

中國醫藥大學

碩士論文

編號：DOSH-0308

*類神經網路預測有機物質之自燃溫度
Prediction of auto-ignition temperatures
for organic compounds by the artificial
neural network approach*

所別：職業安全與衛生學系碩士班

指導教授：廖宏章、陳強琛

學生：郭毓宥 Yu-Yu, Kuo

學號：9572008

中華民國九十七年七月

誌謝

此論文的完成，首先感謝的是我的指導教授廖宏章老師以及陳強琛老師。老師做研究嚴謹的態度，以及對教學的認真負責熱忱，也在日常生活受益良多。另外感謝的是聯合大學高振山教授、雲林科技大學徐啟銘教授及高雄第一科技大學陳振任教授，百忙之中前來擔任口試委員，以及對論文的指導與建議，讓論文可以更盡完善。

感謝實驗室裡面的成員們，兩年的實驗室生活有苦也有樂，也因為有大家的相互扶持，才得以度過這漫長的時間。過去相處在實驗室裡相處一年的玟玲學姐、環安室日昇學長與琇評，謝謝有你們的指導與幫忙，讓我順利適應研究所的生活，也讓我的實驗室生活多采多姿；不管在待人處事以及雜項方面，都增進不少智慧。實驗室裡面的硯丞、曉蔓、怡蓓、宜珍、上豪等學弟妹，這條路也感謝你們的配合與協助，使我的論文可以順利產出。

也感謝一路上很支持我的朋友，大學同學的咪咪與丫頭，還好有你們隨時當我的壓力安全閥，讓我在心情低落時能夠有你們的陪伴。還有同班六年的奕君、筱瑜、桂虹、俊佑，最後階段有你們的關心與體諒，不管是哪個方面都讓我形成強大的勇氣，來面對許多的風風雨雨。美麗的系辦雯倩學姊、研究所同學的宣妹、在職醫生宗興與和我同天口試的昭陽，謝謝你們大家的幫忙，我才可以順利完成最後任務。

我要把特別感謝留給我的家人，謝謝我的爸爸媽媽讓我在唸書的時候沒有經濟壓力，辛苦栽培我至研究所畢業，今天終於順利完成學位，你們終於可以放下心中的大石頭。這段研究所的生活，讓你們操心不少，即將步入社會的另一個階段，相信我在這兩年的研究所生活，我的表現不會讓你們失望！

毓宥 20080722

中文摘要

自燃溫度(Auto-ignition temperature , AIT)是指物質在空氣中無任何外在火源時，可以發生引燃現象的最低溫度。自燃溫度的產生，可視為自由基的反應。就安全科學的觀點，自燃溫度是物質火災危害的重要指標之一，它在危險物的生產、處理、運送、儲存等過程的安全考量上是不可或缺的重要資訊。

然而，AIT 的實驗數據決定於許多的變因(不同的實驗方法與容器皆會影響其實驗值)，因此不同實驗室量測的 AIT 數據平均誤差為 $\pm 30K$ 。為避免實際的實驗過程，採用物質結構特性以預測物質的自燃溫度方法有 QSPR(Quantitative Structure-Property Relationship)及 SGC (Structure Group Contribution)。目前數學上證實類神經網路結構可以成為 $[0,1]^n \rightarrow R^m$ 的一個連續映射，因此使用類神經網路結構可以有效的解決前述方法在模式選擇上遇到的問題。文獻上目前對於 AIT 的預測通常採用的模式結構為兩層前饋式誤差逆傳遞網路結構，對於 AIT 預測而言此結構易有過度配適(over-fitting)的問題，本研究提出三層前饋式誤差逆傳遞網路結構[3,5,1]，選用誤差逆傳遞演算法與共軛梯度法對於物質 AIT 的預測性能比較，結果為使用[3,5,1]網路架構搭配共軛梯度法可求得較佳的物質預測之 AIT。

關鍵字：自燃溫度、QSPR、SGC、類神經網路

英文摘要

Auto-ignition temperature (AIT) is defined as the lowest temperature at which a substance will ignite in the absence of a spark or flame. The auto-ignition mechanism proceeds by a free radical intermediates determines the ease of oxidation. Since auto-ignition occurs in air without the presence of an ignition source, it is an important fire safety parameter for all who handle, transport, and store combustible materials.

Experimentally determined values of AIT depends on the methods (such as size and shape of container) and different AIT of the same substance have been reported to be approximately $\pm 30K$ by different laboratories. The experimental procedure for measuring AIT is laborious and cannot always be done. In connection with these, it is important to work out for estimating AIT values by mathematical modeling. Several studies have been performed to describe the relationship between AIT and descriptors by using QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship) model or SGC (Structure Group Contribution) method. In these approaches, one important topic is to find a suitable function to relate AIT and the descriptors. It has been mathematically proven that the structure of a neural network forms a continuous mapping from $[0, 1]^n$ to R^m . Thus, introducing the neural network structure is an effective way to avoid the difficulty in choosing a suitable model. In the literature, the two-layer feed-forward error back-propagation network is recommended but such a structure tends to be over-fitting for predicting AIT. Using the proposed three-layer network structure with conjugate gradient algorithm can effectively avoid over-fitting in this study.

Keywords : AIT 、 QSPR 、 SGC 、 ANN

目錄

第一章 緒論.....	1
第一節 研究背景.....	1
第二節 研究之重要性.....	2
第三節 研究目的.....	3
第二章 文獻探討.....	5
第一節 物質AIT實驗之方法.....	5
第二節 物理化學性質預測模式.....	6
第三章 傳統的AIT預測模式.....	9
第一節 資料分析與結構分群.....	9
第二節 不同模式的選取.....	18
第三節 結果與討論.....	22
第四章 類神經網路預測模式.....	32
第一節 類神經網路原理.....	32
第二節 倒傳遞類神經網路.....	34
第三節 結果與討論.....	38
第五章 結果與建議.....	51
第一節 結論.....	51
第二節 研究限制.....	52

表目錄

表 1 不同資料庫的AIT數據	4
表 2 碳氫化合物減少碳鏈AIT的變化	10
表 3 碳氫化合物增加甲基官能基	10
表 4 碳氫化合物加入不飽和鍵	11
表 5 碳氫化合物增加分支的位置	11
表 6 低碳數的烷類、醇類、醛類之關係	11
表 7 順式和反式的有機物質AIT	12
表 8 芳香族物質其鄰間對位置的AIT數據	13
表 9 14 和 16 族群分群的物質範例	15
表 10 鹵原子官能基相接不同物質的表現	15
表 11 新增族群的物質	15
表 12 AIT預測模式的分子結構分類表	17
表 13 分子結構群的權重因子	26
表 14 不同模式的未知參數	27
表 15 不同模式未知參數之 95%信賴區間	27
表 16 不同模式的預測能力(R^2)比較	27
表 17 不同模式試驗資料預測能力(Q^2)之比較	27
表 18 訓練資料不同分子結構分類之BPN其 (R^2)比較	38

表 19	試驗資料不同分子結構分類之BPN其 (Q^2) 比較.....	38
表 21	不同網路架構預測能力 (Q^2)	41
表 22	試驗資料預測能力有限之物質.....	42
表 23	[3,5,1]架構不同演算法之預測能力 (R^2)	42
表 24	[3,5,1]架構不同演算法之預測能力 (Q^2)	42



圖目錄

圖 1 不同模式的性能顯示.....	23
圖 2 MLR預測結果與實驗數據比較圖.....	28
圖 3 式(3)的 2 階多項式預測結果與實驗數據比較圖.....	29
圖 4 式(3)的 3 階多項式預測結果與實驗數據比較圖.....	30
圖 5 式(3)的 4 階多項式預測結果與實驗數據比較圖.....	31
圖 6 BPNN [2,4,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖.....	43
圖 7 BPNN [2,5,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖.....	44
圖 8 BPNN [2,6,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖.....	45
圖 9 BPNN [2,7,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖.....	46
圖 10 BPNN [3,3,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖.....	47
圖 11 BPNN [3,4,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖.....	48
圖 12 BPNN [3,5,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖.....	49
圖 13 BPNN [3,6,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖.....	50

第一章 緒論

第一節 研究背景

化學物質常因物質安全管理方面的不足，導致相關火災爆炸危害。因應工業界對化學物質能量危害的需求，首重於物質能量危害風險評估的方法，對於化學危險物的生產、處理、運送、儲存等過程的安全必須加以考慮其燃燒特性。自燃溫度為化學物質的燃燒特性之一，美國石油協會出版的API 581 即以自燃溫度作為判定危險物是否有發生爆炸之可能的決定因素¹⁾。

自燃溫度(Auto-ignition temperature, AIT)是指物質在空氣中無任何外在火源，能夠引燃的最低溫度；物質發生氧化反應放出的熱量速率超越熱量散失到環境的速率而達到平衡的溫度，即為自燃溫度。就安全科學的觀點，AIT為化學物質的燃燒特性之一，也是量化風險評估的一環。另外，在內燃機燃燒效率的研究中，引擎缸內溫度和壓力急遽上升及衝擊波撞擊汽缸壁產生敲擊聲，即是俗稱的”引擎爆震”⁽²⁻⁶⁾。因此仍有許多的研究議題，關注於自燃溫度的研究與探討^(3,6-18)。

第二節 研究之重要性

目前測量物質AIT的實驗方法有：ASTM E659-78、DIN 51795、IEC 79-4 等。AIT不僅與化學物理特性相關，亦與其選用的測試方法有關，任何微小的不均勻性皆會造成實驗結果的差異，如試驗的壓力、試驗容器的體積形狀、樣品的純度、可燃物/氧氣的比例、樣品注入速度等，都已被證實會影響其實驗結果⁽¹⁹⁾。因此，常見的文獻及相關資料庫所提供的AIT實驗數據不盡相同，如表 1 列出AIT差異在100K 以上的物質，其中乙醛(acetaldehyde)的AIT數據差異甚至可達到300K⁽²⁰⁻²³⁾。另有相關文獻指出不同實驗室的AIT平均誤差可達到 $\pm 30K$ ^(6,10-12)。綜合以上論述，發展物質AIT的數學預測模式，為相關研究的主要議題。

目前對於物質能量危害的預測模式研究，主要以定量結構性質關係(Quantitative Structure-Property Relationship, QSPR)模式，選用物質分子結構特性的描述因子(descriptor)，如臨界壓力、電荷、分子量...等，並依經驗找出物質待預測性質與描述因子間的關係式^(13, 14, 16,24-33)。採用QSPR模式預測物質之特性，仍需要使用大量的物理化學性質資料，因此研究上仍有不便之處。若採用分子結構方式(Structure Group Contribution, SGC)做為描述因子，可以有效且迅速解決此一問題。選用SGC模式預測物質之物理特性的優點，對於未知的化學物質，僅知物質的化學結構組成，即可求得相關的物理化學特性。近年來SGC的

方式已被廣泛使用，但就AIT的預測模式而言，相關的研究探討並不多見^{14,15,34,35}。

QSPR 以及 SGC 模式，雖能有效預測物質的物理化學特性，但不免落入較佳預測模式選擇的困擾，故選用數學上被證實可趨近任意連續函數形式的類神經網路(Artificial Neural Network, ANN)模式，可免去此一困擾。

第三節 研究目的

本研究目的為發展有機物質之 AIT 預測模式；依照 AIT 與分子結構的關係，對蒐集到之 AIT 數據加以整理分析，建立預測 AIT 之分子結構表，而後依此分類表，找尋合適的 AIT 預測模式。第二章部分為相關文獻的探討介紹。第三章部分為建立 AIT 之分子結構表，針對傳統 SGC 模式作論述，比較與相關文獻之預測效果。第四章為類神經網路模式的發展，研究採用 SGC-ANN 的方法，比較不同類型之類神經網路預測模式，期使模式的預測誤差範圍能夠為合理的誤差範圍。

表 1 不同資料庫的 AIT 數據*

物質名稱	來源 ⁽²³⁾	來源 ⁽²⁰⁾	來源 ⁽²¹⁾	來源 ⁽²²⁾
2-Butanone	677	788.71	---	788.7
2,4-Dimethylphenol	753	872	---	---
Hexadecanoic acid	513	650	---	---
Piperazidine	593	728.15	---	---
1,3-Diisopropylbenzene	722	349.82	---	---
Benzoyl chloride	873	358.15	---	---
Methylhexanone	728	464.15	---	---
2-Methylnitrobenzene	693	578.15	---	---
2,4-Dihydroxy-2-methylpentane	698	579	---	---
1-Methyl-2-pyrrolidinone	518	619.15	---	---
2-Heptanone	805	666.15	---	805.93
Crotonic acid	773	669.26	---	---
1,4-Benzenedicarboxylic acid	951	769	---	---
2,4-Dimethylpentane	598	708	---	---
1,3-Benzenedicarboxylic acid	973	769	---	---
Phenol	878	988.15	988	---
Isobutyl formate	698	593.15	593	---
Acetaldehyde	413	758.15	448	510.93

*註：AIT 的溫度單位為 K

第二章 文獻探討

第一節 物質 AIT 實驗之方法

由美國測試材料協會(ASTM)提出之AIT標準測試方法E659-78，用來量測液體化學品之AIT。將少量的試劑加入到設定溫度且含有空氣的500ml燒瓶中，在黑暗中觀察燒瓶內容物 10min或到自燃發生為止。測試的過程需重覆試驗，直到找出物質在空氣中，沒有外在的火源，其易燃混合氣體放出熱量速率高於熱量散失速率使引燃的最低溫度，即為AIT⁽¹⁹⁾。試驗過程中，因自燃的判定，來自實驗者的決定，因此過程耗費時間人力，當中實驗的條件設定不盡相同，皆會影響其AIT的測定，因此相關文獻中，提供之AIT實驗數據不盡相同^(6,10-12)。

因實際實驗之不便，因此發展相關的數學預測模式取代AIT的量測，實為目前研究的相關發展。

第二節 物理化學性質預測模式

美國測試材料協會(ASTM)於 1967 年成立E-27 的委員會，該會目標為對有關物質能量危害評估的測試方法提出標準化，其中的E-27.07 子委員會被指派發展能量危害的預測模式，相關的預測研究成果被整合成CHETAH 1.0 的電腦軟體。由於CHETAH設定輸入條件為化學物質的結構，因此以採用多種性質的多變量QSPR模式為基礎的熱化學危害一直是相關研究的主要方式^(13, 14, 16,24-33)，同時QSPR預測模式的研究成果也更新CHETAH軟體，隨著QSPR預測模式的研究成果發展，該軟件於 2005 年公布的第 8 版已包含預測爆炸界限與最小點火能量的預測，但物質AIT的預測模式仍列入待評估中而未列入其軟件的功能⁽³⁶⁾。

QSPR 模式研究皆是以物質之物理化學特性結構來描述預測的性質關係，但較多研究皆以沸點、閃火點、臨界溫度、壓力等作為 QSPR 模式的描述因子，進而求得關係式。選用 QSPR 模式的方便為易取得化學物質相關特性的數據，但關鍵必須找出適合的描述因子以及選用適當的模式做為預測的指標。

Egolf與Jurs^(3,37)對於純碳氫化合物、醇類、酯類的AIT關係式，將自燃溫度的機制分為高溫與低溫的機制，其預測的能力範圍如 $(R^2=0.94-0.98)$ 。研究結果顯示低溫機制包含過氧化物中間體，因此與分子結構具有高的關聯，而高溫機制主要的中間體為烷基自由基，因

此與分子本身的結構關聯性較低，兩者對預測AIT的模式以低溫機制為佳^{3,6)}。

對於AIT的預測模式研究，Susuki等人以一組包含 50 種碳氫化合物的資料檢視AIT與其閃火點、沸點、臨界溫度.....等 16 種不同物理化學性質間的相關程度，研究結果顯示AIT與前述各種單一性質間的關連程度不高⁽¹¹⁾。而後Susuki⁽¹²⁾結合與AIT相關聯之物理化學特性，提出

QSPR模式預測AIT，方程式如下：

$$AIT = 1.73P_c - 3.48P_A + 191.4^0\chi - 246.8Q_T - 121.3I_{ald} + 70.4I_{ket} + 302.5 \quad (1)$$

式中 P_c 為臨界壓力， P_A 為 $20^{\circ}C$ 下之參數， $^0\chi$ 為零級指標， Q_T 絕對電量的總和， I_{ald} 、 I_{ket} 為醛類及酮類的指標。

Albahri⁽¹⁴⁾以 137 種純粹碳氫化合物，採用分子結構的方式探討純粹碳氫化合物的AIT預測模式，提出式(2)之 4 階非線性模式產生最佳的AIT預測效果，其平均誤差百分比 4.2%，最大誤差百分比為 31%。

$$AIT = a + b\left(\sum_i v_i f_i\right) + c\left(\sum_i v_i f_i\right)^2 + d\left(\sum_i v_i f_i\right)^3 + e\left(\sum_i v_i f_i\right)^4 \quad (2)$$

其中 v_i 為物質第 i 種描述因子的數目， f_i 為第 i 種描述因子的權重因子， a, b, c, d 及 e 為模式參數。

而後Albahri與George⁽¹⁵⁾則將研究模式擴展到包含醚、酯、鹵化物等等在內的 490 種有機物質，以分子結構分群的分式，建立有機物質的AIT預測模式，沿用其 4 階非線性模式相關經驗式(3)，其平均誤差百分比為 9.2%，最大誤差百分比為 125%。

$$\begin{aligned} AIT = & 729.7 + 24.9 \left(\sum_i v_i f_i \right) - 1.57 \left(\sum_i v_i f_i \right)^2 - \\ & 0.0773 \left(\sum_i v_i f_i \right)^3 - 0.0032 \left(\sum_i v_i f_i \right)^4 \end{aligned} \quad (3)$$

其中 v_i 為物質第 i 種描述因子的數目， f_i 為第 i 種描述因子的權重因子。

Albahri和George採用兩層前饋式類神經網路，演算法以逆傳遞(Backpropagation network, BPN)探討其對AIT的預測能力⁽¹⁵⁾，研究結果認為隱藏層採用 6 個神經元的類神經網路結構，可以有效預測有機物質的AIT。該平均誤差百分比為 2.8%，最大誤差百分比 20%，較傳統的SGC方法預測AIT有較佳的預測效果。

第三章 傳統的 AIT 預測模式

第一節 資料分析與結構分群

實驗數據使用 483 種有機物質，包含碳氫化合物、醇類、酚類、醚類、醛類、酮類、羧酸、胺類、酯類及鹵化物等；其中 150 種為純粹碳氫化合物，其它 333 種為含氮、氧原子之物質與鹵化物等。隨機選用 400 筆資料作為建立 AIT 預測模式的數據，並以另外 83 筆資料為檢驗模式的預測能力。由於 AIT 的實驗數據取得不易，相關文獻中的實驗資料也不盡相同，故本研究的數據來源為(1)Susuki(1994)⁽¹²⁾(2)AIChE-DIPPR⁽²⁰⁾以及(3)The Chemical Database⁽²³⁾提供之 AIT 實驗數據。

採用分子結構特性作為模式的預測變數，其分類的方式依據自燃現象的理論。自燃反應的理論研究顯示⁽⁹⁾，自燃的反應機制為一種自由基的反應，因此不同結構的有機物質發生自燃現象的難易與其分子結構直接相關。針對碳氫化合物，減少碳鏈的長度、增加甲基官能基、加入不飽和鍵與增加分支的結構，皆會提高預測的 AIT 數值⁽⁶⁾(表 2 - 表 5)。表 6 顯示在低碳數的烷類與其相關的醇類、醛類，自燃溫度的高低為：烷類>醇類>醛類⁽⁹⁾。含雙鍵的物質與單純環烷類不用刻意區分順式與反式的結構，如表 7。表 8 為芳香族物質中，不需要區分官能基之鄰、間、對位置表現⁽¹⁴⁾。

表 2 碳氫化合物減少碳鏈 AIT 的變化









Compound name	CAS	Formula		AIT(K)
Dodecane	112-40-3	C ₁₂ H ₂₆		476
Nonane	111-84-2	C ₉ H ₂₀		478
Octane	111-65-9	C ₈ H ₁₈		479
Heptane	142-82-5	C ₇ H ₁₆		486
Hexane	110-54-3	C ₆ H ₁₄		513
Pentane	109-66-0	C ₅ H ₁₂		538
Butane	106-97-8	C ₄ H ₁₀		645
propane	74-98-6	C ₃ H ₈		723

表 3 碳氫化合物增加甲基官能基


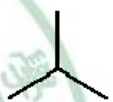



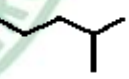

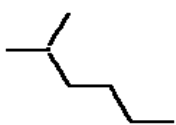
Compound name	CAS	Formula		AIT(K)
propane	74-98-6	C ₃ H ₈		723
2-Methylpropane	75-28-5	C ₄ H ₁₀		733.15
Butane	106-97-8	C ₄ H ₁₀		645
2-Methylbutane	78-78-4	C ₅ H ₁₂		693.15
Pentane	109-66-0	C ₅ H ₁₂		538
2-Methylpentane	107-83-5	C ₆ H ₁₄		579.26
Hexane	110-54-3	C ₆ H ₁₄		513
2-methylhexane	591-76-4	C ₇ H ₁₆		566

表 4 碳氫化合物加入不飽和鍵









Compound name	CAS	Formula		AIT(K)
Pentane	109-66-0	C ₅ H ₁₂		538
1-Pentene	109-67-1	C ₅ H ₁₀		571
Hexane	110-54-3	C ₆ H ₁₄		513
1-Hexene	592-41-6	C ₆ H ₁₂		538
Heptane	142-82-5	C ₇ H ₁₆		486
1-Heptene	592-76-7	C ₇ H ₁₄		536
Octane	111-65-9	C ₈ H ₁₈		479
1-Octene	111-66-0	C ₈ H ₁₆		523

表 5 碳氫化合物增加分支的位置





Compound name	CAS	Formula		AIT(K)
Pentane	109-66-0	C ₅ H ₁₂		538
3-Methylpentane	96-14-0	C ₆ H ₁₄		551.15
2,3-Dimethylpentane	565-59-3	C ₇ H ₁₆		610.37
2,3,4-Trimethylpentane	565-75-3	C ₈ H ₁₈		700

