

การทำนายคุณสมบัติของสารด้วยการเรียนรู้ของเครื่อง
และพัฒนาด้วยวิธีเชิงพันธุกรรม

Properties Prediction with Machine Learning
and Improvement with Genetic Algorithm



ปริญญานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิศวกรรมศาสตรบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ปีการศึกษา 2565

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

การทำนายคุณสมบัติของสารด้วยการเรียนรู้ของเครื่อง
และพัฒนาด้วยวิธีเชิงพันธุกรรม



ปริญญานิพนธ์นี้เป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตรปริญญาวิทยาศาสตรบัณฑิต

สาขาวิชาวิศวกรรมเคมี คณะวิศวกรรมศาสตร์

สถาบันเทคโนโลยีพระจอมเกล้าเจ้าคุณทหารลาดกระบัง

ปีการศึกษา 2565

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Properties Prediction with Machine Learning
and Improvement with Genetic Algorithm



Nalin Amornratthamrong

Run Arunchaipong

A REPORT SUBMITTED IN PARTIAL FULFILLMENT OF THE REQUIREMENT FOR
THE DEGREE OF BACHELOR OF ENGINEERING IN CHEMICAL ENGINEERING
SCHOOL OF ENGINEERING
KING MONGKUT'S INSTITUTE OF TECHNOLOGY LADKRABANG
ACADEMIC YEAR 2022

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ปริญญาานิพนธ์เรื่อง การทำนายคุณสมบัติของสารด้วยการเรียนรู้ของเครื่องและพัฒนาด้วยวิธี
เชิงพันธุกรรม
โดย นลิน อมรรัตน์ธำรงค์
รัญชน์ อรุณชัยพงศ์
ปริญญา วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต
สาขาวิชา วิศวกรรมเคมี
ปีการศึกษา 2565
อาจารย์ที่ปรึกษา ผศ.ดร.อมตะ อนันต์พิณีจวัฒนา

ปริญญาานิพนธ์นี้ได้รับการพิจารณาอนุมัติให้นับเป็นส่วนหนึ่งของการศึกษาตามหลักสูตร
วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต ภาควิชาวิศวกรรมเคมี

คณะกรรมการตรวจสอบปริญญาานิพนธ์

ประธานกรรมการ

(ผศ.ดร.อมตะ อนันต์พิณีจวัฒนา)

กรรมการ

(รศ.ดร.กุลนันท์ เกียรติกิตติพงษ์)

กรรมการ

(ผศ.ดร.ภัทรานิษฐ์ วงศ์พร้อมรัตน์)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ปริญญาโทเรื่อง	การทำนายคุณสมบัติของสารด้วยการเรียนรู้ของเครื่องและพัฒนาด้วยวิธีเชิงพันธุกรรม
โดย	นลิน อมรัตน์ธารงค์ รัฐชน อรุณชัยพงศ์
ปริญญา	วิศวกรรมศาสตรบัณฑิต
สาขาวิชา	วิศวกรรมเคมี
ปีการศึกษา	2565
อาจารย์ที่ปรึกษา	ผศ.ดร.อมตะ อนันต์พิณวิวัฒนา

บทคัดย่อ

จากงานวิจัยหลายงานแสดงให้เห็นว่าการทำนายค่าคุณสมบัติของอนุพันธ์ของสารอินทรีย์ที่มีออกซิเจนโดยใช้การเรียนรู้ของเครื่องนั้น (Machine Learning) ให้ผลที่มีความแม่นยำมากกว่าผลจากวิธีทั่วไป เช่น QSPR (Quantitative Structure-Property Relationship) ดังนั้นการทำนายผลของการเรียนรู้ของเครื่องจึงถูกขยายขอบเขตคุณสมบัติของสารที่มากขึ้นเช่น สัมประสิทธิ์ในการกระจายตัวของสาร (Partition coefficient), จุดเดือด, ค่าการละลาย ฯลฯ ของอนุพันธ์ของสารอินทรีย์ที่มีออกซิเจน โดยโมเดลที่ใช้ในงานวิจัยเช่น Linear Regression, Support Vector Machine, Random Forest, Gaussian Process ฯลฯ และ ข้อมูลจากการทดลองที่ใช้ในการสอนและทดสอบโมเดลนั้นรวบรวมมาจากงานวิจัยอื่นๆ ถึงแม้ว่าการทำนายค่าที่ออกมาของการเรียนรู้ของเครื่องจะให้ผลที่แม่นยำ แต่การนำไปประยุกต์ใช้ในอุตสาหกรรมที่ต้องการช่วงของค่าคุณสมบัติที่จำเพาะนั้นสามารถทำได้ยาก ในงานวิจัยชิ้นนี้จึงนำวิธีทางพันธุกรรม (Genetic Algorithm) มาปรับใช้ซึ่งเป็นกระบวนการหาค่าที่ต้องการในกระบวนการอุตสาหกรรมที่ได้รับแรงบันดาลใจจากทฤษฎีการคัดเลือกทางธรรมชาติของชาลส์ ดาร์วิน การนำวิธีการนี้มาใช้ร่วมกับการเรียนรู้ของเครื่องอาจช่วยให้ค้นพบสารเคมีตัวอื่นๆ ที่อาจจะช่วยพัฒนากระบวนการผลิตซึ่งประกอบไปด้วย ราคาที่ต่ำลง อายุการใช้งานของสารและผลกระทบต่อสิ่งแวดล้อม

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Report Title	Properties Prediction with Machine Learning and Improvement with Genetic Algorithm
By	Nalin Amornratthamrong Run Arunchaipong
Degree	Bachelor of Engineering
Program	Chemical Engineering
Year	2022
Advisor	Asst. Prof. Amata Anantpinijwatna, Ph.D.

Abstract

Many studies have shown that estimating properties of oxygenated organic derivatives using machine learning (ML) gives more accurate results compared to the conventional QSPR method. Therefore, the predictive capabilities of machine learning were expanded to further predict a wider range of properties (e.g., Partition Coefficient, Boiling Point, Solubility, ETC.) of the oxygenated hydrocarbon derivatives. The algorithms used in ML (e.g., Linear Regression, Support Vector Machine, Random Forest, Gaussian Process, ETC.) are selected through trial-and-error method to find suited algorithm. The experimental data used to train and validate the models were collected from published literature. Even though these property predictions are accurate, it finds little use in industry which needs a certain range of property for the process. In this study, genetic algorithms (GA) which is a search heuristic that is inspired by Charles Darwin's theory of natural evolution is employed to design the chemical compounds that meet the industrial requirements. The implementation of the integrated GA-ML could potentially deliver the alternative chemical compound which could improve the overall production processes including higher economic potential, greater sustainability, and lower environmental impacts.

สารบัญ

หน้าที่

บทคัดย่อ.....	I
Abstract	II
สารบัญ	III
สารบัญ (ต่อ).....	IV
สารบัญรูป.....	V
สารบัญตาราง	VI
สารบัญตาราง (ต่อ).....	VI
บทที่ 1 บทนำ.....	1
1.1 ที่มาและความสำคัญ.....	1
1.2 วัตถุประสงค์.....	2
1.3 ขอบเขตการศึกษา	2
1.4 ประโยชน์ที่ได้รับ.....	3
บทที่ 2 ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง.....	4
2.1 ไฮโดรคาร์บอน.....	4
2.2 Simplified Molecular-Input Line-Entry System (SMILES)	5
2.3 การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning)	6
2.4 วิธีเชิงพันธุกรรม (Genetic Algorithm)	9
2.5 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง	11
บทที่ 3 วิธีการดำเนินงาน.....	13
3.1 การศึกษาแบบจำลอง Machine Learning	13
3.2 การปรับปรุงแบบจำลองด้วย K-Fold Cross Validation	15
3.3 การสร้าง Genetic Algorithm.....	15

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญ (ต่อ)

	หน้าที่
3.4 การประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm ร่วมกับ Machine Learning.....	16
3.5 การวิเคราะห์ประสิทธิภาพของขั้นตอนเชิงพันธุกรรม	19
บทที่ 4 ผลการดำเนินงาน.....	21
4.1 ผลการปรับปรุงแบบจำลองด้วย K-Fold Cross Validation.....	21
4.2 ผลการประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm ร่วมกับ Machine Learning.....	21
4.3 การวิเคราะห์ประสิทธิภาพของ Genetic Algorithm	28
4.4 ผลที่ได้จากการนำ SMILES ที่ได้ไปค้นหาสาร	31
บทที่ 5 สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ.....	33
5.1 สรุปผลการวิจัย.....	33
5.2 ข้อเสนอแนะ	34
เอกสารอ้างอิง.....	35
เอกสารอ้างอิง (ต่อ).....	36
ภาคผนวก	37

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญรูป

รูปที่	หน้าที่
รูปที่ 2.1 กระบวนการการเรียนรู้ของเครื่องแบบมีผู้สอน (Supervised Learning).....	7
รูปที่ 2.2 ตัวอย่าง Support Vector Machine ในการวิเคราะห์ข้อมูล.....	8
รูปที่ 2.3 ตัวอย่าง Decision Tree ในการวิเคราะห์ข้อมูล.....	9
รูปที่ 2.4 ตัวอย่าง Genetic Algorithm ในการหาค่าตอบ.....	10
รูปที่ 3.1 Flowchart แสดงวิธีการดำเนินงาน.....	13
รูปที่ 3.2 กราฟแสดงการทำนายค่าจุดเดือดเทียบกับการทดลองหาค่าจุดเดือด.....	13
รูปที่ 3.3 แสดงกระบวนการทำงานของ Genetic Algorithm ร่วมกับแบบจำลองทำนายจุดเดือดและแบบจำลองทำนายค่าการละลาย.....	17
รูปที่ 4.1 กราฟแสดงระยะเวลาที่ใช้ในการดำเนินการของแบบจำลองทำนายค่าจุดเดือด.....	30
รูปที่ 4.2 กราฟแสดงระยะเวลาที่ใช้ในการดำเนินการของแบบจำลองทำนายค่าการละลาย.....	31

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สารบัญตาราง

ตารางที่	หน้า
ตารางที่ 3.1 แสดงผลที่ได้จากการทดสอบแบบจำลองจุดเดือด	14
ตารางที่ 3.2 แสดงผลที่ได้จากแบบจำลองค่าการละลาย (1)	14
ตารางที่ 3.3 แสดงผลที่ได้จากแบบจำลองค่าการละลาย (2)	14
ตารางที่ 3.4 แสดงตัวอย่างค่าเป้าหมายที่ต้องการในการประยุกต์แบบจำลองการทำนายค่าการละลาย	18
ตารางที่ 4.1 ตารางเปรียบเทียบก่อนและหลังปรับปรุงแบบจำลองการทำนายค่าจุดเดือด	21
ตารางที่ 4.2 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากแบบจำลองทำนายจุดเดือด	21
ตารางที่ 4.3 เงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัว	22
ตารางที่ 4.4 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัว	23
ตารางที่ 4.5 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัว	23
ตารางที่ 4.6 เงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1	23
ตารางที่ 4.7 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1	24
ตารางที่ 4.8 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1	24
ตารางที่ 4.9 เงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2	25
ตารางที่ 4.10 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2	25
ตารางที่ 4.11 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2	25
ตารางที่ 4.12 เงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัว	26
ตารางที่ 4.13 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัว	26
ตารางที่ 4.14 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัว	26
ตารางที่ 4.15 ผลการเปรียบเทียบระหว่างขั้นตอนของแบบจำลองจุดเดือด	28
ตารางที่ 4.16 ผลการเปรียบเทียบระหว่างขั้นตอนของแบบจำลองการละลาย	28
ตารางที่ 4.17 เปรียบเทียบระยะเวลาที่ใช้ในการดำเนินการในแบบจำลองทำนายค่าจุดเดือด	29
ตารางที่ 4.18 เปรียบเทียบระยะเวลาที่ใช้ในการดำเนินการในแบบจำลองทำนายค่าการละลาย	30
ตารางที่ 4.19 ผลที่ได้จากนำ SMILES จากแบบจำลองทำนายจุดเดือดเพื่อค้นหาสาร	31
ตารางที่ 4.20 ผลที่ได้จากนำ SMILES จากแบบจำลองทำนายการละลายเพื่อค้นหาสาร	32

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้คัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 1

บทนำ

1.1 ที่มาและความสำคัญ

สารกลุ่มไฮโดรคาร์บอน (Hydrocarbon) ประกอบด้วย แอลเคน (Alkane) แอลคีน (Alkene) และแอลไคน์ (Alkyne) ซึ่งจะประกอบด้วยคาร์บอนอะตอมตั้งแต่ 1-12 อะตอมซึ่งในแต่ละส่วนประกอบของโครงสร้างทำให้มีคุณสมบัติต่างกันเช่น อุณหภูมิจุดเดือด (Boiling Temperature) และค่าการละลาย (Solubility Parameter) โดยสารประกอบไฮโดรคาร์บอนนั้นถูกใช้ในอุตสาหกรรมอย่างแพร่หลาย ในปัจจุบันมีการเลือกใช้สารที่มีโครงสร้างซับซ้อนหรือสารใหม่เพื่อใช้งานให้เหมาะสมกับกระบวนการแต่ในการเลือกสารมาใช้นั้นจะต้องมีการทำการทดลองเพื่อหาสารที่เหมาะสมที่สุด เนื่องจากในการเลือกใช้สารจะไม่สามารถรู้คุณสมบัติของสารบางชนิดได้หากไม่เริ่มจากการทดลอง และในการทดลองแต่ละครั้งจะต้องเสียเงิน เสียเวลา เพื่อที่จะทดสอบสารแต่ละชนิด

การตรวจสอบคุณสมบัติของสารไฮโดรคาร์บอนเหล่านี้สามารถทำได้โดยวิธีแบบดั้งเดิม (Conventional Method) ซึ่งมีความแม่นยำที่ไม่มากพอไม่สามารถนำมาอ้างอิงหรือเป็นประโยชน์ต่อการใช้งาน จึงต้องมีการทำการทดลองเพื่อตรวจสอบคุณสมบัติ แต่ในการทดลองนั้นเสียเวลาและค่าใช้จ่ายจึงมีการสร้างแบบจำลองเพื่อทำนายค่าคุณสมบัติเหล่านี้ โดยในงานวิจัยของ Ioana และคณะ [1] ใช้การแบบจำลอง Quantitative Structure Models เพื่อทำนายค่าอุณหภูมิจุดเดือด และใช้แบบจำลองแบบไม่เป็นเชิงเส้น (Non-linear) ASNNs (Associative Neural Networks) รวมถึงแบบจำลองการถดถอยเชิงเส้นอื่นๆ โดยข้อมูลจุดเดิมนั้นสนใจเฉพาะคาร์บอนอะตอมมากกว่าสองและมีอะตอมมากกว่าสามอะตอม เป็นสารอินทรีย์ที่ประกอบด้วย C, H, F, Cl, Br, N, และ O นอกจากนี้ในงานวิจัยของ Nattasinee [2] ได้ทำการศึกษาและสร้างแบบจำลองทำนายค่าจุดเดือด (Boiling Temperature) และในงานวิจัยของ Chayanis and Chumpunus [3] ได้ทำการศึกษาถึงคุณสมบัติของการละลายน้ำของสารไฮโดรคาร์บอนซึ่งประกอบด้วย Hansen Solubility Parameters และสร้างแบบจำลองทำนายค่าการละลายและในงานวิจัยของ Suwijak and Ananya [4] ได้ทำการสร้างแบบจำลองทำนายค่า Log S และ Log P โดยทั้งสองแบบจำลองนั้นมีความแม่นยำในระดับหนึ่ง

อย่างไรก็ตามในการสร้างแบบจำลองเพื่อทำนายคุณสมบัติของสารการเลือกใช้อัลกอริทึม (Algorithm) เพื่อสร้างแบบจำลองและค่าการปรับแต่ง (Hyperparameter) รวมถึงชุดข้อมูลที่นำมา

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

สอน (Train) แบบจำลองซึ่งส่งผลต่อความแม่นยำ ซึ่งในแบบจำลองของ Nattasinee [2] Suwijak and Ananya และ Chayanis and Chumpunus [3,4] สามารถปรับปรุงประสิทธิภาพในการทำนายให้เหมาะสมยิ่งขึ้นและการนำแบบจำลองมาปรับใช้กับอุตสาหกรรม โดยในอุตสาหกรรมทั่วไปนั้นจะเป็นการเลือกใช้ช่วงคุณสมบัติของสารเพื่อให้เหมาะสมกับกระบวนการแต่ในแบบจำลอง [3,4] ข้างต้นนั้นเป็นการทำนายคุณสมบัติของสารจากโครงสร้าง หากจะนำมาประยุกต์ใช้จริงจะต้องทำการสร้างแบบจำลองขึ้นมาใหม่โดยเป็นการกำหนดสิ่งที่ต้องการทำนายเป็นโครงสร้างของสาร (SMILES) ซึ่งต้องใช้เวลาเพิ่มขึ้นหากทำการสร้างแบบจำลองใหม่

จึงนำมาสู่การศึกษาในงานวิจัยนี้ซึ่งจะทำการปรับปรุงแบบจำลองการทำนายจากการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) โดยการทำ Cross Validation เพื่อทำการเปรียบเทียบกับประสิทธิภาพของแบบจำลองและประยุกต์ใช้ขั้นตอนวิธีเชิงพันธุกรรม (Genetic Algorithm) ซึ่งเป็นเทคนิคสำหรับการค้นหาค่าที่ต้องการหรือคำตอบของปัญหา โดยอาศัยหลักการทางชีววิทยาหรือการคัดเลือกตามธรรมชาติ (Natural Selection) สามารถนำมาหาช่วงของคุณสมบัติที่เหมาะสมตามต้องการ

1.2 วัตถุประสงค์

1. เพื่อพัฒนาโมเดลการทำนายด้วยการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) ที่มีอยู่ด้วย K-fold Cross Validation เพื่อให้โมเดลสามารถทำนายคุณสมบัติของสารได้ดียิ่งขึ้น
2. เพื่อประยุกต์ใช้วิธีเชิงพันธุกรรม (Genetic Algorithm) ในการค้นหาช่วงของคุณสมบัติที่เหมาะสมกับการใช้งานในอุตสาหกรรม
3. เพื่อสาธิตการใช้วิธีเชิงพันธุกรรม (Genetic Algorithm) สามารถสร้างโครงสร้างที่แตกต่างและให้คุณสมบัติทางเคมีที่ตรงกับความต้องการ

1.3 ขอบเขตการศึกษา

1. ศึกษาการทำนายคุณสมบัติของสารประกอบอินทรีย์ที่มีธาตุคาร์บอน ออกซิเจนและไฮโดรเจนเป็นองค์ประกอบ (Hydrocarbon) โดยมีจำนวนคาร์บอนอะตอมตั้งแต่ 1-12 อะตอมตัวอย่างสารดังต่อไปนี้
 - แอลกอฮอล์ เช่น Furfuryl alcohol, Cyclopentanol, Phenol
 - แอลดีไฮด์ เช่น Formaldehyde, Glyoxal, Methylglyoxal
 - คีโตน เช่น Acetone, Methyl vinyl ketone, Cyclohexanone
 - อีเธอร์ เช่น Dimethyl ether, Ethyl vinyl ether, Butyl methyl ether
 - เอสเตอร์ เช่น Methyl acetate, Ethyl formate, Methyl vanillate

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้คัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

— กรดคาร์บอกซิลิก เช่น Glycolic acid, Succinic acid, Glutaric acid

โดยแบบจำลองและผลจากการทำนายค่าคุณสมบัติของสารจะเป็นการปรับปรุงจากงานวิจัยของ Suwijak and Ananya, Chayanis and Chumpunus และ Nattasinee [2,3,4]

2. ประยุกต์ใช้วิธีเชิงพันธุกรรม (Genetic Algorithm) ด้วยภาษาโปรแกรม Python โดยใช้งานอยู่บน Visual Studio
3. ประเมินประสิทธิภาพของผลการทำนายโดยค่าเบี่ยงเบนสัมบูรณ์ ร้อยละค่าเบี่ยงเบนสัมพัทธ์ และประเมินประสิทธิภาพของวิธีเชิงพันธุกรรมโดย ค่าเบี่ยงเบนสัมบูรณ์เฉลี่ย ร้อยละค่าเบี่ยงเบนสัมพัทธ์ สัมบูรณ์เฉลี่ยและรากที่สองของค่าเฉลี่ยความคลาดเคลื่อนกำลังสอง

1.4 ประโยชน์ที่ได้รับ

1. เรียนรู้ขั้นตอนสำหรับการสร้างวิธีเชิงพันธุกรรม (Genetic Algorithm) และการทำนายคุณสมบัติของสารด้วยการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning)
2. โอกาสค้นพบสารที่มีโครงสร้างทางเคมีแบบใหม่รวมถึงคุณสมบัติและพฤติกรรมของสารบางกลุ่มที่นอกเหนือจากเดิม
3. ประหยัดเวลาและค่าใช้จ่ายในการทดลองเพื่อให้ได้สารที่เหมาะสมตามช่วงคุณสมบัติที่ต้องการ

บทที่ 2

ทฤษฎีที่เกี่ยวข้อง

ในการศึกษาในครั้งนี้จะประกอบไปด้วยทฤษฎีและงานวิจัยที่เกี่ยวข้องดังต่อไปนี้

2.1 ไฮโดรคาร์บอน

ไฮโดรคาร์บอน (Hydrocarbon) เป็นสารประกอบอินทรีย์ที่มีธาตุคาร์บอนและไฮโดรเจนเป็นองค์ประกอบ ในธรรมชาติพบสารประกอบไฮโดรคาร์บอนเกิดอยู่ในแหล่งต่างๆ เช่น ยางไม้ ถ่านหิน ปิโตรเลียม นอกจากนี้ยังพบว่ามีสารประกอบไฮโดรคาร์บอนจำนวนมากที่ได้จากการสังเคราะห์แหล่งกำเนิดของสารประกอบไฮโดรคาร์บอนที่สำคัญที่สุด คือ ปิโตรเลียม [5]

ประเภทของไฮโดรคาร์บอนประกอบด้วย 3 ประเภทหลักๆได้แก่

1. อะโรมาติกไฮโดรคาร์บอน (Aromatic Hydrocarbon) จะประกอบด้วยวงอะโรมาติกอย่างน้อย 1 วง
2. ไฮโดรคาร์บอนอิ่มตัว (Saturated Hydrocarbon) หรือเรียกอีกชื่อคือแอลเคน (Alkane) เป็นไฮโดรคาร์บอนซึ่งเป็นพันธะเดี่ยว
3. ไฮโดรคาร์บอนไม่อิ่มตัว (Unsaturated Hydrocarbon) ซึ่งจะประกอบด้วยพันธะคู่และพันธะสามอย่างน้อย 1 พันธะภายในระหว่างคาร์บอนอะตอม โดย พันธะคู่ (Alkene) และพันธะสาม (Alkyne)

โดยไฮโดรคาร์บอนแต่ละประเภทจะมีคุณสมบัติของสารต่างกันโดยคุณสมบัติของสารที่สนใจในการศึกษาครั้งนี้ประกอบด้วย

2.1.1 จุดเดือด (Boiling Point)

เป็นอุณหภูมิที่ของเหลวมีความดันไอ (Vapor Pressure) เท่ากับความดันบรรยากาศ (Atmospheric Pressure) ในบริเวณโดยรอบของของเหลวนั้น สารประกอบไฮโดรคาร์บอนต่างชนิดที่มีคาร์บอนอะตอมเท่ากัน และคาร์บอนต่อกันเป็นโซ่สายยาวเรียงลำดับจุดเดือดจากสูงไปต่ำ ดังนี้ แอลไคน์ > แอลซีน > แอลเคน [5]

2.1.2 Hansen solubility parameters

เป็นวิธีการที่ใช้ในการหาคุณสมบัติทางกายภาพของสารเคมีโดยพารามิเตอร์เหล่านี้ถูกใช้เพื่ออธิบายการกระจายของสารเคมีในระบบที่มีหลายสารประกอบ ซึ่งในแต่ละพารามิเตอร์มีหน่วยวัดคือ $\text{MPa}^{0.5}$ ประกอบด้วย Hansen Dispersion (การกระจายเฉพาะทาง), Hansen H bond (การดึงดูดเอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ด้วยพันธะกลุ่มไฮโดรเจน) และ Hansen Polarity (การกระจายและดึงดูดด้วยพันธะของกลุ่มโพลาริตี)

2.1.3 Log S (Logarithm of Solubility)

Log S หมายถึงการคำนวณลอการิทึมของความสามารถในการละลายของสารที่มีการละลายในน้ำหรือสารละลายอื่นๆ เมื่อ Log S เป็นค่าบวก (positive value) แสดงว่าสารมีความสามารถในการละลายในน้ำหรือสารละลายอื่นๆ ในการเคลื่อนที่ของสารที่ละลายได้ในน้ำ Log S มักจะถูกแสดงเป็นทศนิยม ซึ่งค่าที่มากขึ้นแสดงถึงความสามารถที่เข้มข้นมากขึ้น

2.1.4 Log P (Logarithm of Partition Coefficient)

Log P หมายถึงค่าลอการิทึมของอัตราส่วนการแบ่ง (partition coefficient) อัตราส่วนของความเข้มข้นของสารในสถานะหนึ่งหรือเฟสหนึ่งต่อความเข้มข้นในเฟสที่สอง เมื่อความเข้มข้นทั้งสองอยู่ในสถานะสมดุล

2.2 Simplified Molecular-Input Line-Entry System (SMILES)

Simplified Molecular-Input Line-Entry System หรือ SMILES คือ ระบบการแสดงโครงสร้างสารด้วยตัวอักษรที่มีรหัส ASCII ทำให้ระบบประมวลผลของคอมพิวเตอร์สามารถเข้าใจโครงสร้างของสารได้ทั้ง 2 มิติและ 3 มิติแตกต่างจากการแสดงโครงสร้างสารด้วยอักษร แบบอื่น ๆ ที่ไม่สามารถทำให้ระบบประมวลผลคอมพิวเตอร์เข้าใจลักษณะโครงสร้างสารได้ ระบบ การเขียน SMILES [6] โดยทั่วไปสามารถอธิบายได้ดังนี้

1. อะตอม (Atom) ในระบบ SMILES จะแสดงด้วยตัวอักษรในตารางธาตุภายในสัญลักษณ์ [] ยกเว้นอะตอมของธาตุที่พบเห็นได้บ่อยในสารอินทรีย์ คือ B, C, N, O, P, S, F, Cl, Br, และ I นอกจากนั้นจะไม่มีการแสดงอะตอม H ในรหัส ยกเว้นมีการใช้ [] เพื่อแสดงความเป็นไอออน เช่น [NH4+]
2. พันธะ (Bond) จะแสดงเฉพาะการต่อระหว่างอะตอมที่เป็นพันธะคู่ (Double Bond) ด้วยสัญลักษณ์ = และพันธะสาม (Triple Bond) ด้วยสัญลักษณ์ # ในขณะที่พันธะเดี่ยว (Single Bond) สามารถแสดงด้วยเครื่องหมาย - แต่ที่นิยมนั้นจะไม่แสดง เช่น รหัสของเอทานอล (Ethanol) คือ C-C-O, C-CO, หรือ CC-O แต่ที่นิยม คือ CCO
3. วง (Cyclic) จะแสดงตำแหน่งการต่อของวงด้วยตัวเลขที่ตามหลังอะตอม อะตอมที่มีตัวเลขตามหลังเป็นเลขเดียวกันแสดงว่ามีการต่อเป็นวงที่อะตอมคู่นั้น เช่น รหัสของ Cyclohexane คือ C1CCCCC1

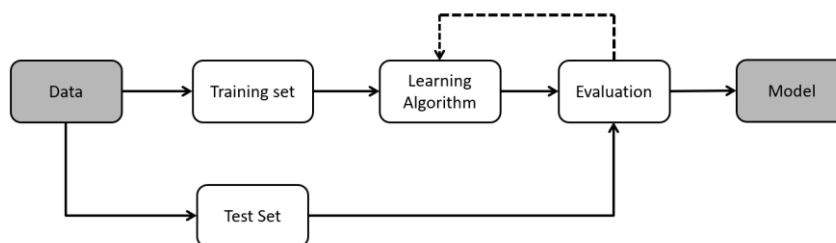
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

4. อะโรมาติก (Aromatic) จะแสดงด้วยอักษรพิมพ์เล็ก เช่น วงเบนซีน (Benzene Ring) มีรหัสเป็น c1ccccc1
5. กิ่ง (Branch) จะถูกแสดงอยู่ภายใต้สัญลักษณ์ () เช่น รหัสของ Fluoroform เป็น FC(F)F การแปลงโครงสร้างของสารด้วย SMILES จะช่วยให้การใช้วิธีการกระจายกลุ่มด้วยระบบประมวลผลคอมพิวเตอร์ทำได้ง่าย เช่น สามารถนับจำนวนหมู่ Methyl ในโครงสร้างของสารได้ โดยอาศัยการอ่านรหัส ASCII ของสัญลักษณ์ (C) ด้วยระบบประมวลผลคอมพิวเตอร์

2.3 การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning)

การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) คือการทำให้ระบบเรียนรู้ทำความเข้าใจและตัดสินใจได้ด้วยตัวเองเหมือนมนุษย์ ซึ่งเป็นส่วนหนึ่งของปัญญาประดิษฐ์ (Artificial Intelligence: AI) แบ่งออกเป็น 3 รูปแบบคือ การเรียนรู้แบบมีผู้สอน (Supervised Learning) เป็นการเรียนรู้ของเครื่องโดยมีข้อมูลหรือผลที่ต้องการประกอบ การเรียนรู้แบบไม่มีผู้สอน (Unsupervised Learning) เป็นการเรียนรู้ของเครื่องไม่มีเป้าหมายที่มีอยู่มาประกอบการทำนายหรือจำแนกผลจากรูปแบบของข้อมูลที่ป้อนเข้าเท่านั้น และ การเรียนรู้ตามสภาพแวดล้อม (Reinforcement Learning) เป็นการเรียนรู้ของเครื่องด้วยการจำลองสภาพแวดล้อมเพื่อให้ระบบตัดสินใจ [7]

ในงานที่เกี่ยวข้องกับการทำนายนั้นรูปแบบที่เป็นที่นิยมคือการเรียนรู้แบบมีผู้สอน โดยเริ่มต้นจากการนำข้อมูลมาแบ่งออกเป็นสองส่วน คือชุดฝึก (Training set) ซึ่งจะถูกใช้สอนอัลกอริทึม (Algorithm) เพื่อสร้างแบบจำลองในการทำนาย และชุดทดสอบ (Test set) จะถูกใช้ในการทดสอบว่าประสิทธิภาพของการทำนายของแบบจำลองที่ได้ หากผลการทดสอบเป็นที่น่าพอใจ แบบจำลองนั้นจะเป็นผลลัพธ์ของกระบวนการซึ่งจะถูกนำไปใช้งานต่อ แต่หากผลทดสอบไม่น่าพอใจ ผู้ศึกษาจะต้องกลับไปปรับเปลี่ยนพารามิเตอร์ (Parameter) ภายในอัลกอริทึมที่เลือกใช้อยู่ หรือเปลี่ยนไปใช้อัลกอริทึมอื่นแทน จากนั้นทดสอบแบบจำลองที่ได้ใหม่ และทำเช่นนี้จนกว่าจะได้แบบจำลองที่มีความน่าเชื่อถือดังรูปที่ 2.1 [7]



รูปที่ 2.1 กระบวนการการเรียนรู้ของเครื่องแบบมีผู้สอน (Supervised Learning)

และในงานวิจัยชิ้นนี้จะใช้การวิเคราะห์แบบถดถอย (Regression Analysis) ซึ่งเป็นวิธีวิเคราะห์ความสัมพันธ์ระหว่างตัวแปรต้นหรือตัวแปรอิสระ (Independent Variable) กับตัวแปรตาม (Dependent Variable) โดยที่ผลของตัวแปรตามที่ต่อเนื่องเป็นช่วงข้อมูล โดยการวิเคราะห์แบบถดถอยนี้เป็นส่วนหนึ่งของการเรียนรู้แบบมีผู้สอน สำหรับอัลกอริทึมที่ใช้ในงานนี้ได้แก่

2.3.1 การถดถอยเชิงเส้น (Linear Regression)

การถดถอยเชิงเส้นคือ การวิเคราะห์ข้อมูลที่เป็นเส้นตรงและเข้าใจง่ายที่สุดโดยที่การถดถอยจะเป็นไปได้สมการที่ (2-1) [8]

$$Y_i = a_0 + a_1X_{1,i} + \dots + a_{n-1}X_{n-1,i} + a_nX_{n,i} + \varepsilon_i \quad (2-1)$$

เมื่อ Y_i คือ ตัวแปรตามลำดับที่ i

$X_{n,i}$ คือ ตัวแปรต้นที่ลำดับที่ i เป็นปัจจัยลำดับที่ n

a_n คือ สัมประสิทธิ์ที่เป็นปัจจัยลำดับที่ n

ε_i คือ ความคลาดเคลื่อนลำดับที่ i

การหาค่าความคลาดเคลื่อน (Error) นั้นสามารถทำได้หลายวิธี แต่วิธีที่นิยมที่สุดคือผลรวมค่าคลาดเคลื่อนกำลังสองที่น้อยที่สุด (Least Square) ซึ่งเป็นไปตามสมการที่ (2-2) [8]

$$L = \sum_{i=1}^n \varepsilon_i^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - f_i) \quad (2-2)$$

เมื่อ L คือ ค่ากำลังสองที่น้อยที่สุด

ε_i คือ ความคลาดเคลื่อนลำดับที่ i

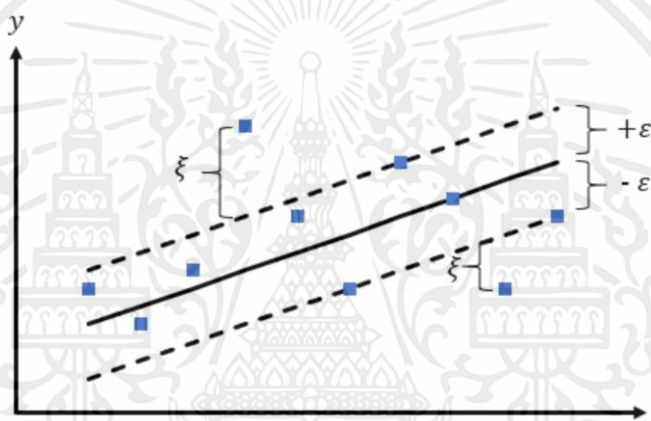
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Y_i คือ ตัวแปรตามจากการทดลองลำดับที่ i

f_i คือ ตัวแปรตามจากการทำนายลำดับที่ i

2.3.2 Support Vector Machine (SVM)

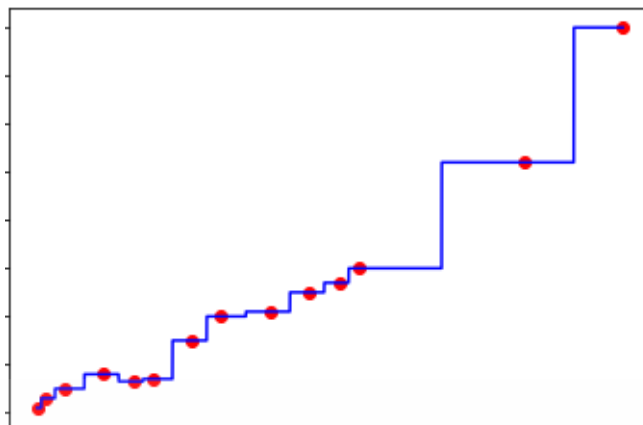
Support Vector Machine เป็นวิธีการแก้ปัญหาได้ทั้งวิธีเป็นเชิงเส้น ไม่เป็นเชิงเส้นและมีหลายมิติโดยหลักการคือหาสัมประสิทธิ์ของสมการเพื่อสร้างเส้นแบ่งแยกกลุ่มข้อมูลที่ป้อนเข้าเพื่อสอนคอมพิวเตอร์ให้เรียนรู้แยกเป็นสองส่วน (Binary Classification) ระหว่างฟังก์ชันแกนกลาง (Kernel Function) ซึ่งการวิเคราะห์จะสร้างสมการระหว่างตัวแปรต้น (x) และตัวแปรตาม (y) รวมถึงการกำหนดขอบเขต (ϵ) ที่สามารถครอบคลุมจำนวนข้อมูลให้ได้มากที่สุดและระยะห่างของข้อมูลที่หลุดออกจากขอบเขต (ξ) มีค่าน้อยที่สุดดังรูปที่ 2.2 [9]



รูปที่ 2.2 ตัวอย่าง Support Vector Machine ในการวิเคราะห์ข้อมูล

2.3.3 Decision Tree (DT)

Decision Tree เป็นการวิเคราะห์แบบถดถอยรูปแบบหนึ่งซึ่งทำนายจากการตัดสินใจจากเงื่อนไขว่าข้อมูลที่ส่งเข้ามานั้นอยู่ในเงื่อนไขที่ตั้งหรือไม่ หากอยู่ในช่วงเงื่อนไขที่ต้องการก็จะแสดงผลจากการทำนายออกมา หากไม่จะถูกส่งไปยังเงื่อนไขต่อไปจึงค่อยแสดงผลการทำนาย การวิเคราะห์แบบนี้จะทำให้ผลที่ออกมาช่วงต่างกัน ทำให้ค่าที่ออกมาไม่จำเพาะต่อตัวแปรต้นตัวใดตัวหนึ่ง ซึ่งเป็นข้อเสียของ Decision Tree ที่ไม่สามารถให้ค่าที่ต่อเนื่องจำเพาะได้เหมือนการวิเคราะห์แบบอื่น ตัวอย่างผลการวิเคราะห์ของ DT เป็นไปตามรูปที่ 2.3 [8]



