput. Aided Drug Des.* 3, pp 235–239.
- [١٩] Karelson M. (2000), "*Molecular Descriptors in QSAR/ QSPR*", John Wiley & Sons, New York.
- [٢٠] Devillers J., Balaban A.T. (2000), "*Topological Indices and Related Descriptors in QSAR and QSPR*", Taylor & Francis.
- [٢١] Karelson M., Lobanov V.S., Katritzky A.R. (1996) "Quantum-chemical descriptors in QSAR/QSPR studies", *Chem. Rev.*, 96, pp 1027–1043.
- [٢٢] Todeschini R., Consonni V. (2000) "*Handbook of molecular descriptors*", in: Mannhold R., Kubinyi H., Timmerman H. (Eds.), *Methods and Principles in Medicinal Chemistry*, Wiley-VCH, Weinheim,.
- [٢٣] Trinajstić N. (1992) "*Chemical Graph Theory*", CRC Press, Boca Raton, FL.
- [٢٤] Katritzky A.R., Dobchev D.A., Karelson M. (2006) "*Physical, chemical, and technological property correlation with chemical structure: the potential of QSPR*". *Z. Naturforsch. B.* 61, pp 373–384.
- [٢٥] Gharagheizi F. (2007) "A new accurate neural network quantitative-structure-property relationship for prediction of θ (lower critical solution temperature) of polymer solutions, e-polymers", Article Number 114.
- [٢٦] Gharagheizi F., Sattari M. (2008) "Prediction of Some Important Physical Properties of Sulfur Compounds Using QSPR Models", *Mol. Divers.*, 12, pp 143–155.

- [٢٧] Katritzky A.R., Lobanov V.S., Karelson M. (1995) "QSPR: the correlation and quantitative prediction of chemical and physical properties from structure", *Chem. Soc. Rev.* 24, pp 279–287.
- [٢٨] Katritzky A.R., Maran U., Lobanov V., Karelson M. (2000) "Structurally diverse quantitative-structure–property relationship correlations of technologically relevant physical properties", *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 4, pp 1–18.
- [٢٩] Yaffe D.L. (2001) "A Neural Network Approach for Estimating Physicochemical Properties using Quantitative Structure–Property Relationships (QSPRs)", *University of California*, Los Angeles.
- [٣٠] Taskinen, J., Yliruusi, J., 2003. "Prediction of physicochemical properties based on neural network modeling". *Adv. Drug Deliv. Rev.* 55, pp 1163–1183.
- [٣١] Selassie C.D., Mekapati S.B., Verma R.P. (2002) "QSAR: then and now". *Curr. Top. Med. Chem.* 2, pp 1357–1379.
- [٣٢] Schneider G. (2004) "*Modeling Structure–Activity Relationships*", Schneider G.; Sung-San So, Landes Bioscience.
- [٣٣] Introduction to molecular descriptors, <http://WWW.qsar.pe.kr/descriptors>
- [٣٤] Guidance Document on the Validation of (Quantitative) Structure–Activity Relationships [(Q)SAR] Models, *Organisation for Economic Co-operation and Development*, 2007.
- [٣٥] Wold S., Sjström M., Eriksson L. (2001) "PLS-regression: a basic tool of Chemometrics". *Chemomet. Intell. Lab. Syst.* 58, pp 109–130.
- [٣٦] Geladi P., Kowalski B.R. (1986) "Partial least squares regression: A tutorial" *Anal. Chim. Acta.* 185, pp: 1-17.
- [٣٧] Zuarada J.M. (1992) "*Introduction to Artificial neural systems*" West, St. Paul, MN.
- [٣٨] Wold S. (1976) "*Pattern recognition by means of disjoint principal components models*" *Pattern Recogn.* 8, pp: 127-139.
- [٣٩] Vigneau E., Devaux M.F., Qannari E.M., Rober P. (1997) "principal component regression, ridge regression and ridge principal component regression in spectroscopy calibration" *J. Chemometr.* 11, pp: 239-249.
- [٤٠] Tropsha A., Gramatica P., Gombar V.K. (2003) "The importance of being earnest: validation is the absolute essential for successful application and interpretation of QSPR models" *QSAR Comb. Sci.* 22 (1), pp 69–77.