表 6 低碳數的烷類、醇類、醛類之關係





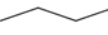

Compound name	CAS	Formula		AIT(K)
propane	74-98-6	C ₃ H ₈		723
1-Propanol	71-23-8	C ₃ H ₈ O		644.26
Propionaldehyde	123-38-6	C ₃ H ₆ O		500
Butane	106-97-8	C ₄ H ₁₀		645
1-Butanol	71-36-3	C ₄ H ₁₀ O		616
Butyraldehyde	123-72-8	C ₄ H ₈ O		503.15

表 7 順式和反式的有機物質 AIT

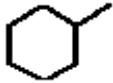
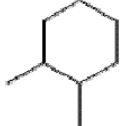
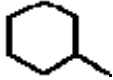
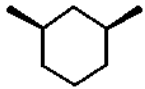



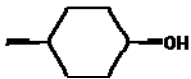
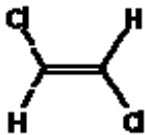
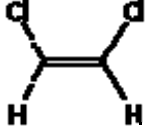
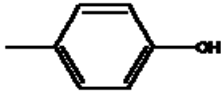
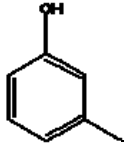
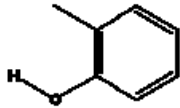
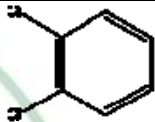


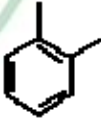
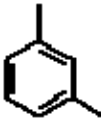

Compound name	CAS	Formula		AIT(K)
trans-1,2-Dimethylcyclohexane	6876-23-9	C ₈ H ₁₆		577.15
cis-1,2-Dimethylcyclohexane	2207-01-4	C ₈ H ₁₆		577.15
trans-1,3-Dimethylcyclohexane	2207-03-6	C ₈ H ₁₆		579
cis-1,3-Dimethylcyclohexane	638-04-0	C ₈ H ₁₆		579
trans-1,4-Dimethylcyclohexane	2207-04-7	C ₈ H ₁₆		577
cis-1,4-Dimethylcyclohexane	624-29-3	C ₈ H ₁₆		577
trans-4-Methylcyclohexanol	7731-29-5	C ₇ H ₁₄ O		570.15
cis-4-Methylcyclohexanol	7731-28-4	C ₇ H ₁₄ O		570.15
trans-1,2-dichloroethylene	156-60-5	C ₂ H ₂ Cl ₂		733
cis-1,2-Dichloroethylene	156-59-2	C ₂ H ₂ Cl ₂		733

表 8 芳香族物質其鄰間對位置的 AIT 數據

Compound name	CAS	Formula		AIT(K)
p-cresol	106-44-5	C ₇ H ₈ O		832.04
m-cresol	108-39-4	C ₇ H ₈ O		832.04
o-cresol	95-48-7	C ₇ H ₈ O		872.04
1,2-Dichlorobenzene	95-50-1	C ₆ H ₄ Cl ₂		920.93
1,3-Dichlorobenzene	541-73-1	C ₆ H ₄ Cl ₂		920
1,4-Dichlorobenzene	106-46-7	C ₆ H ₄ Cl ₂		920
1,2-Dimethylbenzene	95-47-6	C ₈ H ₁₀		737.04
1,3-Dimethylbenzene	108-38-3	C ₈ H ₁₀		800.93
1,4-Dimethylbenzene	106-42-3	C ₈ H ₁₀		802.04

單純環烷類與芳香族的物質對AIT預測影響有明顯之不同，從表 9 可看出環烷類中每增加一個 14 族群，溫度上升約 50K 左右，但是物質中增加到第三個 14 族群，其溫度卻明顯上升許多，顯示預測AIT時必須考慮 14 和 16 族群的不同。

此外研究認為鹵原子的官能基被加入直鏈物質中，也會影響預測AIT的效果，因此在分類中加入 18 到 21 族群的結構，由於化學鍵的性質，氯原子中純共價鍵由於被加入直鏈物質中，改變其純共價鍵的鍵結，所以整個反應符合自燃溫度的自由基反應。除了氯原子與直鏈物質的關係之外，鹵原子官能基接在直鏈中(22-24 族群)與被接在環狀物質(25-27 族群)，對於預測AIT也有不同的預測效果。由表 10 的資料中顯示，鹵原子官能基接在直鏈物質中，會使物質的AIT下降，但與環狀物質相接則會增加物質的AIT。最後，引進兩個與過去文獻不同的 9 族群與 42 族群分子結構，表 11 為其分類的物質。

表 9 14 和 16 族群分群的物質範例





Compound name	CAS	Formula		AIT(K)
Cyclohexane	110-82-7	C ₆ H ₁₂		533.15
Cyclohexene	110-83-8	C ₆ H ₁₀		583.15
1,3-Cyclohexadiene	592-57-4	C ₆ H ₈		633*
Benzene	71-43-2	C ₆ H ₆		835.37

表 10 鹵原子官能基相接不同物質的表現






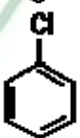
Compound name	CAS	Formula		AIT(K)
Butane	106-97-8	C ₄ H ₁₀		645
1-Chlorobutane	109-69-3	C ₄ H ₉ Cl		523
Cyclohexane	110-82-7	C ₆ H ₁₂		533.15
Chlorocyclohexane	542-18-7	C ₆ H ₁₁ Cl		563*
Benzene	71-43-2	C ₆ H ₆		835.37
Chlorobenzene	108-90-7	C ₆ H ₅ Cl		863

表 11 新增族群的物質



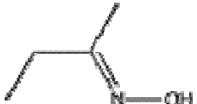
Compound name	CAS	Formula		AIT(K)
第 9 族群				
1-Hexyne	693-02-7	C ₆ H ₁₀		536*
Ethyne	74-86-2	C ₂ H ₂		578.15
第 42 族群				
2-Butoxime	96-29-7	C ₄ H ₉ NO		588

表 12 為研究使用預測AIT的分子結構表，其分類方式大致以Albahri 與George⁽¹⁵⁾提供的分類方式為主，然而加入影響AIT預測效果的結構分群。與前述研究之不同點，在於表 9 提供 14 族群與 16 族群的劃分、表 10 鹵原子被接在直鏈物質或是環狀物質的表現以及表 11 中的新增物質，皆是不同於過去文獻所提供的分類方式，期望有效提高AIT之預測效果。



表 12 AIT 預測模式的分子結構分類表

	Serial no.	Group	
increments	1	-CH ₃	
	2	>CH ₂	
	3	>CH-	
	4	>C<	
	5	=CH ₂	
	6	=CH-	
	7	>C=	
	8	≡CH	
	9	≡C-	
Ring increments	10	>CH ₂	
	11	>CH-	
	12	>C<	
	13	=CH-	
	14	>C=	
	15	=CH-	
Aromatic	16	>C=	(fused)
	17	>C=	(nonfused)
attached to at least one halogen atom	18	-CH ₃	
	19	>CH ₂	
	20	>CH-	
	21	>C<	
Halogen increments	22	-F	(non ring)
	23	-Cl	(non ring)
	24	-Br	(non ring)
	25	-F	(ring)
	26	-Cl	(ring)
	27	-Br	(ring)
Oxygen increments	28	-OH	(alcohol)
	29	-OH	(phenol)
	30	-O-	(non ring)
	31	-O-	(ring)
	32	>C=O	(non ring)
	33	>C=O	(ring)
	34	O=CH-	(aldehyde)
	35	-COOH	(acid)
Nitrogen increments	36	-COO-	(ester)
	37	-NH ₂	
	38	>NH	(non ring)
	39	>NH	(ring)
	40	>N-	(non ring)
	41	>N-	(ring)
	42	-N=	(non ring)
	43	-N=	(ring)
	44	-CN	
	45	-NO ₂	

第二節 不同模式的選取

建立 QSPR 模式預測分析物質的相關物理化學特性，決定分子結構並加以分類之後，依經驗決定自燃點與描述因子間的經驗關係式，根據現有的試驗資料決定經驗關係式中未知參數與每個描述因子的權重因子。

以多元線性迴歸(Multiple Linear Regression, MLR)為例，其假設 AIT 與分子結構間的關係為：

$$AIT = f_0 + \sum_{i=1}^n v_i f_i \quad (4)$$

其中 n 為表 12 AIT 預測模式的分子結構分類表定義的分子結構群數目； v_i 為第 i 個結構群的分子數目； f_i 為第 i 個結構群的權重因子； f_0 為迴歸截距。

Albahri 嘗試使用不同的非線性模式取代式(4)的線性模式，使模式的整體預測有進一步的改善，結論以式(5)之非線性模式產生最佳的 AIT 預測效果^(14,15)。

$$AIT = a' + b' \left(\sum_{i=1} v_i f_i \right) + c' \left(\sum_{i=1} v_i f_i \right)^2 + d' \left(\sum_{i=1} v_i f_i \right)^3 + e' \left(\sum_{i=1} v_i f_i \right)^4 \quad (5)$$

基於非線性模式用以改善並增強線性模式的預測能力，本研究指出式(6)較合乎 MLR 延伸概念的模式：

$$AIT = a + \left(\sum_{i=1} v_i f_i \right) + b \left(\sum_{i=1} v_i f_i \right)^2 + c \left(\sum_{i=1} v_i f_i \right)^3 + d \left(\sum_{i=1} v_i f_i \right)^4 \quad (6)$$

比較式(5)與式(6)，兩式的差距在於未知參數的個數，式(5)中的 b' 可視為多餘的參數。關於式(5)與式(6)的非線性模式參數求解過程，為一最適化(optimization)的過程，因此目標函數的訂定決定“最佳”的意義，在 QSPR 模式中的參數最適化通常使用最小平方誤差作為目標函數。由於最適化的過程極容易落入所謂的局部最小值(local minimum)，多餘的參數會使此情況惡化。因此選用以 MLR 延伸概念的式(6)，可以有效避免此一問題。

判斷建立預測模式的指標使用平均誤差的總和，表示為 (R^2) ，而顯示模式的預測能力則用 (Q^2) ，如以下定義：

$$\begin{aligned} \text{建模資料} \quad R^2 &= 1 - \frac{\sum_{i=1}^k (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^k (y_i - \bar{y})^2} \\ \text{試驗資料(非建模資料)} \quad Q^2 &= 1 - \frac{\sum_{i=1}^k (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^k (y_i - \bar{y})^2} \end{aligned}$$

y_i 表示第 i 個物質的實驗值； \hat{y}_i 表示第 i 個物質的預測值； \bar{y} 為所有物質實驗值的平均值。通常 (R^2) 和 (Q^2) 的值隨著模式的複雜程度增加(未知參數的數目)而有所不同， (R^2) 隨著模式的複雜程度增加而增加，但是單以 (R^2) 做為模式的有效預測能力顯然不足，因此需要佐以非建模資料的 (Q^2) 來顯現模式的預測能力效果。 (Q^2) 也會隨著模式的複雜程度增加而增加，但是會因為適合程度與預測能力的作用，達到資料訓練的

極限值。本研究採用非建模資料的(Q²)與假設檢定來決定合適的非線性預測模式。

式(6)為非線性模式最小平方法求解的問題，以下簡短的敘述此方法，假設此非線性模式表示為：

$$y_i = f(x_i; \theta) + \varepsilon_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

y_i 表示第 i 個物質的實驗值； n 為建模資料的有機物數目； $x_i \in R^K$ 分子中結構群 i 的數目， K 為表 12 所定義的結構群數目； $\theta \in R^P$ 表示模式中未知參數(包含 f_i, a, b, c 和 d)的權重， P 為模式未知參數的數目； ε_i 為實驗誤差值，假設符合 $N(0, \sigma^2)$ 。我們可以定義：

$$y \equiv [y_1 \quad y_2 \quad \dots \quad y_n]^T \quad (7)$$

$$f_i(\theta) \equiv f(x_i; \theta) \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (8)$$

$$f(\theta) \equiv [f_1(\theta), \quad f_2(\theta), \quad \dots \quad f_n(\theta)]^T \quad (9)$$

$$F(\theta) \equiv \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1(\theta)}{\partial \theta_1} & \frac{\partial f_1(\theta)}{\partial \theta_2} & \dots & \frac{\partial f_1(\theta)}{\partial \theta_p} \\ \frac{\partial f_2(\theta)}{\partial \theta_1} & \frac{\partial f_2(\theta)}{\partial \theta_2} & \dots & \frac{\partial f_2(\theta)}{\partial \theta_p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \frac{\partial f_n(\theta)}{\partial \theta_1} & \frac{\partial f_n(\theta)}{\partial \theta_2} & \dots & \frac{\partial f_n(\theta)}{\partial \theta_p} \end{bmatrix} = \left[\left(\frac{\partial f_i(\theta)}{\partial \theta_j} \right) \right] \quad (10)$$

使 θ^* 為 θ 的真實值，且 $\hat{\theta}$ 為式(8)估算 θ 的收斂解。

$$\theta^{(a+1)} = \theta^a + (F^T(\theta^a)F(\theta^a))^{-1} F^T(\theta^a) [y - f(\theta^a)] \quad (11)$$

當數據資料 n 很大時，對 θ_j 近似 $100(1-\alpha)\%$ 的信賴區間如下：

$$\theta_i \pm t_{n-p}^{\alpha/2} s \sqrt{\hat{c}^{rr}} \quad (12)$$

θ_r 為 θ 之第 i 個物質； t_{n-p} 為自由度 $(n-p)$ 之 t 分佈； s 為標準差；當

$$\hat{C} = F^T(\hat{\theta}) F(\hat{\theta}) \text{ 時，定義 } \left[\left(\hat{c}^{rs} \right) \right] = \hat{c}^{-1} \text{。}$$

本研究採用式(12)估算方程式(6)的每個未知參數之 95%信賴區間。



第三節 結果與討論

使用 400 筆建模資料，找出分子結構群的權重因子(f_i)和未知參數的關係，比較MLR模式和 2-4 階非線性模式對AIT的預測效果。使用最小平方法求出MLR模式中的參數，針對已MLR作為起始值的 2-4 階非線性模式，式(11)和式(12)檢定未知參數之 95%信賴區間。表 13 列出所有模式之分子結構群的權重因子(f_i)，表 14 為其他參數(a, b, c, d)之值，表 15 列出非線性模式未知參數之 95%信賴區間。表 16 為辨別建模資料的預測能力(R^2)的好壞，另外選用表 13 及表 14 給定的參數，估算 83 筆非建模資料之模式的預測能力(Q^2)，如表 17 所示。

模式的複雜程度提高，其建模資料的預測能力(R^2)也會跟著提高，但是非建模資料的預測能力(Q^2)，並非跟隨著模式的複雜程度增加而增加。因此判定合適的預測模式，必須要考慮到建模資料的預測能力(R^2)與非建模資料的預測能力(Q^2)兩者間的平衡，因為(R^2)可由數學模式與訓練資料來調整其高低，然而(Q^2)卻是估計外在資料的預測可靠度。通常兩者間由模式的複雜程度達到平衡，圖 1 表示不同模式的(R^2)與(Q^2)趨勢。選用 3 階非線性模式時，其非建模資料的預測能力(Q^2)達到最大值，而模式的預測能力(R^2)較 4 階非線性模式略低。在參數之 95%區間假設檢定，可判斷各參數是否存在，表 15 中 4 階非線性模式參數 d 的 95%範圍包含 0，接受其假設檢定 $d=0$ 的結果，可將 d 視為不必要的參

數，而 4 階非線性模式為過度配適模式。雖然 3 階非線性方程式中的 c 參數值很小 (-4.5604×10^{-6})，但是在參數的 95% 區間範圍裡，並沒有包含 0，綜合上述的論點，選定合適的模式為 3 階非線性模式。

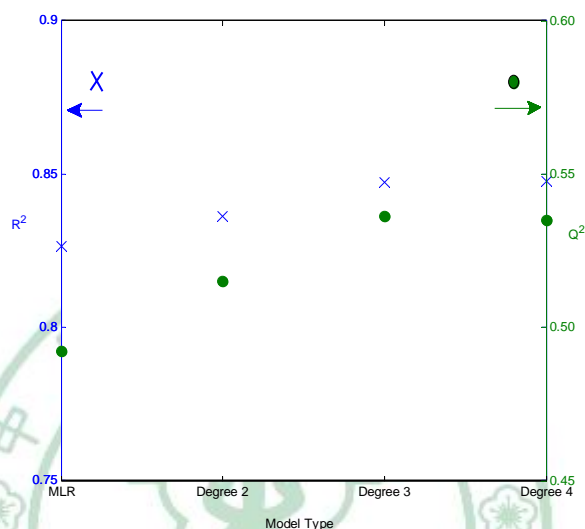


圖 1 不同模式的性能顯示

根據前述資料，圖 2 為 MLR 法預測結果與實驗數據的比較圖，其線性模式預測之 (R^2) 為 0.8266，顯示以表 12 的分類方式已有足夠的預測能力。為嘗試解決圖 2 低溫部分數據的偏離，我們考慮式(6)的非線性模式來預測相關數據，其預測結果與實驗數據如圖 3 至圖 5 所示。

圖 2 至圖 5 顯示預測模式在低溫區與高溫區，相關數據散佈的情形並不相同，高溫趨明顯較低溫區的數據散佈為大。根據自燃溫度的燃燒理論，自燃的現象有兩種可能的機制：低溫機制及高溫機制。低溫機制包含過氧化物中間體，因此與分子結構具有高的關聯，而高溫

機制主要的中間體為烷基自由基，因此與分子本身的結構關聯性較低

(6)。模式預測結果的分布情況反應此一現象，如欲增加預測結果的精確度，可以考慮將數據分成高溫群及低溫群而後再加以處理，這將可以增加整體預測結果的性能表現。

以分子結構的方式預測有機物質的 AIT 預測模式，選用式(13)為最佳的預測模式。此模式包含了 400 筆有機物質的自燃溫度資料，45 種分子結構的分群，相關經驗式為 3 階的非線性方程式。模式的性能可達到 $R^2=0.8474$ ，最大誤差為 32K 且平均誤差百分比為 4.9%，選用不包含於前面數據的 83 筆資料，驗證模式的預測能力，此預測能力的表現為 $Q^2=0.5361$ ，平均誤差為 70K 且平均誤差百分比為 11.0%。

$$AIT = 750.3065 + \left(\sum_i v_i f_i \right) - 8.644 * 10^{-4} \left(\sum_i v_i f_i \right)^2 - 4.5604 * 10^{-6} \left(\sum_i v_i f_i \right)^3 \quad (13)$$

計算範例：

範例(1) 1-Heptene 

依照表 12 的分類方式，可分為 1 個 $[-CH_3]$ 、4 個 $[>CH_2]$ 、
1 個 $[=CH_2]$ 與 1 個 $[=CH-]$ 。


$$\sum v_i f_i = 1(-CH_3) + 4(>CH_2) + 1(=CH_2) + 1(=CH-)$$

所以：
$$= 1(-22.8857) + 4(-28.5961) + 1(-21.6668) + 1(-46.3286)$$
$$= -205.2655$$

依照方程式(13)可得，

$$AIT = 750.3065 + (-205.2655) - 8.644 * 10^{-4} (-205.2655)^2 - 4.5604 * 10^{-6} * (-213.4470)^3$$
$$= 548.0617K$$

實驗值為 536K，預測誤差 12.0617K，以 K 為單位的誤差比例為
2.3%。

範例(2) Fluoroethene 

依照表 12 的分類方式，可得 1 個 $[=CH_2]$ 、1 個 $[=CH-]$
與 1 個 $[-F]$ 。

$$\sum v_i f_i = 1(=CH_2) + 1(=CH-) + 1(-F)$$

所以：
$$= 1(-21.6668) + 1(-46.3286) + 1(-45.0477)$$
$$= -113.0431$$

依照方程式(13)可得，

$$AIT = 750.3065 + (-113.0431) - 8.644 * 10^{-4} (-113.0431)^2 - 4.5604 * 10^{-6} * (-113.0431)^3$$
$$= 632.8K$$

實驗值為 658.15K，預測誤差-25.35K，以 K 為單位的誤差比例為
-3.9%。

表 13 分子結構群的權重因子

Serial no.	Group	MLR	Degree2	Degree3	Degree4
1	-CH ₃	-22.6813	-29.9804	-22.8857	-23.1736
2	>CH ₂	-21.3527	-39.6875	-28.5961	-30.5288
3	>CH-	4.0509	0.5544	1.3340	0.5424
4	>C<	56.6464	54.9627	49.7423	48.2437
5	=CH ₂	-17.7405	-31.9088	-21.6668	-22.9287
6	=CH-	-39.7751	-66.2563	-46.3286	-49.5017
7	>C=	-31.1140	-36.4970	-32.7605	-33.1968
8	≡CH	-71.9615	-117.6474	-81.0169	-85.7134
9	≡C-	-55.6234	-94.6821	-64.4957	-68.9986
10	>CH ₂	-24.6453	-40.1768	-28.4401	-30.1512
11	>CH-	-4.0091	-8.4713	-6.7179	-7.3545
12	>C<	-15.3282	-62.9661	-21.7342	-26.1364
13	=CH-	20.5679	17.5968	19.5293	20.2876
14	>C=	-48.4525	-43.7461	-49.0687	-50.6287
15	=CH-	6.1265	2.5173	6.2350	6.1348
16	>C= (fused)	10.0809	7.8480	5.8332	4.9528
17	>C= (nonfused)	22.0000	24.2898	15.9976	14.9799
18	-CH ₃	120.6545	82.3095	103.2738	114.6114
19	>CH ₂	-3.0301	-17.5437	-9.8344	-11.3142
20	>CH-	-23.3669	-37.6850	-24.2759	-26.4969
21	>C<	242.6675	247.3441	293.5064	287.6000
22	-F (non ring)	-42.1638	-65.1907	-45.0477	-48.2274
23	-Cl (non ring)	37.8512	34.3163	33.9332	33.9492
24	-Br (non ring)	-26.7706	-38.4893	-27.8628	-29.3678
25	-F (ring)	49.5353	49.8512	88.8289	90.5979
26	-Cl (ring)	27.1279	10.1433	79.4122	73.0277
27	-Br (ring)	54.0271	26.6567	53.4870	50.0560
28	-OH (alcohol)	-10.2828	-15.2847	-8.9378	-9.0980
29	-OH (phenol)	43.0417	19.8772	134.3524	135.0214
30	-O- (non ring)	-54.7172	-102.1454	-70.0383	-74.8046
31	-O- (ring)	-27.3097	-40.1570	-28.4801	-29.4928
32	>C=O (non ring)	10.3136	4.4457	8.1173	7.4529
33	>C=O (ring)	46.6977	37.5549	57.5044	58.9186
34	O=CH- (aldehyde)	-120.8556	-208.1346	-138.3186	-147.3836
35	-COOH (acid)	7.4758	-5.7007	4.0037	3.5463
36	-COO- (ester)	35.2785	34.2704	35.2011	35.1839
37	-NH ₂	-17.8076	-33.4276	-17.7579	-18.9367
38	>NH (non ring)	-0.7601	1.5113	-1.8223	-1.5263
39	>NH (ring)	22.7367	22.3273	24.5474	25.8972
40	>N- (non ring)	-1.1683	-20.3543	-4.7926	-8.1033
41	>N- (ring)	-42.3160	-47.2060	-49.3834	-51.0105
42	-N= (non ring)	-35.3780	-75.6105	-41.9897	-47.4827
43	-N= (ring)	33.2611	3.5793	31.8743	24.8482
44	-CN	82.0245	86.5584	80.5038	81.3197
45	-NO ₂	-46.9847	-65.2997	-52.7670	-53.2661

