چکیده پایان نامه:

در این پژوهش، رابطه کمی ساختار- ثابت قانون هنری گروهی از آلکان¬ها صرفاً با استفاده از توصیف کننده-های توپولوژیکی مورد مطالعه قرار گرفت. به این منظور، از مقادیر تجربی ثابت هنری ۷۲ مولکول آلکان به عنوان سری داده¬ها استفاده شد. پس از محاسبه توصیف کننده¬ها، سری داده¬ها به دوگروه شامل سری آموزشی (۵۸ مولکول) و سری آزمون (۱٤ مولکول) تقسیم شدند و از تکنیک رگرسیون خطی چندگانه به روش گام به گام جهت مدل¬سازی مقادیر ثابت هنری استفاده شد. به این روش، مدلی شامل چهار توصیف کننده توپولوژیکی (CENT, ZM2V, TL1, S1K) ۰/۸۹٤ =با آماره های: R2 ،561/0SE = ۱۰۱/٥۸٦و =F به دست آمد. سپس، جهت توسعه مدلی با کیفیت آماری بالاتر، از توصیف کننده¬های منتخب و شبکه عصبی مصنوعی استفاده گردید. در مدل سازی غیرخطی، تعداد ۱٤ مولکول از سری آموزشی به کار رفته در مدل رگرسیونی به عنوان سری اعتبار سنجی به کار رفتند. جهت ایجاد مدل، شبکه عصبی پرسپترون چند لایه با الگوریتم پس انتشار خطا و تکنیک های یادگیری لونبرگ- مارکوارت و گرادیان توأم¬مقیاس شده استفاده شد. نتایج نشان داد که بهترین مدل غیرخطی با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی آموزش داده شده با الگوریتم یادگیری گرادیان توأم¬مقیاس شده و با معماری ۱-۱٤-٤ به دست می¬آید. آماره های مربوط به مدل منتخب شبکه عصبی مصنوعی برای سری آموزشی به ترتیب R= ،541/0 MSE=۹۷/۱۹۲ و F=۰/۹٤۱ ، R= ۰/۹٥۳ بود. بر اساس نتایج این تحقیق، شبکه F= ۸۸/۳۸٥ و SE= 305/0 ،R= و برای سری آزمون F۰/۹۸۸ = و ۱۷/۳۸۲ = SE 704/0 عصبی مصنوعی از برتری قابل ملاحظه ای نسبت به تکنیک رگرسیون خطی چندگانه جهت مدل¬سازی و پیش بینی مقادیر ثابت قانون هنری آلکان¬ها برخوردار است.

واژگان کلیدی: ثابت قانون هنری، رابطه کمی ساختار- ویژگی، توصیف کننده توپولوژیکی، شبکه عصبی مصنوعی