- [٤١] Rawlings, J.O. (1988). *"Applied Regression Analysis"*: Wadsworth & Brooks/Cole, Pacific Grove (CA).
- [٤٢] Allen D.M. (1971). *"Mean Square Error of Prediction as a Criterion for Selecting Variables"*. *Technometrics*, 13, pp 469-475.
- [٤٣] Topliss J.G., Costello R.J., (1972). "Chance correlations in structure-activity studies using multiple regression-analysis". *J. Med. Chem.* 15, pp 1066–1068.
- [٤٤] Clark M. and Cramer III R.D. (1993). "The Probability of Chance Correlation Using Partial Least Squares(PLS)". *Quant.Struct.-Act.Relat.*, 12, pp 137-145.
- [٤٥] Wold S. (1991). "Validation of QSAR's". *Quant.Struct.-Act.Relat.*, 10, pp 191-193.
- [٤٦] Osten D.W. (1988). "Selection of Optimal Regression Models via Cross-Validation". *J.Chemom.*, 2, pp 39.
- [٤٧] Cruciani G., Baroni M., Clementi S., Costantino G., Riganelli D., and Skagerberg B. (1992). "Predictive Ability of Regression Models. Part I: Standard Deviation of Prediction Errors(SDPE)". *J.Chemom.*, 6, pp 335-346.
- [٤٨] Gramatica P. (2007), *"Principles of QSAR models validation: internal and external, QSAR"*, *Comb. Sci.* 26, pp 694–701.
- [٤٩] Karelson M., (2000), *"Molecular Descriptors in QSAR/QSPR"*, Wiley-VCH, New York.
- [٥٠] Frank I.E. and Todeschini R. (1994). *"The Data Analysis Handbook"*. Elsevier, Amsterdam(The Netherlands), pp 366.
- [٥١] Platt J.R. (1947). "Influence of Neighbor Bonds on Additive Bond Properties in Paraffins". *J.Chem.Phys.*, 15, pp 419-420.
- [٥٢] Wiener H. (1947c). "Structural Determination of Paraffin Boiling Points". *J.Am.Chem.Soc.*, 69, pp 17-20.
- [٥٣] Rucker G., Rucker C., (1993), *J.Chem. Inf. Comput. Sci.*, 33, pp 686-695.
- [٥٤] Bonchev D., (1983), *"Information Theoretic Indices for Characterization of Chemical Structures"*, RSP-Wiley, Chichester, UK.
- [٥٥] Topliss J.G. and Edward R.P. (1979). "Chance Fraction in Studies of Quantitative Structure-Activity Relationships". *J.Med.Chem.*, 22, 1238-1224.
- [٥٦] Draper N. and Smith H. (1998). *"Applied Regression Analysis"*. Wiley, Newyork (NY).
- [٥٧] Pitts W., MacCullouch S., (1947), *Bull. Math. Biophysic.* 9, pp 127.

- [⁸] *Hyperchem professional Release 7 for Windows*, Molecular Modeling System, Hypercube, Inc., 2002. <<http://www.hyper.com>>.
- [⁹] Todeschini, R., Consonni, V., Mauri, A., Pavan, M., V. 13-20124, Milano, Italy, *Dragon Software version 3.0*.
- [⁰] *SPSS 14.0 for Windows Evaluation version*, Release 14.0.0, SPSS Inc., 2005.
- [¹] *MATLAB, (The Language of Thechnical Computing)*. Version 7.5.0.342(R2007b), The MathWorks Inc.,2007.
- [²] <http://www.mathtools.net/MATLAB/Chemometrics/index.html>
- [³] Schepin, R., Litvinov D., *WinMopac Release 7.2 for Windows*, <www.psu.ru/scince/soft/winmopac/index-e.htm>
- [⁴] Freire, R.O., *MOPAC6_RMI*, Version 1.03 build 10.0.1.15, Departamento de Química Fundamental Universidade Federal de Pernambuco Recife, PE, Brazil., 2006. <<http://sparkle.pro.br>>.
- [⁵] *DRAGON web version 3.0-2003*. is developed by Milano Chemometrics and QSAR Research Group, Dipartimento di Scienze dell'Ambiente e del Territorio Universitàdegli Studi di Milano, Bicocca
- [⁶] Leardi R. (1994), "Application of a genetic algorithm to feature selection under full validation conditions and to outlier detection", *J. Chemomet.* pp 79-865.
- [⁷] Basheer I.A., Hajmeer M., (2000). "Artificial neural networks: Fundamentals, computing, design, and application". *Journal of Microbiological Methods* .43, pp 3–31.
- [⁸] Bazaraa M.S., Sherali H.D., Shetty C.M., (2006). "*Nonlinear Programming Theory and Algorithms*", third ed. John-Wiley, New York.
- [⁹] McCulloch W.S., Pitts W.H. (1943). "A logical calculus of the ideas immanent in neural nets". *Bull. Math Biophys.* 5, pp 115-133.
- [⁰] Hebb D. O., (1949), "*the organization of behavior*", Wiley, New York.
- [¹] Sardari S., Sardari D., (2002), *J. Current. Pharm. Des.*, 8, pp 65.
- [²] Hussain A. S., Yu X. Q., Johnson R. D., (1991), *Pharm. Res.*, 8, pp 1248.
- [³] Zupan J. and Gasteiger J., (1999). "*Neural Network for Chemistry and Drug Design*". Wiley-VCH Publishers, Weinheim(Germany).
- [⁴] Zupan J., (1994), "Introduction to Artificial Neural Network(ANN) Methods: What They Are and How to Use Them", *Acta Chemica Slovenica*, 41(3), pp 327-352.