表 14 不同模式的未知參數

Coefficients	MLR	Degree 2	Degree 3	Degree 4
a	731.490 2	771.1828	750.3065	754.0344
b	---	8.5082 E-04	-8.6444 E-04	-7.5627 E-04
c	---	---	-4.5604 E-06	-5.0831 E-06
d	---	---	---	-2.4496 E-09

表 15 不同模式未知參數之 95%信賴區間

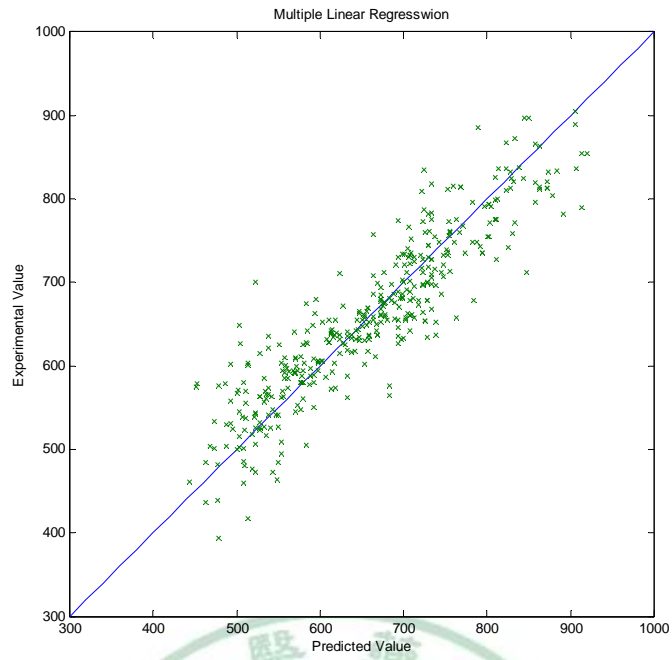
Model Degree	a-	a+	b-	b+	c-	c+	d-	d+
2	7.17984E+02	8.24381E+02	6.76307E-04	1.02534E-03	---	---	---	---
3	7.07108E+02	7.93505E+02	-1.68051E-03	-4.83678E-05	-6.15028E-06	-2.97048E-06	---	---
4	7.08928E+02	7.99141E+02	-1.67053E-03	1.57982E-04	-7.77587E-06	-2.39041E-06	-9.58518E-09	4.68588E-09

表 16 不同模式的預測能力(R²)比較

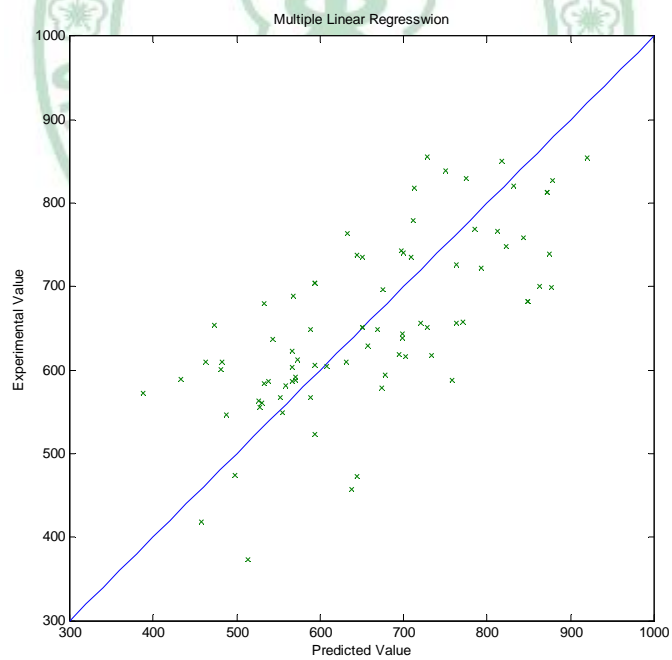
Model	R ²	Max Err(K)	Avg Err(K)	Max Err(%)	Avg Err(%)
MLR	0.8266	178	34	34	5.3
Degree 2	0.8361	163	33	31	5.1
Degree 3	0.8474	169	32	32	4.9
Degree 4	0.8478	168	31	32	4.9
Albahri	0.8464	166	28	31	4.2
Albahri and George	0.79	---	58	125	9.2

表 17 不同模式試驗資料預測能力(Q²)之比較

Model	Q ²	Max Err (K)	Avg Err (K)	Max Err (%)	Avg Err (%)
MLR	0.4921	184.1	75.2	47.4	11.9
Degree 2	0.5151	189.0	72.3	45.4	11.3
Degree 3	0.5361	179.6	69.8	45.9	11.0
Degree 4	0.5349	178.5	69.7	45.5	11.0

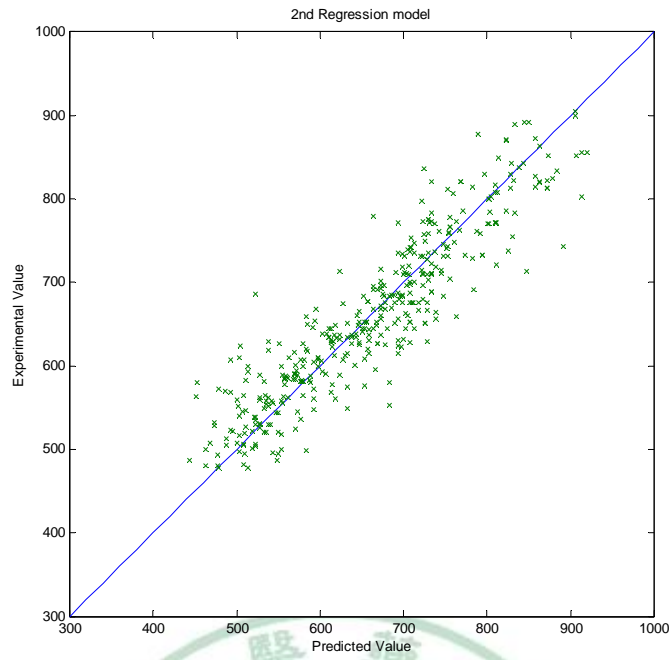


(a)400 筆建模資料

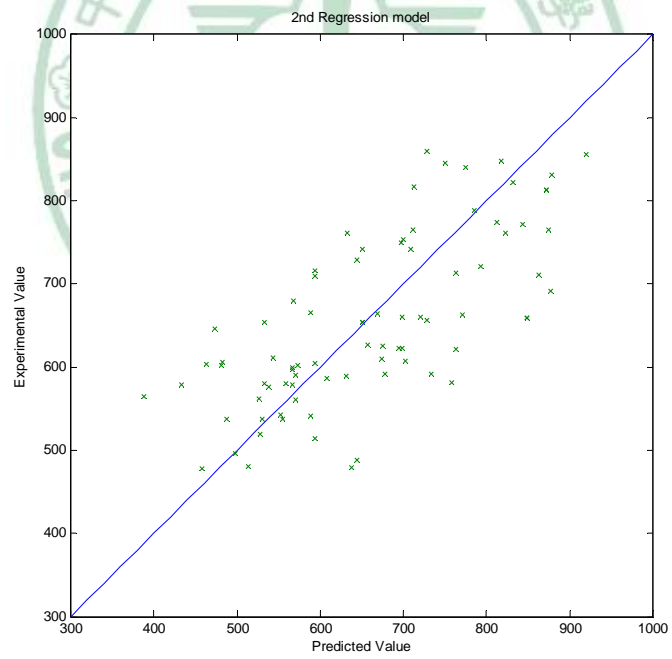


(b)83 筆試驗資料

圖 2 MLR 預測結果與實驗數據比較圖

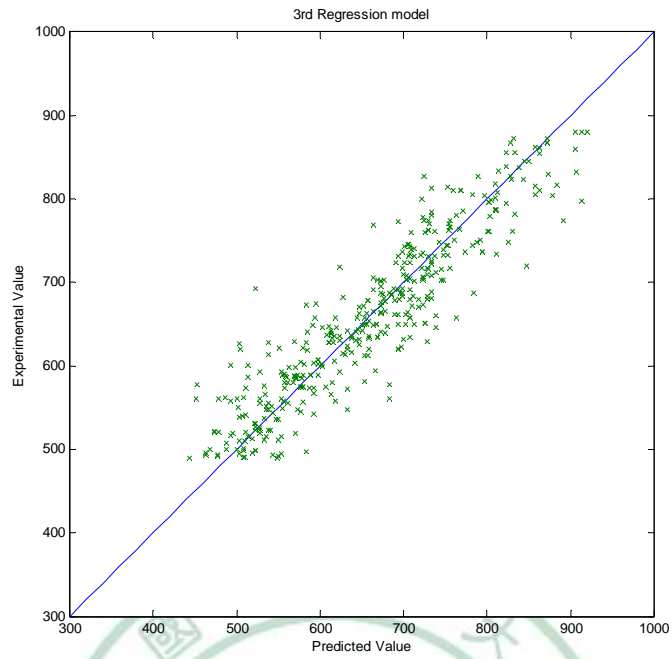


(a)400 筆建模資料

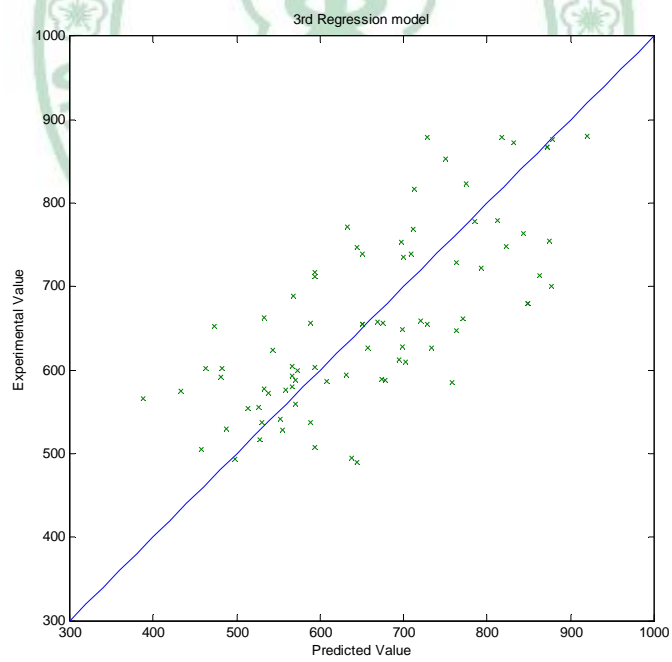


(b)83 筆試驗資料

圖 3 式(3)的 2 階多項式預測結果與實驗數據比較圖

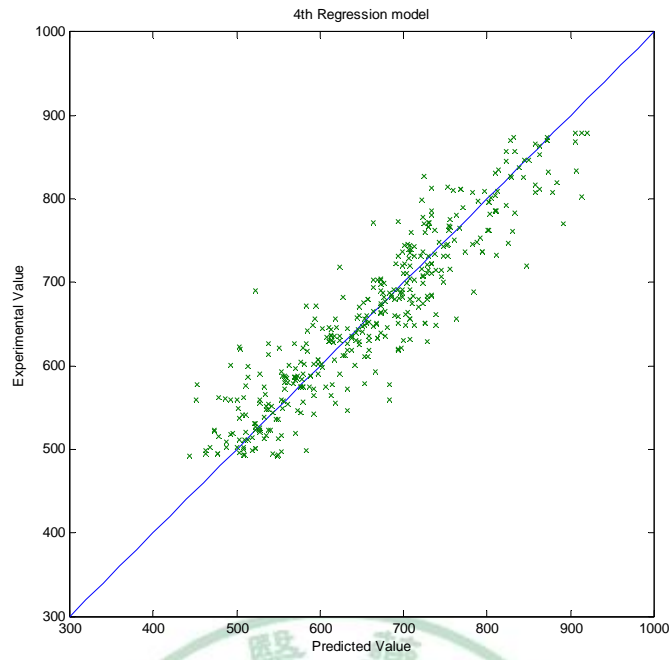


(a)400 筆建模資料

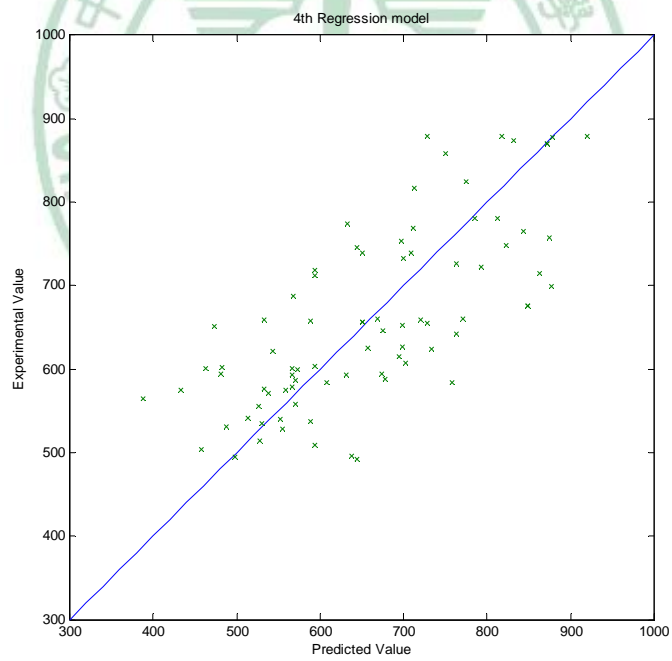


(b)83 筆試驗資料

圖 4 式(3)的 3 階多項式預測結果與實驗數據比較圖



(a)400 筆建模資料



(b)83 筆試驗資料

圖 5 式(3)的 4 階多項式預測結果與實驗數據比較圖

第四章 類神經網路預測模式

第一節 類神經網路原理

類神經網路(Artificial Neural Network, ANN)，又稱做人工神經網路，源自於現今對人類神經系統的認識，而神經元為神經系統最小的處理單元，也是神經系統運作的基礎，用以模擬生物神經元^(38,39)。

類神經網路模仿生物神經網路的資訊處理系統，使用大量簡單的人工神經元相連結，從外界取得資訊加以簡單計算在輸出其結果，人工神經元基本結構包含三部份：權重(突觸)、輸入訊號疊加器(神經核)、活化(作用)函數。整個 ANN 的聚集型式就如同人的大腦一般，透過對樣本或資料的訓練來展現其學習、回想、歸納推演的能力。

類神經網路的系統能力和網路的結構大小有關，也和用來訓練此系統的學習演算法相關。網路架構的型態和大小，藉由試誤法決定最佳的網路大小，一般來說神經元太少無法處理複雜的事件，神經元太多除了效率不好之外，也不能夠代表為最佳的網路架構。學習演算法是藉由訓練的過程中調整類神經網路各神經元的連結強弱的方法。

類神經網路依學習演算的不同可分為(1)監督式學習：不斷修正網路的傳遞權重，降低網路與目標輸出值之間的差距，直到差距小至一定的臨界值。(2)非監督式學習：訓練過程中只有輸入資料的特性，靠自己本身學習及調整權重，沒有目標輸出值得學習過程。

依照連結的網路架構可分為(1)前饋式網路：連結方向為單一向前的傳遞連結，常見的為兩層式(不計輸入層)前饋式類神經網路結構，又可分為(A)單層前饋式網路：僅輸入層與輸出層，輸出層即為單層的意思。(B)多層前饋式網路：含有隱藏層及輸出層的網路，網路的傳遞沿輸入層經由隱藏層而後抵達輸出層。隱藏層的功能為調節網路內部輸入值與網路整體的輸出值。(2)回饋式類神經網路：至少含有一回饋迴圈且將其資料傳給前一層或同層中之其他神經元，又稱為遞迴式網路⁽³⁸⁻⁴⁰⁾。

本研究以表 12 不同分子結構群做為類神經網路的輸入值，對應的自燃溫度為輸出值，探討不同類型之網路結構與其學習規則對於AIT預測能力的差異。

第二節 倒傳遞類神經網路

類神經網路的發展，目前較多研究選用多層前向式之倒傳遞類神經網路(Back-propagation Networks, BPN)，此種網路具有一層的輸入層(input layer)、一層或以上的隱藏層(hidden layer)、以及一層的輸出層(output layer)。BPN 常用以處理非線性的問題，其網路的學習方式採用監督式學習法，網路的訓練演算法是由屬於錯誤更正學習法則的倒傳遞演算法來訓練網路的鍵結值。

一般BPN的架構，輸入層與輸出層用來表現輸入項與輸出值，且兩者間的神經元數目依問題的型式決定；隱藏層神經元數目需以試誤法決定，隱藏層的層數可以依問題複雜度由一層增加到數層⁽³⁸⁾。網路中靠相關權重連結各層間的神經元，輸入值由輸入層直接傳入隱藏層，經加權累加後再透過活化函數轉換可得一輸出值，同理再傳入輸出層。常使用的活化函數形式如S形函數：

$$F(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (14)$$

由於此非線性函數的可微分特徵，可利用最陡坡降法在學習過程中修正權重與偏權值，使誤差逐次減小，達到學習的目的。

倒傳遞演算法的網路訓練方式包含兩個階段：前饋階段以及倒傳遞階段。在前饋階段，輸入訊息從輸入層經由隱藏層加權運算，經活化函數轉換處理後，再傳向輸出層計算網路輸出值，每一層的神經元只影響下

一層的神經元的狀態；若在輸出層得不到目標輸出值，轉為倒傳遞階段，將誤差訊號沿原來的方向沿原來的網路回傳，藉由誤差的值的修正，以使網路的輸出值趨向於期望輸出值⁽³⁸⁻⁴⁰⁾。

在 BPN 的架構中，第 n 層第 j 個神經元的輸入值 y_j^n 為第 $n-1$ 層神經元輸出值權重累加值之非線性函數如式(15)所示：

$$y_j^n = f(\text{net}_j^n) \quad (15)$$

式中 y_j^n 為第 n 層的輸出值，對第一層來說為輸入值， f 為活化函數， net_j^n 為第 $n-1$ 層輸出值 y_i^{n-1} 的權重累加值，如式(16)表示：

$$\text{net}_j^n = \sum_i w_{ji}^n y_i^{n-1} + b_j^n \quad (16)$$

式中 w_{ji}^n 為第 n 層第 j 個神經元與第 $n-1$ 層神經元的連結權重， b_j^n 為第 n 層第 j 個神經元的偏權值。由於倒傳遞類神經網路屬監督式學習，其目的在降低網路輸出值與目標輸出值間的差距，誤差函數 E 定義為：

$$E = \frac{1}{2} \sum_k (d_k - y_k)^2 \quad (17)$$

式中 d_k 為第 k 個神經元的目標輸出值， y_k 為第 k 個神經元的網路輸出值。

因此網路的學習過程，即是使誤差函數 E 最小化的過程，求解目標函數 E 最小化的數值方法有很多種：如梯度法(gradient method)、牛頓法(Newton method)、最陡坡降法(steepest descent method)、共軛梯度法(conjugate gradient method)等，也就是求出最小的誤差平方和^(38-40,47,48)。

BPN 通常包含大量的連結權重參數需要調整，而在訓練的過程中因收斂速度慢且需設定龐大的迭代次數，過程中目標函數易陷入局部解，為改善類神經網路的訓練情形，研究選用變動的學習速率的方式提升傳遞演算法的搜尋效率。

本研究對 BPN 之網路架構設定、資料的設定、以及訓練函數的選擇，過程如下：

(1) 架構設定條件與限制

- i. 先決定隱藏層的數目，以確定網路的大小。對於本研究預測 AIT 的問題，提出具有兩層隱藏層的網路架構較 Albahri 與 George⁽¹⁵⁾ 提出一層隱藏層，更能有效解決過多的未知參數。
- ii. 隱藏層個數的選擇，關係著網路參數的多寡以及影響網路描述問題的能力。研究以 Albahri 與 George⁽¹⁵⁾ 提出之 [6,1] 網路架構，其第一層隱藏層具有 6 個神經元，將其 6 分為 [2,4]、[3,3]、[4,2] 與 [5,1]。作為三層網路架構之隱藏層個數的起始值，但由於 [4,2] 及 [5,1] 會造成過多的參數，影響預測 AIT 之結果，故研究目前先討論 [2,4] 及 [3,3] 兩種起始值的網路架構。

(2) 資料的設定

- i. 對於輸入資料的處理，設定訓練資料以及試驗資料，將其分子結構分類資料正規化(normalize)至 -1 至 1 的範圍間。

- ii. 目標輸出值選用之 S 形活化函數， $F(v) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ ，其目標數出值介於 0 至 1 之間。