รูปที่ 2.3 ตัวอย่าง Decision Tree ในการวิเคราะห์ข้อมูล

2.3.4 Random Forest (RF)

Random Forest เป็นการวิเคราะห์แบบ Decision Tree แต่เป็นการนำ Decision Tree หลายๆ กระบวนการมารวมกันและหาค่าเฉลี่ย โดยผลเฉลยรวมที่ได้จากทุก Decision Tree คือผลของ Random Forest [8]

2.3.5 K-Nearest Neighbors (KNN)

K-Nearest Neighbors เป็นการวิเคราะห์ข้อมูลโดยอาศัยเพื่อนบ้านจำนวนที่ใกล้ที่สุดจำนวน k ตัวตามที่กำหนด โดยข้อมูลที่เลือกนั้นจะถูกนำไปเทียบกับระยะห่างจากข้อมูลเพื่อนบ้านที่ใกล้ที่สุด เฉลี่ยค่าน้ำหนักออกมา ค่าเฉลี่ยด้วยน้ำหนักของข้อมูลเพื่อนบ้านเหล่านั้นคือค่าทำนายที่ได้จาก K-Nearest Neighbors ณ ตำแหน่งที่สนใจ [8]

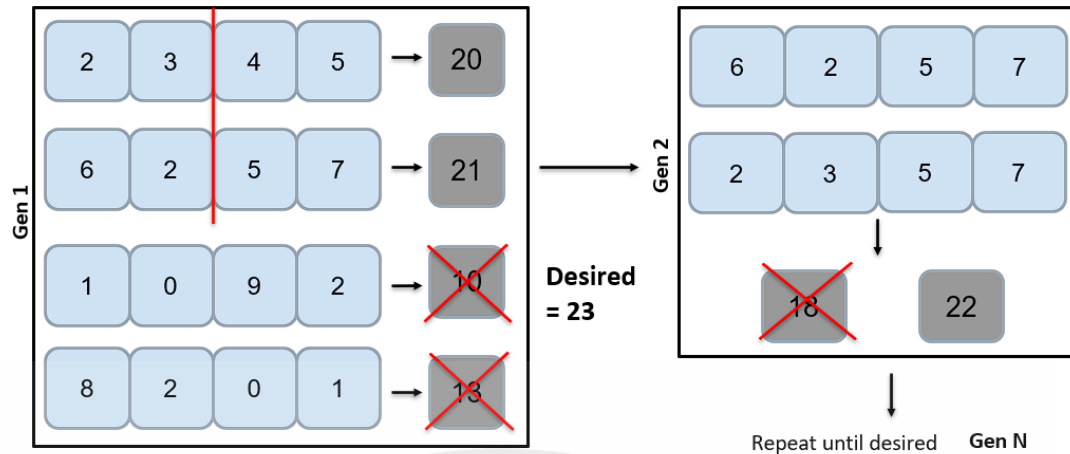
2.3.6 Gaussian Process

Gaussian Process เป็นการวิเคราะห์ข้อมูลแบบถดถอยซึ่งแตกต่างจากวิธีการโดยที่ Gaussian Process จะทำการสร้างสมมติฐานที่ว่าความน่าจะเป็นจากการวัดเกิดจากความสัมพันธ์รูปแบบกระจายตัวแบบปกติ (Gaussian Distribution) ที่มีค่าเฉลี่ยเป็นค่าที่ได้จากสมการความสัมพันธ์และมีความแปรปรวนของข้อมูลที่เกิดจากการคำนวณทางสถิติและความน่าจะเป็นแทนที่จะเป็นค่าจากการทำนายและการวัดหรือการทดลอง [8]

2.4 วิธีเชิงพันธุกรรม (Genetic Algorithm)

วิธีเชิงพันธุกรรม (Genetic Algorithm) คือ วิธีการค้นหาคำตอบที่เหมาะสมโดยใช้วิธีการคัดเลือกทางธรรมชาติจากทฤษฎีของชาลส์ ดาร์วิน โดยจำลองแนวคิดวิวัฒนาการของสิ่งมีชีวิตตามรูปที่ 2.4 [10]

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 2.4 ตัวอย่าง Genetic Algorithm ในการหาคำตอบ

2.4.1 ขั้นตอนการทำงาน (Methodology)

1. การสุ่มประชากรต้นแบบ (Random) เป็นการสร้างประชากรรุ่นที่ 1 โดยสมาชิกในประชากรคือโครโมโซม (Chromosome) และสมาชิกในโครโมโซมคือยีน (Gene) หากการสุ่มประชากรไม่มีการกำหนดขอบเขตจะทำให้การหาเป้าหมายทำได้ยากขึ้นดังนั้นควรมีการกำหนดขอบเขตของการสุ่มเพื่อกำหนดขอบเขตของคำตอบที่เราอยากได้
2. การคัดเลือกประชากร (Selection) เป็นการทดสอบว่าประชากรที่สุ่มมานั้นใกล้เคียงกับความต้องการเท่าไรโดยการใช้ Objective Function เพื่อหาว่าค่าของโครโมโซมที่ได้มานั้นอยู่ห่างจากค่าที่เราได้เท่าไร จากนั้นกำหนดปริมาณโครโมโซมที่ต้องการมาทำการสลับสายพันธุ (Crossover)
3. กระบวนการสลับสายพันธุ (Crossover) เป็นการสลับยีนในประชากรที่ถูกคัดเลือกมาแล้ว ซึ่งอาจจะทำให้เกิดโครโมโซมที่มีผลที่ต้องการอยู่ได้ โดยเริ่มจากการทำการสุ่มโครโมโซมและจุดที่เกิดการสลับสายพันธุ (Crossover point)
4. กระบวนการกลายพันธุ (Mutation) เป็นการกลายพันธุยีนในโครโมโซมหลังจากการสลับสายพันธุเพื่อป้องกันไม่ให้เกิดโครโมโซมซ้ำทำให้ไม่ได้ผลที่ต้องการ โดยต้องทำการกำหนดอัตราการกลายพันธุ (Mutation Rate) ก่อนและกำหนดจำนวนยีนที่จะเกิดการกลายพันธุ จากนั้นทำการสุ่มค่าที่จะกลายพันธุแทนเข้าไปในยีนที่เกิดการกลายพันธุ หลังจากที่เกิดการกลายพันธุให้นำประชากรใหม่นี้ไปคัดเลือกอีกครั้งหากได้ผลตามที่ต้องการหรืออยู่ในช่วงที่ยอมรับได้แล้วหยุด

ในงานที่ใช้ันั้นจะเริ่มต้นจากการสุ่มค่า SMILES เป็นชุดเริ่มต้นโดยทำการตั้งไว้ที่ 10 ชุดและทำการคัดเลือกประชากร 4 ชุดที่ใกล้เคียงผลที่ต้องการมากที่สุดจากนั้นนำมาทำการสลับสายพันธุโดย

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ที่สุ่มจุดที่เกิดการสลับสายพันธุ้ขึ้นจากนั้นเข้าสู่กระบวนการกลายพันธุ้ที่มีโอกาสเกิด 70% โดยหากค่าที่ต้องการออกมาอยู่ในช่วงที่ยอมรับได้จะถูกนำไปใช้งาน

2.5 งานวิจัยที่เกี่ยวข้อง

2.5.1 การพัฒนาการออกแบบของโมเลกุลโดยใช้วิธีเชิงพันธุกรรม

จากงานวิจัยที่ศึกษาในปีค.ศ. 2021 โดย Youngchun และคณะ [11] ได้ทำการใช้การเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning) ควบคู่กับการใช้วิธีเชิงพันธุกรรม (Genetic Algorithm: GA) ในการออกแบบโมเลกุลพอลิเมอร์ที่ตรงกับความต้องการทางอุตสาหกรรมเนื่องจากในอดีตการใช้วิธีการลองผิดลองถูก (Trials and Error) เป็นวิธีการที่ยอมรับได้มากที่สุดในการค้นหาสารใหม่เพื่อนำไปใช้ในอุตสาหกรรมเช่น High-Throughput Computational Screening (HTCS) ซึ่งเป็นวิธีการรวบรวมข้อมูลสารเคมีสำหรับการทำนายคุณสมบัติของสารในปริมาณมากโดยใช้ ML หรือการจำลอง แต่่วาวิธีนี้มีข้อจำกัดขึ้นอยู่กับประสิทธิภาพกับการคาดเดาของผู้วิจัยจึงทำให้วิธีนี้มีอัตราประสบความสำเร็จที่ต่ำ โดยการเลือกใช้ Genetic Algorithm ก็เป็นการแก้ไขปัญหาในส่วนนี้

ปัญหาหลักของงานวิจัยชิ้นนี้คือ 1) ตรวจสอบความเป็นไปได้ของโมเลกุลที่ออกแบบมาว่าเกิดขึ้นได้จริง 2) เลือกโมเลกุลในแต่ละรุ่น (Generation) ได้อย่างมีประสิทธิภาพและแม่นยำ ซึ่งสามารถแก้ปัญหาได้โดยใช้ความรู้ทางเคมีควบคู่ไปกับทดสอบผลได้กับการทำนายจากโครงข่ายประสาทเทียม (Neural Network) เพื่อใช้ในการวิเคราะห์ผลว่ามีความแม่นยำหรือไม่ [11]

ผลที่ได้จากการออกแบบโมเลกุลจากวิธีทางพันธุกรรมนั้นมีประสิทธิภาพใกล้เคียงกับการทำนายจากโครงข่ายประสาทเทียมและได้ผลที่อยู่ในช่วงในความต้องการ แต่การที่กระบวนการเป็นกระบวนการอัตโนมัติอาจทำให้ผลที่ได้ขึ้นอยู่กับข้อมูลในการสุ่มซึ่งอาจทำให้ไม่มีกรกลายพันธุ้มากพอที่ทำให้เกิดเป็นคุณสมบัติใหม่ได้ และหากเตรียมข้อมูลโดยไม่ตรวจสอบความเรียบร้อยอาจทำให้ผลคลาดเคลื่อนได้ง่าย

2.5.2 การสร้างแบบจำลองการทำนายคุณสมบัติของสารด้วยการใช้การเรียนรู้ของเครื่องและแบบจำลองแบบดั้งเดิม

จากงานวิจัยที่ศึกษาโดย Ioana และคณะ [1] การสร้างแบบจำลองเพื่อทำนายค่าคุณสมบัติต่างของสารเช่น ค่าอุณหภูมิจุดเดือด อุณหภูมิจุดหลอมเหลว อุณหภูมิวิกฤต ของสารไฮโดรคาร์บอนนั้นได้มีการศึกษาอย่างแพร่หลายทั้งวิธีการสร้างโมเดลแบบดั้งเดิม (Convexional Method) และการเรียนรู้ของเครื่อง (Machine Learning)

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

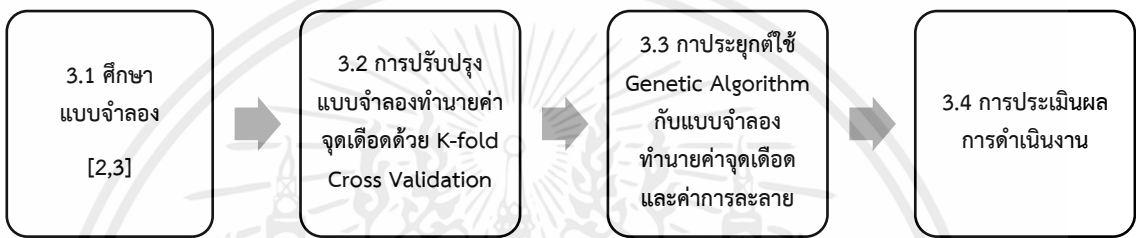
ในงานวิจัยที่ใช้การแบบจำลอง Quantitative Structure Models เพื่อทำนายค่าอุณหภูมิจุดเดือด และ ใช้แบบจำลองแบบไม่เป็นเชิงเส้น (Non-Linear) ASNNs (Associative Neural Networks) รวมถึงแบบจำลองการถดถอยเชิงเส้นอื่นๆ เช่น ISDA-MLR SQS โดยในการชุดข้อมูลที่นำมาศึกษาประกอบด้วย 2,098 ชนิดของ organic compound โดยมีค่าอุณหภูมิจุดหลอมเหลวอยู่ในช่วง 185-419 K และได้ทำการปรับปรุงประสิทธิภาพของแบบจำลองด้วยการทำ 5-fold cross validation โดยผลที่ได้จากงานวิจัยนี้โมเดล ISDA-MLR (Multiple Linear Regression) R^2 เป็น 0.93 RMSE 13.7 และ MAE 8.6 แบบจำลอง ASNN R^2 0.96 RMSE 9.3 และ MAE 6.2 และแบบจำลองสุดท้าย SQS R^2 0.87 RMSE 17.3 และ MAE 12.3 โดยงานวิจัยนี้ได้สรุปผลว่า ASNN ได้ให้ผลดีที่สุดแต่ในงานวิจัยนี้ยังกล่าวอีกว่าความแตกต่างของชุดข้อมูล จำนวนข้อมูล ความถูกต้องของข้อมูล ที่นำมาสร้างแบบจำลองนั้นส่งผลให้ไม่สามารถเปรียบเทียบได้โดยตรงกับชุดข้อมูลที่ใช้สร้างแบบจำลองอื่นๆ[1]

บทที่ 3

วิธีการดำเนินงาน

3.1 การศึกษาแบบจำลอง Machine Learning

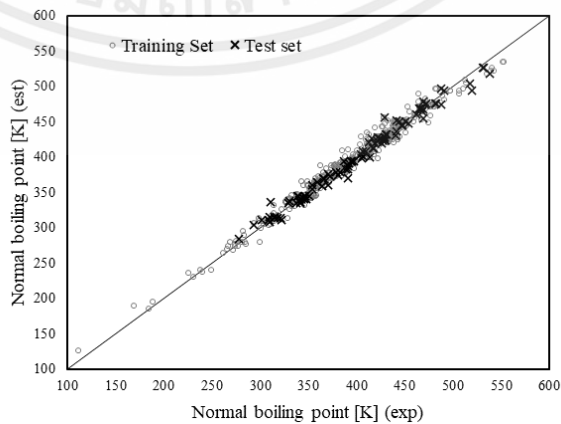
จากแบบจำลอง [2,3] สามารถนำมาประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm โดยแยกเป็นสองแบบจำลองโดยภาพรวมในการดำเนินงานนั้นจะไปตามรูปที่ 3.1 คือปรับปรุงโมเดลเดิม สร้าง Genetic Algorithm และวิเคราะห์ประสิทธิภาพของผลที่ได้



รูปที่ 3.1 Flowchart แสดงวิธีการดำเนินงาน

3.1.1 แบบจำลองการทำนายจุดเดือด (Melting Point)

ตามการศึกษาของ [2] ได้มีการกำหนดค่าเริ่มต้นของแบบจำลอง (Feature) ประกอบด้วย C Double, Triple Branch, Cyclic และ ค่าการทำนาย (Label) คือ T_b (Melting Point) โดย Algorithm ที่ใช้ในแบบจำลองคือ Decision Tree ซึ่งจำนวนชุดข้อมูล (Dataset) มีจำนวนทั้งสิ้น 560 ซึ่งประกอบด้วยสาร Hydrocarbon ทั้งสามชนิดประกอบด้วย Alkane, Alkene, Alkyne โดยผลลัพธ์ที่ได้จากแบบจำลองของผู้เขียนนั้นได้แสดงไว้ในตารางที่ 3.1



รูปที่ 3.2 กราฟแสดงการทำนายค่าจุดเดือดเทียบกับการทดลองหาค่าจุดเดือด

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 3.1 แสดงผลที่ได้จากการทดสอบแบบจำลองจุดเดือด

	Training	Test	Total
R ²	0.980	0.984	0.981
RMSE	8.354	7.924	8.340
MAPE	0.016	0.015	0.016

จากการศึกษาแบบจำลองการทำนายจุดเดือด [3,4] จะเห็นได้ว่าแบบจำลองค่อนข้างมีประสิทธิภาพเมื่อเทียบกับแบบจำลองทำนายจุดเดือดที่สร้างด้วยวิธีการอื่นๆจึงสามารถนำแบบจำลองนี้มาประยุกต์ใช้กับ Genetic Algorithm เพื่อทำการประยุกต์ใช้แบบจำลองในการค้นหาสารที่ต้องการได้

3.1.2 แบบจำลองการทำนายค่าการละลาย (Solubility Parameter)

ตามการศึกษาของ [3,4] ได้มีการกำหนดค่าเริ่มต้นของแบบจำลอง (Feature) ประกอบด้วย C, Double, Triple, Branch, Benzene, Cyclic, SingleCO, DoubleCO และค่าที่ได้จากการทำนายคือค่า Log S, Log P และ Hansen (Dispersion, Polarity, H Bond) โดยผลลัพธ์ที่ได้จากแบบจำลองของผู้เขียนนั้นได้แสดงไว้ในตารางที่ 3.2 และ 3.3

ตารางที่ 3.2 แสดงผลที่ได้จากแบบจำลองค่าการละลาย (1)

Property	Method	Number of Compound	RMSE	AAD
Log S	This work [2]	857	0.59	0.38
	LDH	287	0.90	0.73
Log P	This work [2]	1217	0.80	0.60
	-	-	-	-

ตารางที่ 3.3 แสดงผลที่ได้จากแบบจำลองค่าการละลาย (2)

Property	Method	Number of Compound	ADD		
			Dispersion	Polarity	H Bonding
Hansen	This Work [2]	422	0.10	0.43	0.62
	SP	357	0.41	0.86	0.80

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากการศึกษาแบบจำลองของการทำนายค่าการละลาย ซึ่งค่าการละลายที่ใช้ในการทำนาย ประกอบด้วย Log S, Log P, Hansen (Dispersion, Polarity, H Bonding) พบว่าแบบจำลองการทำนายมีประสิทธิภาพสูงเมื่อเทียบกับแบบจำลองอื่นที่ทำนายค่าการละลายเช่นเดียวกันดังตารางที่ 3.2 และ 3.3 จึงได้ทำการเลือกแบบจำลองนี้มาใช้ในการศึกษาในโครงการนี้ต่อไป

3.2 การปรับปรุงแบบจำลองด้วย K-Fold Cross Validation

ในการปรับปรุงแบบจำลองนั้นสามารถทำได้หลากหลายวิธีแต่จากแบบจำลองการทำนายข้างต้น สามารถปรับปรุงแบบจำลองได้ด้วย K-fold Cross Validation โดยในแบบจำลองเดิมนั้นได้มีการสร้างแบบจำลองด้วย Algorithm ที่ตัวแปรบางตัวจะต้องปรับจูนค่า (Hyper-Parameter)

ในขั้นตอนนี้จะทำการคัดเลือกแบบจำลองที่จะมีการปรับปรุงด้วย K-Fold Cross validation ซึ่งจะประกอบด้วย K-nearest neighbor, Decision Tree และ Random Forrest โดยแบบจำลองเดิมนั้นได้มีการแบ่งชุดข้อมูลฝึก (Training Set) และ ชุดข้อมูลทดสอบ (Test Set) ไว้ที่อัตราส่วน 80:20 ตามลำดับ โดยข้อมูลนั้นมาจากการเก็บรวบรวมข้อมูลโครงสร้าง SMILES ของคุณสมบัติต่างๆ ของสารไฮโดรคาร์บอน (Hydrocarbon) โดยได้มีการกำหนดบทบาทคอลัมน์ที่ใช้ในการทำนายและ คอลัมน์ที่เป็นผลของการทำนาย (Labels) ไว้แล้วคือ จุดหลอมเหลว จุดเดือด อุดมหมู่มีวิฤต จากนั้นจึงทำการสร้างแบบจำลอง

ในการปรับปรุงจะต้องดำเนินการ (Run) โมเดลเดิมเพื่อวิเคราะห์ประสิทธิภาพของโมเดลเพื่อทำการปรับปรุงโดยวิเคราะห์ผ่านทางค่าสถิติ โดยโมเดลนั้นจะดำเนินการด้วยภาษาคอมพิวเตอร์ Python โดยทำการนำเข้า (Import) โมดูลของ Cross validation จากนั้นกำหนดจำนวน Fold 5 ครั้งเนื่องจากเป็นจำนวนครั้งที่เหมาะสมกับอัตราส่วนชุดข้อมูลฝึกและชุดข้อมูลทดสอบที่กำหนดไว้ และดำเนินการ (Run)

3.3 การสร้าง Genetic Algorithm

การสร้าง Genetic Algorithm นี้ทำในโปรแกรม Visual Studio Code โดยใช้ภาษา Python เริ่มต้นจากการกำหนดยีนในโครโมโซมหรือกำหนดค่า SMILES ของไฮโดรคาร์บอนให้อยู่ในขอบเขตจำนวนคาร์บอน 1-12 ตัวและตัวแปรที่เหลือสำหรับแบบจำลองการทำนายค่าจุดเดือดได้แก่ พันธะคู่ (Double Bond), พันธะสาม (Triple Bond), โช้กิ่ง (Branch) และ วง (Cyclic) โดยสุ่มขึ้นมา (Random) และตัวแปรที่เหลือสำหรับแบบจำลองการทำนายค่าการละลายได้แก่ C, Double, Triple, Branch, Benzene, Cyclic, SingleCO, DoubleCO เมื่อนำไปตรวจสอบความเป็นไปได้ของสารก่อน หากไม่สามารถเป็นไปได้เช่นคาร์บอน 2 ตัว พันธะคู่ 3 พันธะเป็นต้นจะไม่นำมาใช้และทำการสุ่ม

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้คัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

อีกครั้งจนกว่าจะได้ตัวที่เป็นไปได้ เมื่อทำการสุ่มจนครบ 10 สารแล้วเข้าสู่ขั้นตอนสลับสายพันธุโดยนำสารทั้งไปทำนายค่าที่ต้องการตามอัลกอริทึมที่เลือกจากนั้นทำการเลือกคัดเลือก (Selection) สาร 4 ตัวที่ให้ค่าให้ใกล้เคียงผลที่ต้องการมากที่สุดเพื่อนำไปใช้ในการสลับสายพันธุ (Crossover)

การสลับสายพันธุเริ่มจากการสุ่มจุดที่ทำการสลับสายพันธุและเลือกคู่ที่ทำการสลับสายพันธุเพื่อดูผลโดยกำหนดขอบเขตที่สุ่มตั้งแต่พันธุคู่ไปถึงวง จากนั้นนำสารใหม่ที่ได้ไปหาทำนายค่าที่ต้องการเพื่อตรวจสอบว่าสารที่สลับสายพันธุ นั้นใกล้เคียงผลที่ต้องการหรือไม่และตรวจสอบความเป็นไปได้ของสารอีกครั้งก่อนเข้าสู่การกลายพันธุ (Mutation)

การกลายพันธุต้องทำการตั้งอัตราการกลายพันธุ (Mutation Rate) โดยทำการตั้งไว้ที่ 70% และมีโอกาส 60% ที่จะเกิดการกลายพันธุที่คาร์บอนโดยที่ไม่ห่างจากเดิมมากเกินไป (± 2) และโอกาส 10% ที่จะเกิดการกลายพันธุที่จุดอื่น จากนั้นนำสารใหม่ที่ได้ไปหาทำนายค่าที่ต้องการเพื่อตรวจสอบว่าสารที่สลับสายพันธุ นั้นใกล้เคียงผลที่ต้องการหรือไม่และตรวจสอบความเป็นไปได้ของสาร

หากผลที่ได้ออกมาหากไม่ได้ที่ต้องการหรือไม่อยู่ในช่วงที่รับได้ จะถูกส่งกลับไปสุ่มและคัดเลือกประชากรใหม่ โดยในการทำ Genetic Algorithm นั้นอาจสลับขั้นตอนหรือเพิ่มขั้นตอนเดิมเพื่อทดลองหาความเป็นไปได้ที่จะทำให้ประสิทธิภาพของ Genetic Algorithm มากขึ้น

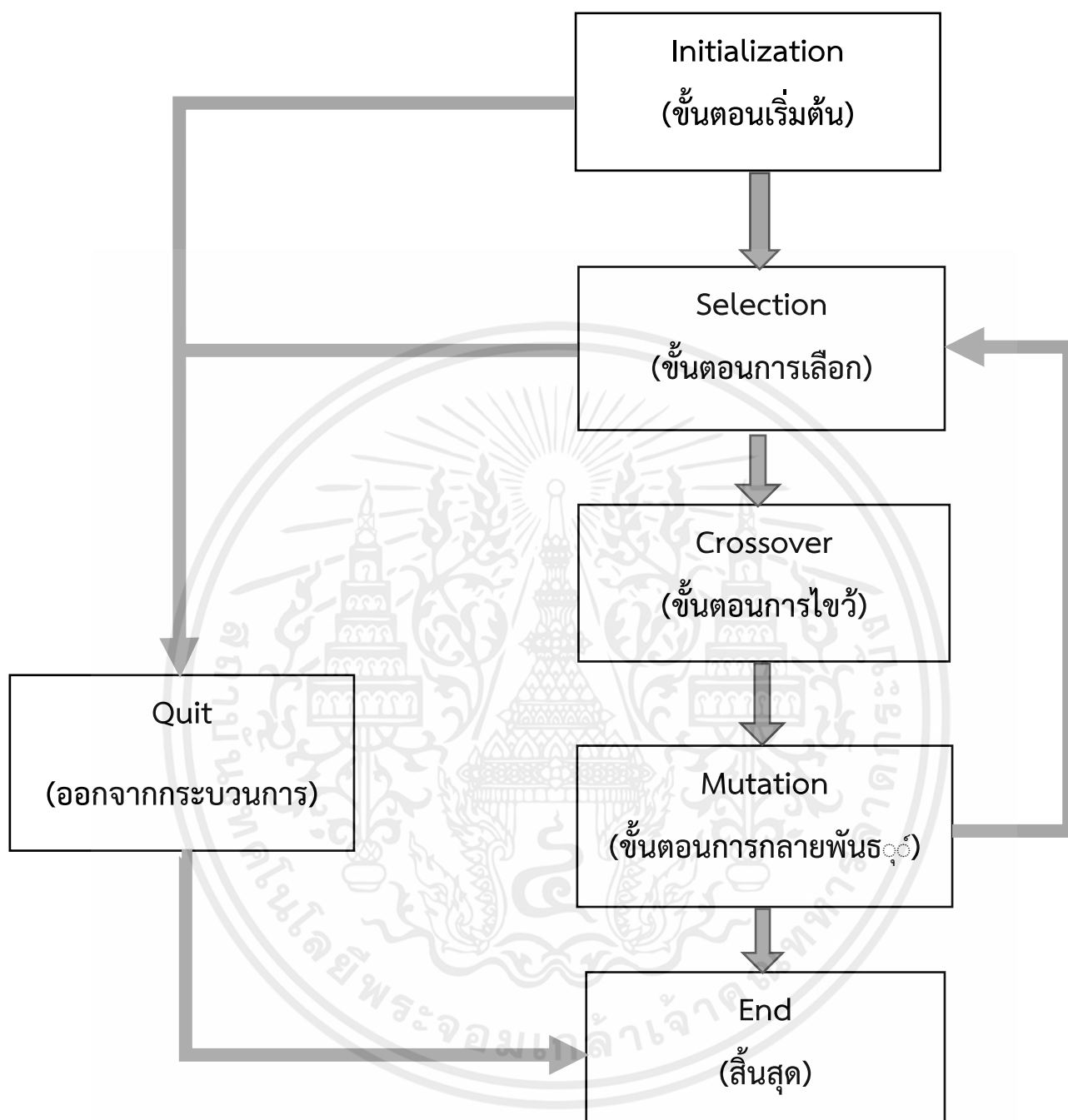
3.4 การประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm ร่วมกับ Machine Learning

จากข้างต้นที่แสดงให้เห็นถึงแบบจำลองการทำนายค่าจุดเดือด [2] และแบบจำลองทำนายค่าการละลาย[3,4] จะเป็นการใช้ Machine Learning เพื่อทำนายค่าคุณสมบัติของสารแต่ในอุตสาหกรรมทั่วไปนั้นจะเป็นการเลือกใช้ช่วงคุณสมบัติของสารเพื่อให้เหมาะสมกับกระบวนการซึ่งหากต้องการทำเช่นนั้นจะต้องทำการสร้างแบบจำลองใหม่แต่หากนำ Genetic Algorithm เข้ามาประยุกต์จะสามารถทำให้ใช้ได้จริงในอุตสาหกรรม โดยในการประยุกต์นี้จะทำการทำแยกกันของสองแบบจำลองโดย

3.4.1 การประยุกต์ในแบบจำลองการทำนายจุดเดือด

การประยุกต์ในแบบจำลองการทำนายคุณสมบัติจุดเดือด [2] จะเป็นการประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm โดยการป้อนค่าที่เงื่อนไขที่ต้องการคือช่วงจุดเดือดที่ต้องการ โดยกระบวนการทำงานจะเป็นดังภาพ

เงื่อนไข : ช่วงของจุดเดือดที่ต้องการ [ขอบล่างของช่วงจุดเดือด, ขอบบนของช่วงจุดเดือด]



รูปที่ 3.3 แสดงกระบวนการทำงานของ Genetic Algorithm

ร่วมกับแบบจำลองทำนายจุดเดือดและแบบจำลองทำนายค่าการละลาย

1. **Initialization (ขั้นตอนเริ่มต้น)** จะทำการป้อนค่าจุดเดือดที่ต้องการโดยในขั้นตอนนี้จะเป็นการ Random อย่างที่กล่าวไว้ในหัวข้อ 3.3 และจะทำการใช้แบบจำลองการทำนายค่าการละลายที่ ถูกปรับปรุงด้วย K-Fold Cross validation เพื่อทำนาย (Predict) ค่าจุดเดือดของ SMILES ที่ได้ จากการสุ่ม

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

2. **Selection (ขั้นตอนการเลือก)** เมื่อทำการทำนายค่าจุดเดือตมาแล้วจะทำการเลือก 100 ตัวแรกที่มีค่าความคลาดเคลื่อนน้อยที่สุดและตัดตัวที่เหลือทิ้งหมดออก
3. **Crossover (ขั้นตอนการไขว้)** จะนำผลลัพธ์ที่ได้จากการเลือกไว้ในขั้นตอน selection มาทำการไขว้กันในแต่ละตำแหน่งแบบสุ่มซึ่งอัตราการเกิดสารที่ไขว้กำหนดไว้เท่ากับ 40% และจำการไขว้ออกมาทั้งหมด 10,000 ผลลัพธ์และถ้าในขั้นตอนนี้มีผลลัพธ์ที่อยู่ในช่วงที่กำหนดจะทำการออกจากกระบวนการและได้แสดงคำตอบออกมาในรูปแบบค่า SMILES หากยังไม่ได้คำตอบจะดำเนินการขั้นตอนถัดไป
4. **Mutation (ขั้นตอนการกลายพันธุ์)** ในขั้นตอนนี้จะทำการสุ่มผลลัพธ์ที่ได้จากขั้นตอนการไขว้ 1 ตัวเพื่อทำการเปลี่ยนค่า SMILES ที่ตำแหน่งใดตำแหน่งหนึ่งและค่าใดค่าหนึ่ง แล้วทำการทำนายผลลัพธ์หากผลที่ได้ยังไม่อยู่ในช่วงที่กำหนดจะทำการวนซ้ำที่ขั้นตอน Selection ใหม่จนครบ 100 รอบ

3.4.2 การประยุกต์ในแบบจำลองการทำนายค่าการละลาย

การประยุกต์ในแบบจำลองการทำนายคุณสมบัติจุดเดือต [3,4] นั้นจะเป็นการประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm โดยการป้อนค่าที่ต้องการ (Input) ตัวอย่างของการป้อนค่าตามตารางที่ 3.4 โดยขั้นตอนการทำงานจะเป็นดังรูปที่ 3.3

ตารางที่ 3.4 แสดงตัวอย่างค่าเป้าหมายที่ต้องการในการประยุกต์แบบจำลองการทำนายค่าการละลาย

Input	Upper Bound	Lower Bound	Weight
Hansen Dispersion	15	10	0.3
Hansen H bond	3	1	0.4
Hansen Polarity	5	3	0.1
Log S	-1	-3	0.15
Log P	-1	-3	0.05

หากอ้างอิงจากภาพแสดงกระบวนการทำงานที่ 3.3 จะได้ว่า

1. **Initialization (ขั้นตอนเริ่มต้น)** จะทำการป้อนค่าเงื่อนไขที่ต้องการดังตารางที่ 3.4 ในขั้นตอนนี้จะเป็นการ Random อย่างที่กล่าวไว้ในหัวข้อ 3.3 และจะทำการใช้แบบจำลองการทำนายค่า

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

การละลายที่ถูกปรับปรุงด้วย K-Fold Cross validation เพื่อทำนาย (Predict) ค่าคุณสมบัติของ SMILES ที่ได้จากการสุ่ม

2. **Selection (ขั้นตอนการเลือก)** เมื่อทำการทำนายค่าคุณสมบัติแล้วจะทำการเลือก 100 ตัวแรกที่มีค่าความคลาดเคลื่อนน้อยที่สุดและตัดตัวที่เหลือทั้งหมดออก
3. **Crossover (ขั้นตอนการไขว้)** จะนำผลลัพธ์ที่ได้จากการเลือกไว้ในขั้นตอน selection มาทำการไขว้กันในแต่ละตำแหน่งแบบสุ่มซึ่งอัตราการเกิดสารที่ไขว้กำหนดไว้เท่ากับ 40% และจะทำการไขว้ออกมาทั้งหมด 10,000 ผลลัพธ์และถ้าในขั้นตอนนี้มีผลลัพธ์ที่อยู่ในช่วงที่กำหนดจะทำการออกจากกระบวนการและได้แสดงคำตอบออกมาในรูปแบบค่า SMILES หากยังไม่ได้คำตอบจะดำเนินการขั้นตอนถัดไป
4. **Mutation (ขั้นตอนการกลายพันธุ์)** ในขั้นตอนนี้จะทำการสุ่มผลลัพธ์ที่ได้จากขั้นตอนการไขว้ 1 ตัวเพื่อทำการเปลี่ยนค่า SMILES ที่ตำแหน่งใดตำแหน่งหนึ่งและค่าใดค่าหนึ่ง แล้วทำการทำนายผลลัพธ์หากผลที่ได้ยังไม่อยู่ในช่วงที่กำหนดจะทำการวนซ้ำที่ขั้นตอน Selection ใหม่จนครบ 100 รอบ

3.5 การวิเคราะห์ประสิทธิภาพของขั้นตอนเชิงพันธุกรรม

การวิเคราะห์ประสิทธิภาพของขั้นตอนเชิงพันธุกรรม ทำโดยวิเคราะห์ค่าสัมประสิทธิ์ผลต่างของค่าที่ต้องการและค่าที่ได้จากขั้นตอนเชิงพันธุกรรม (Absolute Error) ดังสมการที่ (3-1)

$$\text{Absolute Error} = |v_A - v_E| \quad (3-1)$$

เมื่อ v_A คือ ค่าจากการทำนาย
 v_E คือ ค่าที่กำหนด

เปอร์เซ็นต์ความคลาดเคลื่อน (Percentage Error) ค่าที่แสดงถึงเปอร์เซ็นต์ความแตกต่างของค่าที่ได้จากขั้นตอนเชิงพันธุกรรมและค่าที่ต้องการ โดยค่าที่กำหนดให้ยอมรับได้จะอยู่ในช่วง 0 ถึง 5% ดังสมการที่ (3-2)

$$\text{Percentage Error} = \left| \frac{v_A - v_E}{v_E} \right| \times 100\% \quad (3-2)$$

เมื่อ v_A คือ ค่าจากการทำนาย
 v_E คือ ค่าที่กำหนด

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ค่า R^2 (R-Squared) ค่าที่แสดง variance ของแบบจำลอง Machine Learning โดยค่าที่จะอยู่ในช่วงระหว่าง 0-1 ดังสมการที่ (3-3)

$$R^2 = 1 - \frac{\sum(V_E - V_A)^2}{(V_E - \bar{V}_A)^2} \quad (3-3)$$

เมื่อ V_A คือ ค่าจากการทำนาย
 V_E คือ ค่าที่กำหนด
 \bar{V}_A คือ ค่าเฉลี่ยของค่าจากการทำนาย

ค่าความคลาดเคลื่อนแบบ %MAPE (Mean Absolute Percentage Error) หาได้จากสมการที่ 3-4

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{t=1}^n \left| \frac{\phi_{exp} - \phi_{pred}}{\phi_{exp}} \right| \times 100 \quad (3-4)$$

เมื่อ n คือ จำนวนข้อมูล
 ϕ_{exp} คือ ค่าสัมประสิทธิ์ออสโมติกจากการทดลอง
 ϕ_{pred} คือ ค่าสัมประสิทธิ์ออสโมติกจากการทำนาย

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
 ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 4

ผลการดำเนินงาน

จากการดำเนินงานจะสามารถแสดงผลการทดลองได้ตามหัวข้อดังนี้

4.1 ผลการปรับปรุงแบบจำลองด้วย K-Fold Cross Validation

โดยการปรับปรุงแบบจำลองการทำนายค่าการละลายจะเป็นไปตามตารางที่ 4.1

ตารางที่ 4.1 ตารางเปรียบเทียบก่อนและหลังปรับปรุงแบบจำลองการทำนายค่าจุดเดือด

Metric	Before K-fold			After K-fold		
	Training	Test	Total	Training	Test	Total
R2	0.980	0.984	0.981	0.991	0.977	0.991
RMSE	8.354	7.924	8.340	5.591	8.729	5.559
MAPE	0.016	0.015	0.016	0.010	0.016	0.014

จากภาพจะเห็นได้ว่าในแบบจำลองการทำนายค่าจุดเดือดโดยพิจารณาที่ค่า R^2 ก่อนทำการปรับปรุงแบบจำลองด้วย K-Fold Cross Validation นั้นแบบจำลองมีค่า R^2 ของ Training Set อยู่ที่ 0.980 และ Test Set อยู่ที่ 0.984 และ Training Set + Test Set อยู่ที่ 0.981 หลังจากปรับปรุงด้วยวิธีการ K-Fold Cross Validation ค่า R^2 ของ Training Set อยู่ที่ 0.991 มีประสิทธิภาพดีขึ้น 1.1 % และ Test Set อยู่ที่ 0.977 มีประสิทธิภาพลดลง 0.7% และ Training Set + Test Set อยู่ที่ 0.991 ดีขึ้น 1 % จากการพิจารณาผลที่ได้จะเห็นว่าการทำงาน K-Fold Cross Validation ส่งผลให้แบบจำลองมีประสิทธิภาพดีขึ้นเพียงเล็กน้อยดังนั้นการทำการปรับปรุงด้วย K-Fold Cross Validation จึงไม่จำเป็นในแบบจำลองที่มีประสิทธิภาพในการทำนายสูง

4.2 ผลการประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm ร่วมกับ Machine Learning

4.2.1 ผลการดำเนินงานด้วย Genetic Algorithm ของแบบจำลองทำนายจุดเดือด

ตารางที่ 4.2 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากแบบจำลองทำนายจุดเดือด

Range (K)	Iteration	C	Double	Triple	Branch	Cyclic	Predict T_b (K)	Error (%)
200-205	100	2	0	0	0	0	188.45	5.775
250-255	100	3	0	1	0	0	249.95	0.02

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้คัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Range (K)	Iteration	C	Double	Triple	Branch	Cyclic	Predict T _b (K)	Error (%)
300-305*	1	4	0	1	0	0	300.05	0
350-355*	1	7	1	0	3	0	351.05	0
400-405*	1	8	2	0	0	1	403.58	0
450-455*	1	12	1	0	5	0	453.15	0

*ผลลัพธ์เพิ่มเติมสามารถดูได้ที่ภาคผนวก ค. ถึง ช.