- [٧٥] Rich E., Knight K., (1991). "Artificial Intelligence", 2nd ed.; McGraw-Hill: New York.
- [٧٦] Smith K.A. (2005). "Applications of neural networks". *Computers and Operations Research*, 32(10):2495-7.
- [٧٧] Lam M. (2004). "Neural network techniques for financial performance prediction: Integrating fundamental and technical analysis". *Decision Support Systems*, 37, pp 567-581.
- [٧٨] Jain P. and Deo M.C. (2006), "Neural networks in ocean engineering", SAOS vol 1 no 1. pp 25-35.
- [٧٩] Taylor J.G., Mannion C.L.T., (1992), "Theory and application of neural networks", Springer-Verlag, New York.
- [٨٠] Fausett L. (1994). "Fundamentals of neural networks architectures, algorithms, and applications". Englewood Cliffs: Prentice-Hall.
- [٨١] Dayhoff J.E. (1990), "Neural network architectures, An introduction", Van Nostrand Reinhold.
- [٨٢] Hinton G.E. (1992), "How neural networks learn from experience", *Sci. Am.* 267(3), pp 145-151.
- [٨٣] Rumelhart D.E, Hinton G.E., and Williams R.J., (1986), "Learning internal representations by error propagation," D.E. Rumelhart and J. McClelland, editors, *Parallel Data Processing*, Vol.1, Chapter 8, The M.I.T. Press, Cambridge, MA, , pp 318-362.
- [٨٤] Hagan M.T., Demuth H.B., and Beale M.H., "Neural Network Design", chapter 11-12, ISBN 0-9717321-0-8 (available from John Stovall, john.stovall@colorado.edu, 303.492.3648).
- [٨٥] مختاری م ، (١٣٨٠) "کاربردهای Matlab و simulink در مهندسی" چاپ اول، ترجمه صمدی بخارایی، مرکز انتشارات خراسان، ص ١٨٠.
- [٨٦] منهاج م ، (١٣٧٩)، "مبانی شبکه های عصبی"، نشر دانشگاه صنعتی امیر کبیر، ص ٧١٥.
- [٨٧] Foresee F.D., Hagan M.T. (1997), "Gauss-Newton approximation to Bayesian regularization," *Proceedings of the 1997 International Joint Conference on Neural Networks*, pp 1930-1935.

