

عنوان فارسی مقاله :

مدلی برای پیش بینی دمای احراق خودکار با استفاده از رویکرد روابط
خصوصیات ساختار کمی

عنوان انگلیسی مقاله :

A model for predicting the auto-ignition temperature using quantitative structure
property relationship approach



توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل
با فرمت ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک نمایید.

4. Conclusions

In this work, a 4-descriptor QSPR model for predicting AIT of flammable materials are proposed. The proposed model gives the performance of $R = 0.900$ and average absolute error = 36.0K. As compared with other existing works, this model is built from the largest data set, with the least descriptors, and give performance with acceptable accuracy while comparing with the experimental accuracy. As the QSPR approach just requires the information of the molecular structure itself to predict the desired properties, this model provides a way to predict the AIT of a developing compounds within reasonable accuracy for assessing their flammability characteristics.



4- نتیجه گیری

در این کار یک مدل QSPR با چهار توصیفگر برای پیش بینی AIT از مواد قابل اشتعال ارائه شده است. مدل پیشنهادی در عملکرد مقدراری برای $R=0.9$ و خطای مطلق 36K را داشته که در مقایسه با سایر تحقیقات موجود این مدل از بزرگترین مجموعه داده ساخته شده است و با حداقل توصیف بوده و عملکرد قابل قبولی در مقایسه با دقت تجربی داشته است. به عنوان رویکرد QSPR فقط نیاز به اطلاعات از ساختار مولکولی برای پیش بینی خواص مورد نظر است و این مدل یک راه برای پیش بینی AIT از ترکیبات در حال توسعه است که دقتی برای ارزیابی ویژگی های اشتعال پذیری معقول را بوجود می آورد.

توجه !

این فایل تنها قسمتی از ترجمه میباشد. برای تهیه مقاله ترجمه شده کامل با فرمت

ورد (قابل ویرایش) همراه با نسخه انگلیسی مقاله، [اینجا](#) کلیک کنید.

همچنین برای مشاهده سایر مقالات این رشته [اینجا](#) کلیک نمایید.