จากการดำเนินการในช่วง 200-205 K และ 250-255 K ได้ใช้จำนวนรอบในการวนซ้ำทั้งหมด 100 รอบโดยสารที่ได้ออกมานั้นจะมีเพียงค่าเดียวและมีค่าความคลาดเคลื่อนอยู่ในช่วงของค่าที่ยอมรับได้คือ 5.775 และ 0.02 ตามลำดับ และช่วงตั้งแต่ 300-305 K จนถึง 450-455 K จะเห็นได้ว่าใช้จำนวนรอบในการวนซ้ำเพียง 1 รอบและมีค่าความคลาดเคลื่อนเท่ากับศูนย์ ซึ่งทำให้มีผลลัพธ์ที่เป็นไปได้มากกว่า 1 ค่าสามารถดูเพิ่มเติมได้ที่ภาคผนวก ค. ถึง ช.

จากจำนวนรอบในการวนซ้ำและจำนวนผลลัพธ์ที่แสดงดังตารางที่ 4.2 จะเห็นได้ว่าจำนวนการวนซ้ำ ค่าความคลาดเคลื่อนและจำนวนผลลัพธ์เกี่ยวข้องกันเมื่อจำนวนรอบในการวนซ้ำน้อย หมายถึงว่าสามารถหาค่าที่ตรงตามช่วงอุณหภูมิจุดเดือดที่กำหนดได้ถูกต้องตั้งแต่ในขั้นตอนแรกเริ่มของกระบวนการ Genetic Algorithm ในทางกลับกันเมื่อสามารถหาค่าที่อยู่ในช่วงต้องการได้เร็วขึ้นนั้น อาจจะมีมากกว่า 1 ผลลัพธ์

4.2.2 ผลการดำเนินงานด้วย Genetic Algorithm ของแบบจำลองการละลาย

แบบจำลองทำนายค่าการละลายต้องป้อนช่วงของสารที่สมบัติสาร (Properties) ที่ต้องการทั้งหมด 5 ตัวประกอบด้วย Hansen Dispersion, Hansen H bond, Hansen Polarity, Log S, Log P โดยตัวอย่างของการป้อนเป็นดังตาราง

4.2.2.1 ผลการจำลองเมื่อตั้งค่าน้ำหนักทั้ง 5 ตัว

ตารางที่ 4.3 เงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัว

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	10	1	3	-3	-3
Upper	15	3	5	-1	-1
Weight	0.05	0.15	0.1	0.4	0.3

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.4 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัว

Iteration	C	Double	Triple	Branch	Benzene	Cycle	SingleCO	DoubleCO
100	12	1	1	2	0	0	0	3

ตารางที่ 4.5 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัว

Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
-3.42	-0.02	2.90	16.60	9.80	0.027

จากการดำเนินการได้ทำการวนซ้ำทั้งหมด 100 รอบโดยสารที่ได้ออกมานั้นมี SMILES ประกอบด้วยคาร์บอน 12 อะตอมโดยค่าคุณสมบัติที่ได้จะเป็นไปตามตารางที่ได้จากการดำเนินงาน เมื่อทำการหาค่า MAPE (Mean Absolute Percentage Error) จะมีค่าเท่ากับ 0.0267 % ซึ่งอยู่ในช่วงที่ยอมรับได้และในการดำเนินการครั้งนี้และสามารถดูการดำเนินการเพิ่มเติมได้ที่ภาคผนวก ฉ. ถึง ก.

4.2.2.2 ผลการจำลองเมื่อตั้งค่าน้ำหนักทั้ง 3 ตัวครั้งที่ 1

แบบจำลองทำนายค่าการละลายต้องป้อนช่วงของสารที่สมบัติสาร (Properties) ที่ต้องการทั้งหมด 3 ตัวประกอบด้วย Hansen Polarity, Log S, Log P โดยตัวอย่างของการป้อนเป็นดังตาราง

ตารางที่ 4.6 เงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	10	1	3	0	-1
Upper	15	3	5	2	1
Weight	0	0	0.25	0.35	0.4

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.7 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1

Iteration	C	Double	Triple	Branch	Benzene	Cycle	SingleCO	DoubleCO
1	5	0	1	2	0	0	0	0
	6	0	1	1	0	0	3	0
	11	1	1	0	0	0	3	0
	11	0	4	0	0	0	3	0
	12	0	3	0	0	1	3	0
	11	0	0	0	0	0	3	0
	5	0	2	0	0	0	0	0
	7	0	0	0	0	0	1	2
	12	1	1	0	0	0	3	0
	7	0	1	0	0	0	1	2

ตารางที่ 4.8 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1

Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
0.896	0.12	3.80	15.20	13.3	0
0.985	1.08	4.90	15.30	9.60	0
1.34	0.83	4.60	15.80	6.00	0
1.34	0.83	4.60	15.80	7.10	0
1.34	0.83	3.40	16.65	7.10	0
1.34	0.83	4.60	15.80	7.10	0
1.5275	0.085	3.80	15.40	5.40	0
0.21	0.846	5.00	16.80	10.50	0
1.34	0.83	4.60	15.80	6.00	0
0.21	0.846	5.00	16.80	10.50	0

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

จากการดำเนินการได้ทำการวนซ้ำทั้งหมด 1 รอบโดยสารที่ได้ออกมานั้นมี SMILES และค่าคุณสมบัติที่ได้จะเป็นไปตามตารางที่ได้จากการดำเนินงาน เมื่อทำการหาค่า MAPE (Mean Absolute Percentage Error) จะมีค่าเท่ากับ 0 %

4.2.2.3 ผลการจำลองเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2

แบบจำลองทำนายค่าการละลายต้องป้อนช่วงของสารที่สมบัติสาร (Properties) ที่ต้องการทั้งหมด 3 ตัวประกอบด้วย Hansen Polarity, Log S, Log P โดยตัวอย่างของการป้อนเป็นดังตาราง

ตารางที่ 4.9 เงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	16	5	7	-3	-3
Upper	18	7	9	-1	-1
Weight	0.25	0.25	0	0	0.5

ตารางที่ 4.10 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2

Iteration	C	Double	Triple	Branch	Benzene	Cycle	SingleCO	DoubleCO
100	8	0	0	0	0	0	2	0

ตารางที่ 4.11 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2

Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
-1.51	-3.035	3.75	15.60	6.20	0.008

จากการดำเนินการได้ทำการวนซ้ำทั้งหมด 100 รอบโดยสารที่ได้ออกมานั้นมี SMILES ประกอบด้วยคาร์บอน 8 อะตอมโดยค่าคุณสมบัติที่ได้จะเป็นไปตามตารางที่ได้จากการดำเนินงาน เมื่อทำการหาค่า MAPE (Mean Absolute Percentage Error) จะมีค่าเท่ากับ 0.008 % ซึ่งอยู่ในช่วงที่ยอมรับได้ และสามารถดูผลการดำเนินการเพิ่มเติมได้ที่ ได้ที่ภาคผนวก ฎ. ถึง ฐ.

4.2.2.4 ผลการจำลองเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัว

แบบจำลองทำนายค่าการละลายต้องป้อนช่วงของสารที่สมบัติสาร (Properties) ที่ต้องการทั้งหมด 2 ตัวประกอบด้วย Log S, Log P โดยตัวอย่างของการป้อนเป็นดังตาราง

ตารางที่ 4.12 เงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัว

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	14	3	2	-2	-2
Upper	16	5	5	0	0
weight	0	0	0	0.4	0.6

ตารางที่ 4.13 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัว

Iteration	C	Double	Triple	Branch	Benzene	Cycle	SingleCO	DoubleCO
1	6	1	1	1	0	0	0	0
	7	0	0	3	0	0	4	0
	6	1	0	2	0	0	1	0
	6	1	0	0	0	0	1	0
	9	0	0	0	0	0	9	0
	10	0	0	0	0	0	10	0
	6	2	0	1	0	0	1	0
	8	0	0	4	0	0	0	2
	6	0	0	1	0	1	0	0

ตารางที่ 4.14 แสดงผลลัพธ์เมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัว

Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
-1.55	-0.36	4.10	15.00	7.10	0
-0.035	-1.61	6.10	16.10	110	0

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
-1.55	-0.36	6.10	15.00	7.10	0
-1.55	-0.36	7.50	16.30	13.80	0
-0.62	-0.60	4.80	15.00	15.10	0
-0.62	-0.60	4.00	15.00	15.10	0
-1.55	-0.36	5.00	14.90	7.10	0
-1.056	-0.29	3.35	17.10	10.70	0
-0.44	-0.04	7.85	17.35	13.55	0

จากการดำเนินการได้ทำการวนซ้ำทั้งหมด 1 รอบโดยสารที่ได้ออกมานั้นมี SMILES ประกอบด้วยคาร์บอน 6 อะตอม 4 ตัว คาร์บอน 7 อะตอม โดยค่าคุณสมบัติที่ได้จะเป็นไปตามตารางที่ได้จากการดำเนินงาน เมื่อทำการหาค่า MAPE (Mean Absolute Percentage Error) จะมีค่าเท่ากับ 0 % สามารถดูผลการดำเนินการเพิ่มเติมได้ที่ภาคผนวก ค. ถึง ด.

จากแบบจำลองทำนายการละลายตั้งแต่การกำหนดค่าน้ำหนัก 5 3 และ 2 ตัว ตามลำดับ แสดงให้เห็นว่าหากกำหนดค่าน้ำหนักครบทั้ง 5 ตัวจะใช้จำนวนรอบในการวนซ้ำมากถึง 100 รอบในทุกการดำเนินการตั้งผลลัพธ์ในตารางที่ 4. และภาคผนวก ข. ถึง ค. หากกำหนดค่าน้ำหนัก 3 ตัว จำนวนรอบในการวนซ้ำมีตั้งแต่ 1-100 รอบ จำนวนผลลัพธ์ที่ได้ออกมามีทั้งผลลัพธ์เดียวและมากกว่า และหากกำหนดค่าน้ำหนัก 2 ตัว จำนวนรอบในการวนซ้ำจะมีเพียง 1 รอบ จำนวนผลลัพธ์ที่ได้ออกมามีจำนวนมากกว่า 1 ผลลัพธ์ในทุกการดำเนินการ แสดงให้เห็นว่าจำนวนการตั้งค่าน้ำหนักในแบบจำลองทำนายค่าการละลายส่งผลต่อจำนวนรอบและจำนวนผลลัพธ์ของการดำเนินการ เนื่องจากการกำหนดค่าน้ำหนักหลายค่าหรือครบทุกค่าเป็นการช่วยลดขอบเขตในการดำเนินการของแบบจำลองและหากกำหนดค่าน้ำหนักน้อยจะส่งผลให้ขอบเขตของแบบจำลองกว้างและทำให้มีจำนวนผลลัพธ์หลายค่าแต่จำนวนรอบที่ใช้ในการวนซ้ำก็จะน้อยลงด้วย

4.3 การวิเคราะห์ประสิทธิภาพของ Genetic Algorithm

4.3.1 การเปรียบเทียบระหว่างขั้นตอน

ตารางที่ 4.15 ผลการเปรียบเทียบระหว่างขั้นตอนของแบบจำลองจุดเดือด

Range (K)	Average Initialization Error (%)	Average Selection Error (%)	Average Crossover Error (%)	Average Mutate Error (%)
200-205	107.52	29.45	28.32	5.78
250-255	67.55	6.64	12.57	0.02
300-305	41.33	7.66	-	-
350-355	24.72	2.39	-	-
400-405	14.97	1.27	-	-
450-455	12.00	0.70	-	-

จากตารางที่ 4.15 จะเห็นได้ว่าการประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm ในแบบจำลองทำนายจุดเดือด จะเห็นได้ว่าในทุกช่วงของอุณหภูมิจุดเดือดที่ได้จากการดำเนินการในขั้นตอนแรก (Initialization) จะได้ค่าเฉลี่ยความคลาดเคลื่อนที่สูงจากนั้นในขั้นตอนถัดมา (Selection) จะเห็นได้ว่าค่าเฉลี่ยความคลาดเคลื่อนมีค่าลดลงและในขั้นตอน Crossover และ Mutate ค่าเฉลี่ยความคลาดเคลื่อนมีแนวโน้มลดลงจนเกือบเท่ากับศูนย์ในบางช่วงของอุณหภูมิจุดเดือดที่กำหนดทำให้สามารถสรุปได้ว่าการประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm ในแบบจำลองทำนายจุดเดื่อนั้นในแต่ละขั้นตอนของกระบวนการ Genetic Algorithm ส่งผลให้เข้าใจค่าที่ต้องการได้มากขึ้น

ตารางที่ 4.16 ผลการเปรียบเทียบระหว่างขั้นตอนของแบบจำลองการละลาย

Number of Condition	Round	Average Initialization Error (%)	Average Selection Error (%)	Average Crossover Error (%)	Average Mutate Error (%)
5	1	15.63	4.32	12.36	2.24
	2	16.92	2.32	8.95	2.81
	3	24.91	2.28	13.99	6.80
3	1	5.16	2.94	-	-
	2	33.34	4.85	19.87	3.51
	3	8.03	2.18	8.18	2.55

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้คัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

Number of Condition	Round	Average Initialization Error (%)	Average Selection Error (%)	Average Crossover Error (%)	Average Mutate Error (%)
2	1	4.48	4.98	-	-
	2	6.30	0.35	-	-
	3	29.81	0.15	-	-

จากตารางที่ 4.16 จะเห็นได้ว่าการประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm ในแบบจำลองทำนายค่าการละลายจะเห็นได้ว่าไม่ว่าการตั้งค่าจำนวนน้ำหนัก 5 3 หรือ 2 ตัวก็ตามผลที่ได้จากการดำเนินการในขั้นตอนแรก (Initialization) จะได้ค่าเฉลี่ยความคลาดเคลื่อนที่สูงจากนั้นในขั้นตอนถัดมา (Selection) จะเห็นได้ว่าค่าเฉลี่ยความคลาดเคลื่อนมีค่าลดลงและในขั้นตอน Crossover และ Mutate ค่าเฉลี่ยความคลาดเคลื่อนมีแนวโน้มลดลงจนเกือบเท่ากับศูนย์ทำให้สามารถสรุปได้ว่าการประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm ในแบบจำลองทำนายการละลายนั้นในแต่ละขั้นตอนของกระบวนการ Genetic Algorithm ส่งผลให้เข้าใกล้ค่าที่กำหนดได้มากขึ้น

4.3.2 เปรียบเทียบเวลาที่ใช้ในการดำเนินการ

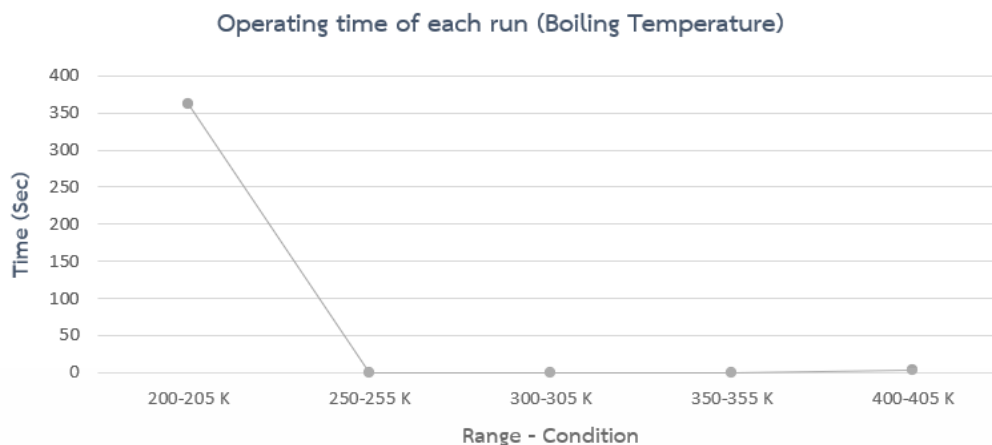
4.3.2.1 แบบจำลองการทำนายจุดเดือด

จากผลลัพธ์ในการดำเนินการด้วย Genetic Algorithm ของแบบจำลองทำนายค่าจุดเดือดจะเห็นได้ว่าในช่วง 200-205 และ 250-255 K หรือช่วงที่อุณหภูมิต่ำกว่า 273 K จะใช้เวลาในการดำเนินการมากกว่าช่วงอื่นเนื่องจากกระบวนการในรอบแรก (First Iteration) ไม่สามารถค้นพบสารในช่วงที่กำหนดและใช้เวลาในการดำเนินการจนครบ 100 รอบจึงใช้เวลาในการดำเนินการนาน

ตารางที่ 4.17 เปรียบเทียบระยะเวลาที่ใช้ในการดำเนินการในแบบจำลองทำนายค่าจุดเดือด

Range (K)	Time (Sec)
200-205	295.22
250-255	361.49
300-305	0.11
350-355	0.10
350-355	0.08
350-355	2.57

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 4.1 กราฟแสดงระยะเวลาที่ใช้ในการดำเนินการของแบบจำลองทำนายค่าจุดเดือด

สามารถสรุปได้ว่าสารไฮโดรคาร์บอนที่มีจุดเดือดต่ำกว่า 273 K มีจำนวนสารไฮโดรคาร์บอนที่เป็นไปได้น้อยในช่วงที่กำหนดจึงใช้เวลาในการดำเนินการเป็นเวลานาน

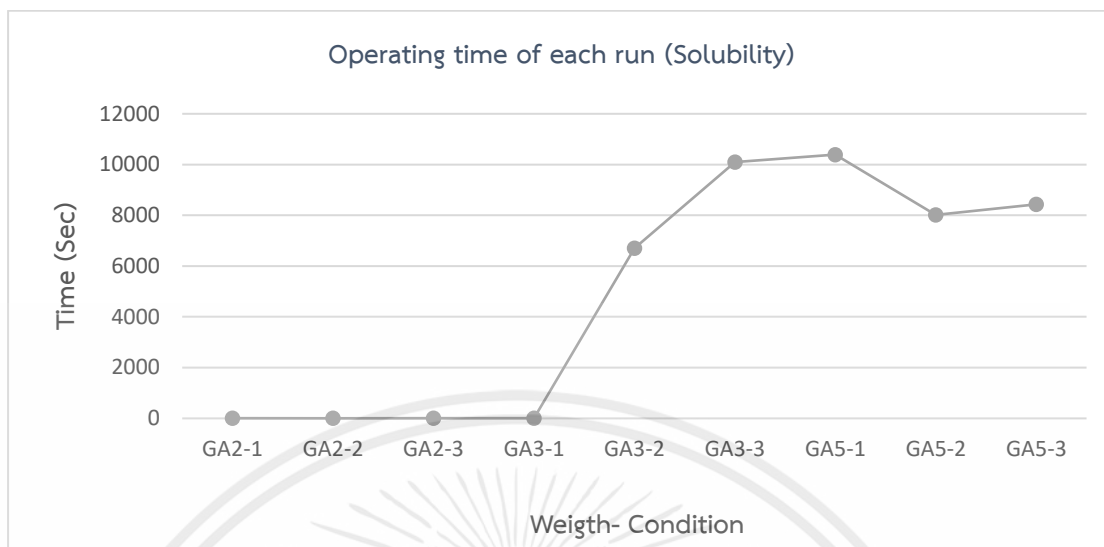
4.3.2.2 แบบจำลองทำนายค่าการละลาย

จากผลลัพธ์ในการดำเนินการด้วย Genetic Algorithm ของแบบจำลองทำนายค่าการละลายจะเห็นได้ว่าการตั้งค่าน้ำหนักที่ 2 และ 3 ครั้งที่ 5 นั้นจะใช้เวลาในการดำเนินการมากกว่าช่วงอื่นเพราะไม่สามารถค้นพบสารในช่วงที่กำหนดและใช้เวลาในการดำเนินการจนครบ 100 นอกจากนี้เวลาในการดำเนินการยังมากกว่าแบบจำลองทำนายจุดเดือดอย่างมากเนื่องจากแบบจำลองใช้เวลาในการดำเนินการในแต่ละรอบนานกว่ามากจึงทำให้เวลาดำเนินการรวมมีค่าสูง

ตารางที่ 4.18 เปรียบเทียบระยะเวลาที่ใช้ในการดำเนินการในแบบจำลองทำนายค่าการละลาย

Number of Condition	Round	Time (Sec)
2	1	4.49
	2	3.59
	3	4.92
3	1	8.46
	2	6703.25
	3	10095.26
5	1	10392.04
	2	8022.41
	3	8426.70

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



รูปที่ 4.2 กราฟแสดงระยะเวลาที่ใช้ในการดำเนินการของแบบจำลองทำนายค่าการละลาย

สามารถสรุปได้ว่าเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 และ 5 ตัว จะสามารถค้นหาสารที่ตรงกับเงื่อนไขได้ยากจึงทำให้การดำเนินการใช้เวลานาน

4.4 ผลที่ได้จากการนำ SMILES ที่ได้ไปค้นหาสาร

ตารางที่ 4.19 ผลที่ได้จากการนำ SMILES จากแบบจำลองทำนายจุดเดือดเพื่อค้นหาสาร

Range (K)	SMILES	Name	Formula
200-205	CC	Ethane	C ₂ H ₆
250-255	CC#C	1-Propyne	C ₃ H ₄
300-305	CC#CC	2-Butyne	C ₄ H ₆
350-355	CC(=C)C(C)C	2,3,3-Trimethyl-1-butene	C ₁₅ H ₃₆
400-405	C=CC1CCC=CC1	4-Vinyl-1-Cyclohexene	C ₈ H ₁₂
450-455	CC1=CCC(CC1)C(=C)C	Cyclohexene,1-methyl-4-(1-methylethenyl)-	C ₁₀ H ₁₆

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ 4.20 ผลที่ได้จากนำ SMILES จากแบบจำลองทำนายการละลายเพื่อค้นหาสาร

Number of Condition	Round	SMILES	Name	Formula
5	1	<chem>CCCCOC(=O)C=CC(=O)OCCCC</chem>	Dibutyl Fumarate	$C_{12}H_{20}O_4$
3	1	<chem>CC(C)(C#C)O</chem>	2-Methyl-3-butyn-2-OL	C_5H_8O
	2	<chem>CCOCCOCCOCC</chem>	Diethylene glycol diethyl ether	$C_8H_{18}O_3$
2	1	<chem>CCCCOCC</chem>	Butyl ethyl ether	$C_6H_{14}O$

หากพิจารณาผลที่ได้จากการดำเนินการด้วย Genetic Algorithm จะเห็นได้ว่าในช่วงอุณหภูมิจุดเดือดต่างๆ ของสารในแบบจำลองทำนายการละลายและทุกการตั้งค่าน้ำหนักเพื่อป้อนในแบบจำลองทำนายการละลายไม่ว่าจะ 2 3 หรือ 5 ตัว เพื่อใช้ในการค้นหา สามารถนำไปใช้เพื่อทำการสืบค้นลักษณะของสารทั้งรูปแบบการเรียงกันของโมเลกุล โครงสร้างสามมิติ รวมถึงสูตรทางเคมี โดยในที่นี้ในแบบจำลองการทำนายค่าจุดเดือดได้นำทุก SMILES ที่เป็นผลลัพธ์มาใช้เพื่อค้นหาแต่ในแบบจำลองทำนายการละลายนั้นได้ยกตัวอย่างมาเพียงบางตัวเท่านั้นเนื่องจากผลที่ได้จากแบบจำลองทำนายการละลายมีมากถึง 44 ตัวทำให้ในการใช้จริงจะเป็นการใช้เพียงบางตัวเท่านั้นจึงนำมายกตัวอย่างดังตาราง การประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm นี้สามารถนำไปใช้ได้จริงในอุตสาหกรรมเพื่อลดระยะเวลาทดลองเพื่อหาคุณสมบัติสารที่เป็นไปตามต้องการรวมถึงลดขอบเขตในการทดลอง

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

บทที่ 5

สรุปผลการวิจัยและข้อเสนอแนะ

5.1 สรุปผลการวิจัย

งานวิจัยที่ผ่านมาเสนอให้เห็นถึงความสามารถของการใช้ Machine Learning เพื่อทำนายคุณสมบัติของสารอินทรีย์ได้อย่างแม่นยำกว่าวิธีดั้งเดิม (Conventional Method) อย่าง QSPR โดยในงานวิจัยนี้ได้นำแบบจำลองมาปรับปรุงด้วยวิธีการ K-Fold Cross Validation ทำให้แบบจำลองทำนายการละลายนั้นมีประสิทธิภาพที่สูงขึ้น อย่างไรก็ตามถึงแม้ว่าการทำนายของ Machine Learning จะมีประสิทธิภาพสูงแต่การนำไปปรับใช้ในอุตสาหกรรมสามารถทำได้ยาก ในงานวิจัยนี้จึงได้นำเสนอการประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm ซึ่งเป็นกระบวนการที่นำมาใช้ร่วมกับแบบจำลองการทำนายเพื่อหาค่าคุณสมบัติที่ต้องการได้อย่างแม่นยำ

โดยในงานวิจัยนี้ได้เลือกแบบจำลองการทำนายมาสองแบบจำลองคือแบบจำลองทำนายจุดเดือดซึ่งปรับปรุงด้วย K-Fold Cross validation และแบบจำลองการทำนายค่าการละลาย ในแบบจำลองทำนายค่าจุดเดือดนั้นการประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm จะเป็นการป้อนค่าขอบบนและขอบล่างของช่วงจุดเดือดที่ต้องการค้นหาในงานวิจัยนี้ได้แบ่งช่วงของจุดเดือดออกเป็น 6 ช่วง จากผลการวิจัยจะเห็นได้ว่าในการนำแบบจำลองทำนายค่าจุดเดือดนั้นสามารถค้นหาสารโดยใช้เวลาในการดำเนินการไม่นานและได้ผลลัพธ์ที่มีค่าคลาดเคลื่อนต่ำจนถึงศูนย์ (MAPE) แบบจำลองทำนายค่าการละลายนั้น ในส่วนของแบบจำลองทำนายค่าการละลายจะเป็นการป้อนค่าขอบบนและขอบล่างของ Properties ที่ต้องการซึ่งประกอบด้วย Hansen Dispersion, Hansen H Bond, Hansen Polarity, Log S, Log P และต้องป้อนค่าน้ำหนัก (Weight) ตามความสำคัญของ Properties ที่ต้องการโดยในงานวิจัยนี้ได้ทำการแบ่งการป้อนค่าเป็นสามรูปแบบและดำเนินการรูปแบบละสามครั้ง โดยในรูปแบบที่ 1 จะทำการป้อน properties ทั้ง 5 ตัว ผลที่ได้จากรูปแบบที่ 1 นั้นใช้เวลาในการดำเนินการที่นานถึง 2 ชั่วโมงและทั้งสามครั้งใช้การวนซ้ำทั้งหมด 100 รอบและผลลัพธ์ที่ได้ออกมานั้นมีค่าคลาดเคลื่อนน้อยจนเกือบถึงศูนย์ ค่า SMILES ที่ออกมาจะมีเพียงค่าเดียว ในรูปแบบที่ 2 จะทำการป้อน properties 3 ตัว ผลที่ได้จากรูปแบบที่ 2 นั้นใช้เวลาในการดำเนินการที่นานถึง 1-2 ชั่วโมงและในครั้งที่ 1 ใช้การวนซ้ำเพียง 1 รอบและผลลัพธ์ที่ได้ออกมานั้นมีค่าคลาดเคลื่อนเท่ากับศูนย์ ค่า SMILES ที่ออกมา 10 ค่า ในครั้งที่ 2 และ 3 ใช้การวนซ้ำทั้งหมด 100 รอบ ค่า SMILES ที่ออกมามีเพียง 1 ค่า ในรูปแบบที่ 3 จะทำการป้อน properties 2 ตัว ผลที่ได้จากรูปแบบที่ 3 นั้นใช้เวลาในการดำเนินการเพียงหลักวินาที และทั้ง 3 ครั้ง ใช้การวนซ้ำเพียง 1 รอบและผลลัพธ์ที่ได้ออกมานั้นมี

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้าไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ค่าคลาดเคลื่อนเท่ากับศูนย์ ค่า SMILES ที่ออกมาในครั้งที่ 1 มีทั้งหมด 9 ค่า ในครั้งที่ 2 ค่า SMILES ที่ออกมามีทั้งหมด 44 ค่า และในครั้งที่ 3 ค่า SMILES ที่ออกมามีเพียง 40 ค่า จากผลลัพธ์ทั้งหมดที่ได้จากการวิจัยแสดงให้เห็นว่าเมื่อการป้อนค่าเริ่มต้นด้วยจำนวน Properties ที่น้อยทำให้การดำเนินการทำได้เร็วแต่ในทางกลับกันผลลัพธ์ที่ออกมานั้นมีหลากหลายตั้งแต่ 1-44 ตัว แต่หากทำการป้อนค่าเริ่มต้นด้วย Properties ที่มากจะใช้เวลาดำเนินการนานแต่ผลลัพธ์ที่ได้ออกมานั้นจะมีเพียงค่าเดียวซึ่งจะได้ผลลัพธ์ที่เฉพาะเจาะจง รวมถึงผลลัพธ์ที่ได้สามารถนำไปค้นหาลักษณะการจัดเรียงตัวของโมเลกุล สูตรโครงสร้าง และชื่อสารได้อย่างถูกต้อง

5.2 ข้อเสนอแนะ

1. แบบจำลองการทำนายค่าจุดเดือดและแบบจำลองทำนายค่าการละลายที่นำมาประยุกต์ใช้ร่วมกับ Genetic Algorithm ในงานวิจัยนี้ Algorithm หลักมีเพียง Decision Tree ในการทำนายค่านี้จึงให้ผลที่ค่อนข้างไม่หลากหลายเนื่องจากใช้ Algorithm เพียงตัวเดียวหากจะให้งานวิจัยนี้มีความหลากหลายในการค้นหาสารมากขึ้นอาจจะลองใช้หลากหลาย Algorithm อย่าง Polynomial Regression , Random Forest , Gaussian Process และอื่นๆ ทดลองดูอีกด้วย
2. ในงานวิจัยนี้ในส่วนของ การประยุกต์ใช้ Genetic Algorithm ในแบบจำลองการทำนายค่าการละลายใช้เวลาในการดำเนินการค่อนข้างนาน สิ่งที่ส่งผลให้ดำเนินการนานมาจากการกำหนดน้ำหนักของค่าที่ต้องการป้อนหลายตัวหากทำการป้อนค่าน้ำหนักทั้ง 5 ตัวจะดำเนินการถึง 2 ชั่วโมงในส่วนนี้ควรมีการปรับปรุงอาจจะเป็นการเลือกใช้ Algorithm อื่นๆที่สามารถทำนายค่าได้รวดเร็วกว่าหรือการป้อนค่าน้ำหนักเฉพาะที่จำเป็นในการใช้งาน

เอกสารอ้างอิง

- [1] I. Oprisiu, G. Marcou, D. Horvath, D.B. Brunel, F. Rivollet, A. Varnek, Publicly available models to predict normal boiling point of organic compounds, *Thermochim Acta*. 553 (2013) 60–67. <https://doi.org/10.1016/J.TCA.2012.11.024>.
- [2] N. Chorbngam, R. Chawuthai, A. Anantpinijwatna, Novel method for properties prediction of pure organic compounds using machine learning, *Computer Aided Chemical Engineering*. 50 (2021) 431–437. <https://doi.org/10.1016/B978-0-323-88506-5.50068-1>.
- [3] Chayanis T, Chumpunut S, Solubilities Prediction of Oxygenated Organic Compounds Using Novel Statistical-based Method, 2021.
- [4] Suwijak S, Ananya N, Prediction of Osmotic and Activity Coefficients of Alkyl Ammonium in Aqueous Solution with Machine Learning, 2021.
- [5] Hydrocarbons - Types, Classification, Properties, Preparation, Uses, (n.d.). <https://byjus.com/jee/hydrocarbons/> (accessed November 30, 2022).
- [6] D. Weininger, SMILES, a chemical language and information system. 1. Introduction to methodology and encoding rules, *J Chem Inf Comput Sci*. 28 (2002) 31–36. <https://doi.org/10.1021/ci00057a005>.
- [7] Machine Learning | An Introduction | by Gavin Edwards | Towards Data Science, (n.d.). <https://towardsdatascience.com/machine-learning-an-introduction-23b84d51e6d0> (accessed November 30, 2022).
- [8] scikit-learn: machine learning in Python — scikit-learn 1.1.3 documentation, (n.d.). <https://scikit-learn.org/stable/> (accessed December 3, 2022).
- [9] A.J. Smola, B. Schölkopf, A tutorial on support vector regression, *Stat Comput*. 14 (2004) 199–222. <https://doi.org/10.1023/B:STCO.0000035301.49549.88>.

เอกสารอ้างอิง (ต่อ)

- [10] Genetic Algorithms คืออะไร??[พร้อมตัวอย่างและโค้ด] | by Krittamet Kotawong | Medium, (n.d.). <https://krittamet-project.medium.com/genetic-algorithms-genetic-algorithms-คืออะไร-พร้อมตัวอย่างและโค้ด-57c41fbac251> (accessed November 28, 2022).
- [11] Y. Kwon, S. Kang, Y.S. Choi, I. Kim, Evolutionary design of molecules based on deep learning and a genetic algorithm, Scientific Reports 2021 11:1. 11 (2021) 1–11. <https://doi.org/10.1038/s41598-021-96812-8>.