(3) 訓練函數的選擇

- i. 最陡坡降演算法：建議採用變動學習速率，可提高搜尋效率。選用結合動量訓練之適應性學習速率演算法，當前一次的誤差總和下降，提高學習速率，反之誤差值增加，學習速率降低。(學習遞增比例為 1.05，學習遞減比例為 0.7)
- ii. 共軛梯度法演算法：延著共軛方向進行線性搜尋以決定權重與偏權值的改變量，較最陡坡降法有更快的收斂速度。

在BPN的輸入項部分，過去文獻以物質之物理化學特性為主，如利用沸點、絕對溫度及絕對體積，或是以Susuki⁽¹²⁾針對物質提出之 6 種描述因子(臨界壓力 P_c 、20⁰C 下之參數 P_A 、零級指標⁰ χ 、絕對電量的總和 Q_T 、醛類 I_{ald} 及酮類 I_{ket} 的指標)作為網路的輸層部分。多數研究主要發展 QSPR-ANN 模式，以物質之物理化學特性預測其性質^(10, 37, 42-46)，如 AIT 等。少數研究採用 SGC-ANN 作為 AIT 之預測模式。

第三節 結果與討論

首先將 483 筆資料分為 400 筆訓練資料及 83 筆試驗資料，採用 Albahri 建議之分子結構表進行分類⁽¹⁵⁾，選定兩層式網路架構[6,1]，設定訓練次數為 500000 次，活化函數的型式為 S 形函數 $F(x) = \frac{1}{1+e^{-x}}$ ，採用可變動的學習速率之演算法，並與第三章提出之分子結構分類表之 BPN 進行比較，結果顯示如表 18。

表 18 訓練資料不同分子結構分類之 BPN 其 (R^2) 比較

Model	R^2	Max Err(K)	Avg Err(K)	Max Err(%)	Avg Err(%)
表 12 分類之 BPN	0.9638	94.836	13.3861	15.8367	2.0827
Albahri 分類之 BPN	0.937	105.7639	19.105	17.7374	2.9743

表 19 試驗資料不同分子結構分類之 BPN 其 (Q^2) 比較

Model	Q^2	Max Err(K)	Avg Err(K)	Max Err(%)	Avg Err(%)
表 12 分類之 BPN	0.3433	515.6348	81.4618	1824.427	36.2355
Albahri 分類之 BPN	0.1271	890.8092	97.8762	573.8062	26.4887

表 18 與表 19 顯示，採用表 12 之分類方式作為 BPN 網路的輸入層部份，較 Albahri 與 George 建議之分類方式⁽¹⁵⁾，訓練資料其 (R^2) 分別為 0.9638 與 0.937，但是對試驗資料上的表現 (Q^2) 為 0.3433 與 0.1271。顯示以 Albahri 與 George 建議之分類方式，雖然訓練資料之性能預測 (R^2) 可藉由訓練提升，但對試驗資料的預測能力 (Q^2) 實為不足，故採用表 12 之分類方式作為後續研究之輸入層部分。

以表 12 為例，其輸入層的個數約為 45 個，如採取Albahri與George建議的網路架構⁽¹⁵⁾，該類神經網路的調整參數可達 $(45*6+6)+(6*1+1)=283$ 個，由於建立AIT預測模式的實驗數據約 300-400 個，因此前述的類神經網路架構對於非模式選定資料的物質之預測能力有限。研究希望採用 3 層式的類神經網路架構來解決此問題，假定將網路架構設為[3,5,1]的型式，則整體系統的可調參數 $(45*3+3)+(3*5+5)+(5*1+1)=164$ 個，整個系統的可調參數較原先Albahri與George的研究少 119 個，因此不論在網路訓練學習與預測聯想均能有效的提升。

為了決定適當的隱藏層神經元個數，研究由[2,4,1]網路架構開始訓練，再逐一增加第二層隱藏層神經元之個數至[2,7,1]，再者由[3,3,1]網路架構開始訓練，繼續增加第二層隱藏層神經元之個數至[3,6,1]，期望使誤差變化不大時之最少神經元個數，即為最適當的神經元個數。

將各層網路架構的性能預測(R^2)及預測能力(Q^2)列出，如

表 20 及表 21 配合圖 6 至圖 12 得知，先就其預測能力(Q^2)大小判斷，挑選出網路架構[2,4,1]、[2,6,1]、 [3,3,1]及[3,5,1]具較大之(Q^2)進行比較。其餘架構如[2,5,1]、[2,7,1]、[3,4,1]與[3,6,1]，因試驗資料之預測能力(Q^2)較小，且由圖 7、圖 9、圖 11 及圖 13 看出具有較大之偏離，故不列入選取的模式。

就網路架構[2,4,1]、[2,6,1]、 [3,3,1]及[3,5,1]進行討論，發現在試驗資料的表現，其[3,3,1]架構之圖 10 也具有偏離的現象，故只針對[2,4,1]、[2,6,1]、及[3,5,1]架構加以選擇。雖然[2,4,1]及[2,6,1]架構在試驗資料之(Q^2)較[3,5,1]為高，但是由圖 6、圖 8 之試驗資料表現較圖 12 之[3,5,1]架構為分散；且在訓練資料中，[2,4,1]及[2,6,1]架構其性能預測的表現(R^2)遠不及[3,5,1]架構，故選用[3,5,1]為最佳的網路架構。

針對研究建議[3,5,1]網路架構之BPN，檢視 83 筆試驗資料，如表 22 列出下列物質其預測之能力有限，誤差皆比平均誤差 68.0528K大者，如 N,N-Dimethylbenzenamine若以不同網路架構預測，其誤差可高達 1000K 左右。但若以整體的試驗資料預測效果，已達到與前述非線性模式提出之平均誤差 69.8K。

BPN採用最陡坡降演算法(GD)作為搜尋的指標，在提升BPN的搜尋速率之過程中，利用加入慣性項(GDM)或是採用研究提出之具變動的學習速率之演算法(GDX)，皆有助於提升BPN之學習速率。但由於過程仍需要相當大的迭代次數與較多的調整權重，因此建議使用共軛梯度法(CGF、CGB)，可省去搜尋過程花費的時間，並在較短的時間內達到設定的指標，且學習速率較最陡坡降為佳。

表 23 與 表 24 以[3,5,1]網路架構，選用不同方式的演算方式，比較預測模式之性能指標(R^2)與預測能力(Q^2)，在此加入迭代的次數作為比

較。由此可知，使用共軛梯度法之演算過程，較過去之最陡坡降法之過程以較少的迭代次數即可完成訓練，不論在訓練資料或是試驗資料的表現上，皆與使用最陡坡降法之資料表現相等。

表 20 不同網路架構性能預測(R^2)

Model	R^2	Max Err(K)	Avg Err(K)	Max Err(%)	Avg Err(%)
[2,4,1]	0.896	128.7082	24.1261	22.1202	3.7908
[2,5,1]	0.8792	132.5682	25.5933	22.6334	3.9376
[2,6,1]	0.896	141.438	24.2659	20.0294	3.7343
[2,7,1]	0.892	147.5469	24.6244	22.004	3.7774
[3,3,1]	0.9249	104.8747	20.3544	19.8523	3.2054
[3,4,1]	0.9312	121.0966	19.4503	20.3763	3.0258
[3,5,1]	0.9351	114.3215	19.2682	20.2224	3.0014
[3,6,1]	0.9035	132.9269	23.0511	22.1863	3.6112

表 21 不同網路架構預測能力(Q^2)

Model	Q^2	Max Err(K)	Avg Err(K)	Max Err(%)	Avg Err(%)
[2,4,1]	0.401	235.8167	66.8581	41.2782	10.3973
[2,5,1]	0.209	560.0427	78.1663	370.9941	15.904
[2,6,1]	0.4175	228.4323	67.9344	42.9199	10.7927
[2,7,1]	0.2799	490.6302	72.849	45.2348	11.0421
[3,3,1]	0.3104	320.6245	76.8013	47.9969	11.7137
[3,4,1]	0.2442	573.2674	77.7206	47.0846	11.3102
[3,5,1]	0.3355	247.5574	68.0528	50.9626	10.8981
[3,6,1]	0.1352	431.5155	72.7619	135.5669	12.5254

表 22 試驗資料預測能力有限之物質


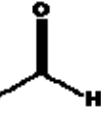
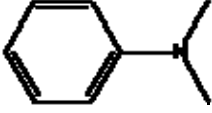

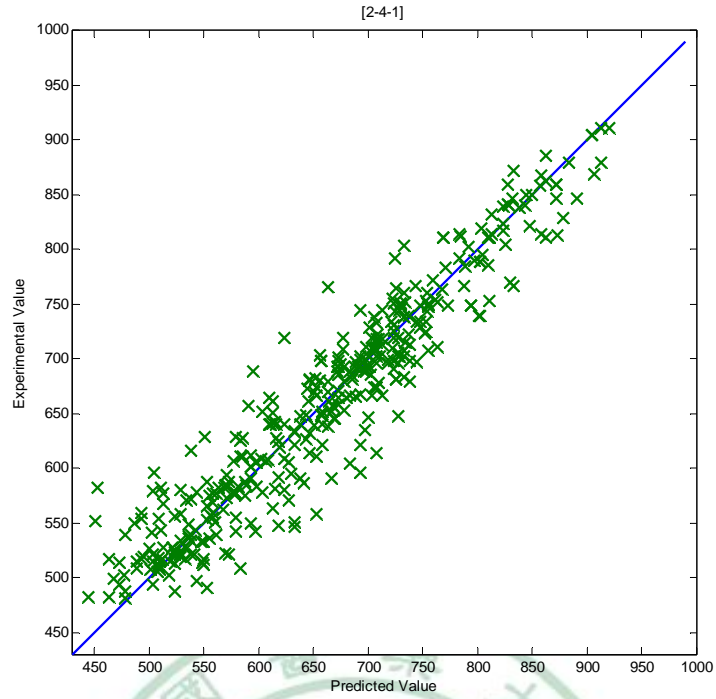
Compound name	CAS	Formula		AIT(K)
1,3-Cyclohexadiene	592-57-4	C ₆ H ₈		633*
Acetaldehyde	75-07-0	C ₂ H ₄ O		758.15
N,N-Dimethylbenzenamine	121-69-7	C ₈ H ₁₁ N		644.26
4-Hydroxy-4-methyl-2-pentanone	123-42-2	C ₆ H ₁₂ O ₂		835.37

表 23 [3,5,1]架構不同演算法之預測能力(R²)

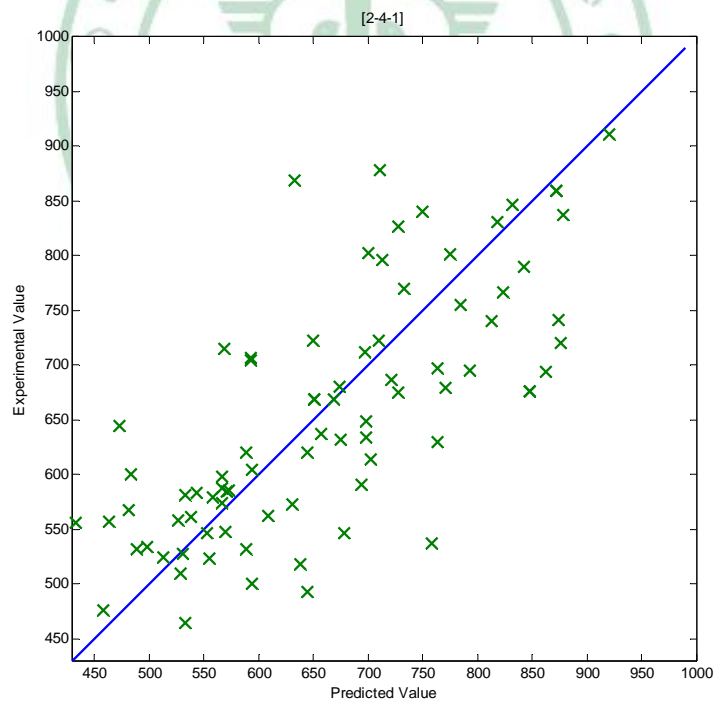
Algorithm	R ²	Max Err(K)	Avg Err(K)	Max Err(%)	Avg Err(%)	epochs
GD	0.862	161.3651	27.9872	23.5788	4.2432	500000
GDM	0.8568	142.3912	28.521	21.3996	4.3575	500000
GDX	0.9351	114.3215	19.2682	20.2224	0.9351	500000
CGF	0.9229	125.9494	20.7117	18.1849	3.2524	2461
CGB	0.9235	108.2624	20.9606	17.6824	3.1987	1949

表 24 [3,5,1]架構不同演算法之預測能力(Q²)

Algorithm	Q ²	Max Err(K)	Avg Err(K)	Max Err(%)	Avg Err(%)	epochs
GD	0.3106	220.003	66.7686	43.1462	10.4269	500000
GDM	0.3566	192.1346	66.3195	33.9451	10.1899	500000
GDX	0.3355	247.5574	68.0528	50.9626	10.8981	500000
CGF	0.3241	323.934	71.2066	83.6896	11.9073	2461
CGB	0.4605	223.2779	66.6307	62.0354	10.7346	1949