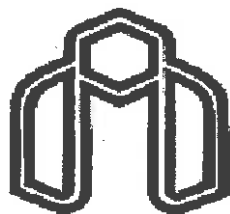
- [⁸⁸] Leshno M., Lin V., Pinkus A., Schocken S. (1993), "Multilayer feedforward neural networks with a nonpolynomial activation function can approximate any function". *Neural Networks*;6, pp 7-861.
- [⁸⁹] Hornik K.M., Stinchcombe M. & White H., (1989) "Multilayer feedforward networks are universal approximator", *Neural networks*, Vol 2 , No 5.
- [⁹⁰] White H. "Connectionist nonparametric regression: multilayer feedforward networks can learn arbitrary mappings". *Neural Networks* 1990;3, pp 49-535.
- [⁹¹] Hagan M.T., Demuth H.B., and Beale M.H. (1996), "Neural Network Design", Boston, MA: PWS Publishing.
- [⁹²] Hagan M.T., and Menhaj M. (1994), "Training feed-forward networks with the Marquardt algorithm," *IEEE Transactions on Neural Networks*, Vol. 5, No. 6, 1994, pp. 989-993,.
- [⁹³] Shi J. J. (2000). "Reducing prediction error by transforming input data for neural Networks". *Journal of Computing in Civil Engineering*, 14(2), pp 109–116.
- [⁹⁴] Rosa Lebrón-Aguilar, Jesús Eduardo Quintanilla-López, Ana María Tello, José María Santiuste, (2007), "Isothermal retention indices on poly(3,3,3-trifluoropropylmethylsiloxane) stationary phases", *Journal of Chromatography A*, Volume 1160, Issues 1-2, 10 August, pp 276-288.
- [⁹⁵] Schultz H.P., Schultz T.B. (1993). "Topological Organic Chemistry. 6. Graph Theory and Molecular Topological Indices of Cycloalkanes". *J.Chem.Inf.Comput.Sci.*, 33, pp 240-244.
- [⁹⁶] Gutman I., Yeh Y.N., Lee S.L. and Chen J.C. (1994b). "Wiener Numbers of Dendrimers". *MATCH (Comm.Math.Comp.Chem.)*, 30, pp 103-115.
- [⁹⁷] Trinajstić N. (1992). "Chemical Graph Theory". *CRC Press, Boca Raton (FL)*, pp 322.
- [⁹⁸] Lee S.L. and Yeh Y.N. (1993). "On Eigenvalues and Eigenvectors of Graphs". *J.Math.Chem.*, 12, pp 121-135.
- [⁹⁹] Burden F.R. (1989). "Molecular Identification Number for Substructure Searches". *J.Chem.Inf.Comput.Sci.*, 29, pp 225-227.
- [¹⁰⁰] Geary R.C. (1954). "The Contiguity Ratio and Statistical Mapping". *Incorp.Statist.*, 5, pp 115-145.

- [101] Baumann K. and Clerc J.T.(1997b). "Computer-Assisted IR Spectra Prediction - Linked Similarity Searches for Structures and Spectra". *Anal.Chim.Acta*, 348, pp 327-343.
- [102] Taylor P.J. (1990). "*Hydrophobic Properties of Drugs*". In Quantitative Drug Design. Vol. 4(Ramsden, C.A., ed.), Pergamon Press, Oxford (UK), pp. 241-249.
- [103] Klir G.J. and Folger T.A. (1988). "*Fuzzy Sets, Uncertainty, and Information*". Prentice-Hall, Englewood Cliffs (NJ), pp 356.
- [104] Peter Korytár, Adrian Covaci, Jacob de Boer, Anke Gelbin, Udo A.Th. Brinkman., (2005), "Retention-time database of 126 polybrominated diphenyl ether congeners and two Bromkal technical mixtures on seven capillary gas chromatographic columns", *Journal of Chromatography A*, Volume 1065, Issue 2, 18 February, pp 239-249.
- [105] Todeschini R. and Gramatica P., (1997a). "3D-Modelling and Prediction by WHIM Descriptors. Part 5. Theory Development and Chemical Meaning of WHIM Descriptors". *Quant.Struct.Act.Relat.*, 16, pp 113-119.

Abstract:

A quantitative structure – property relationship (QSPR) study was conducted on the retention indices (RI) of organic compounds. The stepwise regression strategy was used as descriptor selection. Modeling of the relationship between selected molecular descriptors and retention indices of data was made by linear (multiple linear regression; MLR) and nonlinear (artificial neural network; ANN) methods. The QSPR models were validated by early stopping technique as well as application of the models to predict the RI of external set compounds, which did not have contributed in model development steps. Both linear and nonlinear methods have accurate prediction ability although ANN model has more accurate results. The mean square errors (mse) of the test set obtained by MLR and ANN models were 75/549 and 34/714, respectively. In the second part, MLR and ANN methods were used for prediction of retention times of 126 brominated diphenyl ethers (PBDE) on the DB-1 stationary phase of column in gas chromatography. The mean square errors of test set obtained by MLR and ANN models were 0/028 and 0/017, respectively.

Keywords: gas chromatography; multiple linear regression; artificial neural network



Shahrood University of Technology

Faculty of Chemistry

**QSPR Modeling of Retention Factors for Some
Organic Compounds on Trifluoropropyl
Stationary Phases**

Hamid Ghafari Rad

Supervisors:

**Dr.Naser Goodarzi
Dr.Mohamad Hosein Fatemi**

Date: July - 2009