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้



ภาคผนวก

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า ไม่ว่าจะกรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ตัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ภาคผนวก ก. ผลที่ได้จากการปรับปรุงแบบจำลองด้วย K-Fold Cross Validation



เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

ตารางที่ ก.1 ผลที่ได้จากการปรับปรุงแบบจำลองทำนายค่าจุดเดือดด้วย K-fold Cross Validation

Index	Name	SMILES	Reference	Predict
1	methane	C	111.65	111.65
2	ethane	CC	184.55	184.55
3	propane	CCC	231.05	225.55
4	Cyclopropane	C1CC1	240.35	240.35
5	2-Methylpropane	CC(C)C	261.45	261.45
6	n-butane	CCCC	272.65	272.65
7	Methylcyclopropane	CC1CC1	273.85	285.75
8	2,2-Dimethylpropane	CC(C)(C)C	282.55	282.55
9	Cyclobutane	C1CCC1	285.75	285.75
10	1,1-Dimethylcyclopropane	CC1(CC1)C	293.75	303.0833
11	2-Methylbutane	CCC(C)C	300.95	303.0833
12	trans-1,2-Dimethylcyclopropane	CC1CC1C	301.35	310.575
13	Ethylcyclopropane	CCC1CC1	309.05	310.575
14	n-pentane	CCCCC	309.15	309.15
15	Methylcyclobutane	CC1CCC1	309.45	310.575
16	CYCLOPROPANE,1,2-DIMETHYL-,CIS-	CC1CC1C	310.15	310.575
17	Spiro[2.2]pentane	C1CC12CC2	312.15	315.4
18	Methylenecyclobutane	C=C1CCC1	315.35	314.2833
19	Bicyclo[2.1.0]pentane	C1CC2C1C2	318.65	315.4
20	Cyclopentane	C1CCCC1	322.45	310.575
21	2, 2-Dimethylbutane	CCC(C)(C)C	322.85	326.95

ตารางที่ ก.1 ผลที่ได้จากการปรับปรุงแบบจำลองทำนายค่าจุดเดือดด้วย K-fold Cross Validation

Index	Name	SMILES	Reference	Predict
22	1,1,2-Trimethylcyclo-propane	<chem>CC1CC1(C)C</chem>	327.15	329.5167
23	1-Ethyl-1-methylcyclopropane	<chem>CCC1(CC1)C</chem>	329.95	329.5167
24	2,3-Dimethylbutane	<chem>CC(C)C(C)C</chem>	331.05	326.95
25	Cyclobutane,1,2-dimethyl-,trans-	<chem>CC1CCC1C</chem>	331.15	343.05
26	Isopropylcyclo-propane	<chem>CC(C)C1CC1</chem>	331.45	329.5167
27	2-Methylpentane	<chem>CCCC(C)C</chem>	333.35	334.85
28	3-Methylpentane	<chem>CCC(C)CC</chem>	336.35	334.85
29	n-hexane	<chem>CCCCCC</chem>	341.85	341.85
30	Propylcyclopropane	<chem>CCCC1CC1</chem>	342.25	343.05
31	Ethylcyclobutane	<chem>CCC1CCC1</chem>	343.95	343.05
32	Methylcyclopentane	<chem>CC1CCCC1</chem>	344.95	343.05
33	2,2-Dimethylpentane	<chem>CCCC(C)(C)C</chem>	352.35	358.1167
34	2,4-Dimethylpentane	<chem>CC(C)CC(C)C</chem>	353.55	358.1167
35	Cyclohexane	<chem>C1CCCCC1</chem>	353.85	343.05
36	2,2,3-Trimethylbutane	<chem>CC(C)C(C)(C)C</chem>	353.95	353.95
37	3,3-Dimethylpentane	<chem>CCC(C)(C)CC</chem>	359.15	358.1167
38	1,1-Dimethylcyclopentane	<chem>CC1(C)CCCC1</chem>	360.65	363.15
39	2,3-Dimethylpentane	<chem>CCC(C)C(C)C</chem>	362.85	358.116667
40	2-Methylhexane	<chem>CCCCCC(C)C</chem>	363.15	365.4

ตารางที่ ก.1 ผลที่ได้จากการปรับปรุงแบบจำลองทำนายค่าจุดเดือดด้วย K-fold Cross Validation

Index	Name	SMILES	Reference	Predict
41	cis-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	CC1CCC(C1)C	363.95	363.15
42	3-Methylhexane	CCCC(C)CC	364.15	365.4
43	trans-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	CC1CCC(C1)C	364.85	363.15
44	trans-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	CC1CCCC1C	365.05	375.99
45	Bicyclo[3.1.0]hexane,1-methyl-	CC12CCCC1C2	366.25	378.1166667
46	3-ethylpentane	CCC(CC)CC	366.65	365.4
47	n-heptane	CCCCCCC	371.65	371.65
48	2,2,4-Trimethylpentane	CC(C)CC(C)(C)C	372.35	380.7166667
49	cis-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	CC1CCCC1C	372.65	375.99
50	Methylcyclohexane	CC1CCCCC1	374.05	375.99
51	Methylenecyclo-hexane	C=C1CCCCC1	375.65	377.95
52	Ethylcyclopentane	CCC1CCCC1	376.65	375.99
53	1,1,3-Trimethylcyclo-pentane	CC1CCC(C1)(C)C	378.05	384
54	Tricyclo[4.1.0.0(2,4)]heptane	C1C2CC2C3C1C3	378.15	378.15
55	Bicyclo[2.2.1]heptane	C1CC2CCC1C2	378.45	378.1166667
56	2,2,3,3-Tetramethylbutane	CC(C)(C)C(C)(C)C	379.55	380.7166667
57	2,2-Dimethylhexane	CC(=CC(C)(C)C)C	379.95	381.4
58	2,5-Dimethylhexane	CC(C)CCC(C)C	382.25	386.3833333
59	2,4-Dimethylhexane	CCC(C)CC(C)C	382.65	386.3833333
60	2,2,3-Trimethylpentane	CCC(C)C(C)(C)C	383.15	380.7166667



ภาคผนวก ข.โค้ดสำหรับการสร้าง Genetic Algorithm

เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```

def errorcheck(data):
    showerr =[]
    for i in data["Predict"]:
        if i < LowerBound:
            pccerror = float((abs(i-LowerBound)/LowerBound)*100)
        elif i > UpperBound:
            pccerror = float((abs(i-UpperBound)/UpperBound)*100)
        else:
            pccerror = 0
        showerr.append(pccerror)
    return showerr

```

```

def pop():
    count = 0
    cc =[]
    while count < 1000 :
        carbon = [rnd(1, 12), rnd(0, 6), rnd(0, 4), rnd(0, 10), rnd(0, 4)]
        checkk = check(carbon)
        if checkk == True:
            cc.append(carbon)
            count = count+1
        else:
            count = count
    return pd.DataFrame(cc)

```

```

def crossover(parent):
    # parent = parent.drop(columns=["Predict", "rank"])
    parent = parent[["C", "Double", "Triple", "Bracket", "Cyclic"]]
    num_parents = parent.shape[0]
    offspring = []
    for i in range(num_parents):
        for j in range(i+1, num_parents):
            p1 = parent.iloc[i].to_numpy()
            p2 = parent.iloc[j].to_numpy()
            pt = np.random.randint(1, p1.shape[0])
            # print(f"the crossover point for parents {i+1} and {j+1} is {pt}")
            off1 = np.concatenate((p1[:pt], p2[pt:]))
            off2 = np.concatenate((p2[:pt], p1[pt:]))
            if check(off1):
                offspring.append(off1)
            if check(off2):
                offspring.append(off2)
    offspring_pd = pd.DataFrame(offspring, columns=["C", "Double", "Triple", "Bracket", "Cyclic"])
    return offspring_pd

```

```

def mutate(selected):
    selected = selected[["C", "Double", "Triple", "Bracket", "Cyclic"]]
    mutated_rows = pd.DataFrame(columns=["C", "Double", "Triple", "Bracket", "Cyclic"])
    for index in range(100):
        rng = rnd(0, 10)
        mut = selected.iloc[index].to_numpy()
        mut = mut.T
        if rng < 3:
            if check(mut):
                mutated_rows = mutated_rows.append(selected.iloc[index], ignore_index=True)
            else:
                rng = rnd(1, 10)
                if rng > 0:
                    c = rnd(mut[0] - 3, mut[0] + 3)
                    if c < 0:
                        c=1
                    elif rng == 7:
                        mut[1] = rnd(0, mut[0] - 1)
                    elif rng == 8:
                        mut[2] = rnd(0, 2)
                    elif rng == 9:
                        mut[3] = rnd(0, 5)
                    elif rng == 10:
                        mut[4] = rnd(0, 3)
                temp = np.arange(5)
                new = np.vstack((mut, temp))
                mutated_row = pd.DataFrame(new, columns=["C", "Double", "Triple", "Bracket",
"Cyclic"])

```

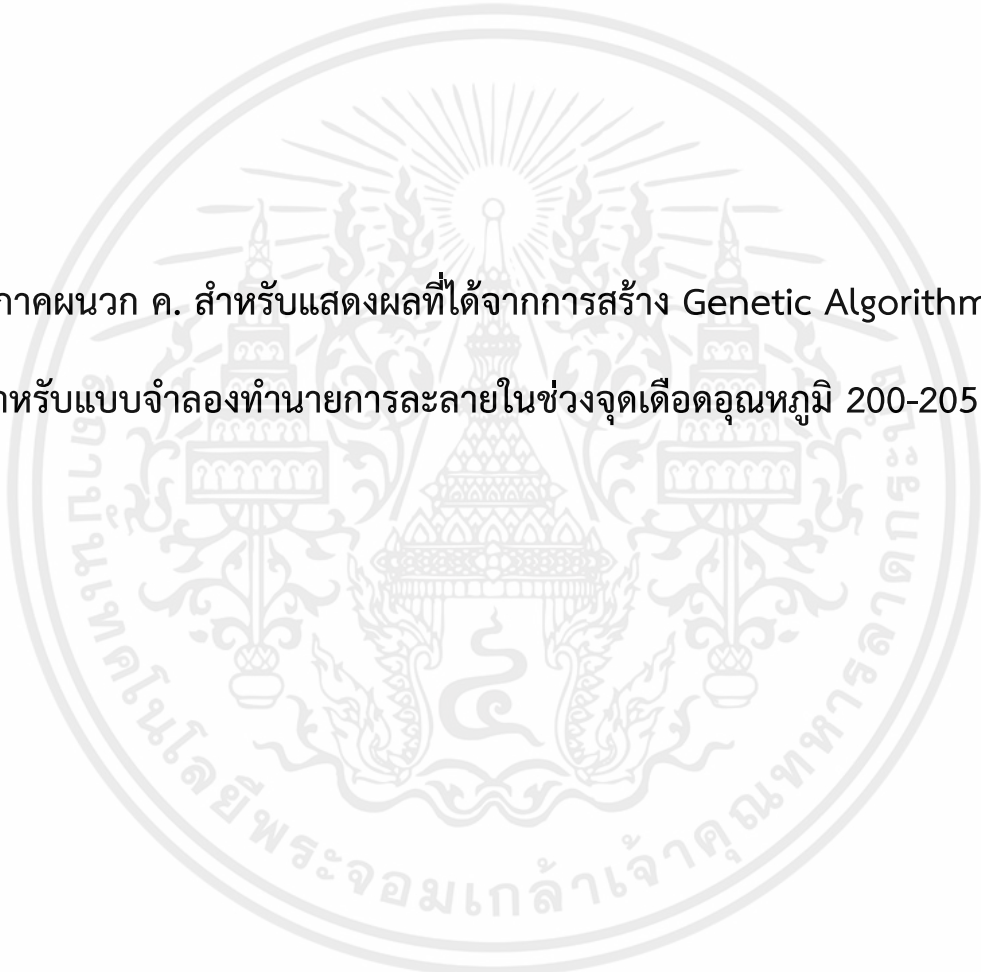
เอกสารนี้เป็นเอกสารที่สงวนไว้สำหรับการใช้งานเพื่อการศึกษาเท่านั้น ไม่อนุญาตให้นำไปใช้ประโยชน์ด้านการค้า
ไม่ว่ากรณีใดๆ ทั้งสิ้น อีกทั้งห้ามมิให้ดัดแปลงเนื้อหาและต้องอ้างอิงถึงเจ้าของเอกสารทุกครั้งที่มีการนำไปใช้

```

for loop in range(iteration):