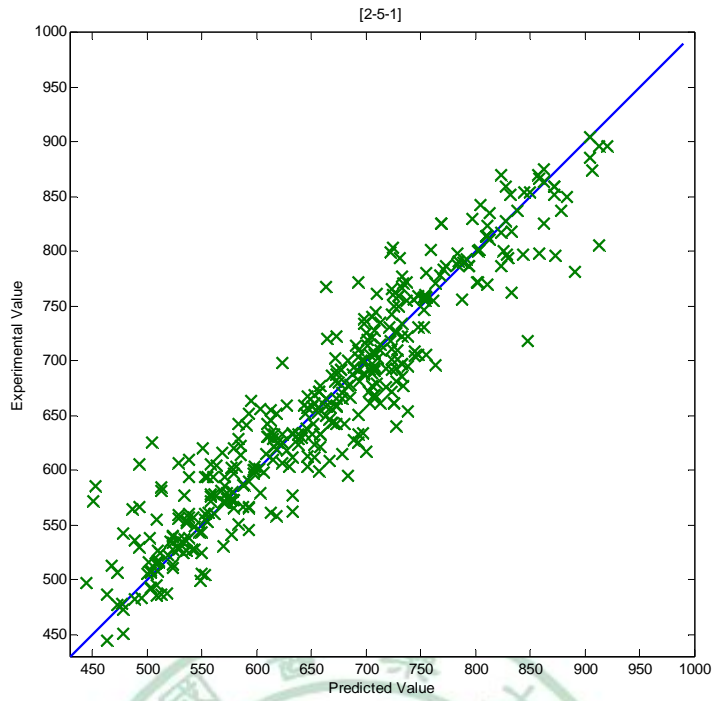


(a) 訓練資料

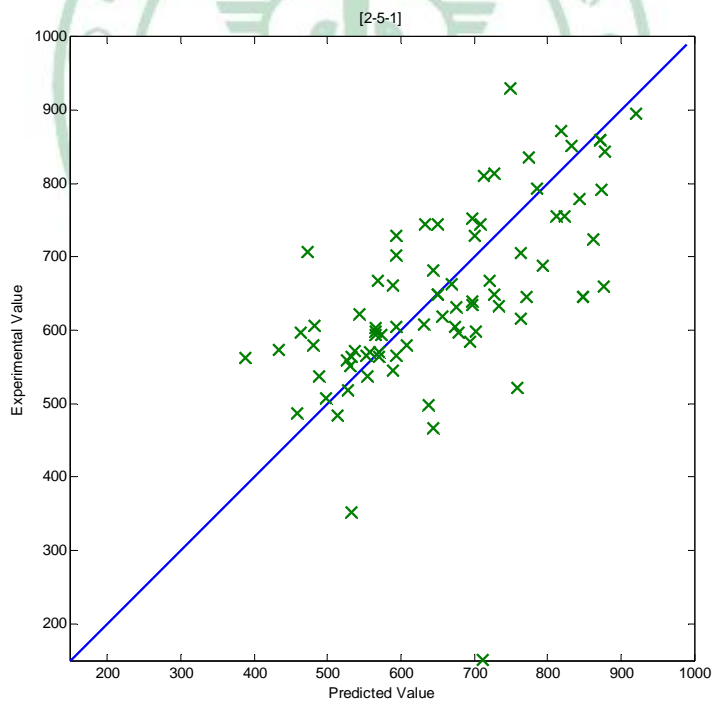


(b) 試驗資料

圖 6 BPNN [2,4,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖

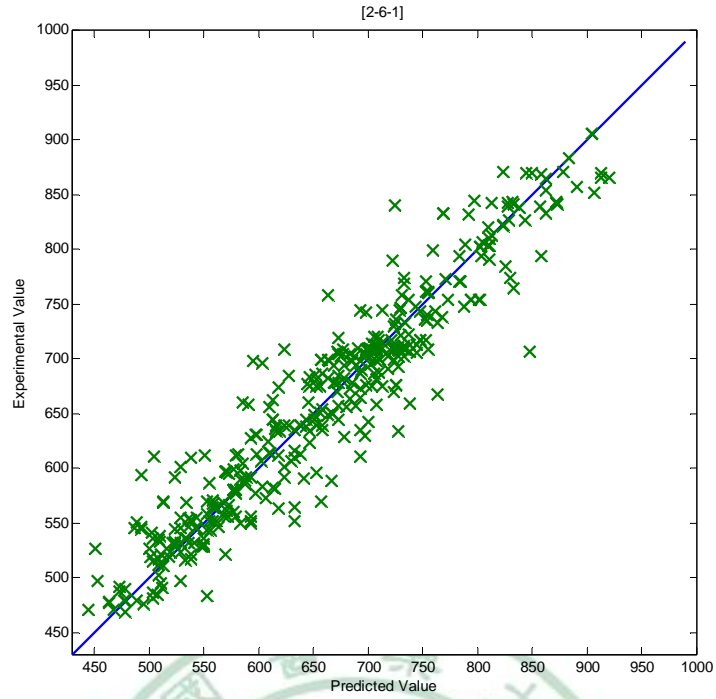


(a) 訓練資料

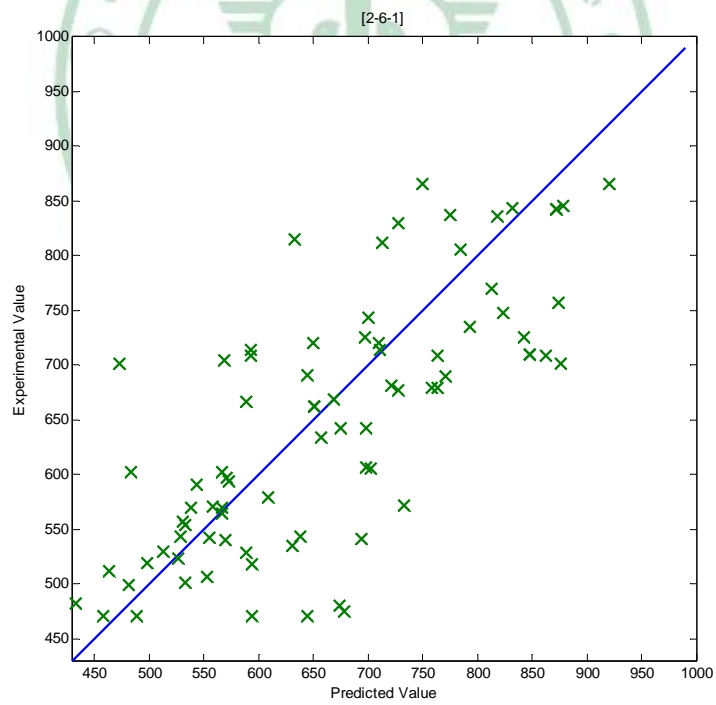


(b) 試驗資料

圖 7 BPNN [2,5,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖

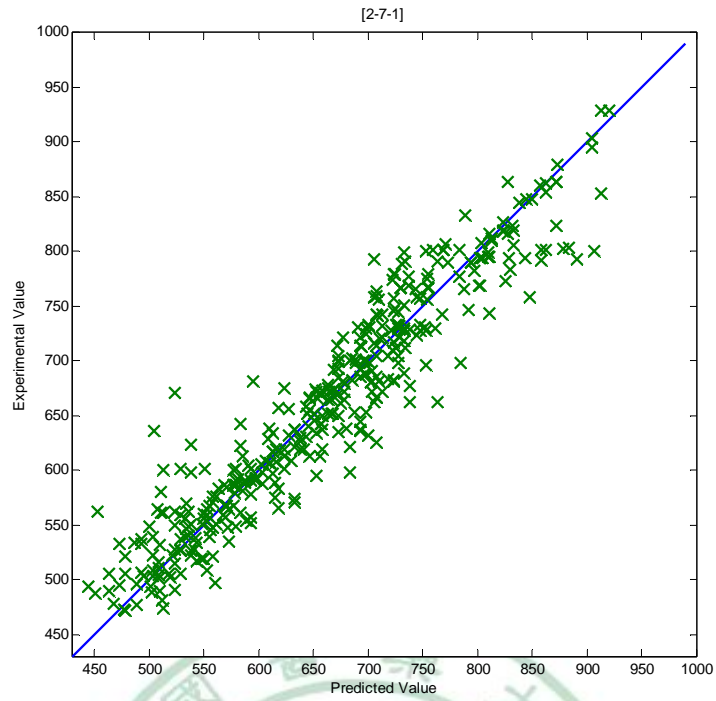


(a) 訓練資料

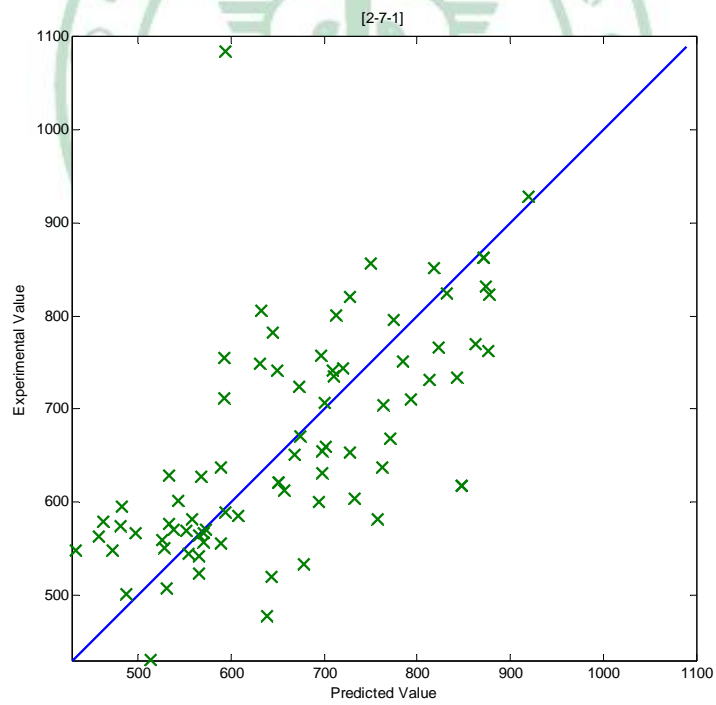


(b) 試驗資料

圖 8 BPNN [2,6,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖

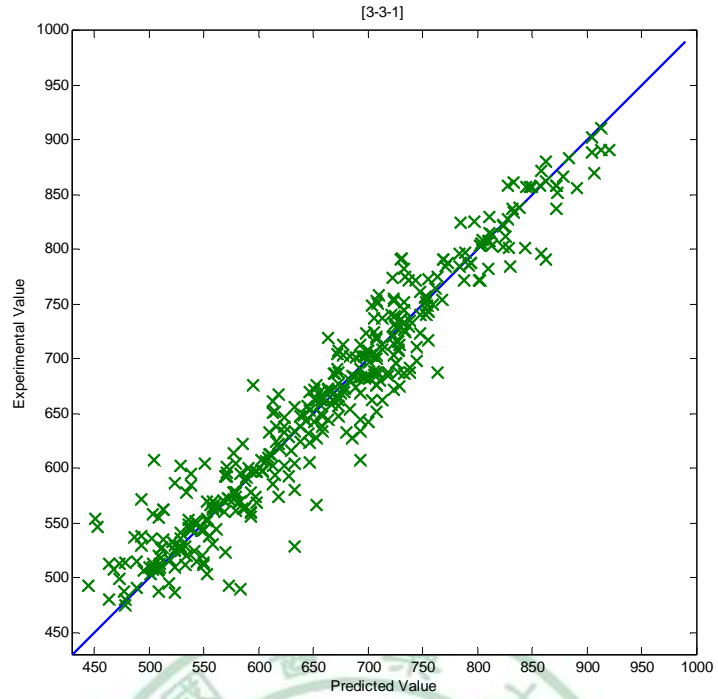


(a) 訓練資料

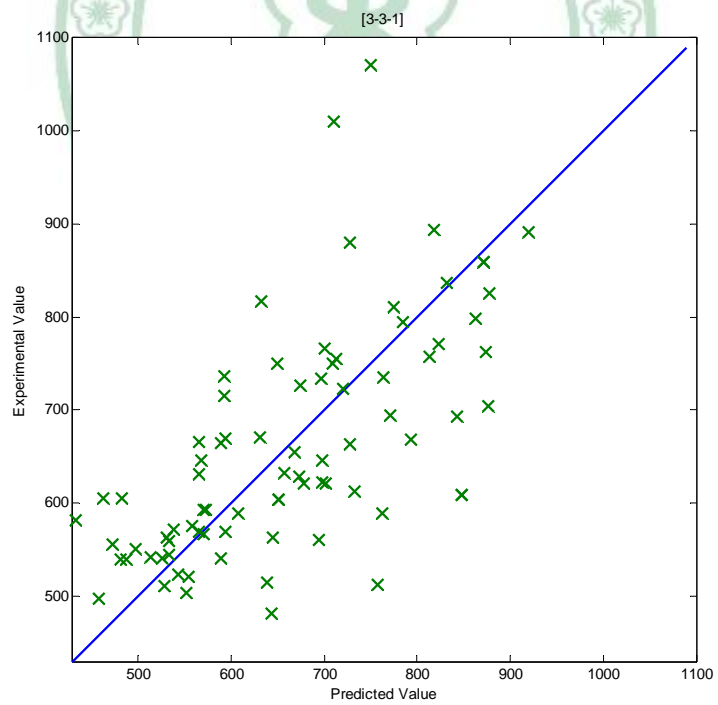


(b) 試驗資料

圖 9 BPNN [2,7,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖

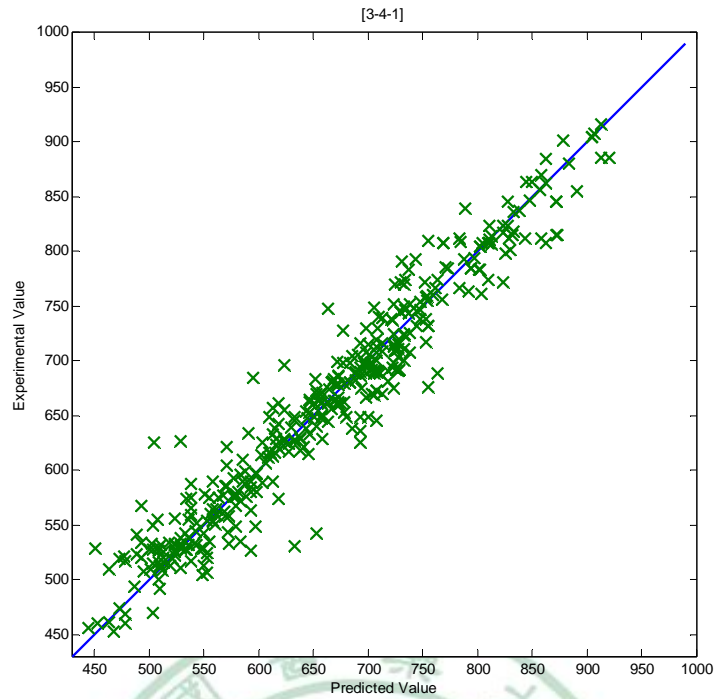


(a) 訓練資料

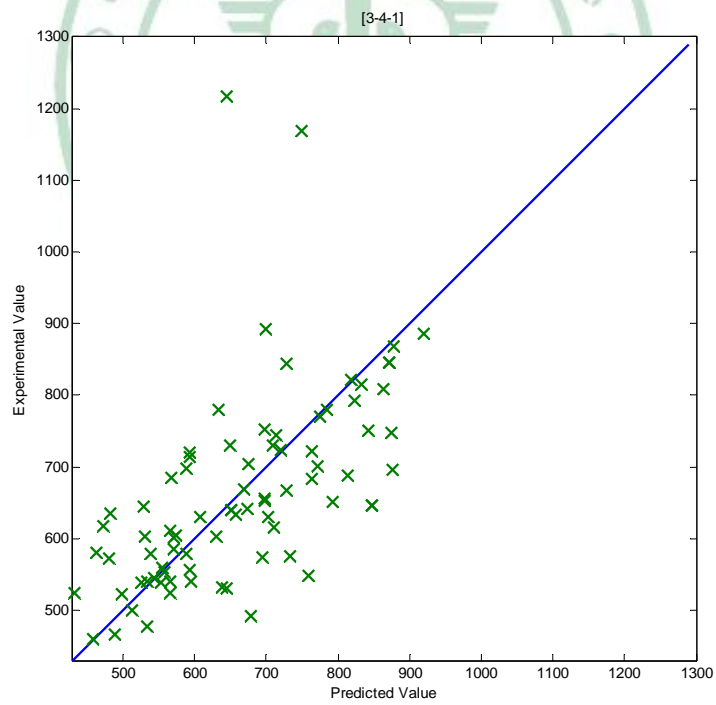


(b) 試驗資料

圖 10 BPNN [3,3,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖

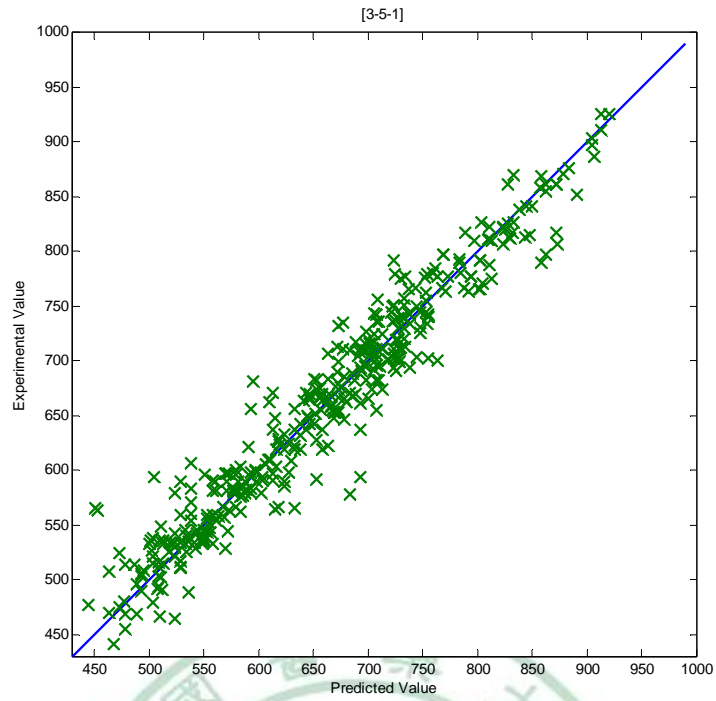


(a) 訓練資料

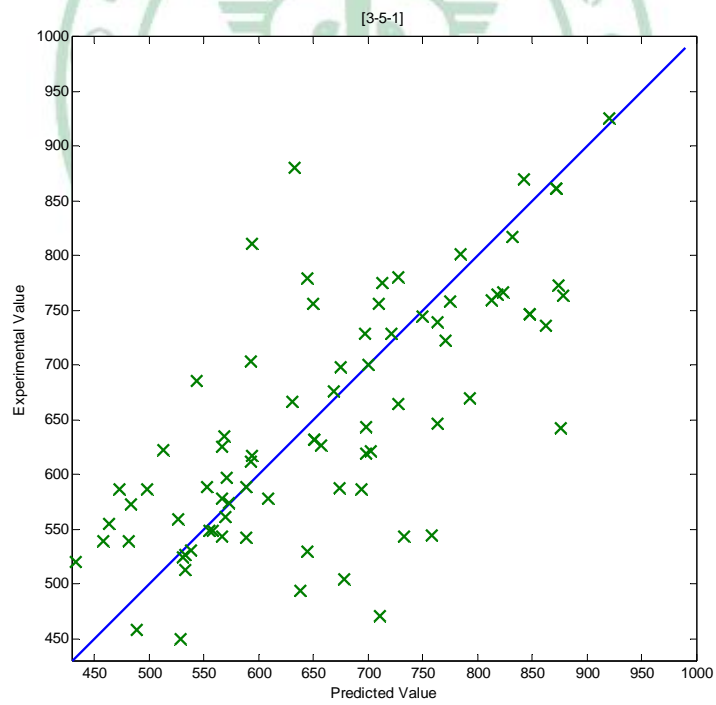


(b) 試驗資料

圖 11 BPNN [3,4,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖

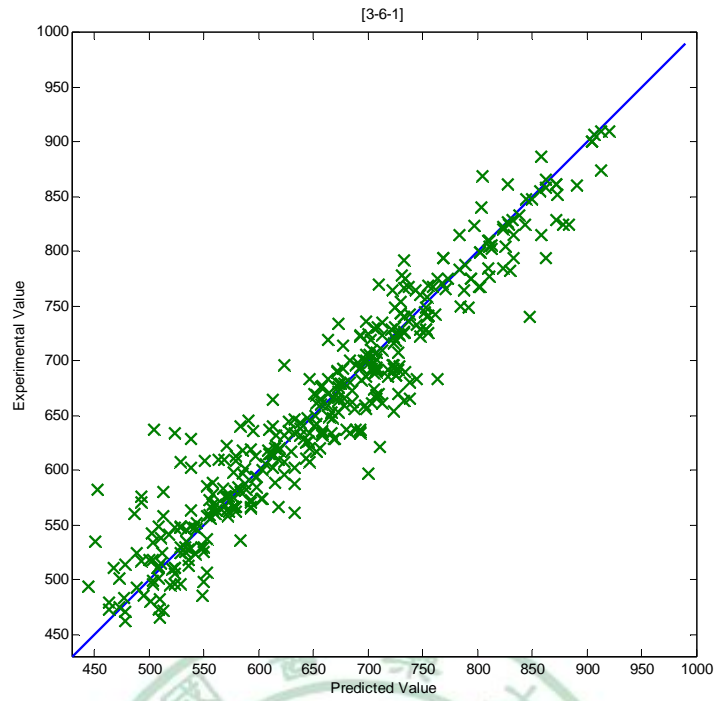


(a) 訓練資料

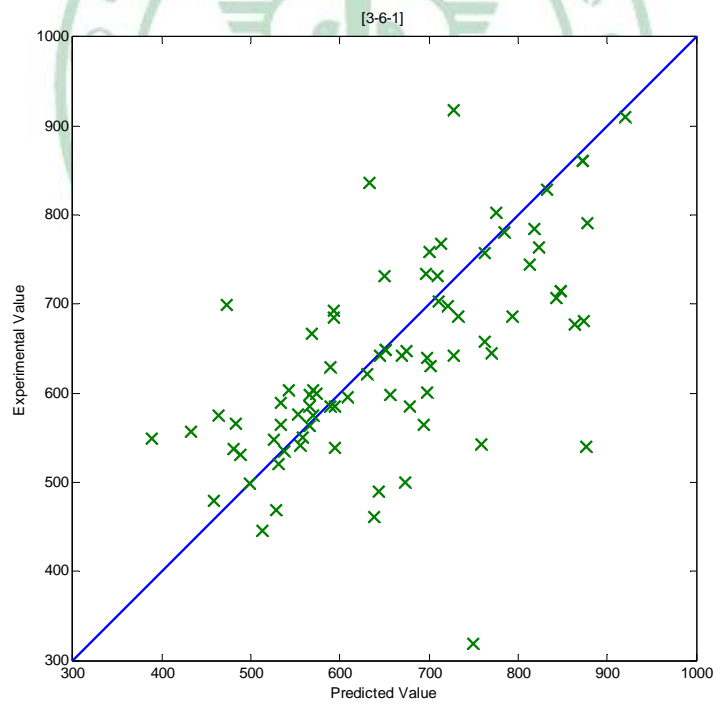


(b) 試驗資料

圖 12 BPNN [3,5,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖



(a) 訓練資料



(b) 試驗資料

圖 13 BPNN [3,6,1]網路結構預測結果與實驗數據比較圖

第五章 結果與建議

第一節 結論

研究對於有機物質之AIT預測模式，認為單純環烷類與芳香族的物質對預測AIT之影響不同；且鹵原子的官能基被加入直鏈之碳氫物質會影響其AIT；而環狀物質與鹵原子的官能基的結合提升其AIT之預測，在直鏈中加入鹵原子的官能基造成AIT之預測下降，因此在分類中加入 14、16、18 到 21 族群、22-24 族群以及 25-27 族群。最後，引進兩個與過去文獻不同的 9 族群與 42 族群分子結構。建立表 12 之分子結構分類表，以有效預測物質之AIT。

本研究提出以 MLR 為延伸概念之非線性模式，經由性能預測(R^2)及預測能力(Q^2)之比較，並對參數做 95%信賴區間比較，選定合適之 3 皆非線性預測模式，其(R^2)為 0.8474、(Q^2)為 0.5361，最大誤差分別為 168K 與 179.6K，平均誤差在 32K 與 69.8K，方程式如下：

$$AIT = 750.3065 + \left(\sum_i v_i f_i \right) - 8.644 * 10^{-4} \left(\sum_i v_i f_i \right)^2 - 4.5604 * 10^{-6} \left(\sum_i v_i f_i \right)^3$$

SGC-ANN做為預測模式的選取，可有效避免其模式選取的複雜。研究提出 3 層式網路架構，較Albahri與George建議的 2 層網路架構有較少的未知參數，且同樣的網路架構比較，顯示以表 12 為輸入層，可以有效預測有機物質之AIT。

最後研究以 BPN [3,5,1] 網路架構預測物質之 AIT，可達到性能預測(R^2) 及預測能力(Q^2) 分別為 0.9351 及 0.3355，而平均誤差分別為 19.2682K 及 88.05K。由於使用最陡坡降之 BPN，在迭代的過程中，容易因龐大的參數與調整權重，在訓練的過程中花費許多時間，若以共軛梯度法之 BPN，可以較少的迭代次數，獲得較佳的預測結果。

因此以分子結構發展預測化學物質特性，故可應用於新物質的合成，若有一新化學物質，可由預測模式先求出其物理化學相關特性，作為參考值使用。附錄 A-1、A-2 為採用 SGC 模式預測 AIT 的數據，A-3、A-4 為採用 SGC-ANN 模式預測 AIT 之數據。

第二節 研究限制

建立模式須對化學物質之分子結構有相當的了解，依其分子結構表加以分類官能基，而後依經驗找出相關經驗式或選用類神經網路，作為預測模式的選擇。過程中須考慮 AIT 與分子結構間的關係，期使預測模式的誤差達可接受之合理範圍。

類神經網路預測模式研究中僅選用建模資料與試驗資料，因其自燃溫度的實驗數據取得不易，部分分子結構分類表僅只有一、兩類物質，故僅分為兩類資料判斷模式之優劣。

參考文獻

- (1)API, API Publication 581: Risk-based inspection base resource document, American Petroleum Institute, 2000.
- (2)Morely C. A fundamentally based correlation between alkane structure and octane number. *Combust. Sci. Tech.* 1987;55:115-123.
- (3)Egolf L.M., P.C. Jurs. Estimation of auto-ignition temperatures of hydrocarbons, alcohols, and ester from molecular structure. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1992;31: 1798-1807.
- (4)Kirish L.J., C.P. Quinn. Progress towards a comprehensive model of hydrocarbon auto-ignition. *J. Chem. Phys.* 1985;82(5):459-473.
- (5)Pilling M.J., S.H. Robertson., P.W. Seakins. Elementary radical reactions and auto-ignition. *J. Chem. Soc. Faraday Trans.* 1995;91(23):4179-4188.
- (6)Affens W.A., J.E. Johnson, H.W. Carhart. Effect of chemical structure on spontaneous ignition of hydrocarbons. *J. Chem. Eng. Data.* 1961;6(4):613-619.
- (7)Roubaud A., R. Minetti, L.R. Sochet. Oxidation and combustion of low alkylbenzenes at high pressure: comparative reactivity and auto-ignition. *Combust. Flame.* 2001;121:535-541.
- (8)Mitchel B.E., P.C. Jurs. Prediction of auto-ignition temperatures of organic compounds from molecular structure. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1997;37:538-547.
- (9)Swarts D.E., M. Orchin. Spontaneous ignition temperature of hydrocarbons. *Ind. Eng. Chem.* 1957;49:432-436.
- (10)Tetteh J., E. Metcalfe, S.L. Howells. Optimisation of radial basis and back-propagation neural networks for modeling auto-ignition temperature by

quantitative-structure property relation. *Chemom. Intell. Lab. Syst.* 1996;32:177-191.

(11) Susuki T., K. Ohtaguchi, K. Koide. Correlation and prediction of auto-ignition temperatures of hydrocarbons using molecular properties. *J. Chem. Eng. Japan* 1992;25:606-608.

(12) Susuki T. Quantitative structure-property relationships for auto-ignition temperatures of organic compounds. *Fire Mater.* 1994;18:81-88.

(13) Albahri T.A. Structural group contribution method for predicting the octane number of pure hydrocarbon liquids. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2003;42:657-662.

(14) Albahri T.A. Flammability characteristics of pure hydrocarbons. *Chem. Eng. Sci.* 2003;58:3629-3641.

(15) Albahri T.A., R.S. George. Artificial neural network investigation of the structural group contribution method for predicting pure components auto-ignition temperature. *Ind. Eng. Chem. Res.* 2003;42: 5708-5714.

(16) Affens W.A. Flammability properties of hydrocarbon fuel interrelations of flammability properties of n-alkanes in air. *J. Chem. Eng. Data.* 1966;11(2):197-202.

(17) Kim Y.S., S. K. Lee, J.H. Kim, J.S. Kim, K.T. No. Predictions of auto-ignitions (AITS) for hydrocarbons and compounds containing heteroatoms by the quantitative structure-property relationship. *Roy. Soc. Chem.* 2002;2:2087-2092.

(18) 陳強琛、郭毓宥，有機物質自燃溫度預測模式，95年程序系統工程研討會，pp.303-311，台北。

- (19)ASTM International. ASTM Standard TEST Method E659-78, The American Society for Testing and Materials: West Conshohocken, PA, 2005.
- (20)AIChE, DIPPRO®. DIPPR Project 801 Pure Component Data public version,1996.
- (21)Lewis R. J. Hazardous Chemicals Desk Reference, John Wiley & Sons,2002
- (22)Lewis R. J. SAX'S Dangerous Properties of Industrial Materials, John Wiley & Sons, 11th edition,2004
- (23)The Hazardous Chemical Database. The World Wide Web:
<http://ull.chemistry.uakron.edu/erd/index.html>.
- (24)Karelson M., V.S. Lobanov, A.R. Katritzky. Quantum-chemical descriptors in QSAR/QSPR studies. *Chem. Rec.* 1996;96:1027-1043.
- (25)Katritzky A.R., V.S. Lobannov, M. Karelson. QSPR: The correlation and quantitative prediction of chemical and physical properties from structure. *Chem. Soc. Rev.* 1995:279-287.
- (26)Katrizky A.R., U. Maran, V.S. Lobanov, M. Karelson. Structurally diverse quantitative structure-property relationship correlation of technologically relevant physical properties. *J. Chem. Inf. Sci.* 2000;40:1-18.
- (27)McClelland H.E., P.C. Jurs. Quantitative structure-property relationship for the prediction of vapor pressures of organic compounds molecular structures. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 2000;40:967-975.
- (28)Luke B.T.. Comparison of three different QSAR/QSPR generation techniques. *J. Mol. Struct. (Theochem)*. 1999;468:13-20.
- (29)Livingstone D.J. The characterization of chemical structures using molecular properties. A Survey. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 2000;40: 195-209.

