

پیش بینی ثابت قانون هنری گروهی از آلکانها با استفاده از توصیف کننده های محاسباتی

زهرا هنرمند*، 148،

1395-11-30

چکیده پایان نامه: در این پژوهش، رابطه کمی ساختار- ثابت قانون هنری گروهی از آلکانها صرفاً با استفاده از توصیف کننده های توپولوژیکی مورد مطالعه قرار گرفت. به این منظور، از مقادیر تجربی ثابت هنری 72 مولکول آلکان به عنوان سری داده ها استفاده شد. پس از محاسبه توصیف کننده ها، سری داده ها به دو گروه شامل سری آموزشی (58 مولکول) و سری آزمون (14 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 (S1K, TL1, ZM2V, CENT) با آماره های: $R^2=894/0$, $R=561/0SE$ و $F=586/101F$ 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 14 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 لونیبرگ- مارکواریت 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 1-14-4 به دست می آید. آماره های مربوط به مدل منتخب شبکه عصبی مصنوعی برای سری آموزشی به ترتیب $R=953/0$, $MSE=541/0$ و $F=192/97$ ، برای سری اعتبار سنجی $R=941/0$, $SE=704/0$ و $F=382/17$ و برای سری آزمون $R=988/0$, $SE=305/0$ ای ملاحظه قابل برتری از مصنوعی شبکه عصبی، تحقیق این نتایج اساس بر بود. $F=385/88$ و $SE=$ نسبت به تکنیک رگرسیون خطی چندگانه جهت مدل سازی و پیش بینی مقادیر ثابت قانون هنری آلکانها برخوردار است.

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

[Islamic Azad University, Rasht Branch - Thesis Database](#)

[دانشگاه آزاد اسلامی واحد رشت - سامانه بانک اطلاعات پایان نامه ها](#)