    dataset = dataset[["C", "Double", "Triple", "Bracket", "Cyclic"]]
    dataset["Predict"] = predict_DT(dataset)
    error = errorcheck(dataset)
    dataset["Error"] = error
    selected = dataset.sort_values('Error').iloc[:100]
    if selected["Error"].iloc[0] > minerr:
        check2 = crossover(selected)
        check2["Predict"] = predict_DT(check2)
        error = errorcheck(check2)
        check2["Error"] = error
        check2 = pd.concat([check2,selected], axis=0)
        check2 = check2.sort_values("Error")
        if check2["Error"].iloc[0] > minerr:
            check3 = mutate(check2.copy())
            check3["Predict"] = predict_DT(check3)
            error = errorcheck(check3)
            check3["Error"] = error
            check2 = pd.concat([check2, check3])
            if check2["Error"].iloc[0] > minerr:
                dataset=check2
                continue
        else:
            if check(check3.iloc[0]):
                break
            else:
                dataset = check2

```



ภาคผนวก ค. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายในช่วงจุดเดือดอุณหภูมิ 200-205 K

ตารางที่ ค.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 200-205 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
1	12	0	0	2	0
2	9	0	0	1	1
3	8	0	2	0	0
4	10	1	0	1	2
5	10	2	0	2	2
6	7	1	0	0	2
7	11	3	0	1	1
8	7	1	0	1	0
9	5	0	2	0	0
10	7	0	1	1	0
11	12	3	0	0	2
12	9	0	2	0	0
13	12	0	0	4	0
14	11	3	0	1	2
15	8	0	0	0	1
16	11	0	2	0	0
17	10	1	0	0	1
18	11	3	0	1	0
19	11	0	0	0	3
20	7	1	0	1	1

ตารางที่ ค.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 200-205 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
1	9	0	1	0	0
2	10	4	0	0	0
3	11	3	0	2	1
4	8	0	2	0	0
5	1	0	0	0	0
6	10	4	0	0	1
7	11	0	0	2	0
8	9	1	0	1	0
9	10	4	0	0	0
10	11	1	0	0	2
11	11	3	0	1	0
12	5	0	1	0	0
13	12	1	0	3	0
14	11	0	0	0	0
15	10	0	0	2	1
16	7	0	0	0	0
17	8	0	0	4	0
18	8	4	0	0	1
19	9	0	0	1	0
20	7	0	0	1	1

ตารางที่ ค.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 200-205 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
1	9	0	1	0	0
2	10	4	0	0	0
3	11	3	0	2	1
4	8	0	2	0	0
5	1	0	0	0	0
6	10	4	0	0	1
7	11	0	0	2	0
8	9	1	0	1	0
9	10	4	0	0	0
10	11	1	0	0	2
11	11	3	0	1	0
12	5	0	1	0	0
13	12	1	0	3	0
14	11	0	0	0	0
15	10	0	0	2	1
16	7	0	0	0	0
17	8	0	0	4	0
18	8	4	0	0	1
19	9	0	0	1	0
20	7	0	0	1	1

ตารางที่ ค.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 200-205 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
0	2	0	1	0	0	188.45	5.775
3626	2	0	1	0	1	188.45	5.775
878	2	0	1	0	0	188.45	5.775
880	2	0	1	0	0	188.45	5.775
882	2	0	1	0	0	188.45	5.775
884	2	0	0	0	0	188.45	5.775
886	2	0	1	0	0	188.45	5.775
888	2	0	0	0	0	188.45	5.775
890	2	0	0	0	0	188.45	5.775
892	2	0	0	0	0	188.45	5.775
3606	2	0	1	0	1	188.45	5.775
896	2	0	1	0	0	188.45	5.775
3590	2	0	0	0	1	188.45	5.775
902	2	0	1	0	1	188.45	5.775
874	2	0	1	0	1	188.45	5.775
904	2	0	0	0	1	188.45	5.775
906	2	0	0	0	1	188.45	5.775
3564	2	0	0	0	1	188.45	5.775
908	2	0	0	0	1	188.45	5.775
3560	2	0	0	0	0	188.45	5.775

ตารางที่ ค.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 200-205 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
910	2	0	1	0	0	188.45	5.775
3546	2	0	0	1	0	188.45	5.775
912	2	0	0	0	0	188.45	5.775
3544	2	0	0	1	0	188.45	5.775
914	2	0	1	0	0	188.45	5.775
3532	2	0	1	0	0	188.45	5.775
916	2	0	1	0	0	188.45	5.775
3528	2	0	0	0	0	188.45	5.775
918	2	0	0	0	0	188.45	5.775
3576	2	0	2	0	0	188.45	5.775
3522	2	0	0	0	0	188.45	5.775
872	2	0	1	0	1	188.45	5.775
3656	2	0	0	0	0	188.45	5.775
807	2	0	1	0	0	188.45	5.775
808	2	0	0	0	0	188.45	5.775
810	2	0	0	0	0	188.45	5.775
812	2	0	1	0	0	188.45	5.775
814	2	0	1	0	0	188.45	5.775
818	2	0	0	0	1	188.45	5.775
822	2	0	1	0	1	188.45	5.775

ตารางที่ ค.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 200-205 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
824	2	0	0	0	1	188.45	5.775
826	2	0	0	0	1	188.45	5.775
828	2	0	1	0	1	188.45	5.775
830	2	0	1	0	0	188.45	5.775
834	2	0	1	0	0	188.45	5.775
836	2	0	1	0	0	188.45	5.775
870	2	0	1	0	1	188.45	5.775
838	2	0	1	0	1	188.45	5.775
846	2	0	1	0	1	188.45	5.775
852	2	0	1	0	0	188.45	5.775
3736	2	0	1	0	0	188.45	5.775
3722	2	0	0	0	1	188.45	5.775
858	2	0	1	0	1	188.45	5.775
3714	2	0	0	0	0	188.45	5.775
860	2	0	1	0	0	188.45	5.775
3682	2	0	0	0	0	188.45	5.775
862	2	0	1	0	1	188.45	5.775
3678	2	0	0	0	0	188.45	5.775
3660	2	0	0	0	0	188.45	5.775
3658	2	0	0	0	0	188.45	5.775

ตารางที่ ค.3 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover ในช่วง 200-205 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
0	2	0	1	0	0	188.45	5.775
456	2	0	1	0	0	188.45	5.775
458	2	0	1	0	0	188.45	5.775
460	2	0	1	0	1	188.45	5.775
462	2	0	1	0	0	188.45	5.775
464	2	0	1	0	0	188.45	5.775
466	2	0	1	0	1	188.45	5.775
454	2	0	1	0	1	188.45	5.775
468	2	0	1	0	0	188.45	5.775
472	2	0	1	0	1	188.45	5.775
474	2	0	1	0	1	188.45	5.775
476	2	0	1	0	1	188.45	5.775
478	2	1	1	0	0	188.45	5.775
480	2	0	1	0	1	188.45	5.775
482	2	0	1	0	1	188.45	5.775
470	2	0	1	0	0	188.45	5.775
484	2	0	1	0	1	188.45	5.775
452	2	0	1	0	1	188.45	5.775
438	2	0	1	0	1	188.45	5.775
2298	2	1	1	0	0	188.45	5.775

ตารางที่ ค.3 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover ในช่วง 200-205 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
2294	2	1	1	0	0	188.45	5.775
413	2	0	1	0	0	188.45	5.775
415	2	1	1	0	0	188.45	5.775
2292	2	0	1	0	0	188.45	5.775
417	2	1	1	0	0	188.45	5.775
444	2	0	1	0	1	188.45	5.775
2290	2	1	1	0	1	188.45	5.775
2288	2	1	1	0	0	188.45	5.775
424	2	0	1	0	1	188.45	5.775
426	2	0	1	0	1	188.45	5.775
428	2	0	1	0	1	188.45	5.775
432	2	0	1	0	1	188.45	5.775
436	2	0	1	0	1	188.45	5.775
420	2	0	1	0	0	188.45	5.775
2306	2	1	1	0	1	188.45	5.775
486	2	0	1	0	0	188.45	5.775
490	2	0	1	0	0	188.45	5.775
534	2	0	1	0	1	188.45	5.775
536	2	0	1	0	0	188.45	5.775
540	2	0	1	0	0	188.45	5.775

ตารางที่ ค.3 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover ในช่วง 200-205 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
542	2	0	1	0	0	188.45	5.775
544	2	0	1	0	0	188.45	5.775
546	2	0	1	0	0	188.45	5.775
532	2	0	1	0	1	188.45	5.775
548	2	0	1	0	0	188.45	5.775
552	2	0	1	0	0	188.45	5.775
554	2	0	1	0	0	188.45	5.775
556	2	0	1	0	0	188.45	5.775
558	2	0	1	0	0	188.45	5.775
560	2	0	1	0	0	188.45	5.775
564	2	0	1	0	0	188.45	5.775
550	2	0	1	0	0	188.45	5.775
488	2	2	1	0	0	188.45	5.775
937	2	0	1	0	0	188.45	5.775
641	2	0	1	0	0	188.45	5.775
492	2	1	1	0	0	188.45	5.775
494	2	0	1	0	0	188.45	5.775
496	2	1	1	0	0	188.45	5.775
498	2	0	1	0	1	188.45	5.775
500	2	0	1	0	1	188.45	5.775

ตารางที่ ค.4 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation ในช่วง 200-205 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
0	2	0	1	0	0	188.45	5.775
1	2	0	1	0	0	188.45	5.775
2	2	0	0	0	0	188.45	5.775
3	2	0	1	0	0	188.45	5.775
4	2	0	1	0	0	188.45	5.775
5	2	0	0	0	0	188.45	5.775
6	2	0	0	0	0	188.45	5.775
7	2	0	0	0	0	188.45	5.775
8	3	0	0	0	0	231.05	12.70731707
9	3	1	0	0	0	231.05	12.70731707
10	3	1	0	0	0	231.05	12.70731707
11	3	1	0	0	0	231.05	12.70731707
12	3	1	0	0	0	231.05	12.70731707
13	3	1	0	0	0	231.05	12.70731707
14	3	0	0	0	0	231.05	12.70731707
15	3	0	0	0	0	231.05	12.70731707
16	2	1	0	0	0	169.45	15.275
17	2	1	0	0	0	169.45	15.275
18	2	1	0	0	0	169.45	15.275
19	2	1	0	0	0	169.45	15.275

ตารางที่ ค.4 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation ในช่วง 200-205 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
20	2	1	0	0	0	169.45	15.275
21	3	2	0	0	0	238.75	16.46341463
22	3	2	0	0	0	238.75	16.46341463
23	3	2	0	0	1	240.35	17.24390244
24	3	2	0	0	1	240.35	17.24390244
25	3	1	0	0	1	240.35	17.24390244
26	3	0	0	0	1	240.35	17.24390244
27	3	1	0	0	1	240.35	17.24390244
28	3	0	0	0	1	240.35	17.24390244
29	3	2	1	0	1	249.95	21.92682927
30	3	0	1	0	0	249.95	21.92682927
31	3	2	1	0	1	249.95	21.92682927
32	3	2	1	0	0	249.95	21.92682927
33	3	1	1	0	0	249.95	21.92682927
34	3	0	1	0	1	249.95	21.92682927
35	3	2	1	0	1	249.95	21.92682927
36	3	0	1	0	1	249.95	21.92682927
37	3	2	1	0	1	249.95	21.92682927
38	3	1	1	0	1	249.95	21.92682927
39	3	2	1	0	1	249.95	21.92682927

ตารางที่ ค.4 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation ในช่วง 200-205 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
40	3	1	1	0	1	249.95	21.92682927
41	3	0	1	0	0	249.95	21.92682927
42	3	1	1	0	1	249.95	21.92682927
43	3	1	1	0	0	249.95	21.92682927
44	3	0	1	0	1	249.95	21.92682927
45	3	1	1	0	0	249.95	21.92682927
46	3	1	1	0	1	249.95	21.92682927
47	3	2	1	0	1	249.95	21.92682927
48	3	2	1	0	1	249.95	21.92682927
49	3	1	1	0	0	249.95	21.92682927
50	3	0	1	0	1	249.95	21.92682927
51	3	1	1	0	1	249.95	21.92682927
52	3	1	1	0	1	249.95	21.92682927
53	3	2	1	0	0	249.95	21.92682927
54	4	1	0	0	0	266.95	30.2195122
55	4	1	0	0	0	266.95	30.2195122
56	4	1	0	0	0	266.95	30.2195122
57	4	0	0	0	0	272.65	33
58	4	0	0	0	0	272.65	33
59	4	0	0	0	0	272.65	33

ตารางที่ ค.5 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm ในช่วง 200-205 K

Iteration	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
100	2	0	0	0	0	188.45	5.775





ภาคผนวก ง. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายในช่วงจุดเดือดอุณหภูมิ 250-255 K

ตารางที่ ง.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
1	9	0	1	0	0
2	10	4	0	0	0
3	11	3	0	2	1
4	8	0	2	0	0
5	1	0	0	0	0
6	10	4	0	0	1
7	11	0	0	2	0
8	9	1	0	1	0
9	10	4	0	0	0
10	11	1	0	0	2
11	11	3	0	1	0
12	5	0	1	0	0
13	12	1	0	3	0
14	11	0	0	0	0
15	10	0	0	2	1
16	7	0	0	0	0
17	8	0	0	4	0
18	8	4	0	0	1
19	9	0	0	1	0
20	7	0	0	1	1

ตารางที่ ง.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
21	12	3	0	0	0
22	12	1	0	1	1
23	4	0	1	0	0
24	11	0	0	2	0
25	10	4	0	1	0
26	10	3	0	1	2
27	7	1	0	1	1
28	10	0	0	2	0
29	12	4	0	0	1
30	11	2	0	1	2
31	12	0	0	5	0
32	11	1	0	1	0
33	12	3	0	0	2
34	10	4	0	1	0
35	3	2	1	0	1
36	10	1	0	2	2
37	12	4	0	2	0
38	7	1	0	1	0
39	7	1	1	0	0
40	10	4	0	1	1

ตารางที่ ง.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
41	10	3	0	0	2
42	3	2	1	0	0
43	12	3	0	0	2
44	12	0	0	1	0
45	3	0	1	0	1
46	3	2	1	0	1
47	7	1	1	0	0
48	12	0	0	0	0
49	8	1	0	0	0
50	12	1	0	0	2
51	10	2	0	0	2
52	5	1	0	0	1
53	8	0	0	0	0
54	11	1	0	2	0
55	6	1	0	0	1
56	12	5	0	0	0
57	10	3	0	2	1
58	7	1	0	2	0
59	9	4	0	0	1
60	7	1	1	1	0

ตารางที่ ง.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
999	3	0	1	0	0	249.95	0.02
741	3	2	1	0	1	249.95	0.02
769	3	0	1	0	1	249.95	0.02
778	3	1	1	0	0	249.95	0.02
157	3	0	1	0	0	249.95	0.02
148	3	2	1	0	0	249.95	0.02
123	3	2	1	0	0	249.95	0.02
44	3	0	1	0	1	249.95	0.02
841	3	1	1	0	0	249.95	0.02
68	3	0	1	0	0	249.95	0.02
906	3	2	1	0	1	249.95	0.02
34	3	2	1	0	1	249.95	0.02
911	3	2	1	0	1	249.95	0.02
913	3	2	1	0	1	249.95	0.02
45	3	2	1	0	1	249.95	0.02
882	3	1	1	0	0	249.95	0.02
714	3	2	1	0	0	249.95	0.02
41	3	2	1	0	0	249.95	0.02
666	3	1	1	0	0	249.95	0.02
233	3	2	1	0	1	249.95	0.02

ตารางที่ ง.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
417	3	0	1	0	1	249.95	0.02
637	3	2	1	0	0	249.95	0.02
340	3	0	1	0	0	249.95	0.02
508	3	2	1	0	0	249.95	0.02
267	3	2	1	0	1	249.95	0.02
537	3	1	1	0	1	249.95	0.02
979	3	0	1	0	1	249.95	0.02
710	3	1	1	0	1	249.95	0.02
605	3	0	1	0	1	249.95	0.02
584	3	0	1	0	0	249.95	0.02
491	3	2	0	0	1	240.35	3.86
620	3	1	0	0	1	240.35	3.86
895	3	2	0	0	1	240.35	3.86
823	3	2	0	0	1	240.35	3.86
976	3	1	0	0	1	240.35	3.86
773	3	1	0	0	1	240.35	3.86
972	3	0	0	0	1	240.35	3.86
899	3	1	0	0	1	240.35	3.86
726	3	0	0	0	1	240.35	3.86
627	3	2	0	0	0	238.75	4.5

ตารางที่ ง.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
203	3	2	0	0	0	238.75	4.5
978	3	2	0	0	0	238.75	4.5
970	3	2	0	0	0	238.75	4.5
273	4	1	0	0	0	266.95	4.686275
158	4	1	0	0	0	266.95	4.686275
535	4	1	0	0	0	266.95	4.686275
577	4	1	0	0	0	266.95	4.686275
853	4	1	0	0	0	266.95	4.686275
995	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
740	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
723	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
886	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
468	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
739	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
797	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
375	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
300	3	0	0	0	0	231.05	7.58
98	3	0	0	0	0	231.05	7.58
700	3	0	0	0	0	231.05	7.58
238	3	0	0	0	0	231.05	7.58

ตารางที่ ง.3 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
0	3	2	1	0	1	249.95	0.02
2756	3	0	2	0	0	249.95	0.02
2758	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2760	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2761	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2762	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2763	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2764	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2765	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2766	3	1	1	0	1	249.95	0.02
2767	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2768	3	1	1	0	1	249.95	0.02
2769	3	0	1	0	0	249.95	0.02
2770	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2771	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2772	3	0	1	0	0	249.95	0.02
2773	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2774	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2775	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2776	3	2	1	0	1	249.95	0.02

ตารางที่ ง.3 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
2777	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2778	3	1	1	0	1	249.95	0.02
2754	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2752	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2750	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2748	3	1	2	0	0	249.95	0.02
2676	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2678	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2680	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2683	3	0	1	0	1	249.95	0.02
2684	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2686	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2690	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2698	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2700	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2704	3	2	1	0	1	249.95	0.02
2779	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2710	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2714	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2716	3	2	1	0	0	249.95	0.02

ตารางที่ ง.3 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
2718	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2720	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2722	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2724	3	0	1	0	0	249.95	0.02
2728	3	2	1	1	0	249.95	0.02
2734	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2738	3	2	1	0	1	249.95	0.02
2746	3	2	1	0	1	249.95	0.02
2712	3	2	1	0	0	249.95	0.02
2780	3	1	1	0	1	249.95	0.02
2781	3	0	1	0	0	249.95	0.02
2782	3	1	1	0	1	249.95	0.02
2844	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2846	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2849	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2851	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2853	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2858	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2860	3	1	1	0	0	249.95	0.02
2866	3	1	1	0	0	249.95	0.02

ตารางที่ ง.4 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
0	3	0	1	0	0	249.95	0.02
1	3	2	1	0	1	249.95	0.02
2	3	0	1	0	1	249.95	0.02
3	3	1	1	0	0	249.95	0.02
4	3	0	1	0	0	249.95	0.02
5	3	2	1	0	0	249.95	0.02
6	3	2	1	0	0	249.95	0.02
7	3	0	1	0	1	249.95	0.02
8	3	1	1	0	0	249.95	0.02
9	3	0	1	0	0	249.95	0.02
10	3	2	1	0	1	249.95	0.02
11	3	2	1	0	1	249.95	0.02
12	3	2	1	0	1	249.95	0.02
13	3	2	1	0	1	249.95	0.02
14	3	2	1	0	1	249.95	0.02
15	3	1	1	0	0	249.95	0.02
16	3	2	1	0	0	249.95	0.02
17	3	2	1	0	0	249.95	0.02
18	3	1	1	0	0	249.95	0.02
19	3	2	1	0	1	249.95	0.02

ตารางที่ ง.4 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
20	3	0	1	0	1	249.95	0.02
21	3	2	1	0	0	249.95	0.02
22	3	0	1	0	0	249.95	0.02
23	3	2	1	0	0	249.95	0.02
24	3	2	1	0	1	249.95	0.02
25	3	1	1	0	1	249.95	0.02
26	3	0	1	0	1	249.95	0.02
27	3	1	1	0	1	249.95	0.02
28	3	0	1	0	1	249.95	0.02
29	3	0	1	0	0	249.95	0.02
30	3	2	0	0	1	240.35	3.86
31	3	1	0	0	1	240.35	3.86
32	3	2	0	0	1	240.35	3.86
33	3	2	0	0	1	240.35	3.86
34	3	1	0	0	1	240.35	3.86
35	3	1	0	0	1	240.35	3.86
36	3	0	0	0	1	240.35	3.86
37	3	1	0	0	1	240.35	3.86
38	3	0	0	0	1	240.35	3.86
39	3	2	0	0	0	238.75	4.5

ตารางที่ ง.4 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
40	3	2	0	0	0	238.75	4.5
41	3	2	0	0	0	238.75	4.5
42	3	2	0	0	0	238.75	4.5
43	4	1	0	0	0	266.95	4.686275
44	4	1	0	0	0	266.95	4.686275
45	4	1	0	0	0	266.95	4.686275
46	4	1	0	0	0	266.95	4.686275
47	4	1	0	0	0	266.95	4.686275
48	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
49	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
50	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
51	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
52	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
53	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
54	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
55	4	0	0	0	0	272.65	6.921569
56	3	0	0	0	0	231.05	7.58
57	3	0	0	0	0	231.05	7.58
58	3	0	0	0	0	231.05	7.58
59	3	0	0	0	0	231.05	7.58

ตารางที่ ง.5 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm ในช่วง 250-255 K (รอบที่ 1)

Iteration	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
100	3	0	1	0	0	249.95	0.02





ภาคผนวก จ. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายในช่วงจุดเดือดอุณหภูมิ 300-305 K

ตารางที่ จ.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 300-305 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
1	10	3	0	2	1
2	11	2	0	1	1
3	10	0	0	5	0
4	12	0	0	0	0
5	8	1	0	2	0
6	12	6	0	0	0
7	12	0	0	3	0
8	3	2	1	0	1
9	11	2	0	0	0
10	9	3	0	0	1
11	11	0	0	2	0
12	11	1	0	0	0
13	12	6	0	0	0
14	11	1	0	0	0
15	11	3	0	1	0
16	5	0	0	0	0
17	12	5	0	2	0
18	9	0	0	0	1
19	12	4	0	1	1
20	9	0	0	1	0

ตารางที่ จ.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 300-305 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
21	12	0	0	0	0
22	10	2	0	2	0
23	11	1	0	1	1
24	7	0	0	1	0
25	9	0	0	0	0
26	11	5	0	0	1
27	12	1	0	0	0
28	12	0	0	1	0
29	11	0	0	2	0
30	12	1	0	3	0
31	10	4	0	0	2
32	10	3	0	0	2
33	12	3	0	0	0
34	6	1	0	0	1
35	10	3	0	1	0
36	9	1	0	2	1
37	8	0	0	3	0
38	11	5	0	0	1
39	10	2	0	2	2
40	10	0	0	4	0

ตารางที่ จ.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 300-305 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
41	6	0	0	1	0
42	11	3	0	0	2
43	11	0	0	2	0
44	9	2	0	0	1
45	11	0	1	0	0
46	11	1	0	0	1
47	7	0	1	0	0
48	12	0	0	1	1
49	8	0	0	0	0
50	2	1	0	0	0
51	7	1	0	0	1
52	12	4	0	2	0
53	10	0	0	0	0
54	10	1	0	0	0
55	8	1	1	0	0
56	6	0	0	0	0
57	10	0	1	0	0
58	10	1	0	2	1
59	11	1	0	2	1
60	6	0	0	1	0

ตารางที่ จ.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 300-305 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
843	4	0	1	0	0	300.05	0
225	5	0	0	1	0	303.0833	0
331	4	1	1	0	0	300.05	0
546	5	0	0	1	0	303.0833	0
192	4	1	1	0	0	300.05	0
919	4	0	1	0	0	300.05	0
594	4	0	1	0	0	300.05	0
859	5	0	0	1	0	303.0833	0
626	5	0	0	1	0	303.0833	0
708	5	0	0	1	0	303.0833	0
761	5	0	0	1	0	303.0833	0
802	4	0	1	0	0	300.05	0
861	5	0	0	1	0	303.0833	0
386	5	1	0	0	0	306.8833	0.617486
976	5	1	0	0	0	306.8833	0.617486
543	5	0	0	0	0	309.15	1.360656
820	5	0	0	0	0	309.15	1.360656
15	5	0	0	0	0	309.15	1.360656
350	5	0	0	0	1	311.0833	1.994536
79	5	0	0	0	1	311.0833	1.994536

ตารางที่ จ.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 300-305 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
541	5	0	0	0	1	311.0833	1.994536
494	5	2	0	0	0	313.225	2.696721
117	5	2	0	0	0	313.225	2.696721
610	5	2	0	0	0	313.225	2.696721
601	5	2	0	0	0	313.225	2.696721
938	5	0	2	0	0	313.25	2.704918
379	5	1	2	0	0	313.25	2.704918
806	5	0	2	0	0	313.25	2.704918
740	5	1	2	0	0	313.25	2.704918
491	5	1	2	0	0	313.25	2.704918
508	5	0	1	0	0	313.25	2.704918
288	5	0	2	0	0	313.25	2.704918
459	5	0	2	0	0	313.25	2.704918
387	5	1	2	0	0	313.25	2.704918
125	5	0	1	0	0	313.25	2.704918
548	5	0	2	0	0	313.25	2.704918
141	5	1	0	0	1	313.75	2.868852
253	5	1	0	0	1	313.75	2.868852
889	5	1	0	0	1	313.75	2.868852
488	4	0	0	0	1	285.75	4.75

ตารางที่ จ.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 300-305K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
688	4	0	0	0	1	285.75	4.75
207	4	0	0	0	1	285.75	4.75
575	4	0	0	0	1	285.75	4.75
108	4	2	0	0	0	284.05	5.316667
625	4	2	0	0	0	284.05	5.316667
700	6	0	0	2	0	326.95	7.196721
505	6	0	0	2	0	326.95	7.196721
204	6	1	0	2	0	329.85	8.147541
334	6	1	0	2	0	329.85	8.147541
769	4	0	0	0	0	272.65	9.116667
345	4	0	0	0	0	272.65	9.116667
348	4	0	0	0	0	272.65	9.116667
805	4	0	0	0	0	272.65	9.116667
713	6	1	0	1	0	334.0357	9.519906
936	6	1	0	1	0	334.0357	9.519906
126	6	1	0	1	0	334.0357	9.519906
683	6	0	0	1	0	334.85	9.786885
866	6	0	0	1	0	334.85	9.786885
42	6	0	0	1	0	334.85	9.786885
756	4	1	0	0	0	266.95	11.01667

ตารางที่ จ.3 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm ในช่วง 300-305 K (รอบที่ 1)

Iteration	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
1	4	0	1	0	0	300.05	0
	5	0	0	1	0	303.0833	0
	4	1	1	0	0	300.05	0



ภาคผนวก ฉ. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายในช่วงจุดเดือดอุณหภูมิ 350-355 K

ตารางที่ ๑.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 350-355 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
1	10	4	0	1	1
2	11	1	0	1	1
3	10	0	0	1	2
4	8	4	0	0	1
5	2	0	1	0	0
6	10	3	0	0	2
7	9	0	0	0	3
8	11	0	0	0	2
9	6	0	0	0	2
10	4	0	1	0	0
11	9	1	0	2	1
12	12	4	0	0	1
13	10	3	0	0	0
14	10	3	0	1	2
15	11	5	0	0	1
16	10	2	0	0	0
17	6	0	1	0	0
18	10	0	0	2	0
19	9	0	0	2	0
20	12	5	0	1	2

ตารางที่ ๑.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 350-355 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
21	7	0	0	0	0
22	7	0	0	1	0
23	11	2	0	1	2
24	7	3	0	0	0
25	11	0	1	0	0
26	11	2	0	0	1
27	12	1	0	1	2
28	9	1	0	1	0
29	8	2	1	0	0
30	12	5	0	0	1
31	10	0	1	0	0
32	3	0	1	0	1
33	12	0	0	4	0
34	10	1	0	2	2
35	8	0	0	0	2
36	8	1	0	3	0
37	10	4	0	1	1
38	9	1	0	0	1
39	12	3	0	0	2
40	7	0	0	3	0

ตารางที่ ๑.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 350-355 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
41	9	2	0	0	0
42	10	1	0	1	0
43	9	0	0	1	1
44	2	1	0	0	0
45	11	4	0	0	2
46	10	5	0	0	2
47	4	0	0	0	0
48	10	3	0	0	1
49	11	0	0	1	2
50	10	0	0	3	0
51	12	0	0	0	1
52	8	0	2	0	0
53	3	0	0	0	1
54	6	0	0	0	1
55	10	4	0	1	0
56	7	0	1	0	0
57	3	1	1	0	0
58	10	0	0	2	0
59	11	1	0	2	1
60	11	1	0	0	1

ตารางที่ ๑.๒ แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 350-355 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
913	7	0	0	3	0	353.95	0
370	6	1	2	0	0	352.0833	0
935	7	1	0	3	0	351.05	0
680	6	1	2	0	0	352.0833	0
295	6	3	0	0	0	351.4	0
245	6	1	1	0	0	352.0833	0
226	6	1	1	0	0	352.0833	0
39	7	0	0	3	0	353.95	0
595	6	1	1	0	0	352.0833	0
720	6	1	2	0	0	352.0833	0
600	7	0	0	3	0	353.95	0
445	6	3	0	0	0	351.4	0
174	6	3	0	0	0	351.4	0
413	6	1	2	0	0	352.0833	0
341	7	0	0	3	0	353.95	0
654	7	1	0	3	0	351.05	0
658	6	0	2	0	0	352.0833	0
884	6	1	2	0	0	352.0833	0
328	6	3	0	0	0	351.4	0
548	6	0	2	0	0	352.0833	0

ตารางที่ ๑.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 350-355 K (รอบที่ 1)

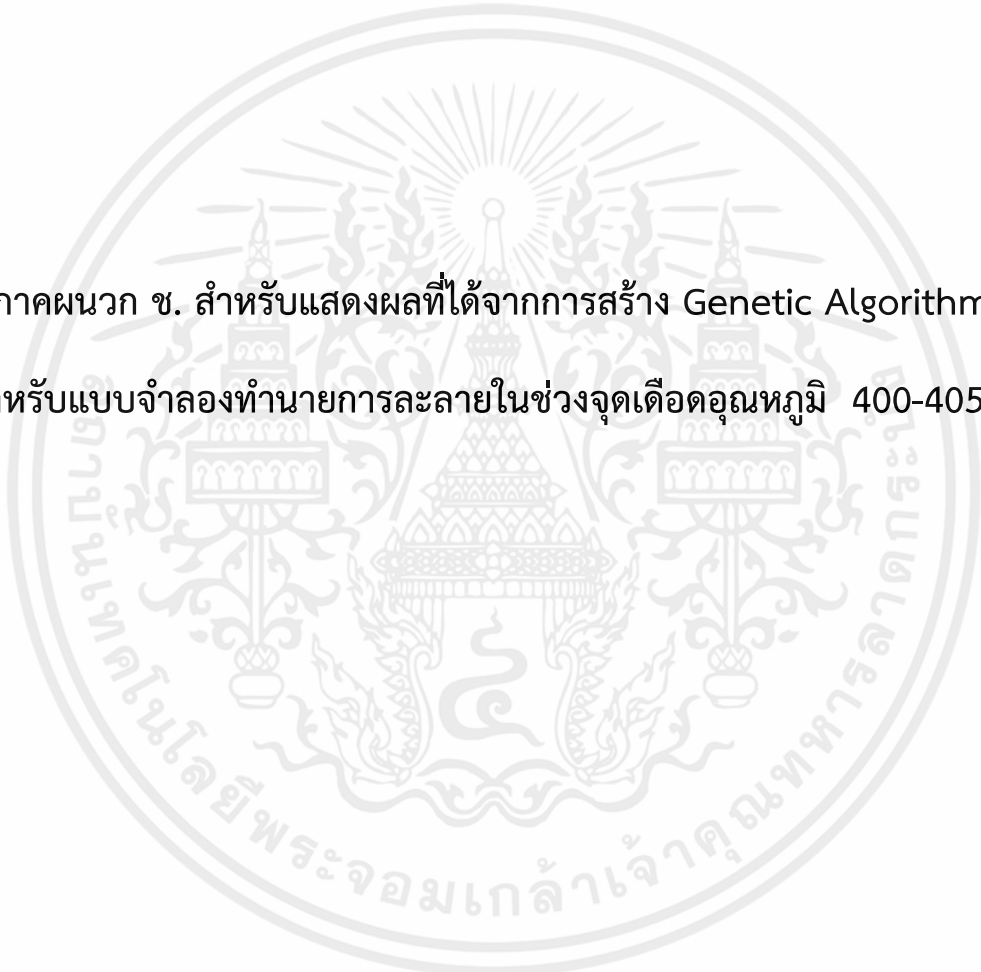
Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
861	6	0	2	0	0	352.0833	0
16	6	0	1	0	0	352.0833	0
981	7	0	0	3	0	353.95	0
94	6	2	0	0	0	348.86	0.325714
345	6	2	0	0	0	348.86	0.325714
67	7	0	0	2	0	356.975	0.556338
820	7	0	0	2	0	356.975	0.556338
421	7	0	0	2	0	356.975	0.556338
709	7	1	0	2	0	357.43	0.684507
546	7	1	0	2	0	357.43	0.684507
862	6	1	0	0	1	346.05	1.128571
954	7	1	0	1	0	361.4591	1.819462
994	7	1	0	1	0	361.4591	1.819462
691	7	1	0	1	0	361.4591	1.819462
528	7	1	0	1	0	361.4591	1.819462
919	7	1	1	1	0	361.4591	1.819462
926	7	1	1	1	0	361.4591	1.819462
238	7	1	0	1	0	361.4591	1.819462
400	7	1	0	1	0	361.4591	1.819462
988	7	1	1	1	0	361.4591	1.819462

ตารางที่ ๑.๒ แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 350-355 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
241	7	1	1	1	0	361.4591	1.819462
324	7	1	1	1	0	361.4591	1.819462
501	6	0	0	0	2	342.4167	2.166667
467	6	0	0	0	1	342.4167	2.166667
53	6	0	0	0	1	342.4167	2.166667
557	6	0	0	0	2	342.4167	2.166667
8	6	0	0	0	2	342.4167	2.166667
556	6	0	0	0	1	342.4167	2.166667
115	6	0	0	0	1	342.4167	2.166667
964	6	0	0	0	2	342.4167	2.166667
75	6	0	0	0	1	342.4167	2.166667
978	6	0	0	0	2	342.4167	2.166667
946	6	0	0	0	0	341.85	2.328571
959	6	0	0	0	0	341.85	2.328571
750	6	0	0	0	0	341.85	2.328571
582	6	0	0	0	0	341.85	2.328571
726	6	0	0	0	0	341.85	2.328571
262	7	0	0	1	0	363.65	2.43662
21	7	0	0	1	0	363.65	2.43662
890	7	0	0	1	0	363.65	2.43662

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm ในช่วง 350-355 K (รอบที่ 1)

Iteration	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
1	7	1	0	3	0	351.05	0
	6	3	0	0	0	351.4	0
	6	1	2	0	0	352.0833	0
	6	1	1	0	0	352.0833	0
	6	0	2	0	0	352.0833	0
	6	0	1	0	0	352.0833	0
	7	0	0	0	3	0	353.95



ภาคผนวก ข. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายในช่วงจุดเดือดอุณหภูมิ 400-405 K

ตารางที่ ข.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 400-405 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
1	12	1	0	3	0
2	10	0	0	1	2
3	11	0	0	1	1
4	10	2	0	1	2
5	7	0	1	1	0
6	5	1	2	0	0
7	8	2	0	0	1
8	12	6	0	0	3
9	7	1	0	0	2
10	2	0	0	0	0
11	9	4	0	0	1
12	12	5	0	0	2
13	11	2	0	2	0
14	3	0	0	0	0
15	10	0	0	1	2
16	8	0	0	4	0
17	12	2	0	0	1
18	4	0	1	0	0
19	6	0	1	0	0
20	8	1	0	0	0

ตารางที่ ข.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 400-405 K (รอบที่ 1)

Index	Name	SMILES	Reference	Predict	Index
21	7	1	0	2	0
22	8	0	0	2	0
23	10	3	0	1	2
24	12	0	0	1	0
25	12	3	0	0	2
26	12	1	0	5	0
27	10	3	0	0	1
28	3	2	0	0	1
29	6	0	0	2	0
30	12	3	0	0	1
31	3	0	0	0	0
32	11	2	0	0	0
33	11	2	0	1	0
34	12	6	0	0	2
35	5	0	1	0	0
36	10	3	0	2	2
37	9	0	0	2	1
38	8	0	0	0	0
39	7	1	1	1	0
40	7	1	0	2	0

ตารางที่ ข.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 400-405 K (รอบที่ 1)

Index	Name	SMILES	Reference	Predict	Index
41	12	4	0	0	2
42	8	0	0	0	0
43	3	0	0	0	0
44	9	3	0	0	0
45	11	0	0	3	0
46	10	0	0	2	1
47	11	3	0	2	0
48	12	2	0	0	0
49	6	0	0	0	0
50	2	1	0	0	0
51	11	3	0	1	1
52	6	1	0	0	0
53	11	1	0	1	2
54	3	1	0	0	1
55	12	1	0	1	1
56	12	1	0	1	2
57	11	3	0	1	0
58	8	1	1	0	0
59	9	1	0	0	2
60	11	0	0	3	0

ตารางที่ ข.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 400-405 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
347	12	1	0	5	0	453.15	0
883	12	1	0	3	0	453.15	0
19	12	1	0	3	0	453.15	0
511	10	0	0	1	1	452.45	0
25	12	1	0	5	0	453.15	0
728	10	0	0	1	1	452.45	0
639	12	1	0	3	0	453.15	0
872	12	1	0	3	0	453.15	0
579	12	1	0	3	0	453.15	0
667	10	2	0	2	1	451.65	0
668	12	1	0	4	0	453.15	0
973	10	2	0	2	1	451.65	0
548	12	1	0	4	0	453.15	0
229	10	2	0	2	1	451.65	0
206	12	1	0	3	0	453.15	0
201	12	1	0	3	0	453.15	0
275	12	1	0	4	0	453.15	0
757	12	1	0	5	0	453.15	0
473	9	4	0	0	0	455.15	0.032967
677	9	4	0	0	0	455.15	0.032967

ตารางที่ ข.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 400-405 K (รอบที่ 1)

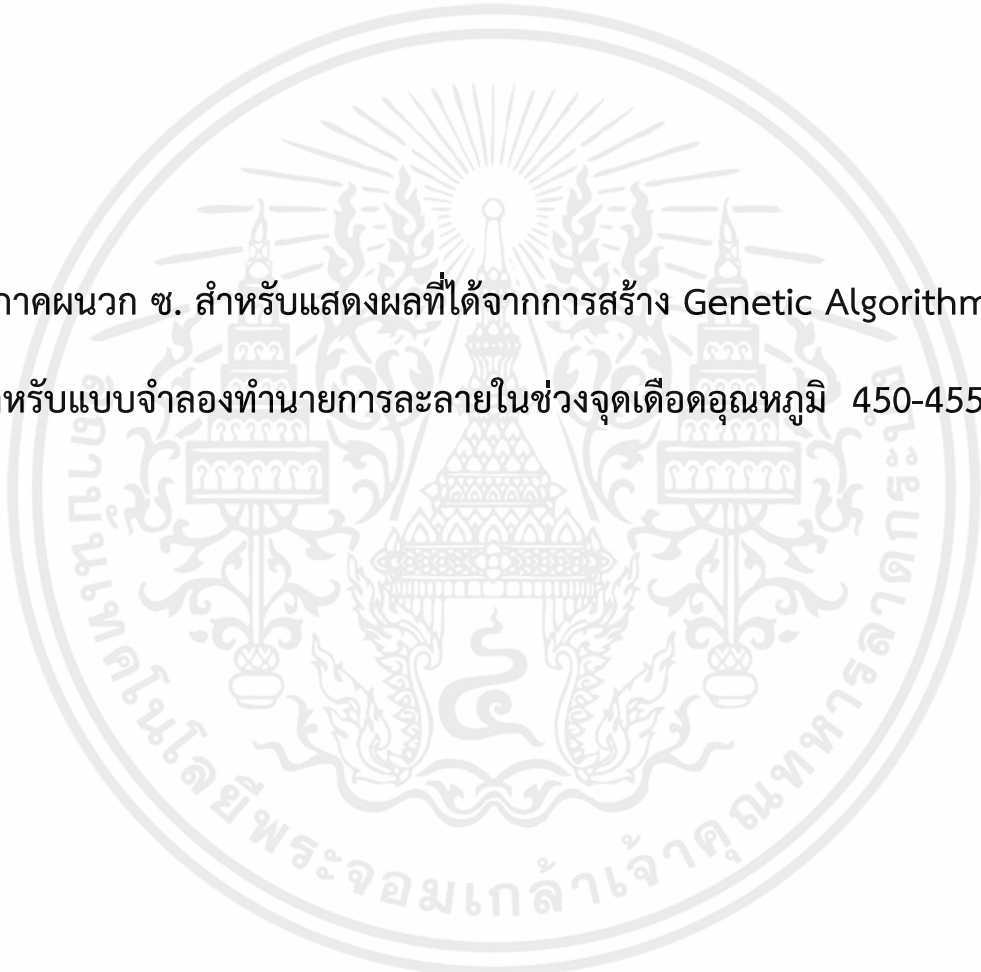
Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
467	9	4	0	0	1	455.15	0.032967
461	9	4	0	0	0	455.15	0.032967
824	9	4	0	0	0	455.15	0.032967
546	9	4	0	0	1	455.15	0.032967
662	9	4	0	0	0	455.15	0.032967
301	9	4	0	0	0	455.15	0.032967
947	9	4	0	0	0	455.15	0.032967
974	9	4	0	0	0	455.15	0.032967
670	9	4	0	0	1	455.15	0.032967
336	10	0	0	0	1	449.15	0.188889
315	10	0	0	0	1	449.15	0.188889
95	10	0	0	0	1	449.15	0.188889
827	10	0	0	0	1	449.15	0.188889
565	10	0	0	0	1	449.15	0.188889
686	10	0	0	0	1	449.15	0.188889
185	10	0	0	0	0	447.25	0.611111
705	10	0	0	0	0	447.25	0.611111
760	10	0	0	0	0	447.25	0.611111
499	10	1	0	0	0	447.25	0.611111
488	10	0	0	0	0	447.25	0.611111

ตารางที่ ข.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 400-405 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
148	10	1	0	0	0	447.25	0.611111
143	10	0	0	0	0	447.25	0.611111
330	10	1	0	0	0	447.25	0.611111
245	10	0	2	0	0	447.15	0.633333
773	10	0	1	0	0	447.15	0.633333
490	10	0	2	0	0	447.15	0.633333
560	10	0	1	0	0	447.15	0.633333
959	10	0	2	0	0	447.15	0.633333
753	10	0	2	0	0	447.15	0.633333
419	10	0	1	0	0	447.15	0.633333
626	10	0	1	0	0	447.15	0.633333
521	10	2	0	1	1	460.15	1.131868
153	10	1	0	0	1	460.15	1.131868
305	10	1	0	0	1	460.15	1.131868
590	10	2	0	0	1	460.15	1.131868
528	10	2	0	1	1	460.15	1.131868
448	10	2	0	0	1	460.15	1.131868
451	10	2	0	1	1	460.15	1.131868
555	10	2	0	1	1	460.15	1.131868
108	10	2	0	1	1	460.15	1.131868

ตารางที่ ข.3 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm ในช่วง 400-405 K (รอบที่ 1)

Iteration	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
1	12	1	0	5	0	453.15	0
	12	1	0	3	0	453.15	0
	10	0	0	1	1	452.45	0
	10	2	0	2	1	451.65	0
	12	1	0	4	0	453.15	0



ภาคผนวก ข. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายในช่วงจุดเดือดอุณหภูมิ 450-455 K

ตารางที่ ข.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 450-455 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
1	12	1	0	3	0
2	10	0	0	1	2
3	11	0	0	1	1
4	10	2	0	1	2
5	7	0	1	1	0
6	5	1	2	0	0
7	8	2	0	0	1
8	12	6	0	0	3
9	7	1	0	0	2
10	2	0	0	0	0
11	9	4	0	0	1
12	12	5	0	0	2
13	11	2	0	2	0
14	3	0	0	0	0
15	10	0	0	1	2
16	8	0	0	4	0
17	12	2	0	0	1
18	4	0	1	0	0
19	6	0	1	0	0
20	8	1	0	0	0

ตารางที่ ข.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 450-455 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
21	11	1	0	0	2
22	11	0	0	1	2
23	12	4	0	2	0
24	11	1	0	0	1
25	11	2	0	2	1
26	10	0	0	2	2
27	10	4	0	1	2
28	10	0	0	4	0
29	12	3	0	0	1
30	12	5	0	2	0
31	7	1	0	1	1
32	10	3	0	2	0
33	3	0	0	0	0
34	11	0	0	0	3
35	10	4	0	0	1
36	5	1	2	0	0
37	7	1	0	0	1
38	12	0	0	1	0
39	11	2	0	0	1
40	11	0	0	0	0

ตารางที่ ข.1 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization ในช่วง 450-455 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic
41	9	1	0	2	0
42	9	2	0	0	1
43	7	3	0	0	0
44	10	0	0	2	0
45	12	1	0	1	0
46	5	0	0	0	0
47	10	3	0	0	0
48	12	6	0	0	2
49	10	1	0	1	1
50	9	0	1	0	3
51	9	1	0	0	1
52	10	0	0	2	2
53	11	0	0	0	3
54	11	5	0	0	1
55	12	5	0	2	0
56	12	4	0	1	1
57	11	1	0	1	1
58	10	3	0	2	0
59	11	0	0	0	1
60	7	1	0	0	1

ตารางที่ ข.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 450-455 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
313	8	2	0	0	1	403.5833	0
172	8	3	0	0	1	403.5833	0
857	8	3	0	0	1	403.5833	0
487	8	3	0	0	1	403.5833	0
125	8	3	0	0	1	403.5833	0
568	8	2	0	0	1	403.5833	0
652	8	2	0	0	1	403.5833	0
746	8	2	0	0	1	403.5833	0
481	8	2	0	0	1	403.5833	0
6	8	2	0	0	1	403.5833	0
542	8	0	1	0	0	405.5	0.123457
875	8	2	1	0	0	405.5	0.123457
492	8	1	1	0	0	405.5	0.123457
243	8	1	1	0	0	405.5	0.123457
551	8	1	1	0	0	405.5	0.123457
255	8	1	1	0	0	405.5	0.123457
734	8	1	1	0	0	405.5	0.123457
121	8	1	1	0	0	405.5	0.123457
69	8	0	2	0	0	405.5	0.123457
596	8	0	2	0	0	405.5	0.123457

ตารางที่ ข.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 450-455 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
290	8	1	1	0	0	405.5	0.123457
437	8	1	1	0	0	405.5	0.123457
364	8	1	1	0	0	405.5	0.123457
799	8	0	2	0	0	405.5	0.123457
639	8	0	2	0	0	405.5	0.123457
724	8	0	1	0	0	405.5	0.123457
163	8	0	0	0	0	398.75	0.3125
401	8	0	0	0	0	398.75	0.3125
506	8	0	0	0	0	398.75	0.3125
737	8	0	0	0	1	407	0.493827
485	8	0	0	0	2	407	0.493827
709	8	1	0	0	1	407	0.493827
587	8	0	0	0	2	407	0.493827
303	8	0	0	0	1	407	0.493827
534	8	1	0	0	1	407	0.493827
814	8	1	0	0	1	407	0.493827
96	8	0	0	0	2	407	0.493827
143	8	0	0	0	2	407	0.493827
137	8	0	0	0	2	407	0.493827
949	9	0	0	4	0	407.7833	0.687243

ตารางที่ ข.2 แสดงผลที่ได้จากการ Selection ในช่วง 450-455 K (รอบที่ 1)

Index	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
759	9	0	0	4	0	407.7833	0.687243
856	9	0	0	4	0	407.7833	0.687243
250	9	0	0	4	0	407.7833	0.687243
103	9	0	0	4	0	407.7833	0.687243
846	9	0	0	4	0	407.7833	0.687243
829	9	0	0	4	0	407.7833	0.687243
667	8	1	0	0	0	396.25	0.9375
704	8	1	0	0	0	396.25	0.9375
873	8	1	0	0	0	396.25	0.9375
19	8	1	0	0	0	396.25	0.9375
498	9	0	0	3	0	409.6167	1.139918
782	9	0	0	3	0	409.6167	1.139918
213	9	0	0	3	0	409.6167	1.139918
701	9	0	0	3	0	409.6167	1.139918
650	9	0	0	3	0	409.6167	1.139918
273	9	0	0	3	0	409.6167	1.139918
277	9	0	0	3	0	409.6167	1.139918
972	9	0	0	2	0	412.3214	1.80776
599	9	0	0	2	0	412.3214	1.80776
231	9	0	0	2	0	412.3214	1.80776

ตารางที่ ข.3 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm ในช่วง 450-455 K (รอบที่ 1)

Iteration	C	Double	Triple	Bracket	Cyclic	Predict	Error (%)
1	8	2	0	0	1	403.5833	0
	8	3	0	0	1	403.5833	0





ภาคผนวก ณ. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1

ตารางที่ ฅ.1 แสดงเงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	10	1	3	-3	-3
Upper	15	3	5	-1	-1
Weight	0.05	0.15	0.1	0.4	0.3

ตารางที่ ฅ.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
0	12	0	0	0	1	0	5	0
1	12	0	1	10	0	0	0	0
2	12	0	2	0	0	0	0	2
3	11	1	0	3	0	0	0	0
4	9	0	1	1	0	0	4	0
5	6	0	1	1	0	1	0	0
6	10	0	1	1	0	0	7	0
7	11	0	0	4	0	0	1	2
8	11	0	2	5	0	0	1	0
9	6	0	1	1	0	0	0	1
10	12	1	0	3	1	0	1	0
11	9	0	1	0	0	0	3	2
12	8	0	0	1	0	1	1	0
13	12	3	0	0	0	0	4	0
14	12	0	0	9	0	0	0	0
15	7	1	0	2	0	0	0	0
16	8	1	0	1	0	0	3	1
17	6	0	0	0	0	0	0	1
18	11	0	0	4	0	0	6	0
19	6	0	0	0	0	0	5	0

ตารางที่ ฅ.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
20	11	1	0	1	0	0	5	1
21	11	0	0	3	0	0	8	0
22	11	4	0	0	0	1	0	0
23	12	0	2	0	0	1	0	0
24	9	0	1	1	0	0	2	2
25	12	0	0	3	0	0	3	1
26	11	2	0	2	0	0	0	1
27	12	0	0	4	0	0	3	2
28	10	0	2	2	0	0	3	0
29	11	2	0	0	0	0	1	0
30	12	0	3	0	0	0	2	0
31	12	0	2	0	0	0	1	0
32	8	1	3	0	0	0	0	0
33	12	0	1	0	0	1	4	1
34	10	0	0	5	0	1	0	1
35	12	0	0	5	0	0	0	3
36	12	0	1	1	0	1	2	1
37	12	1	1	0	0	0	0	0
38	12	1	0	1	0	2	3	0
39	11	2	0	0	0	0	1	0

ตารางที่ ฅ.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
40	9	1	0	6	0	0	0	0
41	8	0	1	2	0	0	4	0
42	11	0	2	1	0	0	6	0
43	12	2	0	1	0	0	1	2
44	8	2	0	1	0	0	0	0
45	7	0	0	1	0	0	1	0
46	11	0	3	3	0	0	1	0
47	11	1	0	0	0	0	3	0
48	10	1	0	1	0	0	6	0