- (30) Saraf S.R., W.J. Roger, M.S. Mannan. Prediction of reactive hazards based on molecule structure. *J. Hazard. Mater.* 2003;A98:15-29.
- (31) Saraf S.R., W. J. Rogers, D. M. Ford, M. S. Mannan. Integrating molecular modeling and process safety research. *Fluid Phase Equilibria.* 2004; 222-223, 205-211.
- (32) Suzuki T., K. Ohtaguchi, K. Koide. A method for estimating flash point of organic compounds from molecular structures. *J. Chem. Eng. Japan.* 1991;24(2):258-261.
- (33) Seaton W.H.. Group contribution method for predicting the lower and the upper flammable limits of vapors in air. *J. Hazard. Mater.* 1991;27:169-185.
- (34) Pan Y., J.C. Jiang, Z.R. Wang. Prediction of auto-ignition temperatures of hydrocarbons by neural network based on atom-type electrotopological-state indices. *J. Hazard. Mater.* 2008;doi:10.1016/j.jhazmat.2008.01.016.
- (35) Pan Y., J.C. Jiang, Z.R. Wang, H. Cao. Advantages of support vector machine in QSPR studies for predicting auto-ignition temperatures of organic compounds. *Chemometr. Intell. Lab. Syst.* 2008;92: 169-178.
- (36) ASTM International. The CHETAH program; The American Society for Testing and Materials: West Conshohocken, PA, 2005.
(<http://www.southalabama.edu/engineering/chemical/chetah/intro.html>)
- (37) Egolf L.M. , P.C. Jurs. Prediction of boiling points of organic heterocyclic compounds using regression and neural network techniques. *J. Chem. Inf. Comput. Sci.* 1993;33:616-625.
- (38) 張斐章、張麗秋，類神經網路，初版，94年9月，東華書局，台北。
- (39) 羅華強，類神經網路，二版，94年7月，高立圖書，台北。

- (40)Hagan Demuth Beale 原著，汪惠健 審校，類神經網路設計，初版，93 年 7 月，普林斯頓國際有限公司，台北。
- (41)Bunz A.P., B. Braun, R. Janowsky. Application of quantitative structure-performance relationship and neural network models for the prediction of physical properties from molecular structure. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1998;37:3043-3051.
- (42)Goll E.S., P.C. Jurs. Prediction of normal boiling points of organic compounds from molecular structures with a computational neural network model. *J. Chem. Inf. Sci.* 1999;39:974-983.
- (43)Taskiuen J., J. Yliruusi. Prediction of physicochemical properties based on neural network modeling. *Advan. Drug Deliv. Rev.* 2003;55:1163-1183.
- (44)Tetteh J., S. Howells, E. Metcalfe, T. Susuki. Optimization of radial basis function neural networks using biharmonic spline interpolation. *Chemometr. Intell. Lab.* 1998;41:17-29.
- (45)Lee M.J., J.T. Chen. Fluid property predictions with the aid of neural networks. *Ind. Eng. Chem. Res.* 1993;32:995-997.
- (46)Guha R., D.T. Stanton, P.C. Jurs. Interpreting computational neural network quantitative structure-activity relationship model: a detailed interpretation of the weights and biases. *J. Chem. Inf. Model.* 2005;45:1109-1121.
- (47)Chong E.K.P., S.H. Zak. An introduction to optimization. John Wiley & Sons, 1996.
- (48)Demuth H., M. Beale, M. Hagan. Neural Network Toolbox - User's uide (Version 5). The Math Works, Inc.. 2006.

附錄

A-1 400 筆建模資料

	Compound name	Exp. Value	Reference	MLR	Degree 3
1	Butane	645	10	643.42	643.16
2	Pentane	538	10	622.07	614.17
3	Hexane	513	10	600.72	586.71
4	Heptane	486	10	579.36	561.42
5	2-Methylpropane	733.15	4	667.50	680.46
6	2-Methylbutane	693.15	4	646.14	650.46
7	3-Methylpentane	551.15	4	624.79	621.19
8	2,2-Dimethylpropane	723.15	4	697.41	707.33
9	2,2-Dimethylbutane	678	5	676.06	677.22
10	2,3-Dimethylpentane	610.37	4	627.51	628.30
11	2,2,3-Trimethylbutane	685	10	678.78	684.64
12	1-Pentene	571	10	608.59	598.09
13	1-Heptene	536	10	565.88	548.06
14	1-Octene	523	5	544.53	527.50
15	1-Decene	508.15	4	501.82	498.46
16	1,3-Pentadiene	613	10	571.74	565.84
17	2-Methyl-1-pentene	579	10	594.57	589.28
18	2,4,4-Trimethyl-1-pentene	693	4	627.20	620.88
19	Cyclopentane	593	10	608.26	603.74
20	Methylcyclopentane	602.04	4	606.22	602.61
21	Ethylcyclohexane	535.37	4	560.22	551.89
22	n-Propylcyclohexane	521.15	4	538.87	530.74
23	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	577.15	4	579.53	575.08
24	Dicyclohexyl	518.15	4	477.02	496.27
25	Decalin	541	10	526.31	522.96
26	Hydrindane	569	10	641.38	629.21
27	Cyclopentene	668.15	4	698.69	702.65
28	Cyclohexene	583.15	4	674.04	672.68
29	Benzene	771	5	768.25	786.27
30	Toluene	755	10	761.44	774.02
31	Ethylbenzene	705.37	4	740.09	745.98
32	n-Propylbenzene	729.15	4	718.74	716.63
33	n-Butylbenzene	685.37	4	697.38	686.60
34	1,3-Dimethylbenzene	800.93	4	754.63	761.36

35	1,4-Diethylbenzene	703.15	4	711.93	702.89
36	Biphenyl	813.15	4	836.76	833.13
37	Naphthalene	813	10	800.66	807.52
38	1-Methylnaphthalene	802.04	4	793.86	796.18
39	Anthracene	828	10	833.08	826.77
40	Ethanol	673	10	677.17	687.74
41	1-Propanol	644.26	4	655.82	657.66
42	1-Butanol	616	4	634.47	628.16
43	2-Butanol	663	5	658.54	665.04
44	tert-Butanol	733	10	709.81	721.88
45	Cyclohexanol	573.15	4	593.97	588.85
46	Benzyl alcohol	709.26	4	752.49	759.86
47	1-Hexanol	558	4	591.76	573.45
48	Allyl alcohol	643	10	642.34	640.51
49	Dimethyl ether	623.15	4	631.41	629.99
50	Dibutyl ether	467.59	4	503.29	499.77
51	Methyl vinyl ether	560.15	4	596.58	586.01
52	Diphenyl ether	891.15	4	782.04	774.04
53	Propylene oxide	738.15	4	652.84	660.27
54	Propionaldehyde	500	10	566.60	560.55
55	Butyraldehyde	503.15	4	545.25	538.18
56	Acetophenone	833	10	771.76	781.65
57	2-Butanone	677	10	675.09	681.59
58	2-Pentanone	725.15	4	653.74	651.57
59	Cyclohexanone	693.15	4	654.96	662.18
60	Acetic acid	737	10	716.28	731.15
61	Butyric acid	718	10	673.58	671.24
62	Pentanoic acid	673.15	4	652.23	641.39
63	Acrylic acid	711.15	4	681.45	683.97
64	Dipropylamine	572.15	4	599.96	585.03
65	Diphenylamine	907.04	4	836.00	831.82
66	2-Aminoethanol	673	10	660.69	663.03
67	1-Chlorobutane	523	10	700.92	692.42
68	Acetyl chloride	663.15	4	756.97	769.12
69	Chlorobenzene	863	5	811.25	853.79
70	1-Bromobutane	538	5	636.30	627.99
71	Bromobenzene	838.15	4	838.15	837.56

72	Ethyl formate	708	10	722.73	733.82
73	Ethyl acetate	700	4	700.05	710.09
74	Propyl acetate	708	10	678.70	679.99
75	Butyl acetate	653	10	657.35	650.00
76	Isobutyl acetate	696	4	681.42	687.42
77	Methyl propionate	728	10	700.05	710.09
78	Ethyl propionate	718	10	678.70	679.99
79	Methyl butyrate	728	10	678.70	679.99
80	Methyl benzoate	783	5	796.72	805.78
81	Ethyl benzoate	763.15	4	775.37	780.24
82	Butyl benzoate	708	10	732.66	723.49
83	Ethyl acrylate	655.93	4	665.22	662.62
84	2-Methylpentane	579.26	4	624.79	621.19
85	2,2,4-Trimethylbutane	680	10	654.71	647.27
86	trans-2-Hexene	528	10	563.87	555.74
87	trans-2-Pentene	558	4	585.22	580.42
88	1,3-Hexadiene	593	10	550.39	542.81
89	1,5-Hexadiene	618	10	573.75	557.74
90	2-Methylpropene	738.15	4	637.27	646.02
91	3-Methyl-1-butene	638.15	4	632.66	633.43
92	4-Methyl-1-pentene	577	10	611.31	604.88
93	2-Ethyl-1-butene	597	10	594.57	589.28
94	2,3-Dimethyl-1-butene	633.15	4	618.64	623.97
95	2,3,3-Trimethyl-1-butene	656	10	648.56	650.14
96	2,4,4-Trimethyl-2-pentene	581	4	603.84	602.22
97	Ethylcyclopentane	533.5	4	584.87	575.97
98	Propylcyclopentane	542.15	4	563.51	551.77
99	n-Hexylcyclopentane	501	10	499.46	500.15
100	Isopropylcyclohexane	556	5	562.94	557.60
101	Butylcyclohexane	519.15	4	517.52	513.30
102	Isobutylcyclohexane	547	10	541.59	535.63
103	sec-Butylcyclohexane	550	10	541.59	535.63
104	tert-Butylcyclohexane	615	10	592.86	579.68
105	trans-1,3-Dimethylcyclohexane	579	4	579.53	575.08
106	trans-1,4-Dimethylcyclohexane	577	4	579.53	575.08
107	1,3,5-Trimethylcyclohexane	587	10	577.48	574.04
108	4-Isopropyl-1-methylcyclohexane	579	10	560.90	556.64

109	Cyclodecane	508	10	485.04	500.89
110	Isobutylbenzene	700.93	4	721.46	723.95
111	sec-butylbenzene	690.93	4	721.46	723.95
112	tert-butylbenzene	723.15	4	772.73	777.77
113	1,2-Dimethylbenzene	737.04	4	754.63	761.36
114	1,4-Dimethylbenzene	802.04	4	754.63	761.36
115	1,2,3-Trimethylbenzene	743.15	4	747.83	748.34
116	1,2,4-Trimethylbenzene	788.15	4	747.83	748.34
117	1-Methyl-2-ethylbenzene	721	10	733.28	732.64
118	1-Methyl-3-ethylbenzene	753.15	4	733.28	732.64
119	1-Methyl-4-ethylbenzene	748.15	4	733.28	732.64
120	1,2-Diethylbenzene	677	10	711.93	702.89
121	1,3-Diethylbenzene	723.15	4	711.93	702.89
122	1-Methyl-3,5-diethylbenzene	734	10	705.12	689.07
123	2-Ethylbiphenyl	722	10	808.60	799.87
124	2-Propylbiphenyl	725	10	787.24	773.77
125	2-Butylbiphenyl	706	10	765.89	745.72
126	Diphenylmethane	759	10	815.40	811.02
127	1-Ethyl-naphthalene	754	10	772.50	769.76
128	Tetralin	657.04	4	618.28	611.97
129	Methanol	728	5	698.53	717.75
130	3-Pentanol	638	10	637.19	635.34
131	2-Methyl-1-butanol	658.15	4	637.19	635.34
132	2-Propanol	672.04	4	679.90	695.16
133	2-Methyl-1-propanol	678	10	658.54	665.04
134	3-Methyl-1-butanol	623.15	4	637.19	635.34
135	2-Pentanol	616.48	4	637.19	635.34
136	2-Methyl-2-butanol	708	10	688.46	691.92
137	2,2-Dimethyl-1-propanol	693	10	688.46	691.92
138	4-Methyl-2-pentanol	613	10	639.91	642.58
139	1-Heptanol	555	4	570.41	549.52
140	4-Heptanol	568	10	594.48	579.75
141	2-Octanol	538	10	573.13	555.15
142	2-Ethyl-1-hexanol	560.93	4	573.13	555.15
143	1-Nonanol	533	10	527.70	511.71
144	1-Decanol	523	10	506.35	499.12
145	Ethylene glycol	673.15	4	668.22	672.30

146	1,2-Propanediol	694.26	4	670.94	679.72
147	Glycerol	673	10	661.99	664.30
148	2-Ethyl-1,3-hexanediol	633	10	588.25	572.95
149	2,2-Dimethyl-1,3-propanediol	672	4	679.50	676.48
150	3,5-Dimethylphenol	828	10	813.55	867.67
151	2,4-Dimethylphenol	872	4	813.55	867.67
152	2,4-Dimethyl-3-pentanol	668	10	642.64	649.88
153	Methoxybenzene	748	5	706.72	703.18
154	Dipentyl ether	444	5	460.59	489.67
155	Butyl vinyl ether	528	10	532.52	519.46
156	Ethylene oxide	702.04	4	654.89	661.48
157	1,2-Epoxyethylbenzene	811	10	728.16	733.63
158	Isobutyraldehyde	534	10	569.32	566.52
159	2-Propenal	573	10	553.12	547.25
160	Crotonaldehyde	553	10	508.40	515.34
161	2-Ethylcrotonaldehyde	523	10	473.03	498.22
162	3-Pentanone	725.37	4	653.74	651.57
163	Propionic acid	713	10	694.93	701.37
164	Isobutyric acid	733	10	697.65	708.76
165	Isopentanoic acid	689.15	4	676.30	678.66
166	Hexanoic acid	653.15	4	630.87	612.48
167	2-Methylpentanoic acid	651	10	654.95	648.68
168	Heptanoic acid	571	4	609.52	585.14
169	Decanoic acid	570	4	545.46	518.90
170	Dodecanoic acid	503	10	502.76	494.32
171	Tetradecanoic acid	508	10	460.05	491.37
172	Hexadecanoic acid	513	10	417.35	515.16
173	o-Phthalic acid	863	10	814.95	810.35
174	2,2-Dimethylpropionic acid	723	10	727.57	735.22
175	2-Ethylbutyric acid	663	10	654.95	648.68
176	2-Aminobiphenyl	725	10	834.82	827.27
177	1,2-Propanediamine	689	10	655.89	661.17
178	DL-1-Amino-2-propanol	647.04	4	663.42	670.43
179	Diisopropanolamine	647	10	630.20	625.75
180	Triisopropanolamine	593	10	579.52	567.12
181	2-Diethylaminoethanol	593	10	589.27	574.26
182	Benzyl chloride	858.15	4	818.94	815.54

183	1,1,1-Trichloroethane	810.15	4	799.00	801.62
184	Trichloroethylene	693	10	774.15	772.52
185	Bis(2-ethoxyethyl)ether	478	10	393.86	521.09
186	n-Hexyl Cellosolve	553	10	494.34	495.07
187	Methyl formate	729.26	4	744.09	762.48
188	Propyl formate	708	10	701.38	704.10
189	n-Butyl formate	595.37	4	680.03	673.98
190	Isopropyl formate	713	10	725.46	741.00
191	Methyl acetate	748	10	721.41	739.65
192	Isopropyl acetate	698	10	702.78	717.44
193	Pentyl acetate	633.15	4	636.00	620.75
194	Isopentyl acetate	653	10	660.07	657.35
195	Hexyl acetate	528	10	614.64	592.88
196	tert-Butyl acetate	708	10	732.69	743.67
197	sec-Butyl acetate	683	10	681.42	687.42
198	n-Decyl acetate	488	10	529.23	508.03
199	Vinyl acetate	698	10	686.57	692.73
200	Allyl acetate	647.04	4	665.22	662.62
201	Phenyl acetate	858	10	796.72	805.78
202	n-Propyl propionate	703	10	657.35	650.00
203	Isopropyl propionate	698	10	681.42	687.42
204	Butyl propionate	658	10	636.00	620.75
205	Isobutyl propionate	708	10	660.07	657.35
206	Ethyl butyrate	713	10	657.35	650.00
207	Propyl butyrate	693	10	636.00	620.75
208	1-Hexyne	536	5	517.17	515.16
209	3-Hexyn-2,5-diol	553	5	562.42	560.40
210	Ethyne	578.15	4	587.57	584.98
211	1,2,4-triethenyl-Cyclohexane	543	5	472.98	493.21
212	4-Fluorobenzyl chloride	863	5	863.00	861.47
213	1,1-Difluoro-1-chloroethane	905	4	905.00	880.03
214	Fluoroethene	658.15	4	631.81	632.80
215	Amyl nitrite	478	5	576.41	560.35
216	Tetrahydropyrrole	618	5	655.65	657.45
217	1-Octanamine	538	5	541.53	523.05
218	N-Ethyl-N,N-diisopropylamine	513	5	603.66	600.89
219	2-Amino-2-ethylhexane	538	5	565.61	548.13

220	N-Butyl-1-butanamine	533	5	557.25	537.62
221	N,N-Dimethylacetamide	627.15	4	672.59	682.56
222	2-Butoxime	588	5	588.00	588.66
223	2-Hydroxy-1-ethylaziridine	607	5	586.90	575.59
224	1-Benzazine	753.15	4	811.82	814.86
225	Nitrocarbol	652.15	4	661.82	671.68
226	Aminomethane	703.15	4	691.00	708.54
227	Ethylamine	657	4	669.65	678.44
228	N,N-Dimethylamine	673.15	4	685.37	701.25
229	Piperazidine	728.15	4	678.38	683.26
230	Azabenzene	823	5	867.59	855.42
231	Tetrafluorethene	473.15	4	500.61	520.06
232	Imidole	823	5	836.50	838.93
233	Triacetaldehyde	510.93	4	569.49	573.94
234	3-Picoline	810	4	775.89	786.84
235	Butane nitrile	761	5	748.13	750.73
236	Cyanoacetic ester	733	5	783.41	784.63
237	2-Picoline	810.93	4	775.89	786.84
238	1,1-dimethylcyclohexane	577	4	547.57	544.64
239	2,3,3-Trimethyl-1-Pentene	504	5	627.20	620.88
240	isoprene	493.15	4	602.44	600.74
241	α -methylstyrene	847.59	4	712.59	719.51
242	Butyl butyrate	623	10	614.64	592.88
243	Propylamine	591	4	648.30	648.47
244	α -pinene	528.15	4	562.92	560.17
245	trans-2-butene	597.04	4	606.58	607.41
246	1-dodecanol	548.15	4	463.65	489.73
247	1,3-butanediol	667.04	4	649.59	649.73
248	isobutyl acrylate	613.15	4	642.54	638.83
249	dimethyl terephthalate	843.15	4	825.19	823.65
250	1,7-octadiene	493	5	531.05	517.32
251	1,3-Diisopropylbenzene	722	5	717.37	717.63
252	Benzoyl chloride	873	5	832.29	829.41
253	1,4-Dioxane	453.15	4	578.29	577.08
254	2-Ethylhexanal	463.15	4	483.91	496.49
255	Methylhexanone	728	5	635.11	629.39
256	2-(2-Methoxyethoxy)ethanol	488	5	503.68	500.18

257	2-Methoxyethyl ether	463	5	436.57	493.03
258	1,2-Dimethoxyethane,	473	5	533.99	521.67
259	Ethyl vinyl ether	451	5	575.22	560.78
260	2-(2-Ethoxyethoxy) ethanol	477.15	4	482.33	492.09
261	Pentanal	495.15	4	523.90	519.29
262	2,2'-Dihydroxyethyl ether	502.04	4	570.80	550.39
263	1,1-Diethoxyethane	503.15	4	515.36	509.67
264	2-Methyl-2-propenal	507.15	4	539.10	540.20
265	2-Ethoxyethanol	508.15	4	579.75	562.35
266	1-Nonene	510	4	523.18	510.75
267	Methylal	510.35	4	555.34	541.08
268	2-Butoxyethanol	511.15	4	537.05	520.58
269	Butylcyclopentane	523.15	4	542.16	530.64
270	trans-Decahydronaphthalene	528	5	526.31	522.96
271	beta-Pinene	528	4	522.65	525.46
272	1-Hendecanol	550	4	485.00	491.58
273	1-Nonanol	550	4	527.70	511.71
274	Methyl acetylacetate	623	5	710.37	718.56
275	Propanoic acid anhydride	558	4	609.33	589.86
276	2-Methoxyethanol	558.15	4	601.10	587.73
277	2-Pentene	561	4	585.22	580.42
278	cis-2-Methylcyclohexanol	569.15	4	591.93	587.77
279	cis-4-Methylcyclohexanol	570.15	4	591.93	587.77
280	cis-1,4-Dimethylcyclohexane	577	4	579.53	575.08
281	cis-1,2-Dimethylcyclohexane	577.15	4	579.53	575.08
282	2-Methylnitrobenzene	693	5	730.33	731.32
283	2,4-Dihydroxy-2-methylpentane	698	5	682.23	683.91
284	cis-1,3-Dimethylcyclohexane	579	4	579.53	575.08
285	1-Butanamine	585	4	626.94	619.27
286	2-Furancarboxaldehyde	588.71	4	596.58	589.39
287	Hexahydro-1H-azepine	603.15	4	606.36	599.98
288	Acetylene tetrabromide	608.15	4	632.51	637.16
289	2,4-Pentanedione	613.15	4	638.67	639.32
290	Propyl acrylate	615	4	643.87	632.98
291	1-Methyl-2-pyrrolidinone	619.15	4	639.25	646.13
292	1-Methoxy-2-propyl acetate	627.15	4	626.71	614.97
293	1,4-Butanediol	630	4	625.51	613.48