49	10	0	3	0	0	1	0	0
50	11	1	0	0	0	1	5	0
51	12	0	1	1	0	0	1	0
52	10	2	0	0	0	0	2	2
53	8	0	0	0	0	1	5	0
54	10	3	0	1	0	1	0	0
55	8	0	0	3	0	0	3	0
56	10	1	0	2	0	0	2	2
57	10	0	0	1	0	0	4	1
58	10	0	3	0	0	0	2	1
59	12	1	0	2	0	0	3	1

ตารางที่ ฅ.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
540	12	1	0	5	0	0	0	2
537	11	0	0	1	0	2	0	2
35	12	0	0	5	0	0	0	3
198	6	1	0	1	0	0	1	0
352	6	1	0	1	0	0	0	0
393	9	0	1	3	0	1	0	0
229	9	0	2	0	0	0	0	0
186	9	0	3	3	0	0	0	0
12	8	0	0	1	0	1	1	0
865	8	0	1	1	0	1	0	0
650	8	0	1	1	0	1	0	0
242	8	0	2	1	0	1	0	0
129	9	0	0	0	0	2	1	0
618	8	0	0	3	0	0	5	0
685	12	1	1	0	0	1	2	0
292	8	0	2	3	0	0	0	0
798	9	0	0	3	0	0	6	0
303	3	0	0	2	0	0	0	0
137	11	1	2	0	0	1	2	0
975	11	1	2	0	0	1	2	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
540	-3.52	2.93	5.5	16.5	27.6	0.066666667
537	-3.4975	2.08	20.1	18.6	16.6	0.073333333
35	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333333
198	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
352	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
393	-3.535	0.12	4.7	17.7	10.6	0.366666667
229	-3.535	0.2	4.8	16	10.6	0.96
186	-3.535	0.12	4.8	16.3	10	1.06
12	-3.535	-0.04	6.4	17	10.6	1.106666667
865	-3.535	-0.04	6.4	17.7	10.6	1.153333333
650	-3.535	-0.04	6.4	17.7	10.6	1.153333333
242	-3.535	-0.04	6.4	17.7	10.6	1.153333333
129	-3.535	-0.04	6.5	17.6	10.6	1.186666667
618	-1.85	0.12	4.9	15	11	1.28
685	-3.17	-0.68	6.5	16.1	6	1.3
292	-3.535	0.12	5.2	15.2	9.5	1.553333333
798	-1.85	0.12	6.1	15	11	1.72
303	1.9325	-0.5	12.1	15.2	28.4	1.793333333
137	-1.765	-0.68	6.5	17.1	6	1.82
975	-1.765	-0.68	6.5	17.1	6	1.82

ตารางที่ ฅ.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRc	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
493	9	2	1	0	0	0	2	0
291	9	2	0	0	0	0	2	0
861	7	0	0	3	0	0	0	2
471	8	2	1	0	0	0	2	0
224	8	3	0	0	0	0	2	0
307	8	0	0	3	0	0	2	0
847	8	0	0	3	0	0	2	0
55	8	0	0	3	0	0	3	0
275	9	0	0	0	0	0	2	0
230	8	0	0	3	0	1	2	0
9	6	0	1	1	0	0	0	1
899	10	0	3	3	0	0	1	0
731	10	0	0	3	1	0	0	0
420	10	0	3	3	0	0	1	0
775	12	0	0	0	0	2	1	2
333	11	0	3	0	0	1	2	0
565	11	0	3	0	0	1	2	0
697	7	0	0	5	0	0	2	0
915	11	0	0	0	0	1	1	3
5	6	0	1	1	0	1	0	0

ตารางที่ ฅ.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
493	-2.485	-3.035	7.2	15.3	4	1.83
291	-2.485	-3.035	7.2	15.3	4	1.83
861	-1.92	0.65	3.35	17.1	14.6	1.84
471	-1.51	-3.035	7.3	15.3	4	1.87
224	-1.075	-3.035	7.3	15.3	4	1.87
307	-1.51	0.12	3.3	15.3	11.8	2.1
847	-1.51	0.12	3.3	15.3	11.8	2.1
55	-1.005	0.12	3.3	15.3	11.8	2.1
275	-2.485	-3.035	7.2	16	4.4	2.276666667
230	-1.78	0.12	4.7	16.3	7.3	2.333333333
9	-0.888333333	0.18	5.15	16.3	8.3	2.526666667
899	-3.889	0.31	6.5	16.3	10	2.544
731	-3.889	0.31	6.5	16.3	10	2.544
420	-3.889	0.31	6.5	16.3	10	2.544
775	-4.62	2.06	20.1	18.6	16.6	2.8
333	-4.16	-0.68	6.5	17.1	4.4	2.873333333
565	-4.16	-0.68	6.5	17.1	4.4	2.873333333
697	-1.27	0.87	6.1	15.1	10.8	2.973333333
915	-3.31	2.06	10.3	18.6	16.6	3.226666667
5	-0.44	-0.36	7.85	17.35	13.55	3.526666667

ตารางที่ ฅ.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
63	10	0	0	2	0	1	1	2
72	8	0	0	0	0	1	2	0
710	8	1	1	0	0	1	0	0
105	8	0	1	1	0	0	1	0
277	9	3	0	0	0	1	0	0
489	9	0	2	1	0	0	0	0
444	9	0	3	1	0	0	1	0
723	12	2	0	3	0	0	1	2
324	12	0	3	0	0	1	2	0
450	12	0	2	0	0	1	2	0
737	12	0	0	0	0	1	2	0
602	8	0	0	0	0	2	1	0
286	8	0	0	0	0	2	1	0
701	12	0	1	0	0	2	2	1
252	10	1	1	0	0	0	2	0
830	7	0	0	5	0	0	0	1
19	6	0	0	0	0	0	5	0
544	8	3	0	0	0	0	1	0
0	12	0	0	0	1	0	5	0
672	12	0	0	0	1	0	6	0

ตารางที่ ฅ.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
63	-0.999	0.56	10.3	18.6	6.3	3.708
72	-1.78	-3.035	6.5	17.1	6.2	3.87
710	-3.71	-0.04	6.5	17.7	6	3.873333333
105	-3.535	0.2	5.2	15.65	7.6	3.903333333
277	-1.38	-0.04	6.5	18.1	4	3.953333333
489	-3.535	0.2	4.8	15.9	7.6	3.966666667
444	-3.535	0.2	4.8	15.9	7.6	3.966666667
723	-3.42	0.81	2.9	17.1	10.7	4.073333333
324	-4.62	-0.68	6.5	16.1	4.4	4.166666667
450	-4.62	-0.68	6.5	16.1	4.4	4.166666667
737	-4.62	-0.68	6.5	16.1	4.4	4.166666667
602	-3.535	-0.04	6.5	17.6	5.1	4.313333333
286	-3.535	-0.04	6.5	17.6	5.1	4.313333333
701	-4.62	-0.68	2.5	16.1	4.4	4.433333333
252	-2.65	0.28	4.7	16	6	4.613333333
830	-1.27	2.25	3.35	15.3	27.6	5.12
19	1.31	-1.75	6.55	15	26	5.14
544	-1.465	0.2	7.3	14.9	4	5.28
0	-3.23	0.83	4	15	9.3	5.293333333
672	-3.23	0.83	4	15	9.3	5.293333333

ตารางที่ ฅ.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
25	12	1	0	5	0	0	0	2
540	12	1	0	5	0	0	0	2
15	12	1	0	5	0	0	0	2
281	12	0	0	5	0	0	1	3
537	11	0	0	1	0	2	0	2
164	11	0	0	1	0	2	0	2
168	11	0	0	1	0	2	0	2
171	11	0	0	1	0	2	0	2
239	11	0	0	1	0	2	0	2
48	11	0	0	5	0	0	0	2
300	12	0	0	5	0	0	0	3
296	12	0	0	5	0	0	0	3
0	11	0	0	5	0	0	0	2
260	11	0	0	5	0	0	0	3
41	12	0	0	5	0	0	0	2
130	11	0	0	5	0	0	0	3
129	11	0	0	5	0	0	0	2
35	12	0	0	5	0	0	0	3
277	12	0	0	5	0	0	0	3
65	12	0	0	5	0	0	0	2

ตารางที่ ๓.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
25	-3.52	2.93	5.5	16.5	27.6	0.066667
540	-3.52	2.93	5.5	16.5	27.6	0.066667
15	-3.52	2.93	5.5	16.5	27.6	0.066667
281	-5.48	2.06	5.5	16.5	27.6	0.073333
537	-3.4975	2.08	20.1	18.6	16.6	0.073333
164	-3.4975	2.08	20.1	18.6	16.6	0.073333
168	-3.4975	2.08	20.1	18.6	16.6	0.073333
171	-3.4975	2.08	20.1	18.6	16.6	0.073333
239	-3.4975	2.08	20.1	18.6	16.6	0.073333
48	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
300	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
296	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
0	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
260	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
41	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
130	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
129	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
35	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
277	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
65	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333

ตารางที่ ฅ.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
76	12	0	0	5	0	0	0	2
1	12	0	0	5	0	0	0	2
503	6	1	0	1	0	0	0	0
358	6	1	0	1	0	0	1	0
357	6	1	0	1	0	0	0	0
353	6	1	0	1	0	0	0	0
352	6	1	0	1	0	0	1	0
351	6	1	0	1	0	0	0	0
619	6	1	0	1	0	0	0	0
550	6	1	0	1	0	0	1	0
558	6	1	0	1	0	0	1	0
572	6	1	0	1	0	0	0	0
579	6	1	0	1	0	0	0	0
582	6	1	0	1	0	0	0	0
4505	6	1	1	1	0	0	0	0
4476	6	2	0	1	0	0	0	0
584	6	1	0	1	0	0	0	0
588	6	1	0	1	0	0	0	0
591	6	1	0	1	0	0	0	0
595	6	1	0	1	0	0	0	0

ตารางที่ ๓.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
76	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
1	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
503	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
358	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
357	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
353	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
352	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
351	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
619	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
550	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
558	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
572	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
579	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
582	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
4505	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
4476	-1.55	-0.36	5	14.9	7.1	0.26
584	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
588	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
591	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
595	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26

ตารางที่ ฅ.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRc	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
602	6	1	0	1	0	0	0	0
610	6	1	0	1	0	0	0	0
627	6	1	0	1	0	0	0	0
617	6	1	0	1	0	0	1	0
625	6	1	0	1	0	0	0	0
198	6	1	0	1	0	0	1	0
362	6	1	0	1	0	0	1	0
364	6	1	0	1	0	0	0	0
548	6	1	0	1	0	0	0	0
374	6	1	0	1	0	0	1	0
491	6	1	0	1	0	0	0	0
489	6	1	0	1	0	0	0	0
484	6	1	0	1	0	0	0	0
530	6	1	0	1	0	0	0	0
483	6	1	0	1	0	0	0	0
482	6	1	0	1	0	0	0	0
477	6	1	0	1	0	0	0	0
475	6	1	0	1	0	0	1	0
474	6	1	0	1	0	0	0	0
470	6	1	0	1	0	0	1	0

ตารางที่ ๓.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
602	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
610	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
627	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
617	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
625	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
198	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
362	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
364	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
548	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
374	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
491	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
489	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
484	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
530	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
483	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
482	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
477	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
475	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
474	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
470	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26

ตารางที่ ฅ.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
1	12	1	0	5	0	0	0	2
2	12	0	0	5	0	0	1	3
10	13	0	0	5	0	0	0	2
4	11	0	0	5	0	0	0	2
5	12	0	0	5	0	0	0	3
6	12	0	0	5	0	0	0	3
7	11	0	0	5	0	0	0	2
8	12	0	0	5	0	0	0	2
9	11	0	0	5	0	0	0	3
11	12	0	0	5	0	0	0	3
12	12	0	0	5	0	0	0	2
44	6	1	0	1	0	0	0	0
43	6	1	1	1	0	0	0	0
42	6	1	0	1	0	0	0	0
41	6	1	0	1	0	0	0	0
37	6	1	0	1	0	0	0	0
39	6	1	0	1	0	0	0	0
38	6	1	0	1	0	0	0	0
45	6	1	0	1	0	0	0	0
36	6	1	1	1	0	0	0	0

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
1	-3.52	2.93	5.5	16.5	27.6	0.066667
2	-5.48	2.06	5.5	16.5	27.6	0.073333
10	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
4	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
5	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
6	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
7	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
8	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
9	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
11	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
12	-5.48	2.08	5.5	16.5	27.6	0.193333
44	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
43	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
42	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
41	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
37	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
39	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
38	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
45	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
36	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26

ตารางที่ ฅ.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
40	6	1	0	1	0	0	0	0
46	6	1	0	1	0	0	1	0
53	6	1	0	1	0	0	1	0
48	6	1	0	1	0	0	0	0
49	6	1	0	1	0	0	1	0
50	6	1	0	1	0	0	0	0
52	6	1	0	1	0	0	1	0
35	6	1	0	1	0	0	1	0
54	6	1	0	1	0	0	1	0
56	6	1	0	1	0	0	1	0
57	6	1	0	1	0	0	1	0
58	6	1	0	1	0	0	0	0
47	6	1	1	1	0	0	0	0
34	6	1	0	1	0	0	0	0
30	6	1	0	1	0	0	0	0
21	6	1	0	1	0	0	0	0
13	6	1	0	1	0	0	0	0
14	6	1	0	1	0	0	1	0
16	6	1	0	1	0	0	0	0
18	6	1	0	1	0	0	0	0

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
40	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
46	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
53	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
48	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
49	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
50	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
52	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
35	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
54	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
56	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
57	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
58	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
47	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
34	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
30	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
21	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
13	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
14	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
16	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
18	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26

ตารางที่ ฅ.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
20	6	1	0	1	0	0	1	0
33	6	1	0	1	0	0	1	0
22	6	1	0	1	0	0	0	0
23	6	1	1	1	0	0	0	0
60	6	1	0	1	0	0	0	0
25	6	2	0	1	0	0	0	0
26	6	1	0	1	0	0	0	0
27	6	1	0	1	0	0	0	0
28	6	1	0	1	0	0	0	0
29	6	1	0	1	0	0	0	0
59	6	1	0	1	0	0	1	0
24	6	1	1	1	0	0	0	0
67	10	0	1	3	0	1	0	0
68	10	0	1	3	0	1	0	0
62	10	0	1	3	0	1	0	0
66	10	0	1	3	0	1	0	0
65	10	0	0	3	0	1	0	0
63	9	0	1	3	0	1	0	0
69	8	0	1	3	0	1	0	0
64	10	0	1	3	0	1	1	0

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
20	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
33	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
22	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
23	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
60	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
25	-1.55	-0.36	5	14.9	7.1	0.26
26	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
27	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
28	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
29	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
59	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
24	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0.26
67	-3.08	0.31	4.7	17.7	10.6	0.293333
68	-3.08	0.31	4.7	17.7	10.6	0.293333
62	-3.08	0.31	4.7	17.7	10.6	0.293333
66	-3.08	0.31	4.7	17.7	10.6	0.293333
65	-3.08	0.31	4.7	17.7	10.6	0.293333
63	-3.535	0.12	4.7	17.7	10.6	0.366667
69	-3.535	0.12	4.7	17.7	10.6	0.366667
64	-3.08	0.31	4.7	16.6	10.6	0.366667

ตารางที่ ๓.6 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 1

Iteration	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
100	12	1	0	5	0	0	0	2

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
10	-3.52	2.93	-5.5	16.5	27.6	0.067



ภาคผนวก ญ. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนักทั้ง 5 ตัวครั้งที่ 2

ตารางที่ ๑.1 แสดงเงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	16	5	7	-2	0
Upper	18	7	9	-4	1
Weight	0.15	0.05	0.1	0.3	0.4



ตารางที่ ๓.๒ แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CR _e	DoubleCC _{Re}	TripleCC	Bracket	Benzene	Cycle _{Re}	SingleCO	DoubleCO
0	11	1	0	0	1	0	1	1
1	9	2	0	0	0	0	1	0
2	6	0	1	1	0	0	3	0
3	12	0	0	4	0	1	0	1
4	9	0	0	1	0	0	1	1
5	12	3	0	6	0	0	0	0
6	12	0	2	1	1	0	0	0
7	12	0	1	5	0	0	4	0
8	11	0	0	1	0	0	3	2
9	12	1	1	1	0	0	5	1
10	12	0	0	0	0	0	10	0
11	9	0	0	0	0	1	6	0
12	10	0	0	3	0	0	1	1
13	10	0	1	3	0	1	0	0
14	11	1	1	2	0	1	2	0
15	7	1	2	0	0	0	1	0
16	11	2	0	4	0	0	2	0
17	12	0	1	2	0	0	1	2
18	11	0	1	1	0	0	3	0
19	11	0	2	2	0	0	5	0

ตารางที่ ๓.๒ แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
20	5	2	0	1	0	0	0	0
21	7	0	1	2	0	0	1	1
22	9	0	0	0	0	1	0	3
23	6	0	1	3	0	0	0	0
24	11	0	0	2	0	1	3	0
25	7	0	0	2	0	0	3	0
26	12	0	0	4	0	1	3	1
27	11	0	3	1	0	0	2	0
28	12	4	0	0	0	1	1	0
29	12	1	0	3	0	2	1	0
30	9	0	1	1	0	0	3	0
31	10	1	1	2	0	0	4	0
32	10	0	0	9	0	0	0	0
33	3	1	0	0	0	0	0	0
34	11	0	0	6	0	0	0	2
35	11	0	4	2	0	0	0	0
36	10	1	1	2	0	0	3	0
37	11	0	1	0	0	1	5	0
38	10	1	0	0	0	1	1	0
39	10	0	1	4	0	1	0	0

ตารางที่ ๓.๒ แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

ลำดับ	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
40	12	0	0	3	0	0	6	0
41	9	1	0	4	0	0	0	1
42	12	2	1	4	0	0	2	0
43	7	1	0	1	0	0	4	0
44	9	0	0	0	0	0	3	1
45	10	1	2	0	0	0	2	1
46	11	2	0	0	0	1	4	0
47	9	0	0	2	0	0	1	1
48	10	1	0	1	1	0	0	0
49	9	0	1	4	0	0	1	1
50	12	1	0	0	0	2	2	1
51	10	0	0	0	0	1	3	1
52	11	0	0	0	1	1	2	0
53	11	0	1	4	0	0	5	0
54	12	0	2	3	0	0	4	0
55	10	0	1	1	0	1	1	1
56	11	3	0	0	0	1	2	0
57	10	1	0	3	0	0	0	1
58	12	0	2	1	0	2	0	0
59	12	0	1	0	0	0	6	1

ตารางที่ ญ.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

ลำดับ	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
854	9	3	0	0	0	0	1	0
343	9	3	1	0	0	0	1	0
826	7	0	0	3	0	0	1	0
627	8	0	0	3	0	0	2	1
156	11	2	1	3	0	0	0	1
613	7	0	0	0	0	0	5	1
889	11	1	1	0	0	0	2	0
321	10	0	1	0	1	0	1	0
912	10	0	2	2	0	0	2	0
753	10	0	0	2	0	0	2	0
363	10	0	3	2	0	0	2	0
42	7	0	0	0	0	0	6	0
954	7	0	0	0	0	0	6	0
945	9	1	0	2	0	1	2	0
61	7	2	0	0	0	0	2	0
24	11	2	0	5	0	0	2	0
990	11	0	0	4	0	1	0	2
314	12	0	0	4	0	1	0	2
701	7	1	0	2	0	1	0	0
242	10	3	0	2	0	0	0	1

ตารางที่ ญ.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
854	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
343	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
826	-0.035	1.63	6.5	15.2	9.5	0.2575
627	-2.463	0.8	4.1	15.3	8.1	0.272036
156	-0.45	1.57	4.7	15.2	3.4	0.362143
613	2.65	2.04	5.7	17.7	11.9	0.583571
889	-2.44	0.83	4.7	15.8	6	0.625357
321	-3.889	1.54	6	16	10	0.632714
912	-3.889	1.5	4.1	15.7	7.2	0.753607
753	-3.889	1.5	4.1	15.7	7.2	0.753607
363	-3.889	1.5	4.1	15.7	7.2	0.753607
42	2.65	2.04	7.2	15	11.9	0.7675
954	2.65	2.04	7.2	15	11.9	0.7675
945	-2.485	0.95	4.9	16.6	7.3	0.812143
61	-1.53	1.32	7.3	15.3	5.9	1.01375
24	-0.45	1.65	4.1	14.7	4.2	1.107321
990	-5.48	2.08	10.3	18.6	9.1	1.111111
314	-5.48	2.08	10.3	18.6	9.1	1.111111
701	0.45	1.52	4.9	17.7	12.5	1.129286
242	-1.246	1.486667	2.7	15.2	5.4	1.140905

ตารางที่ ญ.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
685	10	0	0	2	0	0	3	2
136	10	0	1	2	0	1	2	0
556	9	0	0	3	0	0	2	0
138	9	2	0	0	0	0	3	1
503	9	0	0	3	0	0	0	2
269	11	3	0	3	0	0	0	1
451	10	0	1	2	0	0	0	2
844	9	0	0	5	0	0	0	2
815	10	0	0	3	0	0	7	0
167	10	0	0	3	0	0	2	2
833	7	0	1	4	0	0	1	0
396	8	1	0	0	0	0	4	0
18	12	0	0	2	0	1	1	3
348	6	0	1	0	0	0	2	0
260	7	1	0	2	0	0	1	1
908	12	1	0	0	1	0	2	1
47	10	1	1	0	1	0	0	0
565	10	0	0	4	0	0	1	2
246	10	3	0	2	0	0	0	0
732	8	0	0	0	1	0	2	0

ตารางที่ ญ.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
685	-0.42	1.69	2.9	15.8	6.3	1.358929
136	-3.08	1.5	4.9	16.6	7.3	1.402857
556	-2.485	0.12	7.2	16.3	7.2	1.426429
138	0.83	1.655	5.2	16	4.95	1.480714
503	-0.149	1.77	4.9	17.1	10.7	1.512071
269	-0.45	1.57	4.7	15.2	17.4	1.527857
451	-0.542	1.69	2.9	15.8	6.3	1.541929
844	1.237	1.735	4.9	16.5	27.6	1.567357
815	-1.85	0.31	4.1	15	11	1.6375
167	-0.28	1.69	2.9	17.1	10.7	1.64
833	-1.27	1.2	6.5	14.7	9.5	1.75125
396	0.075	1.86	6	16	11.9	1.753214
18	-4.365	2.06	10.3	18.6	6.7	1.773889
348	0.355333	2.03	6.55	15.95	5.4	1.844946
260	0.45	1.5	4.1	16.4	5	1.846429
908	-1.955	0.83	2.9	15.8	5.1	1.858571
47	-1.98	1.54	5	16	6	1.861429
565	-1.056	1.7	5.5	16.5	9.1	1.912571
246	-1.246	1.095	3.4	15.2	4.2	2.032429
732	-1.51	1.6	3.75	15.6	6.2	2.068571

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
226	8	0	0	0	1	0	2	0
207	11	0	2	4	0	0	2	0
11	10	0	1	4	0	0	0	2
767	10	0	0	2	0	0	1	2
839	12	0	0	0	0	1	1	2
458	12	0	1	2	0	1	0	2
361	6	0	0	0	0	0	2	0
756	6	0	0	0	0	0	1	1
668	12	0	2	2	0	0	1	2
201	12	0	1	2	0	0	1	2
841	12	0	0	2	0	0	1	3
880	12	0	0	2	0	0	1	2
741	12	0	1	2	0	0	1	3
0	6	1	1	0	0	0	2	0
744	10	2	0	2	0	0	0	0
754	10	2	0	2	0	0	0	0
488	10	2	0	2	0	0	0	0
939	10	2	2	2	0	0	0	0
345	10	0	0	1	1	1	0	0
34	12	0	2	4	0	0	2	1

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
226	-1.51	1.6	3.75	15.6	6.2	2.068571
207	-5.48	2.42	4.1	14.7	8.2	2.16375
11	-1.056	1.735	5.5	16.5	9.1	2.192571
767	-0.999	1.69	2.9	15.8	6.3	2.227429
839	-4.62	2.06	10.3	18.6	16.6	2.380317
458	-4.196	2.08	10.3	18.6	6.7	2.440889
361	0.355333	2.03	6.55	15.95	11.55	2.494946
756	-0.075	1.37	8.5	15.8	9.4	2.547143
668	-4.365	2.06	2.9	16.6	6.7	2.556429
201	-4.365	2.06	2.9	16.6	6.7	2.556429
841	-4.365	2.06	2.9	16.6	6.7	2.556429
880	-4.365	2.06	2.9	16.6	6.7	2.556429
741	-4.365	2.06	2.9	16.6	6.7	2.556429
0	0.62	2.03	6.55	15.13333	13.8	2.5725
744	-1.98	1.546	3.4	15.2	4.2	2.676571
754	-1.98	1.546	3.4	15.2	4.2	2.676571
488	-1.98	1.546	3.4	15.2	4.2	2.676571
939	-1.98	1.546	3.4	15.2	4.2	2.676571
345	0.85	2.14	5.9	18.1	10.6	2.690238
34	-5.48	2.42	2.9	15.3	10.4	2.708393

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
427	10	3	0	3	0	0	1	0
465	10	3	0	3	0	0	1	0
0	9	3	0	0	0	0	1	0
4002	9	3	0	0	0	0	1	0
4154	9	3	0	0	0	0	1	0
854	9	3	0	0	0	0	1	0
343	9	3	1	0	0	0	1	0
162	9	3	0	0	0	0	1	0
158	9	3	0	0	0	0	1	0
152	9	3	0	0	0	0	1	0
254	9	3	1	0	0	0	1	0
53	9	3	0	0	0	0	1	0
40	9	3	0	0	0	0	1	0
392	9	3	1	0	0	0	1	0
276	9	3	1	0	0	0	1	0
390	9	3	1	0	0	0	1	0
220	9	3	1	0	0	0	1	0
9302	9	3	0	0	0	0	1	0
128	9	3	0	0	0	0	1	0
198	9	3	1	0	0	0	1	0

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
427	-2.71	1.095	3.4	15.2	4.2	0.031429
465	-2.71	1.095	3.4	15.2	4.2	0.031429
0	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
4002	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
4154	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
854	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
343	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
162	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
158	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
152	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
254	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
53	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
40	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
392	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
276	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
390	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
220	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
9302	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
128	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
198	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
104	9	3	0	0	0	0	1	0
9399	9	3	0	0	0	0	1	0
112	9	3	0	0	0	0	1	0
78	9	3	0	0	0	0	1	0
310	9	3	1	0	0	0	1	0
324	9	3	1	0	0	0	1	0
354	9	3	2	0	0	0	1	0
110	9	3	0	0	0	0	1	0
358	9	3	1	0	0	0	1	0
2	9	3	0	0	0	0	1	0
208	9	3	1	0	0	0	1	0
1	9	3	1	0	0	0	1	0
362	9	3	1	0	0	0	1	0
12	9	3	0	0	0	0	1	0
348	9	3	1	0	0	0	1	0
4422	11	3	0	3	0	2	0	0
30	9	3	0	4	0	1	0	2
3962	9	2	2	2	0	0	0	0
7967	9	2	0	2	0	0	0	0
3958	9	2	0	2	0	0	0	0

ตารางที่ ญ.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
104	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
9399	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
112	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
78	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
310	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
324	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
354	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
110	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
358	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
2	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
208	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
1	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
362	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
12	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
348	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
4422	-0.45	1.57	4.5	17.7	6.6	0.050714
30	-0.98	1.46	10.3	19.2	9.1	0.061111
3962	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
7967	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
3958	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
2504	9	2	2	2	0	0	0	0
304	9	2	0	2	0	0	0	0
7889	9	2	2	2	0	0	0	0
7973	9	2	0	2	0	0	0	0
308	9	2	2	2	0	0	0	0
2502	9	2	0	2	0	0	0	0
8141	9	2	2	2	0	0	0	0
7859	9	2	0	2	0	0	0	0
8063	9	2	0	2	0	0	0	0
4076	9	2	0	2	0	0	0	0
7977	9	2	0	2	0	0	0	0
4108	9	2	0	2	0	0	0	0
6198	10	3	0	2	0	0	2	1
6234	10	3	0	2	0	0	2	1
3516	10	3	0	2	0	0	2	1
3502	10	3	0	2	0	0	2	1
3498	10	3	0	2	0	0	2	1
3538	10	3	0	2	0	0	2	1
3508	10	3	0	2	0	0	2	1
657	10	3	0	2	0	0	2	1

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
2504	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
304	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
7889	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
7973	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
308	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
2502	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
8141	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
7859	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
8063	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
4076	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
7977	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
4108	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
6198	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
6234	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
3516	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
3502	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
3498	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
3538	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
3508	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
657	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
0	10	3	1	3	0	0	1	0
28	9	3	1	0	0	0	1	0
31	9	3	1	0	0	0	1	0
26	9	3	2	0	0	0	1	0
25	9	3	1	0	0	0	1	0
24	9	3	1	0	0	0	1	0
23	9	3	0	0	0	0	1	0
32	9	3	1	0	0	0	1	0
33	9	3	0	0	0	0	1	0
18	9	3	0	0	0	0	1	0
17	9	3	0	0	0	0	1	0
29	9	3	2	0	0	0	1	0
14	9	3	1	0	0	0	1	0
15	9	3	2	0	0	0	1	0
7	9	3	0	0	0	0	1	0
2	9	3	0	0	0	0	1	0
5	9	3	0	0	0	0	1	0
6	9	3	1	0	0	0	1	0
8	9	3	0	0	0	0	1	0
30	9	3	1	0	0	0	1	0

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
0	-2.71	1.095	3.4	15.2	4.2	0.031429
28	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
31	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
26	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
25	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
24	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
23	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
32	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
33	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
18	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
17	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
29	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
14	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
15	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
7	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
2	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
5	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
6	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
8	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321
30	-2.3325	0.2	4.8	14.9	4	0.037321

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
35	11	3	1	3	0	2	0	0
36	9	3	0	4	0	1	0	2
46	9	2	2	2	0	0	0	0
40	9	2	2	2	0	0	0	0
43	9	2	0	2	0	0	0	0
37	9	2	2	2	0	0	0	0
47	9	2	0	2	0	0	0	0
50	9	2	0	2	0	0	0	0
42	9	2	2	2	0	0	0	0
51	9	2	0	2	0	0	0	0
41	9	2	0	2	0	0	0	0
49	9	2	0	2	0	0	0	0
56	10	3	0	2	0	0	2	1
53	10	3	0	2	0	0	2	1
59	10	3	0	2	0	0	2	1
60	10	3	0	2	0	0	2	1
54	10	3	0	2	0	0	2	1
55	10	3	0	2	0	0	2	1
74	11	1	1	0	0	0	2	1
79	11	1	1	0	0	0	2	1

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
35	-0.45	1.57	4.5	17.7	6.6	0.050714
36	-0.98	1.46	10.3	19.2	9.1	0.061111
46	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
40	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
43	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
37	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
47	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
50	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
42	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
51	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
41	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
49	-3.535	1.546	7.2	15.2	4.2	0.073
56	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
53	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
59	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
60	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
54	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
55	-1.77467	1.12	2.9	15.9	15.9	0.083607
74	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
79	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
90	11	1	1	0	0	0	2	1
78	11	1	0	0	1	0	2	1
77	11	1	1	0	0	0	2	1
88	11	1	0	0	1	0	2	1
87	11	1	1	0	1	0	2	1
84	11	1	1	0	0	0	2	1
66	11	1	0	0	0	0	2	1
67	11	1	1	0	3	0	2	1
68	11	1	1	0	0	0	2	1
76	11	1	1	0	0	0	2	1
83	11	1	1	0	0	0	2	1
71	11	1	1	0	0	0	2	1
72	11	1	0	0	0	0	2	1
73	11	1	0	0	0	0	2	1
75	11	1	0	0	0	0	2	1
69	11	1	0	0	0	0	2	1
65	11	1	1	0	0	0	2	1
81	11	1	1	0	0	0	2	1
80	11	1	1	0	0	0	2	1
91	7	1	1	0	0	0	4	1

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
90	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
78	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
77	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
88	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
87	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
84	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
66	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
67	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
68	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
76	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
83	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
71	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
72	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
73	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
75	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
69	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
65	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
81	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
80	-2.44	0.83	2.9	15.8	5.1	0.111071
91	2.65	2.11	5.1	17.7	11.9	0.147857

ตารางที่ ๖.6 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Iteration	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
100	10	3	0	3	0	0	1	0

Iteration	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
100	-2.71	1.095	3.4	15.2	4.2	0.031429



ภาคผนวก ก. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนักทั้ง 5 ตัวครั้งที่ -3

ตารางที่ ๑.1 แสดงเงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	18	8	4	1	2
Upper	20	10	6	3	3
Weight	0.15	0.05	0.2	0.35	0.25

ตารางที่ ๓.๒ แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
0	12	0	2	0	0	0	8	0
1	11	0	0	1	0	0	7	1
2	11	0	0	0	0	0	9	0
3	12	0	1	0	0	1	6	0
4	10	1	2	1	0	0	0	0
5	10	1	0	1	0	0	7	0
6	12	0	1	9	0	0	0	0
7	10	0	0	3	0	0	3	2
8	7	1	0	0	0	0	3	0
9	9	0	0	0	0	1	3	1
10	11	0	0	2	0	0	6	1
11	9	0	1	1	0	0	3	1
12	12	1	2	2	0	0	2	1
13	12	1	2	0	0	0	0	0
14	11	2	2	1	0	0	0	1
15	11	0	1	2	0	0	1	2
16	10	0	3	2	0	0	0	0
17	11	1	4	1	0	0	0	0
18	11	0	2	0	0	0	2	2
19	8	0	0	2	0	0	0	1

ตารางที่ ๓.๒ แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
20	11	3	0	0	0	0	2	11
21	11	0	1	0	0	1	0	11
22	11	0	0	2	0	0	2	11
23	12	2	1	3	0	0	1	12
24	11	1	0	1	0	1	1	11
25	12	0	0	7	0	0	0	12
26	10	1	0	2	0	0	3	10
27	11	0	0	0	0	0	1	11
28	12	1	1	1	0	0	2	12
29	12	3	1	0	0	0	4	12
30	12	2	0	0	0	0	4	12
31	12	0	0	3	0	1	1	12
32	12	0	2	3	0	0	0	12
33	11	2	0	0	0	1	3	11
34	12	3	0	0	0	0	2	12
35	12	0	0	7	0	0	1	12
36	10	0	0	3	0	1	2	10
37	10	0	0	1	1	0	1	10
38	8	0	3	0	0	0	1	8
39	8	0	0	2	0	0	0	8

ตารางที่ ๓.๒ แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
40	12	0	0	8	0	0	0	1
41	10	1	0	1	0	0	3	1
42	12	1	0	4	0	1	0	0
43	7	0	0	0	1	0	1	0
44	5	0	0	0	0	0	1	0
45	9	2	0	2	0	1	0	0
46	12	1	0	6	0	0	2	0
47	10	0	2	2	0	0	2	0
48	11	0	0	1	0	1	3	1
49	10	2	0	0	0	1	1	0
50	12	0	2	0	0	1	1	0
51	8	0	0	3	0	0	0	1
52	11	1	3	1	0	0	0	1
53	10	1	0	3	0	0	0	0
54	12	1	0	2	0	0	0	3
55	11	1	0	2	0	0	0	2
56	11	0	0	3	0	0	0	2
57	8	1	0	1	0	1	1	0
58	9	0	0	0	0	0	8	0
59	8	1	1	1	0	1	0	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
375	12	0	2	1	0	0	3	0
65	10	0	0	5	0	0	0	1
526	8	0	0	5	0	0	1	0
546	10	0	1	5	0	0	2	0
877	9	0	0	5	0	0	1	1
956	9	0	0	0	1	0	3	0
919	10	0	0	6	0	0	1	1
339	10	0	0	8	0	0	0	1
865	10	0	0	6	0	0	1	1
659	8	0	0	7	0	0	0	0
881	10	0	0	7	0	0	0	1
455	9	0	1	2	0	0	3	0
856	8	0	0	1	0	0	1	3
767	9	0	0	4	0	0	3	0
494	10	0	2	5	0	0	0	0
58	10	0	2	5	0	0	1	0
866	10	0	0	10	0	0	0	0
806	10	0	0	9	0	0	0	0
221	10	0	1	7	0	0	0	0
965	9	1	0	3	0	0	3	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
375	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
65	2.46	3	5.5	15.3	9.8	0.45
526	2.46	3	5.2	15.3	9.5	0.45
546	2.46	3	4.1	15.3	8.2	0.45
877	2.46	3	4.9	15.3	9.8	0.45
956	1.74	2.683333	4.8	15.85	7.1	0.470833
919	2.46	3	5.5	15.1	9.8	0.483333
339	2.46	3	5.5	15.1	9.8	0.483333
865	2.46	3	5.5	15.1	9.8	0.483333
659	2.46	3	5.2	15.1	9.5	0.483333
881	2.46	3	5.5	15.1	9.8	0.483333
455	1.74	2.71	6.1	15.5	7.2	0.583333
856	1.28	3.06	3.9	15.8	10.5	0.616667
767	1.74	3	6.1	14.7	7.2	0.716667
494	2.46	3	6.5	15.3	10	0.783333
58	2.46	3	6.5	15.3	10	0.783333
866	2.46	3	6.5	15.1	10	0.816667
806	2.46	3	6.5	15.1	10	0.816667
221	2.46	3	6.5	15.1	10	0.816667
965	1.74	2.97	6.1	16.3	4.2	0.825

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
439	12	1	2	1	0	0	3	0
5	9	0	1	1	0	0	0	3
708	8	0	0	5	0	0	0	1
77	9	0	1	5	0	0	1	0
799	9	0	0	7	0	0	1	0
329	9	0	0	8	0	0	1	0
319	12	0	1	3	0	0	3	2
614	12	0	1	3	0	0	3	2
733	9	0	0	5	0	0	2	0
475	12	0	2	0	0	0	3	2
42	11	0	1	0	0	0	3	2
64	11	0	1	0	0	0	3	2
780	8	0	0	0	0	0	2	3
284	9	1	0	0	0	0	1	3
880	9	0	0	0	0	0	1	3
285	7	0	0	0	0	0	5	0
258	7	0	0	0	0	0	7	0
828	10	1	0	1	0	1	0	1
781	10	1	1	1	0	1	0	1
738	10	0	1	0	0	1	0	1

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
439	1.34	2.42	4.1	15.8	4.2	0.841667
5	1.28	3.325	5.3	15.8	10.5	0.958333
708	2.46	3	3.35	15.3	9.8	1.1
77	2.46	3	7.2	15.3	10	1.25
799	2.46	3	7.2	15.1	10	1.283333
329	2.46	3	7.2	15.1	10	1.283333
319	1.34	3.03	2.9	17.1	9.1	1.3
614	1.34	3.03	2.9	17.1	9.1	1.3
733	2.46	3	7.2	15.3	7.2	1.35
475	1.34	3.03	2.9	16.6	10.5	1.433333
42	1.34	3.04	2.9	16.6	10.5	1.45
64	1.34	3.04	2.9	16.6	10.5	1.45
780	1.28	3.63	5.2	15.8	10.5	1.466667
284	1.28	3.63	4.9	15.8	10.5	1.466667
880	1.28	3.63	4.9	15.8	10.5	1.466667
285	2.65	2.04	7.2	15	11.9	1.49
258	2.65	2.04	7.2	15	11.9	1.49
828	0.85	2.8	5.95	17.7	4.7	1.5125
781	0.85	2.8	5.95	17.7	4.7	1.5125
738	0.85	2.58	5.95	17.7	4.7	1.5125

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
15	10	1	0	5	0	0	1	0
663	10	1	0	6	0	0	0	0
145	10	1	0	6	0	0	0	0
373	11	0	1	2	0	0	3	2
636	8	0	0	0	0	0	1	3
942	10	2	0	0	0	1	1	1
548	9	1	0	5	0	0	0	0
370	9	1	0	0	0	0	3	0
839	9	1	2	0	0	0	3	0
53	8	0	1	0	0	0	0	3
862	12	0	2	2	0	0	3	1
984	9	0	2	1	0	0	3	0
777	12	0	0	7	0	0	3	1
609	12	0	1	5	0	0	3	1
312	10	1	0	0	0	1	3	1
196	6	0	1	0	0	0	4	0
908	12	0	0	2	0	1	3	2
768	11	1	0	3	0	1	3	0
191	11	0	1	2	0	1	3	0
292	12	1	0	0	0	1	3	2

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
15	2.46	2.54	3.4	15.3	4.2	1.525
663	2.46	2.54	3.4	15.1	4.2	1.558333
145	2.46	2.54	3.4	15.1	4.2	1.558333
373	1.34	3.04	2.9	16.6	6.7	1.5625
636	1.28	3.63	3.9	15.8	10.5	1.566667
942	0.85	2.15	6.3	17.6	5.1	1.679167
548	2.46	2.54	7.2	15.3	4.2	1.725
370	1.74	3.77	4.8	15.85	6.6	1.816667
839	1.74	3.77	4.8	15.85	6.6	1.816667
53	1.28	3.63	3.533333	15.8	10.5	1.933333
862	1.34	2.42	2.9	14.8	5.1	1.995833
984	1.74	3.77	6.5	15.5	10.2	2.053333
777	1.34	4.12	6.1	14.7	9.8	2.483333
609	1.34	4.12	6.1	14.7	9.8	2.483333
312	0.83	3.36	6.3	16.65	5.7	2.5025
196	1.31	2.03	6.55	16	30	2.7
908	1.34	3.03	10.3	18.6	6.7	3.079167
768	1.34	4.67	4.5	16.65	7.3	3.095833
191	1.34	4.67	4.5	16.65	7.3	3.095833
292	1.34	3.03	10.3	20.2	12.6	3.206667

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
4120	7	0	0	0	0	0	5	1
676	7	0	0	0	0	0	5	1
3318	12	0	0	5	0	0	3	2
3723	12	0	0	5	0	0	3	2
4872	12	0	0	5	0	0	3	2
3413	12	0	0	5	0	0	3	2
867	9	0	0	2	0	1	3	0
3488	9	0	0	2	0	1	3	0
4064	9	0	0	2	0	1	3	0
6468	9	0	0	2	0	1	3	0
3456	9	0	0	2	0	1	3	0
170	12	0	2	1	0	0	3	0
171	12	0	2	1	0	0	3	0
96	11	0	2	1	0	0	3	0
5417	12	0	2	1	0	0	3	0
89	12	0	2	1	0	0	3	0
147	12	0	2	1	0	0	3	0
5403	11	0	2	1	0	0	3	0
168	11	0	2	1	0	0	3	0
2652	12	0	2	1	0	0	3	0

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
4120	2.65	2.04	5.7	17.7	11.9	0.24
676	2.65	2.04	5.7	17.7	11.9	0.24
3318	1.34	3.03	6.1	17.1	9.8	0.266667
3723	1.34	3.03	6.1	17.1	9.8	0.266667
4872	1.34	3.03	6.1	17.1	9.8	0.266667
3413	1.34	3.03	6.1	17.1	9.8	0.266667
867	1.74	2.71	4.5	16.65	7.3	0.3125
3488	1.74	2.71	4.5	16.65	7.3	0.3125
4064	1.74	2.71	4.5	16.65	7.3	0.3125
6468	1.74	2.71	4.5	16.65	7.3	0.3125
3456	1.74	2.71	4.5	16.65	7.3	0.3125
170	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
171	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
96	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
5417	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
89	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
147	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
5403	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
168	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
2652	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667

ตารางที่ ฎ.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
133	12	0	2	1	0	0	3	0
5394	11	0	2	1	0	0	3	0
2724	12	0	2	1	0	0	3	0
86	12	0	2	1	0	0	3	0
5404	12	0	2	1	0	0	3	0
155	12	0	2	1	0	0	3	0
158	12	0	2	1	0	0	3	0
132	12	0	2	1	0	0	3	0
137	12	0	2	1	0	0	3	0
139	12	0	2	1	0	0	3	0
129	12	0	2	1	0	0	3	0
128	11	0	2	1	0	0	3	0
126	12	0	2	1	0	0	3	0
145	12	0	2	1	0	0	3	0
121	12	0	2	1	0	0	3	0
2649	12	0	2	1	0	0	3	0
149	12	0	2	1	0	0	3	0
116	12	0	2	1	0	0	3	0
115	11	0	2	1	0	0	3	0
151	12	0	2	1	0	0	3	0

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
133	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
5394	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
2724	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
86	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
5404	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
155	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
158	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
132	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
137	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
139	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
129	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
128	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
126	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
145	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
121	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
2649	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
149	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
116	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
115	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
151	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
112	12	0	2	1	0	0	3	0
153	12	0	2	1	0	0	3	0
109	11	0	2	1	0	0	3	0
5390	11	0	2	1	0	0	3	0
104	12	0	2	1	0	0	3	0
50	12	0	2	1	0	0	3	0
2713	12	0	2	1	0	0	3	0
18	12	0	2	1	0	0	3	0
46	12	0	2	1	0	0	3	0
32	12	0	2	1	0	0	3	0
5386	11	0	2	1	0	0	3	0
26	12	0	2	1	0	0	3	0
5385	12	0	2	1	0	0	3	0
24	12	0	2	1	0	0	3	0
22	12	0	2	1	0	0	3	0
2610	12	0	2	1	0	0	3	0
2726	12	0	2	1	0	0	3	0
41	12	0	2	1	0	0	3	0
5435	12	0	2	1	0	0	3	0
3552	12	0	2	1	0	0	3	0

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
112	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
153	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
109	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
5390	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
104	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
50	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
2713	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
18	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
46	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
32	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
5386	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
26	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
5385	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
24	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
22	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
2610	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
2726	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
41	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
5435	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
3552	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
0	7	0	0	0	0	0	5	1
1	12	0	0	5	0	0	3	2
4	12	0	0	5	0	0	3	2
5	9	0	0	2	0	1	3	0
6	9	0	0	2	0	1	3	0
7	9	0	0	2	0	1	3	0
27	12	0	2	1	0	0	3	0
30	12	0	2	1	0	0	3	0
32	12	0	2	1	0	0	3	0
33	12	0	2	1	0	0	3	0
34	12	0	2	1	0	0	3	0
35	11	0	2	1	0	0	3	0
37	12	0	2	1	0	0	3	0
44	12	0	2	1	0	0	3	0
43	12	0	2	1	0	0	3	0
26	11	0	2	1	0	0	3	0
47	11	0	2	1	0	0	3	0
48	12	0	2	1	0	0	3	0
49	14	0	2	1	0	0	3	0
50	11	0	2	1	0	0	3	0

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
0	2.65	2.04	5.7	17.7	11.9	0.24
1	1.34	3.03	6.1	17.1	9.8	0.266667
4	1.34	3.03	6.1	17.1	9.8	0.266667
5	1.74	2.71	4.5	16.65	7.3	0.3125
6	1.74	2.71	4.5	16.65	7.3	0.3125
7	1.74	2.71	4.5	16.65	7.3	0.3125
27	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
30	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
32	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
33	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
34	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
35	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
37	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
44	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
43	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
26	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
47	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
48	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
49	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
50	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
42	15	0	2	1	0	0	3	0
23	12	0	2	1	0	0	3	0
39	12	0	2	1	0	0	3	0
22	12	0	2	1	0	0	3	0
20	12	0	2	1	0	0	3	0
19	12	0	2	1	0	0	3	0
18	12	0	2	1	0	0	3	0
11	12	0	2	1	0	0	3	0
17	12	0	2	1	0	0	3	0
16	11	0	2	1	0	0	3	0
15	12	0	2	1	0	0	3	0
14	12	0	2	1	0	0	3	0
12	11	0	2	1	0	0	3	0
53	8	0	0	5	0	0	1	0
54	10	0	0	5	0	0	2	0
56	8	0	0	5	0	0	1	0
57	8	0	0	5	0	0	1	0
58	10	0	0	5	0	0	2	0
59	8	0	0	5	0	0	1	0
78	9	0	0	5	0	0	0	1

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
42	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
23	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
39	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
22	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
20	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
19	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
18	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
11	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
17	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
16	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
15	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
14	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
12	1.34	2.42	4.1	15.8	10.5	0.416667
53	2.46	3	5.2	15.3	9.5	0.45
54	2.46	3	4.1	15.3	8.2	0.45
56	2.46	3	5.2	15.3	9.5	0.45
57	2.46	3	5.2	15.3	9.5	0.45
58	2.46	3	4.1	15.3	8.2	0.45
59	2.46	3	5.2	15.3	9.5	0.45
78	2.46	3	5.3	15.3	9.8	0.45

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
62	10	0	1	5	0	0	1	1
74	10	0	0	5	0	0	0	1
75	8	0	1	5	0	0	1	0
65	8	0	0	5	0	0	1	0
66	8	0	0	5	0	0	1	0
67	8	0	0	5	0	0	0	0
68	8	0	0	5	0	0	1	0
69	9	0	0	5	0	0	0	1
61	8	0	0	5	0	0	1	0
64	8	0	0	5	0	0	1	0
72	10	1	0	5	0	0	0	1
77	10	0	1	5	0	0	2	0
71	9	0	0	5	0	0	1	1
76	9	0	0	5	0	0	2	1
45	12	0	2	2	0	0	3	0
40	12	0	2	3	0	0	3	0
31	11	0	2	4	0	0	3	0
13	12	0	2	5	0	0	3	0
38	12	0	2	5	0	0	3	0
29	12	0	2	1	0	1	3	0

ตารางที่ ๕.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
62	2.46	3	5.5	15.3	9.8	0.45
74	2.46	3	5.5	15.3	9.8	0.45
75	2.46	3	5.2	15.3	9.5	0.45
65	2.46	3	5.2	15.3	9.5	0.45
66	2.46	3	5.2	15.3	9.5	0.45
67	2.46	3	5.2	15.3	9.5	0.45
68	2.46	3	5.2	15.3	9.5	0.45
69	2.46	3	5.3	15.3	9.8	0.45
61	2.46	3	5.2	15.3	9.5	0.45
64	2.46	3	5.2	15.3	9.5	0.45
72	2.46	2.54	5.5	15.3	9.8	0.45
77	2.46	3	4.1	15.3	8.2	0.45
71	2.46	3	4.9	15.3	9.8	0.45
76	2.46	3	6.1	15.3	9.8	0.516667
45	1.34	2.42	4.1	14.8	8.2	0.533333
40	1.34	2.42	4.1	14.8	8.2	0.533333
31	1.34	2.42	4.1	14.7	8.2	0.55
13	1.34	2.42	4.1	14.7	8.2	0.55
38	1.34	2.42	4.1	14.7	8.2	0.55
29	1.34	2.42	3.4	16.65	7.3	0.9125

ตารางที่ ๖.6 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 5 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Iteration	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
100	10	7	0	0	0	0	0	5

Iteration	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
100	2.65	2.04	-5.7	17.7	11.9	0.24



ภาคผนวก ก. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1

ตารางที่ ๑.1 แสดงเงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	10	1	3	0	-1
Upper	15	3	5	2	1
Weight	0	0	0.25	0.35	0.4

ตารางที่ ๒.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CR _e	DoubleCC _{Re}	TripleCC	Bracket	Benzene	Cycle _{Re}	SingleCO	DoubleCO
0	7	2	0	1	0	0	0	0
1	11	0	0	2	0	0	1	0
2	8	2	0	0	0	0	1	1
3	7	1	1	2	0	0	1	0
4	11	0	0	7	0	0	0	2
5	11	2	0	2	0	1	0	0
6	6	1	2	0	0	0	0	0
7	11	1	0	1	0	0	1	2
8	11	4	0	0	0	0	0	0
9	12	1	0	3	0	0	4	0
10	5	2	0	0	0	0	0	0
11	12	1	0	0	0	0	7	1
12	12	1	4	0	0	0	1	0
13	7	1	0	0	0	0	4	0
14	11	0	2	2	0	0	0	0
15	8	2	1	0	0	0	1	0
16	10	0	0	2	0	0	4	2
17	12	0	3	0	0	0	1	2
18	12	0	1	1	0	0	0	3
19	12	0	0	2	0	1	5	0

ตารางที่ ฎ.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CR _e	DoubleCC _{Re}	TripleCC	Bracket	Benzene	Cycle _{Re}	SingleCO	DoubleCO
20	11	1	1	0	0	1	0	1
21	10	0	0	1	0	2	1	0
22	7	0	0	7	0	0	0	0
23	11	0	2	1	0	1	1	1
24	6	0	1	3	0	0	0	0
25	10	0	1	2	0	0	0	3
26	12	2	0	2	0	0	1	2
27	6	1	0	0	0	0	0	0
28	11	0	1	0	1	0	0	0
29	11	1	0	4	0	0	0	1
30	8	0	0	1	0	0	0	0
31	11	1	0	3	0	0	1	2
32	7	1	0	0	0	0	2	0
33	6	0	0	1	0	1	0	1
34	11	0	0	0	0	1	4	1
35	10	1	0	3	0	0	2	1
36	11	0	0	1	0	0	1	3
37	8	0	0	2	0	1	3	0
38	12	0	0	1	0	0	7	1
39	12	1	0	2	1	0	0	0

ตารางที่ ฎ.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
40	12	0	3	1	0	0	4	0
41	12	1	0	1	1	0	3	0
42	11	0	0	0	0	1	4	2
43	11	5	0	0	0	0	1	0
44	10	1	0	1	0	0	3	1
45	11	3	0	3	0	0	0	0
46	11	3	1	0	0	0	3	0
47	12	1	0	2	0	1	4	0
48	11	0	0	1	0	1	7	0
49	4	1	0	0	0	0	0	1
50	8	0	0	1	0	0	7	0
51	11	1	0	0	0	0	1	1
52	12	0	0	0	0	1	3	3
53	11	0	0	0	0	2	4	0
54	11	0	1	6	0	0	3	0
55	12	1	0	2	0	0	2	0
56	10	0	1	2	0	0	4	1
57	12	1	0	1	0	1	4	0
58	12	1	0	0	0	1	3	2
59	11	2	1	2	0	0	0	1

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
986	5	0	1	2	0	0	0	0
205	6	0	1	1	0	0	3	0
246	11	1	1	0	0	0	3	0
641	11	0	4	0	0	0	3	0
611	12	0	3	0	0	1	3	0
727	11	0	0	0	0	0	3	0
629	5	0	2	0	0	0	0	0
506	7	0	0	0	0	0	1	2
357	12	1	1	0	0	0	3	0
498	7	0	1	0	0	0	1	2
390	4	0	0	2	0	0	0	0
518	4	0	0	2	0	0	1	0
321	11	0	3	0	0	0	3	1
75	5	0	0	1	0	0	1	0
599	5	0	0	1	0	0	2	0
268	12	0	0	0	0	1	3	1
852	11	0	0	0	0	2	3	1
385	12	1	0	0	0	1	3	1
592	7	1	0	1	0	0	1	0
667	8	1	1	0	0	0	4	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
986	0.896	0.12	3.8	15.2	13.3	0
205	0.985	1.08	4.9	15.3	9.6	0
246	1.34	0.83	4.6	15.8	6	0
641	1.34	0.83	4.6	15.8	7.1	0
611	1.34	0.83	3.4	16.65	7.1	0
727	1.34	0.83	4.6	15.8	7.1	0
629	1.5275	0.085	3.8	15.4	5.4	0
506	0.21	0.846667	5	16.8	10.5	0
357	1.34	0.83	4.6	15.8	6	0
498	0.21	0.846667	5	16.8	10.5	0
390	1.05	0.35	5.1	15.2	14.7	0.08
518	1.05	0.35	5.1	15.2	14.7	0.08
321	1.34	0.83	2.9	14.8	5.1	0.133333
75	0.18	0.085	5.2	15.8	13.3	0.16
599	0.403333	0.186667	5.25	15.65	13.95	0.2
268	1.34	0.83	2.5	16.65	4.5	0.666667
852	1.34	0.83	2.5	16.65	4.5	0.666667
385	1.34	0.83	2.5	16.65	5.7	0.666667
592	0.45	2.09	5.3	15	4.2	0.69
667	0.075	1.86	6	16.2	11.9	0.8

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
736	8	1	1	0	0	0	4	0
193	6	0	1	2	0	0	2	0
144	9	0	1	3	0	0	3	0
483	6	1	0	2	0	0	2	0
674	7	1	0	3	0	0	2	0
577	12	1	2	0	0	0	3	1
794	7	1	1	1	0	0	0	1
992	7	2	0	1	0	0	0	1
214	4	0	0	0	0	0	2	0
484	7	1	1	2	0	0	0	0
937	7	1	0	2	0	0	0	0
573	11	1	0	0	0	2	3	0
361	11	1	1	0	0	1	3	0
933	5	1	0	2	0	0	1	0
600	10	0	1	0	0	1	1	1
658	7	1	0	1	0	1	1	0
378	7	2	1	1	0	0	0	0
429	7	2	0	2	0	0	1	0
814	7	2	1	1	0	0	0	0
314	5	1	0	0	0	1	0	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
736	0.075	1.86	6	16.2	11.9	0.8
193	0.355333	0.956667	6.1	15.4	10.9	0.88
144	1.74	0.8	6.1	16.3	7.2	0.88
483	0.62	0.956667	6.1	15.1	5.1	0.88
674	0.67	0.87	6.1	15.3	4.2	0.88
577	1.34	0.83	6.1	14.8	5.1	0.88
794	0.45	1.03	6.2	16.3	6.9	0.96
992	0.45	1.52	6.2	15.2	6.9	0.96
214	1.269	0.89	6.3	15.4	6	1.04
484	0.45	1.03	6.5	15	4.2	1.2
937	0.45	1.03	6.5	15	4.2	1.2
573	1.34	0.83	6.5	16.65	6	1.2
361	1.34	0.83	6.5	16.65	6	1.2
933	0.896	0.12	6.7	15	15.6	1.36
600	0.85	2.08	6.3	17.6	4.5	1.44
658	0.45	2.09	6.35	17.15	12.5	1.53
378	0.45	1.52	7.3	15.2	4.2	1.84
429	0.45	1.5	7.3	15.2	4.2	1.84
814	0.45	1.52	7.3	15.2	4.2	1.84
314	0.943	0.28	7.6	16.5	6.8	2.08

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
260	12	1	2	3	0	0	3	0
777	12	0	2	3	0	0	3	0
682	12	0	2	2	0	1	3	0
606	11	0	2	3	0	0	3	0
37	11	1	2	1	0	0	3	0
233	7	0	0	0	0	0	2	2
834	11	2	0	1	0	0	3	1
898	11	2	1	0	0	0	3	1
753	11	2	0	0	0	0	3	2
670	5	0	0	0	0	0	4	0
778	7	2	0	1	0	0	1	0
280	10	0	0	0	0	0	4	0
486	10	0	0	0	0	0	4	0
839	12	2	0	0	0	0	3	2
952	12	3	0	0	0	0	3	1
639	12	3	0	0	0	0	3	1
737	5	0	0	0	0	0	2	1
542	10	0	0	1	0	2	0	1
131	10	0	1	1	0	1	0	1
919	10	0	0	1	0	1	0	1

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
260	1.34	2.42	4.1	15.8	4.2	2.1
777	1.34	2.42	4.1	15.8	7.2	2.1
682	1.34	2.42	3.4	16.65	7.3	2.1
606	1.34	2.42	4.1	15.8	7.2	2.1
37	1.34	2.42	4.1	15.8	4.2	2.1
233	0.21	1.17	7.7	16.8	10.5	2.16
834	1.34	2.42	2.9	16	5.1	2.233333
898	1.34	2.42	2.9	16	5.1	2.233333
753	1.34	2.42	2.9	16.8	10.5	2.233333
670	0.137	0.315	7.8	16	16.8	2.24
778	0.45	2.09	7.3	15.2	4.2	2.29
280	0.77	2.48	4	16	15.1	2.4
486	0.77	2.48	4	16	15.1	2.4
839	1.34	2.42	6.1	16.8	10.5	2.98
952	1.34	2.42	6.1	16	5.1	2.98
639	1.34	2.42	6.1	16	5.1	2.98
737	1.5275	1.31	9.4	15.7	5.4	3.52
542	0.85	2.58	5.95	17.7	4.7	3.66
131	0.85	2.58	5.95	17.7	4.7	3.66
919	0.85	2.58	5.95	17.7	4.7	3.66

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อดังค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Iteration	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
1	0	1	2	0	0	0	0	5
	0	1	1	0	0	3	0	6
	1	1	0	0	0	3	0	11
	0	4	0	0	0	3	0	11
	0	3	0	0	1	3	0	12
	0	0	0	0	0	3	0	11
	0	2	0	0	0	0	0	5
	0	0	0	0	0	1	2	7
	1	1	0	0	0	3	0	12
	0	1	0	0	0	1	2	7

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Iteration	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
1	0.896	0.12	3.8	15.2	13.3	0
	0.985	1.08	4.9	15.3	9.6	0
	1.34	0.83	4.6	15.8	6	0
	1.34	0.83	4.6	15.8	7.1	0
	1.34	0.83	3.4	16.65	7.1	0
	1.34	0.83	4.6	15.8	7.1	0
	1.5275	0.085	3.8	15.4	5.4	0
	0.21	0.846667	5	16.8	10.5	0
	1.34	0.83	4.6	15.8	6	0
	0.21	0.846667	5	16.8	10.5	0



ภาคผนวก ฐ. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2

ตารางที่ ฐ.1 แสดงเงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	10	1	3	0	-1
Upper	15	3	5	2	1
Weight	0	0	0.25	0.35	0.4

ตารางที่ ฐ.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
0	10	0	0	4	0	0	5	0
1	10	0	0	5	0	0	1	0
2	12	0	2	1	0	1	2	0
3	11	1	0	0	0	0	2	0
4	11	0	2	7	0	0	0	0
5	8	0	1	1	0	0	4	0
6	11	0	0	1	0	0	5	2
7	11	0	0	5	0	0	0	2
8	12	1	1	4	0	0	0	0
9	10	0	0	6	0	0	2	1
10	12	1	0	4	0	0	2	1
11	11	0	2	5	0	0	2	0
12	12	2	1	0	0	0	0	1
13	12	0	1	3	0	0	2	0
14	10	1	0	1	0	0	5	0
15	7	2	0	0	0	0	0	1
16	12	0	0	3	0	0	1	3
17	8	0	3	0	0	0	0	1
18	7	0	0	0	0	0	0	2
19	12	2	0	0	0	0	3	1

ตารางที่ ฐ.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
20	8	0	0	0	1	0	0	0
21	12	0	1	6	0	0	1	0
22	11	0	0	3	0	2	0	0
23	11	0	2	1	0	0	1	0
24	11	1	2	0	0	1	0	0
25	11	0	1	2	0	1	0	0
26	10	1	2	4	0	0	0	0
27	12	2	2	0	0	0	3	0
28	11	0	0	0	0	0	4	2
29	8	2	0	0	0	1	0	0
30	10	0	4	0	0	0	2	0
31	9	0	1	4	0	0	0	1
32	12	1	0	4	0	2	0	0
33	12	0	2	0	0	1	0	1
34	10	0	2	0	0	0	2	0
35	10	0	2	0	0	0	1	2
36	8	0	0	4	0	0	4	0
37	10	2	0	3	0	0	1	1
38	10	0	0	2	0	0	3	1
39	12	1	0	9	0	0	1	0

ตารางที่ ฐ.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
40	12	0	0	3	0	1	2	0
41	12	3	1	1	0	1	0	0
42	11	0	1	5	0	0	1	0
43	11	0	1	0	0	0	0	0
44	8	0	2	3	0	0	1	0
45	11	1	0	2	0	0	3	0
46	11	3	0	0	0	0	5	0
47	10	1	0	4	0	1	0	0
48	12	1	3	1	0	0	1	1
49	11	2	0	2	0	0	1	1
50	11	1	0	5	0	0	0	0
51	5	0	0	0	0	1	0	0
52	11	0	1	0	0	0	8	0
53	6	1	0	0	0	0	2	1
54	9	0	1	0	0	0	1	2
55	10	0	3	0	0	1	1	0
56	12	0	4	0	0	0	0	2
57	9	0	0	4	0	0	2	0
58	9	0	0	1	0	1	1	1
59	9	1	0	7	0	0	0	0

ตารางที่ 3.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
845	8	0	2	0	0	0	2	0
967	9	1	1	0	0	0	2	0
306	9	1	1	0	0	1	2	0
959	9	1	1	0	0	0	2	0
395	3	0	0	0	0	0	3	0
594	8	1	1	0	0	0	2	0
123	8	1	1	0	0	0	2	0
994	6	0	0	3	0	0	1	1
322	1	0	0	0	0	0	1	0
772	9	0	2	0	0	1	2	0
375	9	0	1	0	0	0	2	0
422	3	0	0	1	0	0	1	0
99	6	1	0	0	0	0	1	0
555	12	0	3	0	0	0	4	0
905	12	0	0	0	0	1	4	1
356	12	0	3	0	0	0	5	0
35	12	1	0	0	0	2	4	0
229	11	0	3	0	0	0	5	0
612	12	1	0	0	0	0	8	1
983	12	0	1	0	0	0	6	1

ตารางที่ 3.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
845	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
967	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
306	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
959	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
395	1.798	-0.31	9.2	14.9	16.4	0.158036
594	-1.51	-3.035	6	15.1	6.6	0.164583
123	-1.51	-3.035	6	15.1	6.6	0.164583
994	-0.786	-0.58	8.4	15.7	12.5	0.177679
322	1.761	0.1	12.3	15.1	22.3	0.209821
772	-2.485	-3.035	6.5	17.1	4.4	0.483333
375	-2.485	-3.035	4.8	16	4.4	0.483333
422	1.9325	0.05	13.5	16.8	23.2	1.071429
99	-1.55	-0.36	7.5	16.3	13.8	1.542857
555	-0.57	-0.68	4	16	9.3	1.557143
905	1.07	-0.68	2.5	16.65	9.3	1.557143
356	-0.57	-0.68	4	16	9.3	1.557143
35	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	1.557143
229	-0.57	-0.68	4	16	9.3	1.557143
612	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	1.557143
983	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	1.557143

ตารางที่ 3.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
839	11	1	0	0	0	0	5	1
862	12	1	1	0	0	0	8	0
717	11	1	2	0	0	0	4	0
531	12	1	1	0	0	0	5	0
264	12	0	2	0	0	0	7	0
21	11	0	0	0	0	1	5	1
2	11	0	0	0	0	0	7	1
385	12	0	0	0	0	0	5	1
771	11	0	3	0	0	0	5	0
203	11	0	0	0	0	1	6	0
868	11	0	0	0	0	0	7	1
391	11	0	0	0	0	2	5	0
761	11	0	0	0	0	1	6	0
752	11	1	0	0	0	0	6	1
749	12	0	1	0	0	0	4	1
298	12	1	0	0	0	0	7	0
124	12	0	0	0	0	2	5	0
214	12	0	1	0	0	0	8	1
285	10	0	0	1	0	0	9	0
981	2	0	1	0	0	0	0	0

ตารางที่ 3.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
839	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	1.557143
862	-0.57	-0.68	4	16	9.3	1.557143
717	-0.57	-0.68	4	16	9.3	1.557143
531	-0.57	-0.68	4	16	9.3	1.557143
264	-0.57	-0.68	4	16	9.3	1.557143
21	1.07	-0.68	2.5	16.65	9.3	1.557143
2	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	1.557143
385	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	1.557143
771	-0.57	-0.68	4	16	9.3	1.557143
203	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	1.557143
868	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	1.557143
391	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	1.557143
761	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	1.557143
752	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	1.557143
749	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	1.557143
298	-0.57	-0.68	4	16	9.3	1.557143
124	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	1.557143
214	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	1.557143
285	-0.62	-0.6	4.1	15.7	15.1	1.879464
981	1.648	0.1	8.4	15.4	19.1	2.169643

ตารางที่ 3.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
755	3	0	1	0	0	0	0	0
108	3	0	1	0	0	0	0	0
700	7	0	0	3	0	0	4	0
381	6	0	2	2	0	0	0	0
961	6	0	1	2	0	0	1	0
945	6	0	0	0	0	0	0	0
41	2	0	0	0	0	0	0	1
351	6	1	0	0	0	1	0	0
524	4	0	0	0	0	1	0	0
244	4	0	0	0	0	1	1	0
869	4	0	0	0	0	0	0	2
182	6	3	0	0	0	0	0	0
487	6	1	1	1	0	0	1	0
743	5	1	1	1	0	0	0	0
74	3	0	0	0	0	1	0	0
998	4	0	0	0	0	0	1	1
476	5	0	2	1	0	0	0	0
721	5	0	1	1	0	0	0	0
571	3	0	0	3	0	0	0	0
887	6	0	1	0	0	0	0	0

ตารางที่ 3.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
755	1.648	-0.38	8.8	16.1	19.1	2.442857
108	1.648	-0.38	8.8	16.1	19.1	2.442857
700	-0.035	-1.61	6.1	16.1	11	2.857143
381	0.935	-0.36	3.9	13.7	2.3	2.98125
961	0.935	-0.36	3.9	13.7	2.3	2.98125
945	0.668	-0.36	7.5	16.05	11.55	3.15
41	2.32	-0.34	8.4	15.4	10.2	4.126786
351	-1.55	-0.04	7.85	17.35	13.8	4.742857
524	1.261	-0.42	7.6	15.2	7.55	5.157143
244	1.261	-0.42	7.6	15.2	7.55	5.157143
869	0.59	-0.2	9.8	16.8	10.5	5.5
182	-1.55	-0.36	5.1	14.9	4.8	5.85625
487	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	6.016071
743	0.433	0.085	3.8	15	13.3	6.0375
74	1.761	-0.37	8.6	15.2	6.7	6.05
998	0.849	-0.265	7.1	15.5	8.6	6.050893
476	0.4395	0.085	3.8	15.4	13.3	6.1625
721	0.4395	0.085	3.8	15.4	13.3	6.1625
571	0.21	-0.09	12.1	15.7	28.4	6.279464
887	0.668	-0.36	7.5	16.05	5.4	6.4

ตารางที่ ฐ.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อดังค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
981	8	0	1	0	0	0	2	0
77	8	0	2	0	0	0	2	0
845	8	0	2	0	0	0	2	0
35	8	0	2	0	0	0	2	0
85	8	0	2	0	0	0	2	0
96	8	0	2	0	0	0	2	0
135	8	0	2	0	0	0	2	0
104	8	0	2	0	0	0	2	0
1485	8	0	0	0	0	0	2	0
107	8	0	2	0	0	0	2	0
73	8	0	2	0	0	0	2	0
18	8	0	2	0	0	0	2	0
113	8	0	2	0	0	0	2	0
16	8	0	2	0	0	0	2	0
257	8	0	2	0	0	0	2	0
577	8	0	1	0	0	0	2	0
115	8	0	2	0	0	0	2	0
60	8	0	2	0	0	0	2	0
10	8	0	2	0	0	0	2	0
54	8	0	2	0	0	0	2	0

ตารางที่ ๔.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
981	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
77	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
845	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
35	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
85	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
96	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
135	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
104	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
1485	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
107	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
73	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
18	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
113	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
16	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
257	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
577	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
115	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
60	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
10	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
54	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333

ตารางที่ ๔.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อดังค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
2	8	0	2	0	0	0	2	0
844	8	0	1	0	0	0	2	0
845	8	0	0	0	0	0	2	0
148	8	0	2	0	0	0	2	0
8	8	0	2	0	0	0	2	0
14	8	0	2	0	0	0	2	0
122	8	0	2	0	0	0	2	0
216	2	0	0	0	0	0	2	0
67	2	0	0	0	0	0	2	0
910	2	0	0	0	0	0	2	0
504	2	0	0	0	0	0	2	0
772	2	0	0	0	0	0	2	0
496	9	1	1	0	0	0	2	0
566	9	1	1	0	0	0	2	0
569	9	1	1	0	0	0	2	0
574	9	1	1	0	0	0	2	0
204	9	1	1	0	0	0	2	0
529	9	1	1	0	0	0	2	0
527	9	1	1	0	0	0	2	0
199	9	1	1	0	0	0	2	0

ตารางที่ ๔.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
2	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
844	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
845	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
148	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
8	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
14	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
122	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
216	1.761	-0.31	8.4	15.3	16.4	0.033036
67	1.761	-0.31	8.4	15.3	16.4	0.033036
910	1.761	-0.31	8.4	15.3	16.4	0.033036
504	1.761	-0.31	8.4	15.3	16.4	0.033036
772	1.761	-0.31	8.4	15.3	16.4	0.033036
496	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
566	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
569	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
574	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
204	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
529	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
527	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
199	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667

ตารางที่ ๔.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อดังค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CR _e	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
276	9	1	1	0	0	0	2	0
306	9	1	1	0	0	1	2	0
959	9	1	1	0	0	0	2	0
164	9	1	1	0	0	0	2	0
493	9	1	1	0	0	0	2	0
162	9	1	1	0	0	1	2	0
157	9	1	1	0	0	0	2	0
155	9	1	1	0	0	0	2	0
153	9	1	1	0	0	0	2	0
152	9	1	1	0	0	0	2	0
940	9	1	1	0	0	0	2	0
151	9	1	1	0	0	0	2	0
150	9	1	1	0	0	1	2	0
855	9	1	1	0	0	0	2	0
835	9	1	1	0	0	0	2	0
967	9	1	1	0	0	0	2	0
491	9	1	1	0	0	0	2	0
553	9	1	1	0	0	0	2	0
477	9	1	1	0	0	0	2	0
381	9	1	1	0	0	1	2	0

ตารางที่ ๔.๔ แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
276	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
306	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
959	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
164	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
493	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
162	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
157	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
155	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
153	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
152	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
940	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
151	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
150	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
855	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
835	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
967	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
491	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
553	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
477	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
381	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667

ตารางที่ 5.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
16	8	0	0	0	0	0	2	0
15	8	0	2	0	0	0	2	0
13	8	0	1	0	0	0	2	0
12	8	0	2	0	0	0	2	0
10	8	0	1	0	0	0	2	0
9	8	0	2	0	0	0	2	0
8	8	0	2	0	0	0	2	0
11	8	0	2	0	0	0	2	0
6	8	0	1	0	0	0	2	0
4	8	0	0	0	0	0	2	0
3	8	0	0	0	0	0	2	0
2	8	0	2	0	0	0	2	0
1	8	0	2	0	0	0	2	0
17	2	0	0	0	0	0	2	0
18	2	0	0	0	0	0	2	0
19	2	0	0	0	0	0	2	0
20	2	0	0	0	0	0	2	0
52	9	1	1	0	0	1	2	0
40	9	1	1	0	0	0	2	0
37	9	1	1	0	0	0	2	0

ตารางที่ 5.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
16	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
15	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
13	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
12	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
10	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
9	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
8	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
11	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
6	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
4	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
3	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
2	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
1	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333
17	1.761	-0.31	8.4	15.3	16.4	0.033036
18	1.761	-0.31	8.4	15.3	16.4	0.033036
19	1.761	-0.31	8.4	15.3	16.4	0.033036
20	1.761	-0.31	8.4	15.3	16.4	0.033036
52	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
40	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
37	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667

ตารางที่ 5.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRc	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
50	9	1	1	0	0	0	2	0
39	9	1	1	0	0	0	2	0
36	9	1	1	0	0	0	2	0
41	9	1	1	0	0	1	2	0
32	9	1	1	0	0	0	2	0
43	9	1	0	0	0	0	2	0
44	9	1	1	0	0	1	2	0
34	9	1	1	0	0	0	2	0
45	9	1	1	0	0	1	2	0
46	9	1	1	0	0	1	2	0
47	9	1	0	0	0	1	2	0
42	9	1	1	0	0	0	2	0
33	9	1	1	0	0	0	2	0
56	9	1	1	0	0	0	2	0
31	9	1	1	0	0	0	2	0
30	9	1	0	0	0	1	2	0
29	9	1	1	0	0	0	2	0
53	9	1	1	0	0	1	2	0
27	9	1	1	0	0	0	2	0
55	8	0	0	0	0	1	2	0

ตารางที่ 5.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
50	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
39	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
36	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
41	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
32	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
43	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
44	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
34	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
45	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
46	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
47	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
42	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
33	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
56	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
31	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
30	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
29	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
53	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
27	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
55	-1.51	-3.035	6.5	17.1	6.2	0.116667

ตารางที่ 5.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRc	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
25	9	1	1	0	0	0	2	0
48	9	1	1	0	0	0	2	0
23	9	1	1	0	0	0	2	0
57	9	1	1	0	0	1	2	0
58	9	1	1	0	0	0	2	0
59	9	1	1	0	0	0	2	0
61	8	1	0	0	0	1	2	0
62	9	1	0	0	0	1	2	0
63	9	1	1	0	0	1	2	0
49	9	1	1	0	0	0	2	0
64	3	0	0	0	0	0	3	0
60	8	1	1	0	0	0	2	0
7	8	1	2	0	0	0	2	0
35	9	0	1	0	0	0	2	0
54	9	0	1	0	0	1	2	0
14	8	0	0	0	0	0	0	0
51	9	1	1	0	0	0	0	0
22	9	1	1	0	0	0	0	0
38	9	1	1	0	0	0	1	0
28	12	1	1	0	0	0	2	0

ตารางที่ 5.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
25	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
48	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
23	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
57	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
58	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
59	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
61	-1.51	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
62	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
63	-2.485	-3.035	6.5	17.1	6.6	0.116667
49	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	0.116667
64	1.798	-0.31	9.2	14.9	16.4	0.158036
60	-1.51	-3.035	6	15.1	6.6	0.164583
7	-1.51	-3.035	6	15.1	6.6	0.164583
35	-2.485	-3.035	4.8	16	4.4	0.483333
54	-2.485	-3.035	6.5	17.1	4.4	0.483333
14	-3.71	0.2	5.4	15.55	5.1	11.85938
51	-3.535	0.2	4.8	16	6.6	12
22	-3.535	0.2	4.8	16	6.6	12
38	-3.535	0.2	4.8	16	6.6	12
28	-3.17	0.83	4.7	15.8	6	18.2375

ตารางที่ 6 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Iteration	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
100	8	0	0	0	0	0	2	0

Iteration	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
100	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	0.008333



ภาคผนวก ข. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3

ตารางที่ ท.1 แสดงเงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	14	3	2	-2	-2
Upper	16	5	5	0	0
Weight	0.35	0.4	0.25	0	0

ตารางที่ ท.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
0	9	0	0	1	0	1	3	0
1	12	0	2	2	0	2	0	0
2	10	1	0	0	0	0	1	2
3	11	3	0	2	0	0	1	1