294	2-(2-Ethoxyethoxy)ethyl acetate	583	5	505.21	497.60
295	Nitroethane	633.15	4	640.47	641.83
296	2-Methyl-1-butene	638	4	615.92	616.92
297	2-Aminoethylethanolamine	641	4	617.23	603.06
298	Allylamine	647.04	4	634.81	631.47
299	1,3-Propylene glycol	651	4	646.87	642.43
300	2-Ethoxyethyl acetate	652.59	4	602.63	580.99
301	Ethylenediamine	658.15	4	653.17	653.80
302	1-Methyl-3-nitrobenzene	713	5	730.33	731.32
303	Acetic acid anhydride	603	5	652.04	646.66
304	2-Furanmethanol	664.15	4	685.80	691.87
305	2-Heptanone	666.15	4	611.03	594.31
306	Crotonic acid	669.26	4	636.73	634.34
307	Ethyl 2-hydroxypropanoate	673.15	4	693.82	702.11
308	1,3,5-Trioxacyclohexane	683	5	575.63	577.05
309	Hexanedioic acid	678	5	661.03	639.64
310	Ethylene chlorohydrin	698.15	4	734.68	736.73
311	Cyclobutane	700	4	632.91	632.07
312	Tartaric acid	700.93	4	733.98	743.06
313	3-isopropyltoluene	709	4	736.00	739.83
314	3-Methyl-2-butanol	710	4	661.27	672.44
315	1,2-Epoxybutane	643	5	631.49	630.69
316	N,N-Dimethylformamide	683	5	564.10	561.31
317	N-Phenylacetoacetamide	725.15	4	759.96	760.32
318	Methyl formate	729.26	4	744.09	762.48
319	1,1-Dichloroethane	731.15	4	761.14	770.60
320	trans-1,2-dichloroethylene	733	4	727.64	725.05
321	1,1,2-Trichloroethane	733.15	4	818.65	812.62
322	Acetonitrile	797	5	790.83	804.18
323	Vinyl chloride	745	4	711.83	715.42
324	Ethylphenylamine	752.15	4	739.33	744.14
325	Acrylonitrile	754.26	4	756.00	762.67
326	3-Aminotoluene	755.15	4	759.51	766.35
327	4-Aminotoluene	755.15	4	759.51	766.35
328	Nitrobenzol	753	5	737.14	744.69
329	1-Bromopropane	763.15	4	657.66	657.49
330	3-Hydroxypropionitrile	767.59	4	760.53	764.49

331	1,4-Benzenedicarboxylic acid	769	4	814.95	810.35
332	Ethyl bromide	784.26	4	679.01	687.56
333	o-Nitroaniline	794.15	4	735.20	736.57
334	N-Phenylacetamide	803.15	4	771.00	779.95
335	4-Picoline	810	4	775.89	786.84
336	Hexanedinitrile	823.15	4	810.13	794.59
337	Dichlorofluoromethane	825.15	4	741.66	748.85
338	1,2-Dichloropropane	830	4	758.11	761.07
339	Benzoic acid	805	5	791.60	798.61
340	1,3,5-Trichlorobenzene,	850	4	897.25	845.55
341	p-Nitroaniline	773	5	735.20	736.57
342	Phthalic anhydride	857.04	4	866.08	862.51
343	Hexachlorobutadiene	883.15	4	834.14	816.57
344	Methyl chloride	905	4	890.00	859.46
345	1,4-Dichlorobenzene	920	4	854.25	880.02
346	1,2-Dichlorobenzene	913	5	854.25	880.02
347	2-Methylnaphthalene	802	4	793.86	796.18
348	cis-1,2-Dichloroethylene	733	4	727.64	725.05
349	Ethylene	723.15	4	696.01	705.72
350	Ethyl chloride	792	4	743.63	751.52
351	Ethane	745	4	686.13	703.16
352	Acetone	738	5	696.44	711.67
353	propane	723	4	664.77	673.03
354	Chloroprene	593.15	4	662.97	658.21
355	cis-2-butene	598.15	4	606.58	607.41
356	Diethylamine	585.15	4	642.66	641.28
357	cyclopentadiene	913.15	4	789.12	797.29
358	2-methyl-2-butene	563	4	592.56	598.40
359	p-hydroquinone	788.7	4	886.08	826.80
360	2-methyl-1,3-butadiene	493	4	557.72	558.01
361	2-Hexanone	697.04	4	632.38	622.27
362	m-cresol	832.04	4	820.36	872.41
363	o-cresol	872.04	4	820.36	872.41
364	2,4-dimethylpentane	610	4	627.51	628.30
365	Isopropyl butyrate	708	4	660.07	657.35
366	3-methylhexane	553.15	4	603.44	593.30
367	2,6-xylenol	872.04	4	813.55	867.67

368	vinylcyclohexene	543	4	547.51	543.44
369	3,4,4-trimethyl-2-pentene	598	4	603.84	602.22
370	isobutyl isobutyrate	705.15	4	662.79	664.73
371	benzyl acetate	734	4	775.37	780.24
372	glyceryl triacetate	706	4	730.63	731.12
373	dicyclopentadiene	783.15	4	748.43	744.65
374	diethyl phthalate	730.15	4	782.49	774.10
375	Phenyl benzoate	833	4	872.03	855.43
376	2-(2-Butoxyethoxy)ethanol	477.59	4	439.62	493.46
377	Diglycolic acid	503	4	649.02	626.52
378	1-Hendecene	510	4	480.47	491.28
379	cis-Decahydronaphthalene	523.15	4	526.31	522.96
380	Tetrahydro-2-furancarbinol	555.37	4	594.60	588.67
381	trans-2-Methylcyclohexanol	569.15	4	591.93	587.77
382	Morpholine	583.15	4	628.34	628.07
383	3,3-Dimethylpentane	610	4	654.71	647.27
384	4-Methyl-3-penten-2-one	617.59	4	602.87	606.24
385	Vinyl ether	633.15	4	561.74	547.47
386	Ethanamine	657	4	669.65	678.44
387	4-Hydroxynitrobenzene	729	5	730.33	731.32
388	Isocrotonic acid	669	4	636.73	634.34
389	Isopropylamine	675.15	4	672.37	685.86
390	2-Methoxy-2-methylpropane	708	5	642.69	634.03
391	2-Propenoic acid	688	5	686.57	692.73
392	2-Aminotoluene	755.15	4	759.51	766.35
393	Ethylene diacetate	755.15	4	713.98	716.99
394	Allyl chloride	663	5	708.80	705.13
395	1,3-Benzenedicarboxylic acid	769	4	814.95	810.35
396	Methyl bromide	810.37	4	825.37	818.85
397	1,2-Dimethyl phthalate	829	4	825.19	823.65
398	1,2,4-Trichlorobenzol	844.26	4	897.25	845.55
399	m-Nitroaniline	794	5	735.20	736.57
400	Dichloromethane	878	5	804.16	804.54

A-2 83 筆試驗資料

No	compound name	Exp. Value	Reference	MLR	Degree 3
1	1-Hexene	538	5	587.24	571.80
2	1-Hexadecene	513.15	4	373.71	554.21
3	2,3-Dimethyl-2-butene	673.7	4	578.54	589.59
4	Cyclohexane	533.15	4	583.62	577.15
5	Methylcyclohexane	558.15	4	581.57	576.11
6	Isopropylbenzene	697.04	4	742.81	753.03
7	1,3,5-Trimethylbenzene	823.15	4	747.83	748.34
8	1-Pentanol	573.15	4	613.12	599.87
9	1-Octanol	555	4	549.06	528.73
10	Phenol	878	10	827.16	876.07
11	Diisopropylamine	588.71	4	648.11	655.90
12	1,2-Dichloroethane	711	10	779.78	769.54
13	Isobutyl formate	593.15	4	704.10	711.48
14	2,3-Dimethylbutane	669	10	648.87	657.81
15	1,3-Cyclohexadiene	633	10	764.47	771.11
16	2-Methylbiphenyl	775	10	829.95	823.38
17	Dipropyl ether	488	5	546.00	529.93
18	Dihexyl ether	458.15	4	417.88	504.76
19	Octanoic acid	570	4	588.17	560.00
20	Hexylacetylene	498	5	474.46	492.79
21	Isopentyl nitrite	481	5	600.49	592.09
22	cyclopropane	770.93	4	657.55	661.53
23	1-propyne-3-ol	388.15	4	572.27	566.27
24	dibutyl sebacate	638.15	4	457.75	494.43
25	Ethoxy ethane	433.15	4	588.71	575.05
26	1-Dodecene	528.15	4	555.54	516.29
27	1-Chloropentane	533.15	4	679.57	662.31
28	Ethyl acetylacetate	568.15	4	689.01	688.55
29	trans-4-Methylcyclohexanol	570.15	4	591.93	587.77
30	Ethyleneimine	593.15	4	704.94	717.22
31	Triethylene glycol	644	4	473.37	490.09
32	2-Isopropyltoluene	650	4	736.00	739.83
33	2-Methyl-1-propanamine	651.15	4	651.02	655.80
34	1-Nitropropane	694.15	4	619.12	612.90
35	3,5,5-Trimethyl-2-cyclohexane-1-o	733.15	4	617.64	626.44

	ne				
36	Acetaldehyde	758.15	4	587.95	585.74
37	Phenylacetylene	763	4	656.54	647.94
38	1-Chloropropane	793.15	4	722.28	722.37
39	Vinylidene chloride	843	4	758.34	763.58
40	cis-1-Propenylbenzene	848	4	681.89	679.35
41	2,3-Dimethylphenol	872	4	813.55	867.67
42	3,4-Dimethylphenol	872.04	4	813.55	867.67
43	Formic acid	874.26	4	738.97	754.30
44	Aniline	813	5	766.32	778.86
45	propylene	728.15	4	651.29	655.71
46	Maleic anhydride	749.82	4	838.71	853.23
47	1,3-butadiene	702.04	4	616.46	609.80
48	1-butene	657.04	4	629.94	626.27
49	1,5-pentanediol	608.15	4	604.16	586.06
50	cis-2-hexene	526	4	563.87	555.74
51	ethylcyclobutane	483	4	609.51	602.46
52	p-cresol	832.04	4	820.36	872.41
53	2-methylhexane	566	5	603.44	593.30
54	n-butyl acrylate	565.93	4	622.51	604.45
55	styrene	763.15	4	726.61	729.15
56	Isopentyl propionate	698	4	638.72	627.85
57	p-cymene	709.26	4	736.00	739.83
58	2-ethylhexyl acrylate	530.93	4	561.18	536.87
59	1,1-diphenylethane	713.15	4	818.13	816.76
60	dibutyl phthalate	675.15	4	697.07	656.62
61	Ethyl methyl ether	463.15	4	610.06	601.61
62	Peroxyacetic acid	473.15	4	654.12	652.72
63	Cyclohexenylethylene	543	4	637.17	624.75
64	Butanoic acid anhydride	552.59	4	566.63	541.44
65	Cyclohexanamine	566.15	4	586.45	580.73
66	Tetraethylenepentamine	594	5	522.77	507.17
67	Nonanoic acid	589	4	566.82	537.71
68	Tetrahydrofuran	594.26	4	605.60	603.70
69	Diethylenetriamine	631	4	609.70	594.61
70	N,N-Dimethylbenzenamine	644.26	4	737.59	746.91
71	2-Butanamine	651	4	651.02	655.80

72	1,2,3,4-Tetramethylbenzene	700	4	741.02	735.04
73	2-Nitropropane	698	5	643.19	649.12
74	Diisopropyl ether	678	5	594.15	587.86
75	2-Hydroxybenzoic acid methyl ester	728	4	855.64	879.58
76	4-Methyl-2-pentanone	721	5	656.46	658.93
77	Propionitrile	785	4	769.48	778.49
78	2-Hydroxybenzoic acid	818.15	4	850.51	878.66
79	trans-1-Methylstyrene	848	4	681.89	679.35
80	2-Chloropropane	863	5	700.61	713.28
81	2,5-Dimethylphenol	872	4	813.55	867.67
82	4-Hydroxy-4-methyl-2-pentanone	876.48	4	698.77	700.47
83	1,3-Dichlorobenzene	920	4	854.25	880.02

A-3 400 筆建模資料

	Compound name	Exp. Value	Reference	[3,5,1]	[3,4,1]
1	Butane	645	10	647.2904	615.2049
2	Pentane	538	10	582.7871	565.3252
3	Hexane	513	10	532.5381	525.1977
4	Heptane	486	10	513.2805	493.432
5	2-Methylpropane	733.15	4	720.3379	699.8795
6	2-Methylbutane	693.15	4	661.2586	636.263
7	3-Methylpentane	551.15	4	595.427	577.8083
8	2,2-Dimethylpropane	723.15	4	702.2125	712.4606
9	2,2-Dimethylbutane	678	5	685.7048	679.4547
10	2,3-Dimethylpentane	610.37	4	609.5218	616.142
11	2,2,3-Trimethylbutane	685	10	688.7003	704.6613
12	1-Pentene	571	10	580.6872	604.6716
13	1-Heptene	536	10	488.5293	554.7435
14	1-Octene	523	5	464.7005	532.1291
15	1-Decene	508.15	4	494.008	499.6321
16	1,3-Pentadiene	613	10	597.3807	589.6963
17	2-Methyl-1-pentene	579	10	600.1904	548.1623
18	2,4,4-Trimethyl-1-pentene	693	4	593.7924	625.0966
19	Cyclopentane	593	10	593.5595	580.2678
20	Methylcyclopentane	602.04	4	578.5996	613.4804
21	Ethylcyclohexane	535.37	4	535.1973	531.8225
22	n-Propylcyclohexane	521.15	4	533.2151	519.3669
23	trans-1,2-Dimethylcyclohexane	577.15	4	581.2662	576.32
24	Dicyclohexyl	518.15	4	525.4675	533.4904
25	Decalin	541	10	534.165	532.8783
26	Hydrindane	569	10	556.8244	561.7087
27	Cyclopentene	668.15	4	647.4879	683.6096
28	Cyclohexene	583.15	4	603.7738	595.6045
29	Benzene	771	5	763.6495	785.8759
30	Toluene	755	10	741.9845	810.2337
31	Ethylbenzene	705.37	4	724.4992	748.6872
32	n-Propylbenzene	729.15	4	698.8559	691.7408
33	n-Butylbenzene	685.37	4	668.0404	638.0672
34	1,3-Dimethylbenzene	800.93	4	766.0296	783.8074
35	1,4-Diethylbenzene	703.15	4	710.7024	698.3292

36	Biphenyl	813.15	4	775.1933	806.6774
37	Naphthalene	813	10	809.316	814.4587
38	1-Methylnaphthalene	802.04	4	791.704	804.6111
39	Anthracene	828	10	825.3776	823.0116
40	Ethanol	673	10	699.551	678.5343
41	1-Propanol	644.26	4	649.8652	647.4243
42	1-Butanol	616	4	603.3918	623.1132
43	2-Butanol	663	5	665.3694	662.1728
44	tert-Butanol	733	10	729.8508	710.4746
45	Cyclohexanol	573.15	4	596.8688	557.9801
46	Benzyl alcohol	709.26	4	735.7782	739.8715
47	1-Hexanol	558	4	558.8535	589.0948
48	Allyl alcohol	643	10	636.7838	653.9508
49	Dimethyl ether	623.15	4	585.4957	654.5319
50	Dibutyl ether	467.59	4	441.3477	453.0515
51	Methyl vinyl ether	560.15	4	589.4917	550.9329
52	Diphenyl ether	891.15	4	852.2613	855.6334
53	Propylene oxide	738.15	4	733.714	725.9347
54	Propionaldehyde	500	10	532.5522	527.3032
55	Butyraldehyde	503.15	4	520.9	514.7709
56	Acetophenone	833	10	870.3507	818.7249
57	2-Butanone	677	10	734.5535	727.9273
58	2-Pentanone	725.15	4	719.4397	709.4771
59	Cyclohexanone	693.15	4	694.3383	694.361
60	Acetic acid	737	10	743.5845	743.1801
61	Butyric acid	718	10	699.7319	681.2598
62	Pentanoic acid	673.15	4	666.8977	659.3821
63	Acrylic acid	711.15	4	694.9759	689.1439
64	Dipropylamine	572.15	4	544.5574	543.1734
65	Diphenylamine	907.04	4	886.6204	908.2339
66	2-Aminoethanol	673	10	654.482	662.5568
67	1-Chlorobutane	523	10	578.8842	555.6822
68	Acetyl chloride	663.15	4	706.963	747.9637
69	Chlorobenzene	863	5	854.7149	884.2295
70	1-Bromobutane	538	5	606.1704	587.9938
71	Bromobenzene	838.15	4	838.1825	837.6918
72	Ethyl formate	708	10	705.9578	719.3488

73	Ethyl acetate	700	4	719.028	715.5156
74	Propyl acetate	708	10	701.1216	690.8399
75	Butyl acetate	653	10	674.2995	669.6206
76	Isobutyl acetate	696	4	709.3564	698.213
77	Methyl propionate	728	10	719.028	715.5156
78	Ethyl propionate	718	10	701.1216	690.8399
79	Methyl butyrate	728	10	701.1216	690.8399
80	Methyl benzoate	783	5	789.285	812.3974
81	Ethyl benzoate	763.15	4	776.6514	774.2879
82	Butyl benzoate	708	10	741.8883	707.1327
83	Ethyl acrylate	655.93	4	666.0135	664.3287
84	2-Methylpentane	579.26	4	595.427	577.8083
85	2,2,4-Trimethylbutane	680	10	662.7423	648.9452
86	trans-2-Hexene	528	10	558.8451	538.1795
87	trans-2-Pentene	558	4	581.3875	564.8435
88	1,3-Hexadiene	593	10	579.2784	563.3048
89	1,5-Hexadiene	618	10	566.0483	573.5499
90	2-Methylpropene	738.15	4	693.4601	707.9672
91	3-Methyl-1-butene	638.15	4	631.9542	629.6274
92	4-Methyl-1-pentene	577	10	582.8805	593.1273
93	2-Ethyl-1-butene	597	10	600.1904	548.1623
94	2,3-Dimethyl-1-butene	633.15	4	655.4934	645.9783
95	2,3,3-Trimethyl-1-butene	656	10	675.3105	669.568
96	2,4,4-Trimethyl-2-pentene	581	4	589.5157	580.0981
97	Ethylcyclopentane	533.5	4	540.0875	573.9956
98	Propylcyclopentane	542.15	4	528.1161	544.6245
99	n-Hexylcyclopentane	501	10	535.4899	509.3592
100	Isopropylcyclohexane	556	5	543.7698	559.7248
101	Butylcyclohexane	519.15	4	533.7706	513.1991
102	Isobutylcyclohexane	547	10	536.4106	528.3619
103	sec-Butylcyclohexane	550	10	536.4106	528.3619
104	tert-Butylcyclohexane	615	10	564.1342	615.5242
105	trans-1,3-Dimethylcyclohexane	579	4	581.2662	576.32
106	trans-1,4-Dimethylcyclohexane	577	4	581.2662	576.32
107	1,3,5-Trimethylcyclohexane	587	10	578.7278	599.4227
108	4-Isopropyl-1-methylcyclohexane	579	10	566.2103	567.9271
109	Cyclodecane	508	10	516.039	526.5062

110	Isobutylbenzene	700.93	4	704.8432	705.7057
111	sec-butylbenzene	690.93	4	704.8432	705.7057
112	tert-butylbenzene	723.15	4	791.5858	751.972
113	1,2-Dimethylbenzene	737.04	4	766.0296	783.8074
114	1,4-Dimethylbenzene	802.04	4	766.0296	783.8074
115	1,2,3-Trimethylbenzene	743.15	4	766.4783	792.6863
116	1,2,4-Trimethylbenzene	788.15	4	766.4783	792.6863
117	1-Methyl-2-ethylbenzene	721	10	744.8642	737.9646
118	1-Methyl-3-ethylbenzene	753.15	4	744.8642	737.9646
119	1-Methyl-4-ethylbenzene	748.15	4	744.8642	737.9646
120	1,2-Diethylbenzene	677	10	710.7024	698.3292
121	1,3-Diethylbenzene	723.15	4	710.7024	698.3292
122	1-Methyl-3,5-diethylbenzene	734	10	712.5422	746.7241
123	2-Ethylbiphenyl	722	10	749.7055	736.6347
124	2-Propylbiphenyl	725	10	736.7393	709.8761
125	2-Butylbiphenyl	706	10	717.3551	688.2845
126	Diphenylmethane	759	10	780.4933	760.247
127	1-Ethyl-naphthalene	754	10	779.7888	754.7541
128	Tetralin	657.04	4	655.3431	647.6929
129	Methanol	728	5	738.9563	716.8705
130	3-Pentanol	638	10	619.3366	629.076
131	2-Methyl-1-butanol	658.15	4	619.3366	629.076
132	2-Propanol	672.04	4	713.3501	699.3247
133	2-Methyl-1-propanol	678	10	665.3694	662.1728
134	3-Methyl-1-butanol	623.15	4	619.3366	629.076
135	2-Pentanol	616.48	4	619.3366	629.076
136	2-Methyl-2-butanol	708	10	710.3446	689.425
137	2,2-Dimethyl-1-propanol	693	10	710.3446	689.425
138	4-Methyl-2-pentanol	613	10	636.6755	656.8791
139	1-Heptanol	555	4	551.8764	574.725
140	4-Heptanol	568	10	566.6564	576.9826
141	2-Octanol	538	10	553.7166	558.7688
142	2-Ethyl-1-hexanol	560.93	4	553.7166	558.7688
143	1-Nonanol	533	10	545.337	542.6309
144	1-Decanol	523	10	541.9984	526.3566
145	Ethylene glycol	673.15	4	673.9455	660.9788
146	1,2-Propanediol	694.26	4	690.4884	675.3246

147	Glycerol	673	10	678.7772	666.7814
148	2-Ethyl-1,3-hexanediol	633	10	565.5664	626.3539
149	2,2-Dimethyl-1,3-propanediol	672	4	690.0092	678.8043
150	3,5-Dimethylphenol	828	10	861.7451	845.3197
151	2,4-Dimethylphenol	872	4	861.7451	845.3197
152	2,4-Dimethyl-3-pentanol	668	10	655.001	681.4897
153	Methoxybenzene	748	5	725.0215	754.0711
154	Dipentyl ether	444	5	477.0472	455.4489
155	Butyl vinyl ether	528	10	510.7005	510.1499
156	Ethylene oxide	702.04	4	714.7285	698.627
157	1,2-Epoxyethylbenzene	811	10	787.4332	823.1568
158	Isobutyraldehyde	534	10	525.0406	527.6096
159	2-Propenal	573	10	563.6315	532.333
160	Crotonaldehyde	553	10	559.3949	519.8182
161	2-Ethylcrotonaldehyde	523	10	521.0361	522.0397
162	3-Pentanone	725.37	4	719.4397	709.4771
163	Propionic acid	713	10	724.183	708.6101
164	Isobutyric acid	733	10	739.2189	724.8429
165	Isopentanoic acid	689.15	4	716.968	690.1816
166	Hexanoic acid	653.15	4	627.1129	640.4099
167	2-Methylpentanoic acid	651	10	683.1117	661.0166
168	Heptanoic acid	571	4	589.745	621.5759
169	Decanoic acid	570	4	528.9972	557.8941
170	Dodecanoic acid	503	10	515.2703	527.434
171	Tetradecanoic acid	508	10	511.3582	516.3841
172	Hexadecanoic acid	513	10	514.8049	516.3052
173	o-Phthalic acid	863	10	797.434	807.5296
174	2,2-Dimethylpropionic acid	723	10	751.0959	715.268
175	2-Ethylbutyric acid	663	10	683.1117	661.0166
176	2-Aminobiphenyl	725	10	779.7863	769.5602
177	1,2-Propanediamine	689	10	669.2306	682.6501
178	DL-1-Amino-2-propanol	647.04	4	664.6937	662.2168
179	Diisopropanolamine	647	10	669.3703	652.4306
180	Triisopropanolamine	593	10	583.706	583.8856
181	2-Diethylaminoethanol	593	10	597.5789	525.9681
182	Benzyl chloride	858.15	4	868.6001	869.5727
183	1,1,1-Trichloroethane	810.15	4	810.7371	774.0518

184	Trichloroethylene	693	10	707.4044	687.0529
185	Bis(2-ethoxyethyl)ether	478	10	454.519	460.2826
186	n-Hexyl Cellosolve	553	10	537.8223	506.0364
187	Methyl formate	729.26	4	712.1527	744.262
188	Propyl formate	708	10	696.4256	699.9383
189	n-Butyl formate	595.37	4	681.4176	684.6019
190	Isopropyl formate	713	10	712.1389	738.8469
191	Methyl acetate	748	10	730.5165	746.2049
192	Isopropyl acetate	698	10	726.8444	729.3006
193	Pentyl acetate	633.15	4	636.7985	648.9471
194	Isopentyl acetate	653	10	682.1307	673.0299
195	Hexyl acetate	528	10	589.4058	626.6519
196	tert-Butyl acetate	708	10	735.7437	712.7637
197	sec-Butyl acetate	683	10	709.3564	698.213
198	n-Decyl acetate	488	10	468.8224	541.2121
199	Vinyl acetate	698	10	682.7905	688.4725
200	Allyl acetate	647.04	4	666.0135	664.3287
201	Phenyl acetate	858	10	789.285	812.3974
202	n-Propyl propionate	703	10	674.2995	669.6206
203	Isopropyl propionate	698	10	709.3564	698.213
204	Butyl propionate	658	10	636.7985	648.9471
205	Isobutyl propionate	708	10	682.1307	673.0299
206	Ethyl butyrate	713	10	674.2995	669.6206
207	Propyl butyrate	693	10	636.7985	648.9471
208	1-Hexyne	536	5	538.6825	537.7845
209	3-Hexyn-2,5-diol	553	5	555.5655	553.5577
210	Ethyne	578.15	4	580.1839	577.7152
211	1,2,4-triethenyl-Cyclohexane	543	5	544.9605	531.5593
212	4-Fluorobenzyl chloride	863	5	861.7527	862.5868
213	1,1-Difluoro-1-chloroethane	905	4	903.7746	904.7119
214	Fluoroethene	658.15	4	663.8908	650.3691
215	Amyl nitrite	478	5	513.2697	468.8797
216	Tetrahydropyrrole	618	5	626.3041	661.164
217	1-Octanamine	538	5	570.5276	516.7835
218	N-Ethyl-N,N-diisopropylamine	513	5	536.3473	519.8478
219	2-Amino-2-ethylhexane	538	5	560.4124	575.254
220	N-Butyl-1-butanamine	533	5	533.1902	527.1868

221	N,N-Dimethylacetamide	627.15	4	624.8003	624.6615
222	2-Butoxime	588	5	589.8149	587.5909
223	2-Hydroxy-1-ethylaziridine	607	5	605.5036	605.9662
224	1-Benzazine	753.15	4	754.6525	758.4439
225	Nitrocarbol	652.15	4	651.5615	683.5338
226	Aminomethane	703.15	4	707.2918	691.3086
227	Ethylamine	657	4	667.3845	661.0639
228	N,N-Dimethylamine	673.15	4	652.8938	685.5407
229	Piperazidine	728.15	4	729.6571	710.9304
230	Azabenzene	823	5	821.4686	823.842
231	Tetrafluorethene	473.15	4	474.3464	473.6662
232	Imidole	823	5	822.7676	816.8978
233	Triacetaldehyde	510.93	4	502.1821	511.4547
234	3-Picoline	810	4	810.7969	808.0358
235	Butane nitrile	761	5	784.1354	766.4639
236	Cyanoacetic ester	733	5	750.9322	749.31
237	2-Picoline	810.93	4	810.7969	808.0358
238	1,1-dimethylcyclohexane	577	4	578.9454	575.7382
239	2,3,3-Trimethyl-1-Pentene	504	5	593.7924	625.0966
240	isoprene	493.15	4	504.8709	567.7407
241	α -methylstyrene	847.59	4	815.2214	846.5996
242	Butyl butyrate	623	10	589.4058	626.6519
243	Propylamine	591	4	621.5198	634.0555
244	α -pinene	528.15	4	517.3221	528.6073
245	trans-2-butene	597.04	4	599.4721	596.8915
246	1-dodecanol	548.15	4	532.2066	504.0132
247	1,3-butanediol	667.04	4	658.0674	655.5344
248	isobutyl acrylate	613.15	4	671.081	632.7262
249	dimethyl terephthalate	843.15	4	813.412	812.0317
250	1,7-octadiene	493	5	503.6027	533.8887
251	1,3-Diisopropylbenzene	722	5	735.6228	693.9617
252	Benzoyl chloride	873	5	806.8182	815.5684
253	1,4-Dioxane	453.15	4	563.5536	459.8188
254	2-Ethylhexanal	463.15	4	469.4714	460.5778
255	Methylhexanone	728	5	703.5354	703.9001
256	2-(2-Methoxyethoxy)ethanol	488	5	495.7875	523.1107
257	2-Methoxyethyl ether	463	5	507.6564	509.1626

258	1,2-Dimethoxyethane,	473	5	523.9385	518.6094
259	Ethyl vinyl ether	451	5	565.3215	528.902
260	2-(2-Ethoxyethoxy) ethanol	477.15	4	479.6069	520.7973
261	Pentanal	495.15	4	508.0214	507.3603
262	2,2'-Dihydroxyethyl ether	502.04	4	526.8667	532.6418
263	1,1-Diethoxyethane	503.15	4	479.409	469.3031
264	2-Methyl-2-propenal	507.15	4	491.9861	555.0239
265	2-Ethoxyethanol	508.15	4	503.3588	529.9761
266	1-Nonene	510	4	466.7255	513.1388
267	Methylal	510.35	4	548.9621	531.333
268	2-Butoxyethanol	511.15	4	490.0634	508.8127
269	Butylcyclopentane	523.15	4	529.3593	525.3611
270	trans-Decahydronaphthalene	528	5	534.165	532.8783
271	beta-Pinene	528	4	511.4805	530.9234
272	1-Hendecanol	550	4	537.5558	512.9418
273	1-Nonanol	550	4	545.337	542.6309
274	Methyl acetylacetate	623	5	632.6864	696.1728
275	Propanoic acid anhydride	558	4	590.5796	552.7323
276	2-Methoxyethanol	558.15	4	532.3252	554.1249
277	2-Pentene	561	4	581.3875	564.8435
278	cis-2-Methylcyclohexanol	569.15	4	596.5673	585.1373
279	cis-4-Methylcyclohexanol	570.15	4	596.5673	585.1373
280	cis-1,4-Dimethylcyclohexane	577	4	581.2662	576.32
281	cis-1,2-Dimethylcyclohexane	577.15	4	581.2662	576.32
282	2-Methylnitrobenzene	693	5	710.4683	715.8392
283	2,4-Dihydroxy-2-methylpentane	698	5	695.5219	707.403
284	cis-1,3-Dimethylcyclohexane	579	4	581.2662	576.32
285	1-Butanamine	585	4	584.6236	609.3485
286	2-Furancarboxaldehyde	588.71	4	582.7274	575.4708
287	Hexahydro-1H-azepine	603.15	4	593.8813	625.1676
288	Acetylene tetrabromide	608.15	4	609.409	612.2694
289	2,4-Pentanedione	613.15	4	590.5381	612.8121
290	Propyl acrylate	615	4	647.4787	637.9463
291	1-Methyl-2-pyrrolidinone	619.15	4	623.4186	619.5912
292	1-Methoxy-2-propyl acetate	627.15	4	597.6573	616.8299
293	1,4-Butanediol	630	4	608.9934	639.2089
294	2-(2-Ethoxyethoxy)ethyl acetate	583	5	562.4381	534.5862

295	Nitroethane	633.15	4	621.9111	627.4746
296	2-Methyl-1-butene	638	4	642.3613	618.0118
297	2-Aminoethylethanolamine	641	4	662.8645	621.5029
298	Allylamine	647.04	4	641.9334	632.3354
299	1,3-Propylene glycol	651	4	642.4492	648.6988
300	2-Ethoxyethyl acetate	652.59	4	591.6501	542.125
301	Ethylenediamine	658.15	4	669.7628	670.5569
302	1-Methyl-3-nitrobenzene	713	5	710.4683	715.8392
303	Acetic acid anhydride	603	5	590.6041	588.6727
304	2-Furanmethanol	664.15	4	669.2751	674.1937
305	2-Heptanone	666.15	4	658.7492	680.6022
306	Crotonic acid	669.26	4	652.6755	663.1502
307	Ethyl 2-hydroxypropanoate	673.15	4	731.4292	686.9043
308	1,3,5-Trioxacyclohexane	683	5	577.567	679.7648
309	Hexanedioic acid	678	5	646.9148	652.7878
310	Ethylene chlorohydrin	698.15	4	715.2167	667.0393
311	Cyclobutane	700	4	665.1795	648.2874
312	Tartaric acid	700.93	4	715.5378	696.19
313	3-isopropyltoluene	709	4	755.9448	729.7191
314	3-Methyl-2-butanol	710	4	681.8975	689.3652
315	1,2-Epoxybutane	643	5	671.1857	638.1746
316	N,N-Dimethylformamide	683	5	671.2497	680.2039
317	N-Phenylacetamide	725.15	4	690.7867	692.1918
318	Methyl formate	729.26	4	712.1527	744.262
319	1,1-Dichloroethane	731.15	4	740.4975	790.369
320	trans-1,2-dichloroethylene	733	4	739.4158	723.0455
321	1,1,2-Trichloroethane	733.15	4	756.9967	769.64
322	Acetonitrile	797	5	809.4981	794.279
323	Vinyl chloride	745	4	703.6651	731.4669
324	Ethylphenylamine	752.15	4	775.8358	771.882
325	Acrylonitrile	754.26	4	734.1993	759.3217
326	3-Aminotoluene	755.15	4	740.0974	731.3801
327	4-Aminotoluene	755.15	4	740.0974	731.3801
328	Nitrobenzol	753	5	762.7886	717.0227
329	1-Bromopropane	763.15	4	699.9455	688.1861
330	3-Hydroxypropionitrile	767.59	4	766.9098	756.1633
331	1,4-Benzenedicarboxylic acid	769	4	797.434	807.5296

332	Ethyl bromide	784.26	4	780.7309	809.2663
333	o-Nitroaniline	794.15	4	777.0046	784.3925
334	N-Phenylacetamide	803.15	4	826.2322	761.4028
335	4-Picoline	810	4	810.7969	808.0358
336	Hexanedinitrile	823.15	4	807.1131	771.4545
337	Dichlorofluoromethane	825.15	4	820.4617	798.2743
338	1,2-Dichloropropane	830	4	812.3497	801.0469
339	Benzoic acid	805	5	770.8726	808.1809
340	1,3,5-Trichlorobenzene,	850	4	841.3821	863.7593
341	p-Nitroaniline	773	5	777.0046	784.3925
342	Phthalic anhydride	857.04	4	858.1193	856.0207
343	Hexachlorobutadiene	883.15	4	876.1584	880.6353
344	Methyl chloride	905	4	897.0057	904.4794
345	1,4-Dichlorobenzene	920	4	925.4811	885.3457
346	1,2-Dichlorobenzene	913	5	925.4811	885.3457
347	2-Methylnaphthalene	802	4	791.704	804.6111
348	cis-1,2-Dichloroethylene	733	4	739.4158	723.0455
349	Ethylene	723.15	4	693.8273	724.4363
350	Ethyl chloride	792	4	763.3455	762.9674
351	Ethane	745	4	749.3242	745.8136
352	Acetone	738	5	742.4587	751.5469
353	propane	723	4	706.0494	675.3862
354	Chloroprene	593.15	4	656.1116	590.1228
355	cis-2-butene	598.15	4	599.4721	596.8915
356	Diethylamine	585.15	4	577.1008	590.0956
357	cyclopentadiene	913.15	4	911.4021	916.2121
358	2-methyl-2-butene	563	4	557.6345	574.639
359	p-hydroquinone	788.7	4	817.5496	838.848
360	2-methyl-1,3-butadiene	493	4	489.7697	520.5152
361	2-Hexanone	697.04	4	694.9278	694.5248
362	m-cresol	832.04	4	816.8971	814.8476
363	o-cresol	872.04	4	816.8971	814.8476
364	2,4-dimethylpentane	610	4	609.5218	616.142
365	Isopropyl butyrate	708	4	682.1307	673.0299
366	3-methylhexane	553.15	4	542.8821	524.7765
367	2,6-xylenol	872.04	4	861.7451	845.3197
368	vinylcyclohexene	543	4	542.7168	551.7557

369	3,4,4-trimethyl-2-pentene	598	4	589.5157	580.0981
370	isobutyl isobutyrate	705.15	4	692.2413	691.2639
371	benzyl acetate	734	4	776.6514	774.2879
372	glyceryl triacetate	706	4	743.3427	668.6358
373	dicyclopentadiene	783.15	4	793.1963	766.9467
374	diethyl phthalate	730.15	4	774.5829	772.1551
375	Phenyl benzoate	833	4	826.8082	836.0097
376	2-(2-Butoxyethoxy)ethanol	477.59	4	468.7652	516.9238
377	Diglycolic acid	503	4	537.833	549.9936
378	1-Hendecene	510	4	536.3377	492.0939
379	cis-Decahydronaphthalene	523.15	4	534.165	532.8783
380	Tetrahydro-2-furancarbinol	555.37	4	547.3723	534.6886
381	trans-2-Methylcyclohexanol	569.15	4	596.5673	585.1373
382	Morpholine	583.15	4	575.7496	572.0818
383	3,3-Dimethylpentane	610	4	662.7423	648.9452
384	4-Methyl-3-penten-2-one	617.59	4	628.3589	641.8132
385	Vinyl ether	633.15	4	618.6488	530.9104
386	Ethanamine	657	4	667.3845	661.0639
387	4-Hydroxynitrobenzene	729	5	710.4683	715.8392
388	Isocrotonic acid	669	4	652.6755	663.1502
389	Isopropylamine	675.15	4	676.4439	660.7446
390	2-Methoxy-2-methylpropane	708	5	654.8761	645.234
391	2-Propenoic acid	688	5	682.7905	688.4725
392	2-Aminotoluene	755.15	4	740.0974	731.3801
393	Ethylene diacetate	755.15	4	702.2335	676.4656
394	Allyl chloride	663	5	622.1486	644.8252
395	1,3-Benzenedicarboxylic acid	769	4	797.434	807.5296
396	Methyl bromide	810.37	4	821.973	810.5862
397	1,2-Dimethyl phthalate	829	4	813.412	812.0317
398	1,2,4-Trichlorobenzol	844.26	4	841.3821	863.7593
399	m-Nitroaniline	794	5	777.0046	784.3925
400	Dichloromethane	878	5	870.953	901.4084

A-4 83 筆試驗資料

No	compound name	Exp. Value	Reference	[3,5,1]	[3,4,1]
1	1-Hexene	538	5	531.0526	579.0552
2	1-Hexadecene	513.15	4	622.3152	500.4252
3	2,3-Dimethyl-2-butene	673.7	4	587.0011	641.3134
4	Cyclohexane	533.15	4	526.4311	540.1654
5	Methylcyclohexane	558.15	4	548.1884	553.6683
6	Isopropylbenzene	697.04	4	728.3239	752.3021
7	1,3,5-Trimethylbenzene	823.15	4	766.4783	792.6863
8	1-Pentanol	573.15	4	573.4302	604.3741
9	1-Octanol	555	4	548.1337	559.3151
10	Phenol	878	10	763.1817	867.9921
11	Diisopropylamine	588.71	4	588.7178	698.36
12	1,2-Dichloroethane	711	10	470.9775	616.3986
13	Isobutyl formate	593.15	4	703.7152	713.6095
14	2,3-Dimethylbutane	669	10	676.1671	668.5539
15	1,3-Cyclohexadiene	633	10	880.5574	779.9828
16	2-Methylbiphenyl	775	10	757.9443	769.6868
17	Dipropyl ether	488	5	458.2081	466.4889
18	Dihexyl ether	458.15	4	539.5548	460.4112
19	Octanoic acid	570	4	561.2417	601.0757
20	Hexylacetylene	498	5	586.1638	522.6284
21	Isopentyl nitrite	481	5	538.7633	572.2295
22	cyclopropane	770.93	4	722.3415	700.561
23	1-propyne-3-ol	388.15	4	549.8068	581.2663
24	dibutyl sebacate	638.15	4	493.8233	532.1258
25	Ethoxy ethane	433.15	4	520.1342	524.1216
26	1-Dodecene	528.15	4	449.3771	644.3941
27	1-Chloropentane	533.15	4	512.5725	476.8276
28	Ethyl acetylacetate	568.15	4	634.5153	684.6344
29	trans-4-Methylcyclohexanol	570.15	4	596.5673	585.1373
30	Ethyleneimine	593.15	4	611.8588	719.4976
31	Triethylene glycol	644	4	529.2272	529.9185
32	2-Isopropyltoluene	650	4	755.9448	729.7191
33	2-Methyl-1-propanamine	651.15	4	631.6423	639.6751
34	1-Nitropropane	694.15	4	586.1237	573.5385
35	3,5,5-Trimethyl-2-cyclohexane-1-o	733.15	4	543.2108	575.3813

	ne				
36	Acetaldehyde	758.15	4	543.8999	548.2353
37	Phenylacetylene	763	4	646.7386	683.2022
38	1-Chloropropane	793.15	4	669.9634	650.5581
39	Vinylidene chloride	843	4	870.3823	750.4179
40	cis-1-Propenylbenzene	848	4	746.1117	645.7936
41	2,3-Dimethylphenol	872	4	861.7451	845.3197
42	3,4-Dimethylphenol	872.04	4	861.7451	845.3197
43	Formic acid	874.26	4	772.5395	747.2998
44	Aniline	813	5	759.2008	687.7689
45	propylene	728.15	4	664.0717	667.3542
46	Maleic anhydride	749.82	4	744.3618	1169.213
47	1,3-butadiene	702.04	4	621.4209	630.1439
48	1-butene	657.04	4	626.9214	633.1944
49	1,5-pentanediol	608.15	4	578.4487	630.2204
50	cis-2-hexene	526	4	558.8451	538.1795
51	ethylcyclobutane	483	4	573.1447	635.412
52	p-cresol	832.04	4	816.8971	814.8476
53	2-methylhexane	566	5	542.8821	524.7765
54	n-butyl acrylate	565.93	4	625.84	610.3733
55	styrene	763.15	4	739.7052	721.1716
56	Isopentyl propionate	698	4	643.1721	653.5102
57	p-cymene	709.26	4	755.9448	729.7191
58	2-ethylhexyl acrylate	530.93	4	524.4767	602.7582
59	1,1-diphenylethane	713.15	4	774.8545	744.7097
60	dibutyl phthalate	675.15	4	697.9963	703.5915
61	Ethyl methyl ether	463.15	4	554.6958	579.649
62	Peroxyacetic acid	473.15	4	586.8458	616.5461
63	Cyclohexenylethylene	543	4	685.5526	545.6589
64	Butanoic acid anhydride	552.59	4	588.1301	538.8404
65	Cyclohexanamine	566.15	4	578.5151	540.5825
66	Tetraethylenepentamine	594	5	811.3663	556.699
67	Nonanoic acid	589	4	541.7956	579.1231
68	Tetrahydrofuran	594.26	4	617.0477	539.4743
69	Diethylenetriamine	631	4	666.2376	602.6546
70	N,N-Dimethylbenzenamine	644.26	4	778.9093	1217.527
71	2-Butanamine	651	4	631.6423	639.6751

72	1,2,3,4-Tetramethylbenzene	700	4	700.2231	891.5366
73	2-Nitropropane	698	5	618.8438	655.4811
74	Diisopropyl ether	678	5	503.9872	492.1939
75	2-Hydroxybenzoic acid methyl ester	728	4	780.5533	844.0041
76	4-Methyl-2-pentanone	721	5	728.746	723.6308
77	Propionitrile	785	4	801.1104	779.9389
78	2-Hydroxybenzoic acid	818.15	4	764.3681	821.9353
79	trans-1-Methylstyrene	848	4	746.1117	645.7936
80	2-Chloropropane	863	5	736.4423	808.079
81	2,5-Dimethylphenol	872	4	861.7451	845.3197
82	4-Hydroxy-4-methyl-2-pentanone	876.48	4	642.5638	696.756
83	1,3-Dichlorobenzene	920	4	925.4811	885.3457