4	10	0	1	1	0	0	1	2
5	11	1	0	3	0	0	1	1
6	9	2	0	1	0	0	1	1
7	12	0	0	3	1	0	1	0
8	7	1	1	1	0	0	1	0
9	11	1	1	1	0	0	4	1
10	11	0	1	3	1	0	0	0
11	9	0	1	0	0	0	6	0
12	12	2	1	6	0	0	0	0
13	6	0	1	0	0	0	1	1
14	12	0	0	1	0	1	1	0
15	11	1	2	4	0	0	0	0
16	12	1	0	2	0	2	0	0
17	12	0	4	0	0	0	1	1
18	9	1	1	4	0	0	0	0
19	9	2	0	1	0	1	0	0

ตารางที่ ท.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
20	8	0	0	4	0	0	1	1
21	7	0	1	3	0	0	1	0
22	10	0	1	2	0	0	6	0
23	12	2	0	3	0	0	2	0
24	12	3	0	0	0	0	2	2
25	7	0	1	0	0	0	4	0
26	11	0	0	4	0	0	1	0
27	10	0	0	1	0	0	8	0
28	12	0	0	2	0	3	1	0
29	6	1	0	0	0	0	3	0
30	11	0	2	2	0	0	0	0
31	9	0	0	4	0	0	0	1
32	12	2	0	1	1	0	1	0
33	12	0	0	1	0	0	5	1
34	7	0	0	1	0	0	0	2
35	12	0	0	2	0	2	3	0
36	8	0	0	0	0	0	2	0
37	11	1	0	3	0	0	5	0
38	12	0	3	4	0	0	2	0
39	12	0	0	4	0	0	3	0

ตารางที่ ๗.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

ลำดับ	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
40	11	0	2	2	0	1	1	0
41	12	2	0	3	0	0	1	1
42	12	1	0	2	0	0	2	0
43	11	0	0	0	0	2	3	0
44	12	1	4	1	0	0	0	0
45	11	0	0	4	0	0	0	0
46	8	1	1	0	0	0	4	0
47	12	3	1	0	0	0	0	2
48	12	1	3	2	0	0	1	0
49	10	1	0	1	0	0	2	0
50	12	1	0	2	1	0	0	1
51	12	0	0	7	0	0	1	1
52	5	0	0	0	0	0	1	1
53	11	0	0	2	0	1	1	1
54	11	2	1	0	0	1	0	0
55	7	1	2	0	0	0	0	0
56	10	1	1	5	0	0	1	0
57	12	0	0	3	0	0	6	1
58	11	1	0	3	0	1	0	1
59	8	0	0	2	0	0	0	0

ตารางที่ ท.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
553	8	3	0	2	0	0	0	0
593	9	0	0	0	0	0	2	0
265	9	0	3	0	0	0	2	0
175	9	0	1	0	0	0	2	0
635	8	1	0	0	0	0	2	0
4	8	0	0	0	0	2	2	0
102	8	1	1	0	0	1	1	0
97	8	1	1	0	0	1	1	0
78	9	1	0	0	0	2	0	0
91	9	1	0	0	0	1	0	0
337	8	1	1	0	0	1	0	0
393	6	0	0	0	0	1	1	0
154	12	0	2	0	0	0	4	0
706	12	1	0	0	0	0	10	0
725	11	0	0	0	0	0	8	0
943	12	0	1	0	0	0	5	0
733	11	1	0	0	0	0	8	0
442	11	0	1	0	0	0	9	0
415	12	1	2	0	0	0	5	0
760	11	0	1	0	0	0	5	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
553	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
593	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
265	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
175	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
635	-1.51	-3.035	6	15.1	6.6	3.56
4	-1.51	-3.035	6.5	17.1	6.2	3.90125
102	-3.71	-0.04	6.5	17.1	6.6	4.54125
97	-3.71	-0.04	6.5	17.1	6.6	4.54125
78	-3.71	-0.04	6.5	17.7	6.6	4.80375
91	-3.71	-0.04	6.5	17.7	6.6	4.80375
337	-3.71	-0.04	6.5	17.7	6.6	4.80375
393	-0.44	-0.04	7.85	17.35	6	5.040625
154	-0.57	-0.68	4	16	9.3	6.88
706	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
725	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
943	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
733	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
442	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
415	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
760	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88

ตารางที่ ท.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
944	12	1	2	0	0	0	6	0
284	12	0	0	0	0	0	10	0
949	11	1	2	0	0	0	4	0
245	11	1	1	0	0	0	5	0
910	12	1	2	0	0	0	5	0
801	11	0	2	0	0	0	4	0
188	11	0	1	0	0	0	7	0
159	11	0	1	0	0	0	5	0
135	12	1	1	0	0	0	4	0
274	11	0	0	0	0	0	7	0
749	11	0	1	0	0	0	4	1
846	11	1	0	0	0	0	4	1
447	11	1	1	0	0	0	5	1
363	11	0	1	0	0	0	5	1
543	12	0	0	0	0	0	10	1
632	12	1	0	0	0	0	7	1
975	12	0	0	0	0	0	8	1
670	12	1	0	0	0	0	6	1
707	12	0	2	0	0	0	6	1
162	12	1	0	0	0	0	6	1

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
944	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
284	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
949	-0.57	-0.68	4	16	9.3	6.88
245	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
910	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
801	-0.57	-0.68	4	16	9.3	6.88
188	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
159	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
135	-0.57	-0.68	4	16	9.3	6.88
274	-0.57	-0.68	4	15	9.3	6.88
749	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	7.62375
846	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	7.62375
447	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	7.62375
363	-0.57	-0.68	2.9	17.7	9.3	7.62375
543	-0.57	-0.68	6.1	17.7	9.3	8.72375
632	-0.57	-0.68	6.1	17.7	9.3	8.72375
975	-0.57	-0.68	6.1	17.7	9.3	8.72375
670	-0.57	-0.68	6.1	17.7	9.3	8.72375
707	-0.57	-0.68	6.1	17.7	9.3	8.72375
162	-0.57	-0.68	6.1	17.7	9.3	8.72375

ตารางที่ ท.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อดึงค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
861	12	0	1	0	0	0	5	1
585	12	1	0	0	0	0	7	1
769	12	0	0	0	0	0	9	1
938	8	0	0	4	0	0	0	2
520	7	0	0	3	0	0	3	0
796	7	0	0	4	0	0	3	0
389	8	1	0	1	0	1	1	0
880	8	1	0	1	0	1	1	0
229	9	1	0	1	0	1	0	0
200	9	0	1	0	0	1	0	0
840	10	0	0	0	0	0	10	0
469	6	0	0	2	0	1	0	0
527	6	1	0	0	0	0	0	0
280	6	1	2	0	0	0	0	0
296	6	0	1	1	0	1	0	0
997	6	1	0	0	0	1	0	0
795	4	0	0	3	0	0	0	0
722	6	0	1	3	0	0	1	0
465	6	0	1	3	0	0	0	0
0	9	1	0	4	0	0	0	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
861	-0.57	-0.68	6.1	17.7	9.3	8.72375
585	-0.57	-0.68	6.1	17.7	9.3	8.72375
769	-0.57	-0.68	6.1	17.7	9.3	8.72375
938	-1.056	-0.29	3.35	17.1	10.7	9.60125
520	-0.035	-0.1	6.1	15.3	10.8	10.38
796	-1.27	-0.1	6.1	14.7	10.8	10.38
389	-3.71	-0.04	6.4	17	10.6	10.7975
880	-3.71	-0.04	6.4	17	10.6	10.7975
229	-3.71	-0.04	6.4	17.7	10.6	11.10375
200	-3.535	-0.04	6.5	17.7	10.6	11.20375
840	-0.62	-0.6	4	15	15.1	16.16
469	-0.44	-0.04	8.65	17	12.8	16.5675
527	-1.55	-0.36	7.5	16.3	13.8	16.71125
280	-1.55	-0.36	7.5	16.3	13.8	16.71125
296	-0.44	-0.04	7.85	17.35	13.55	17.12062
997	-1.55	-0.04	7.85	17.35	13.8	17.52063
795	-0.51	-0.09	5.1	15.7	17.8	20.58
722	-0.862	-2.74	8.4	15.7	17.8	23.88
465	-0.862	-2.74	8.4	15.7	17.8	23.88
0	-3.71	3	7.2	15.3	4.2	

ตารางที่ ๗.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
2	8	0	3	0	0	0	2	0
318	8	0	3	0	0	0	2	0
570	8	0	0	0	0	0	2	0
209	8	0	0	0	0	0	2	0
510	8	0	1	0	0	0	2	0
504	8	0	1	0	0	0	2	0
135	8	0	0	0	0	0	2	0
441	8	0	1	0	0	0	2	0
723	8	0	0	0	0	0	2	0
439	8	0	1	0	0	0	2	0
269	8	0	0	0	0	0	2	0
297	8	0	0	0	0	0	2	0
6803	8	0	0	0	0	0	2	0
310	8	0	0	0	0	0	2	0
6898	8	0	0	0	0	0	2	0
312	8	0	3	0	0	0	2	0
6902	8	0	0	0	0	0	2	0
406	8	0	3	0	0	0	2	0
139	8	0	0	0	0	0	2	0
6276	8	0	0	0	0	1	1	0

ตารางที่ ๗.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
2	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
318	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
570	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
209	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
510	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
504	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
135	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
441	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
723	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
439	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
269	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
297	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
6803	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
310	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
6898	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
312	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
6902	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
406	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
139	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
6276	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125

ตารางที่ ๗.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
761	8	0	0	0	0	1	1	0
756	8	0	0	0	0	1	1	0
5236	8	0	0	0	0	1	1	0
6905	8	0	0	0	0	1	1	0
875	8	0	0	0	0	2	1	0
1583	8	0	0	0	0	1	1	0
1634	8	0	0	0	0	1	1	0
1656	8	0	0	0	0	1	1	0
1105	8	0	1	0	0	1	1	0
79	8	3	0	2	0	0	0	0
51	8	3	0	2	0	0	0	0
52	8	3	0	2	0	0	0	0
73	8	3	0	2	0	0	0	0
29	8	3	0	2	0	0	0	0
12	8	3	0	2	0	0	0	0
57	8	3	0	2	0	0	0	0
11	8	3	0	2	0	0	0	0
4	8	3	0	2	0	0	0	0
67	8	3	0	2	0	0	0	0
553	8	3	0	2	0	0	0	0

ตารางที่ ๗.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
761	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
756	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
5236	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
6905	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
875	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
1583	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
1634	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
1656	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
1105	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
79	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
51	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
52	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
73	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
29	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
12	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
57	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
11	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
4	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
67	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
553	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3

ตารางที่ ๗.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

ลำดับ	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
87	8	3	0	2	0	0	0	0
71	8	3	0	2	0	0	0	0
89	8	3	0	2	0	0	0	0
92	8	3	0	2	0	0	0	0
94	8	3	0	2	0	0	0	0
99	8	3	0	2	0	0	0	0
101	8	3	0	2	0	0	0	0
120	8	3	0	2	0	0	0	0
122	8	3	0	2	0	0	0	0
1509	8	0	0	0	0	1	0	0
6505	8	0	1	0	0	2	0	0
5784	8	0	0	0	0	1	0	0
939	8	0	1	0	0	1	0	0
826	8	0	0	0	0	2	0	0
6834	8	0	0	0	0	1	0	0
825	8	0	0	0	0	2	0	0
6896	8	0	0	0	0	2	0	0
817	8	0	0	0	0	2	0	0
1185	8	0	0	0	0	2	0	0
874	8	0	0	0	0	2	0	0

ตารางที่ ๗.4 แสดงผลที่ได้จากการ Crossover การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
87	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
71	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
89	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
92	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
94	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
99	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
101	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
120	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
122	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
1509	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
6505	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
5784	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
939	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
826	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
6834	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
825	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
6896	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
817	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
1185	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
874	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375

ตารางที่ ๗.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
0	8	0	2	0	0	0	2	0
14	8	0	3	0	0	0	2	0
12	8	0	0	0	0	0	2	0
11	8	0	0	0	0	0	2	0
10	8	0	0	0	0	0	2	0
9	8	0	0	0	0	0	2	0
13	8	0	0	0	0	0	2	0
7	8	0	0	0	0	0	2	0
6	8	0	1	0	0	0	2	0
4	8	0	1	0	0	0	2	0
1	8	0	0	0	0	0	2	0
8	8	0	0	0	0	0	2	0
16	8	0	2	0	0	1	1	0
19	8	0	0	0	0	1	1	0
20	8	0	0	0	0	1	1	0
21	8	0	0	0	0	1	1	0
22	8	0	0	0	0	1	1	0
23	8	0	2	0	0	1	1	0
33	8	3	0	2	0	0	0	0
28	8	3	0	2	0	0	0	0

ตารางที่ ๗.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
0	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
14	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
12	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
11	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
10	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
9	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
13	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
7	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
6	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
4	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
1	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
8	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92
16	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
19	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
20	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
21	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
22	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
23	-3.535	-0.04	6.5	17.1	5.1	2.14125
33	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
28	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3

ตารางที่ ๗.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
31	8	3	0	2	0	0	0	0
29	8	3	0	2	0	0	0	0
27	8	3	0	2	0	0	0	0
32	8	3	0	2	0	0	0	0
25	8	3	0	2	0	0	0	0
26	8	3	0	2	0	0	0	0
46	8	0	0	0	0	2	0	0
45	8	0	0	0	0	2	0	0
43	8	0	1	0	0	1	0	0
41	8	0	0	0	0	2	0	0
40	8	0	0	0	0	2	0	0
39	8	0	0	0	0	2	0	0
47	8	0	1	0	0	1	0	0
36	8	0	1	0	0	1	0	0
35	8	0	1	0	0	2	0	0
34	8	0	0	0	0	1	0	0
37	8	0	1	0	0	1	0	0
48	9	1	0	0	0	0	2	0
49	9	1	0	0	0	0	2	0
51	9	1	1	0	0	0	2	0

ตารางที่ ๗.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
31	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
29	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
27	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
32	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
25	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
26	-2.0475	-0.87	7.3	15.2	4.2	2.3
46	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
45	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
43	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
41	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
40	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
39	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
47	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
36	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
35	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
34	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
37	-3.535	-0.04	6.5	17.7	5.1	2.40375
48	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	2.56
49	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	2.56
51	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	2.56

ตารางที่ ๗.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CR _e	DoubleCC _{Re}	TripleCC	Bracket	Benzene	Cycle _{Re}	SingleCO	DoubleCO
53	9	1	0	0	0	0	2	0
54	9	1	0	0	0	0	2	0
71	9	0	1	0	0	0	2	0
68	9	0	3	0	0	0	2	0
67	9	0	3	0	0	0	2	0
62	9	0	3	0	0	0	2	0
61	9	0	1	0	0	0	2	0
52	9	0	0	0	0	0	2	0
57	9	0	1	0	0	0	2	0
72	9	0	0	0	0	0	2	0
60	9	0	1	0	0	0	2	0
74	9	0	1	0	0	0	2	0
24	8	0	1	0	0	1	2	0
2	8	0	0	0	0	1	2	0
18	6	0	0	0	0	1	1	0
3	8	2	1	0	0	0	2	0
5	5	0	0	0	0	0	2	0
15	5	0	0	0	0	0	2	0
17	8	2	0	0	0	1	1	0
30	8	1	0	2	0	0	0	0

ตารางที่ ๗.5 แสดงผลที่ได้จากการ Mutation การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
53	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	2.56
54	-2.485	-3.035	4.8	16	6.6	2.56
71	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
68	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
67	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
62	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
61	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
52	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
57	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
72	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
60	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
74	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	3.36
24	-1.51	-3.035	6.5	17.1	6.2	3.90125
2	-1.51	-3.035	6.5	17.1	6.2	3.90125
18	-0.44	-0.04	7.85	17.35	6	5.040625
3	-1.51	1.6	7.3	16	4	inf
5	1.5275	-0.1	4.833333	15.4	6	inf
15	1.5275	-0.1	4.833333	15.4	6	inf
17	-3.71	2.036667	4.5	17.1	4	inf
30	-3.71	2.15	5.2	15	4.2	inf

ตารางที่ ๗.6 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 3 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Iteration	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
100	8	0	1	0	0	0	2	0

Iteration	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
100	-1.51	-3.035	3.75	15.6	6.2	1.92



ภาคผนวก ผ. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1

ตารางที่ ๓.1 แสดงเงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	14	3	2	-2	-2
Upper	16	5	5	0	0
Weight	0	0	0	0.4	0.6

ตารางที่ ๗.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
0	10	0	0	2	0	2	0	0
1	2	0	0	1	0	0	1	0
2	10	0	2	0	0	1	1	0
3	10	2	0	0	0	1	2	0
4	9	1	0	3	0	1	1	0
5	7	0	0	2	0	0	1	0
6	11	0	4	0	0	1	0	0
7	11	1	1	1	0	0	1	0
8	11	0	1	1	0	1	0	0
9	10	0	1	3	0	1	2	0
10	12	0	0	0	1	0	5	0
11	11	3	0	4	0	0	1	0
12	10	1	1	3	0	0	2	0
13	10	0	3	1	0	0	1	1
14	10	0	0	4	0	1	1	0
15	11	1	0	1	0	1	1	2
16	12	0	1	3	0	0	2	1
17	12	1	1	1	0	0	0	1
18	11	0	1	0	0	1	0	3
19	10	1	0	5	0	1	0	0

ตารางที่ ๗.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
20	9	0	1	1	0	0	1	2
21	11	2	2	0	0	1	0	0
22	7	0	0	2	0	0	1	1
23	11	2	1	0	0	0	0	2
24	11	0	2	1	0	0	1	1
25	11	0	0	1	1	1	1	0
26	12	0	2	0	0	0	4	0
27	11	2	2	1	0	0	1	0
28	12	0	0	2	0	0	3	2
29	11	2	0	1	0	0	4	1
30	10	0	1	0	0	1	0	1
31	10	2	2	0	0	0	2	0
32	12	0	0	10	0	0	0	1
33	12	1	0	4	0	0	4	0
34	10	0	0	1	0	2	3	0
35	9	1	0	4	0	0	1	1
36	12	0	1	2	0	0	0	2
37	12	0	2	0	1	0	1	0
38	6	0	0	0	0	0	0	0
39	7	0	2	1	0	0	0	0

ตารางที่ ๗.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
40	11	0	2	1	0	0	2	0
41	12	0	1	0	0	1	3	1
42	12	0	0	7	0	0	3	1
43	12	1	1	3	0	0	1	0
44	12	3	0	4	0	0	0	0
45	11	1	0	5	0	0	2	1
46	8	4	0	0	0	0	0	0
47	12	0	0	3	1	1	0	0
48	11	0	0	0	0	1	2	1
49	12	1	1	4	0	0	4	0
50	9	2	0	2	0	0	1	1
51	8	1	0	5	0	0	1	0
52	11	0	0	3	0	0	4	1
53	12	1	0	1	0	1	0	2
54	11	0	0	7	0	1	0	0
55	10	1	0	4	0	0	3	0
56	12	1	1	6	0	0	0	1
57	7	0	0	1	0	0	4	1
58	11	0	3	2	0	0	2	0
59	12	0	0	1	1	0	4	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
661	6	1	1	1	0	0	0	0
951	7	0	0	3	0	0	4	0
898	6	1	0	2	0	0	1	0
768	6	1	0	0	0	0	1	0
533	9	0	0	0	0	0	9	0
320	10	0	0	0	0	0	10	0
388	7	0	0	3	0	0	4	0
279	6	2	0	1	0	0	1	0
822	8	0	0	4	0	0	0	2
263	6	0	0	1	0	1	0	0
782	6	0	1	3	0	0	1	0
982	6	1	0	3	0	0	1	0
488	6	0	0	3	0	0	3	0
428	12	1	2	0	0	1	2	0
616	11	0	0	0	0	2	2	1
676	11	0	1	0	0	1	2	1
340	12	1	1	0	0	1	2	1
737	9	0	0	1	0	1	0	0
103	9	0	0	1	0	2	1	0
108	9	0	1	1	0	1	0	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
661	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0
951	-0.035	-1.61	6.1	16.1	11	0
898	-1.55	-0.36	6.1	15	7.1	0
768	-1.55	-0.36	7.5	16.3	13.8	0
533	-0.62	-0.6	4.8	15	15.1	0
320	-0.62	-0.6	4	15	15.1	0
388	-0.035	-1.61	6.1	16.1	11	0
279	-1.55	-0.36	5	14.9	7.1	0
822	-1.056	-0.29	3.35	17.1	10.7	0
263	-0.44	-0.04	7.85	17.35	13.55	0
782	-0.786	-2.74	8.4	15.7	17.8	4.44
982	-0.97	-2.74	8.4	15.7	17.8	4.44
488	-0.786	-2.74	8.4	15.8	17.8	4.44
428	-3.17	-0.68	3.4	16.1	6	4.68
616	-3.405	-0.68	2.5	17.1	4.4	5.62
676	-3.405	-0.68	2.5	17.1	4.4	5.62
340	-3.42	-0.68	2.5	16.1	5.7	5.68
737	-3.535	-0.04	6.4	17.7	10.6	6.14
103	-3.535	-0.04	6.4	16.6	6.6	6.14
108	-3.535	-0.04	6.4	17.7	10.6	6.14

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRE	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
791	9	0	0	0	0	3	0	0
781	9	0	0	0	0	2	1	0
996	9	0	0	0	0	2	0	0
227	9	1	0	0	0	1	1	0
431	9	1	1	0	0	1	1	0
799	9	0	1	1	0	1	0	0
150	9	2	0	1	0	1	1	0
135	8	2	1	0	0	0	2	0
245	8	0	0	0	0	2	2	0
211	8	1	0	0	0	1	0	0
232	8	1	1	1	0	1	0	0
251	8	0	1	0	0	1	1	0
754	8	0	0	1	0	1	1	0
653	8	2	0	1	0	1	0	0
942	8	2	0	0	0	1	0	0
542	12	0	0	0	0	2	2	0
276	9	0	2	0	0	0	2	0
691	9	0	2	0	0	0	2	0
51	9	0	2	0	0	1	2	0
112	11	0	2	0	0	1	2	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
791	-3.535	-0.04	6.5	17.7	10.6	6.14
781	-3.535	-0.04	6.5	17.6	10.6	6.14
996	-3.535	-0.04	6.5	17.7	10.6	6.14
227	-3.535	-0.04	6.5	17.6	6.6	6.14
431	-3.535	-0.04	6.5	17.6	6.6	6.14
799	-3.535	-0.04	6.4	17.7	10.6	6.14
150	-3.535	-0.04	6.4	16.6	12.2	6.14
135	-1.51	-3.035	7.3	16	4	6.21
245	-1.51	-3.035	6.5	17.1	6.2	6.21
211	-3.71	-0.04	6.5	17.7	6.6	6.84
232	-3.71	-0.04	6.4	17.7	10.6	6.84
251	-3.71	-0.04	6.5	17.6	5.1	6.84
754	-3.71	-0.04	6.4	16.6	10.6	6.84
653	-3.71	-0.04	6.4	17.7	14.3	6.84
942	-3.71	-0.04	6.5	17.7	4	6.84
542	-3.84	-0.68	3.4	16.1	4.4	7.36
276	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	8.15
691	-2.485	-3.035	4.8	16	7.1	8.15
51	-2.485	-3.035	6.5	17.1	7.1	8.15
112	-4.16	-0.68	6.5	17.1	7.1	8.64

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
144	11	0	3	0	0	1	2	0
501	12	0	0	0	1	1	2	0
680	5	1	1	0	0	0	1	0
681	10	0	2	0	0	0	4	0
670	11	0	0	8	0	1	0	0
677	12	2	0	2	0	0	3	0
672	11	0	0	0	0	0	0	0
679	11	0	2	4	0	0	0	1
673	12	1	2	0	0	0	0	2
674	3	0	0	1	0	0	0	1
682	12	1	0	0	0	0	2	1
675	10	1	0	0	0	1	1	2
678	5	0	0	1	0	0	2	1
683	12	0	3	0	0	0	0	1
671	12	1	1	2	0	0	6	0
669	10	0	0	5	0	0	0	0
0	9	1	2	1	0	0	0	1
667	12	3	0	4	0	0	2	0
641	9	0	0	1	0	0	3	2
642	12	3	0	2	0	0	1	1

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
144	-4.16	-0.68	6.5	17.1	7.1	8.64
501	-4.62	-0.68	3.4	18.4	4.4	10.48
680	0.95	0.085	3.8	15.9	6.8	inf
681	0.77	2.48	4	15.7	15.1	inf
670	-5.48	3.76	4.7	17.7	10.6	inf
677	-0.245	4.04	4.1	16	4.2	inf
672	-4.16	4.72	6	14.8	10	inf
679	-5.48	3.76	5.5	14.7	10.4	inf
673	-3.42	2.93	2.9	16.6	10.5	inf
674	0.627	0.18	3.9	15.5	9.7	inf
682	-3.42	0.83	2.9	15.8	5.1	inf
675	-1.85	2.8	6.1	20.2	11.2	inf
678	0.403333	1.31	4.5	15.5	4.1	inf
683	-4.62	5.14	4.7	14.8	5.1	inf
671	-0.57	4.67	4.1	15	9.3	inf
669	2.46	3	6.5	14.7	10	inf
0	-2.13	2.825	5.3	15.6	4.95	inf
667	-3.17	4.04	4.1	15.3	4.2	inf
641	-2.14	3.12	5.2	15.8	10.5	inf
642	-3.42	3.93	4.7	15.2	3.4	inf

ตารางที่ ๓๔ แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Iteration	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO	
1	6	1	1	1	0	0	0	0	
	7	0	0	3	0	0	4	0	
	6	1	0	2	0	0	1	0	
	6	1	0	0	0	0	1	0	
	9	0	0	0	0	0	9	0	
	10	0	0	0	0	0	10	0	
	6	2	0	1	0	0	1	0	
	8	0	0	0	4	0	0	0	2
	6	0	0	0	1	0	1	0	0

ตารางที่ ๓.4 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 1 (รอบที่ 1)

Iteration	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
1	-1.55	-0.36	4.1	15	7.1	0
	-0.035	-1.61	6.1	16.1	11	0
	-1.55	-0.36	6.1	15	7.1	0
	-1.55	-0.36	7.5	16.3	13.8	0
	-0.62	-0.6	4.8	15	15.1	0
	-0.62	-0.6	4	15	15.1	0
	-1.55	-0.36	5	14.9	7.1	0
	-1.056	-0.29	3.35	17.1	10.7	0
	-0.44	-0.04	7.85	17.35	13.55	0



ภาคผนวก ณ. สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2

ตารางที่ ๓.1 แสดงเงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	16	5	6	-1	-1
Upper	18	7	8	1	1
Weight	0	0.7	0.3	0	0

ตารางที่ ๓.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
0	8	0	0	7	0	0	1	0
1	12	0	1	1	0	0	7	0
2	11	3	0	0	0	0	1	0
3	11	1	2	0	0	0	1	1
4	12	0	0	1	0	1	1	3
5	6	0	0	0	0	0	4	0
6	12	4	0	1	0	0	1	0
7	10	1	3	0	0	0	1	0
8	12	0	0	0	0	0	6	2
9	11	1	0	0	0	2	0	1
10	12	1	0	3	0	0	2	0
11	12	1	2	1	0	1	0	0
12	12	1	0	0	1	0	1	1
13	11	0	0	2	0	1	1	1
14	8	0	1	1	0	0	2	1
15	12	0	0	0	0	3	1	1
16	10	0	2	0	0	0	0	3
17	7	0	0	1	0	0	2	0
18	12	1	1	4	0	1	0	0
19	12	1	1	1	0	1	0	0

ตารางที่ ๓.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
20	10	1	0	1	0	0	6	0
21	7	0	0	7	0	0	0	0
22	9	0	2	0	0	0	0	1
23	12	0	0	0	0	1	3	1
24	11	0	0	6	0	0	2	1
25	11	0	0	5	0	0	3	0
26	7	0	0	2	0	0	5	0
27	9	1	0	0	0	0	1	3
28	12	2	1	0	0	0	6	0
29	8	0	0	0	0	0	5	1
30	8	0	0	3	0	0	1	1
31	11	0	1	0	0	2	0	0
32	8	2	0	1	0	1	0	0
33	12	1	0	1	0	1	2	0
34	10	0	0	2	0	0	4	2
35	11	2	2	0	0	1	0	0
36	12	0	0	8	0	0	2	1
37	8	0	1	0	0	1	1	1
38	7	0	0	0	0	1	2	1
39	8	2	0	3	0	0	1	0

ตารางที่ ๓.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
50	12	2	2	0	0	0	0	0
51	11	0	1	1	0	1	1	0
52	9	0	1	0	0	0	1	0
53	12	0	0	3	0	2	0	1
54	12	1	1	0	0	0	3	2
55	12	0	0	6	0	0	0	2
56	12	2	3	0	0	0	1	0
57	12	1	0	1	0	1	4	1
58	9	1	1	3	0	0	2	0
59	12	0	1	3	0	0	5	0
60	12	1	2	0	0	0	4	0
61	12	2	0	3	0	0	3	1
62	11	1	0	0	0	0	7	0
63	9	0	0	0	0	1	6	0
64	10	0	0	3	0	0	7	0
65	9	0	0	2	0	0	3	2
66	7	2	0	0	0	0	2	0
67	11	1	0	2	0	0	3	1
68	12	0	0	2	1	0	2	0
69	9	0	1	1	0	0	1	1

ตารางที่ ณ.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
320	11	1	1	1	0	2	0	0
591	8	0	1	0	0	2	0	0
385	10	1	0	0	0	1	2	1
597	9	0	1	1	0	2	0	0
829	6	0	1	0	0	1	0	0
364	11	0	0	1	0	2	3	0
617	12	0	3	1	0	0	2	1
360	8	1	1	0	0	0	2	0
630	12	0	2	1	0	0	2	1
351	6	0	2	0	0	0	2	0
188	8	0	0	0	0	1	0	0
260	7	1	0	3	0	0	0	1
338	8	0	2	0	0	1	0	0
653	12	3	0	0	0	0	3	1
923	6	0	0	0	0	1	3	0
668	8	1	0	2	0	0	0	1
308	8	0	0	0	0	2	0	0
676	10	0	1	1	0	2	1	0
301	12	0	0	0	0	0	2	1
807	11	0	0	1	0	2	3	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
320	-2.115	3.76	6.4	17.7	6.6	0
591	-3.71	-0.04	6.5	17.7	5.1	0
385	0.85	3.36	6.3	17.1	5.7	0
597	-3.535	-0.04	6.4	17.7	6.6	0
829	-0.44	-0.04	7.85	15.2	5.4	0
364	1.34	4.67	6.4	16.65	6.6	0
617	-4.365	2.42	6.1	15.8	5.1	0
360	-1.51	-3.035	6	15.13333	6.6	0
630	-4.365	2.42	6.1	15.8	5.1	0
351	0.355333	2.03	6.55	15.95	5.4	0
188	-3.71	-0.04	6.5	17.7	5.1	0
260	0.01	2.25	6.2	15.2	5	0
338	-3.71	-0.04	6.5	17.7	5.1	0
653	-3.23	2.42	6.1	16	5.1	0
923	-0.046	2.03	6.6	16.65	5.15	0
668	-1.38	2.15	6.2	15.5	5	0
308	-3.71	-0.04	6.5	17.7	5.1	0
676	0.85	4.57	6.4	17	6.6	0
301	-4.62	0.83	6.1	15.8	5.1	0
807	1.34	4.67	6.4	16.65	6.6	0

ตารางที่ ณ.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
203	11	0	1	1	0	2	0	0
212	7	3	0	0	0	0	1	0
52	12	1	1	1	0	0	2	1
648	5	0	1	0	0	0	3	0
878	8	1	1	0	0	1	1	0
163	8	1	1	0	0	0	3	0
131	10	0	1	1	0	2	0	0
479	9	0	0	1	0	2	2	0
462	6	0	1	0	0	0	2	0
5	8	1	0	0	0	0	3	0
453	12	0	2	1	0	0	3	1
503	12	0	1	0	0	0	3	1
77	12	1	2	1	0	0	2	1
573	5	1	0	0	0	0	1	1
991	12	3	0	0	0	0	3	1
529	9	1	0	0	0	1	1	0
541	5	0	0	0	0	1	0	0
113	6	1	0	2	0	0	2	0
405	12	0	0	1	0	0	2	1
398	11	0	1	1	0	2	1	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
203	-3.4975	4.296667	6.4	17.7	6.6	0
212	-1.51	2.09	7.3	14.9	6.7	0
52	-3.42	4.69	6.1	14.8	5.1	0
648	0.345	1.25	7.8	15.55	5.4	0
878	-3.71	-0.04	6.5	17.6	6.6	0
163	-1.26	1.91	6	15.55	6.6	0
131	0.85	4.57	6.4	17.7	6.6	0
479	-2.485	-0.15	6.4	16.6	6.6	0
462	0.355333	2.03	6.55	15.95	5.4	0
5	-1.26	1.91	6	15.9	6.6	0
453	1.34	2.42	6.1	15.8	5.1	0
503	1.34	0.83	6.1	15.8	5.1	0
77	-3.42	2.42	6.1	14.8	5.1	0
573	0.95	1.37	7.1	15.5	5.5	0
991	-3.23	2.42	6.1	16	5.1	0
529	-3.535	-0.04	6.5	17.6	6.6	0
541	0.97	0.085	7.6	15.2	6	0
113	0.62	0.956667	6.1	15.1	5.1	0
405	-4.365	4.69	6.1	15.8	5.1	0
398	-3.31	4.296667	6.4	17	6.6	0

ตารางที่ ณ.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
130	8	1	1	0	0	1	0	0
407	9	1	0	0	0	1	0	0
891	12	0	0	2	0	0	2	2
278	12	0	1	0	0	0	2	1
117	10	1	0	0	0	1	0	0
552	11	1	1	0	0	1	1	0
99	9	0	0	0	0	2	3	0
902	9	0	1	0	0	1	3	0
684	11	0	3	0	0	1	2	0
961	11	0	0	0	0	1	2	0
928	9	0	0	0	0	1	2	0
3	6	1	1	2	0	0	0	0
545	9	0	0	0	0	1	3	0
915	6	2	0	2	0	0	0	0
619	11	0	3	0	0	1	2	0
87	6	1	1	0	0	0	0	1
758	9	0	2	2	0	0	3	0
51	9	0	0	6	0	0	3	0
918	9	0	0	5	0	0	3	0
110	9	0	1	4	0	0	3	0

ตารางที่ ๓.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
130	-3.71	-0.04	6.5	17.7	6.6	0
407	-3.535	-0.04	6.5	17.7	6.6	0
891	-4.365	3.03	6.1	16.6	6.7	0
278	-4.62	0.83	6.1	15.8	5.1	0
117	0.85	4.57	6.5	17.7	6	0
552	-2.115	4.72	6.5	17.6	6	0
99	1.74	3.77	6.5	16.65	7.1	0.2
902	1.74	3.77	6.5	16.65	7.1	0.2
684	-4.16	-0.68	6.5	17.1	7.1	0.2
961	-4.16	-0.68	6.5	17.1	7.1	0.2
928	-2.485	-3.035	6.5	17.1	7.1	0.2
3	-1.55	-0.36	7.2	15	7.1	0.2
545	1.74	3.77	6.5	16.65	7.1	0.2
915	-1.55	-0.36	7.2	15.2	7.1	0.2
619	-4.16	-0.68	6.5	17.1	7.1	0.2
87	0.636	1.37	8.5	16.2	6.9	0.375
758	1.74	2.78	6.1	15.5	7.2	0.4
51	2.46	3	6.1	14.7	7.2	0.4
918	2.46	3	6.1	14.7	7.2	0.4
110	1.74	3	6.1	14.7	7.2	0.4

ตารางที่ ๓.4 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
1	11	1	1	1	0	2	0	0
	8	0	1	0	0	2	0	0
	10	1	0	0	0	1	2	1
	9	0	1	1	0	2	0	0
	6	0	1	0	0	1	0	0
	11	0	0	1	0	2	3	0
	12	0	3	1	0	0	2	1
	8	1	1	0	0	0	2	0
	12	0	2	1	0	0	2	1
	6	0	2	0	0	0	2	0
	8	0	0	0	0	1	0	0
	7	1	0	3	0	0	0	1
	8	0	2	0	0	1	0	0
	12	3	0	0	0	0	3	1
	6	0	0	0	0	1	3	0
	8	1	0	2	0	0	0	1
	8	0	0	0	0	2	0	0
	10	0	1	1	0	2	1	0
	12	0	0	0	0	0	2	1
	11	0	1	1	1	0	2	0

ตารางที่ ๓.๔ แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
1	-2.115	3.76	6.4	17.7	6.6	0
	-3.71	-0.04	6.5	17.7	5.1	0
	0.85	3.36	6.3	17.1	5.7	0
	-3.535	-0.04	6.4	17.7	6.6	0
	-0.44	-0.04	7.85	15.2	5.4	0
	1.34	4.67	6.4	16.65	6.6	0
	-4.365	2.42	6.1	15.8	5.1	0
	-1.51	-3.035	6	15.13333	6.6	0
	-4.365	2.42	6.1	15.8	5.1	0
	0.355333	2.03	6.55	15.95	5.4	0
	-3.71	-0.04	6.5	17.7	5.1	0
	0.01	2.25	6.2	15.2	5	0
	-3.71	-0.04	6.5	17.7	5.1	0
	-3.23	2.42	6.1	16	5.1	0
	-0.046	2.03	6.6	16.65	5.15	0
	-1.38	2.15	6.2	15.5	5	0
	-3.71	-0.04	6.5	17.7	5.1	0
	0.85	4.57	6.4	17	6.6	0
	-4.62	0.83	6.1	15.8	5.1	0
	-3.4975	4.296667	6.4	17.7	6.6	0

ตารางที่ ๓.4 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
1	7	3	0	0	0	0	1	0
	12	1	1	1	0	0	2	1
	5	0	1	0	0	0	3	0
	8	1	1	0	0	1	1	0
	8	1	1	0	0	0	3	0
	10	0	1	1	0	2	0	0
	9	0	0	1	0	2	2	0
	6	0	1	0	0	0	2	0
	8	1	0	0	0	0	3	0
	12	0	2	1	0	0	3	1
	12	0	1	0	0	0	3	1
	12	1	2	1	0	0	2	1
	5	1	0	0	0	0	1	1
	9	1	0	0	0	0	1	0
	5	0	0	0	0	0	1	0
	6	1	0	2	0	0	2	0
	12	0	0	1	0	0	2	1
	11	0	1	1	0	2	1	0
	8	1	1	0	0	1	0	0
	9	1	0	0	0	0	1	0

ตารางที่ ๓.4 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
1	-1.51	2.09	7.3	14.9	6.7	0
	-3.42	4.69	6.1	14.8	5.1	0
	0.345	1.25	7.8	15.55	5.4	0
	-3.71	-0.04	6.5	17.6	6.6	0
	-1.26	1.91	6	15.55	6.6	0
	0.85	4.57	6.4	17.7	6.6	0
	-2.485	-0.15	6.4	16.6	6.6	0
	0.355333	2.03	6.55	15.95	5.4	0
	-1.26	1.91	6	15.9	6.6	0
	1.34	2.42	6.1	15.8	5.1	0
	1.34	0.83	6.1	15.8	5.1	0
	-3.42	2.42	6.1	14.8	5.1	0
	0.95	1.37	7.1	15.5	5.5	0
	-3.535	-0.04	6.5	17.6	6.6	0
	0.97	0.085	7.6	15.2	6	0
	0.62	0.956667	6.1	15.1	5.1	0
	-4.365	4.69	6.1	15.8	5.1	0
	-3.31	4.296667	6.4	17	6.6	0
	-3.71	-0.04	6.5	17.7	6.6	0
	-3.535	-0.04	6.5	17.7	6.6	0

ตารางที่ ๓.5 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Iteration	CR _e	DoubleCC _{Re}	TripleCC	Bracket	Benzene	Cycle _{Re}	SingleCO	DoubleCO
1	12	0	0	2	0	0	2	2
	12	0	1	0	0	0	2	1
	10	1	0	0	0	1	0	0
	11	1	1	0	0	1	1	0

ตารางที่ ๓.5 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 2 (รอบที่ 1)

Iteration	Predict Log S	Predict Log P	Predict	Predict	Predict	Error (%)
			Hansen Polarity	Hansen dispersion	Hansen H bond	
1	-4.365	3.03	6.1	16.6	6.7	0
	-4.62	0.83	6.1	15.8	5.1	0
	0.85	4.57	6.5	17.7	6	0
	-2.115	4.72	6.5	17.6	6	0



ภาคผนวก ด สำหรับแสดงผลที่ได้จากการสร้าง Genetic Algorithm
สำหรับแบบจำลองทำนายการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3

ตารางที่ ด.1 แสดงเงื่อนไขแบบจำลองการละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Condition	Hansen Dispersion	Hansen H bond	Hansen Polarity	Log S	Log P
Lower	16	5	6	-1	-1
Upper	18	7	8	1	1
Weight	0	0.7	0.3	0	0



ตารางที่ ด.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
0	12	0	1	3	0	1	3	0
1	12	0	0	2	0	0	2	1
2	11	1	3	0	0	0	1	0
3	9	1	0	1	0	0	5	0
4	3	0	0	2	0	0	0	0
5	9	0	0	2	0	0	3	0
6	10	0	1	6	0	0	2	0
7	7	2	0	0	0	1	0	0
8	10	3	0	2	0	0	0	0
9	4	0	1	0	0	0	2	0
10	8	1	0	2	0	0	0	1
11	12	0	0	2	0	1	0	2
12	7	0	0	0	0	1	3	0
13	9	1	2	2	0	0	0	0
14	11	1	0	0	0	0	0	1
15	8	0	0	0	0	0	1	0
16	12	1	0	1	0	0	0	3
17	11	2	1	1	0	0	0	0
18	9	0	1	2	0	0	1	1
19	9	2	0	5	0	0	0	0

ตารางที่ ด.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
20	9	0	0	0	0	1	3	1
21	12	1	0	7	0	0	3	0
22	12	2	1	0	0	0	0	2
23	8	1	0	0	0	0	3	1
24	10	0	0	5	0	0	5	0
25	10	0	2	0	0	0	0	0
26	11	3	0	3	0	0	0	0
27	10	0	1	4	0	1	0	0
28	12	0	1	1	0	1	1	2
29	9	0	0	4	0	0	0	1
30	11	0	0	0	0	1	3	0
31	10	0	0	1	0	0	1	1
32	7	0	1	1	0	0	1	0
33	12	1	0	4	0	0	1	1
34	12	0	0	1	0	0	3	3
35	8	0	0	0	0	1	2	0
36	9	1	0	1	0	0	0	1
37	11	2	1	2	0	0	3	0
38	12	0	2	2	0	0	2	0
39	6	0	0	0	0	1	0	0

ตารางที่ ด.2 แสดงผลที่ได้จากการ Initialization การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
40	11	0	1	0	0	0	3	0
41	12	0	0	6	0	0	3	1
42	10	3	0	1	0	0	1	1
43	12	0	2	1	0	2	1	0
44	12	0	1	6	0	0	1	0
45	12	1	0	1	0	0	0	1
46	12	1	1	4	0	0	1	0
47	8	0	0	3	0	0	3	0
48	12	1	1	1	0	0	0	1
49	11	0	2	3	0	0	0	0
50	10	2	0	1	0	1	0	1
51	11	2	0	1	0	0	2	1
52	9	0	4	1	0	0	0	0
53	12	0	0	4	0	0	6	1
54	11	0	0	1	0	1	3	1
55	12	0	0	1	0	0	9	1
56	7	0	2	0	0	0	1	0
57	11	1	1	0	0	0	1	0
58	12	2	1	1	0	0	0	0
59	12	0	2	0	0	0	6	0

ตารางที่ ด.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
1	12	0	1	5	0	0	3	0
61	8	0	1	5	0	0	1	0
88	11	0	0	2	0	2	3	0
862	9	0	1	0	0	0	3	0
966	12	0	0	3	0	1	5	0
325	11	1	1	0	0	1	4	0
330	12	0	1	0	0	1	6	0
802	11	0	1	2	0	1	3	0
860	12	0	1	5	0	0	3	0
336	12	0	3	3	0	0	3	0
346	9	0	1	5	0	0	0	1
789	10	1	0	5	0	1	0	0
522	12	0	0	5	0	1	4	0
365	12	0	1	0	0	1	6	0
550	11	0	0	0	0	1	7	0
223	12	0	0	3	0	1	4	0
864	12	0	3	0	0	0	3	0
596	12	3	0	3	0	0	3	0
245	9	1	0	1	0	0	0	3
543	12	0	1	5	0	0	3	0

ตารางที่ ด.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
1	1.34	4.67	4.1	14.7	8.2	0
61	1.237	3	5.2	14.7	9.5	0
88	1.34	4.67	4.7	16.65	6.6	0
862	1.74	3.77	4.8	15.85	7.1	0
966	1.07	4.67	6	16.65	9.3	0
325	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
330	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
802	1.34	4.67	4.7	16.65	7.3	0
860	1.34	4.67	4.1	14.7	8.2	0
336	1.34	2.42	4.1	15.8	7.2	0
346	1.237	3	5.3	15.3	9.8	0
789	1.237	2.54	4.7	17.7	10.6	0
522	1.07	4.67	6	16.65	9.3	0
365	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
550	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
223	1.07	4.67	6	16.65	9.3	0
864	1.34	0.83	4.6	15.8	7.1	0
596	1.34	4.04	4.1	16	4.2	0
245	1.28	2.825	5.3	16.8	10.5	0
543	1.34	4.67	4.1	14.7	8.2	0

ตารางที่ ด.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
272	12	3	0	1	0	0	3	0
952	11	0	0	2	0	1	6	0
840	8	0	1	5	0	0	1	0
78	12	0	1	2	0	1	4	0
667	12	0	0	2	0	2	3	0
288	12	1	0	2	0	0	3	0
254	12	0	0	1	0	0	3	0
289	8	0	0	7	0	0	0	0
831	12	0	1	1	0	0	3	0
295	9	0	0	3	0	0	0	3
922	10	0	0	5	0	1	0	0
958	8	0	0	2	0	0	0	3
300	10	0	0	5	0	0	1	2
80	12	2	2	1	0	0	3	0
291	11	2	2	0	0	0	3	0
271	4	0	0	2	0	0	1	0
220	12	0	2	2	0	0	3	0
978	10	0	0	7	0	1	0	0
171	12	0	2	0	0	0	3	0
900	12	0	1	0	0	1	7	0

ตารางที่ ด.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
272	1.34	3	4.1	16	4.2	0
952	1.07	4.67	6	16.65	9.3	0
840	1.237	3	5.2	14.7	9.5	0
78	1.07	4.67	6	16.65	9.3	0
667	1.34	4.67	4.7	16.65	5.8	0
288	1.34	4.67	4.1	15.8	4.2	0
254	1.34	4.67	4.1	15.8	10.2	0
289	1.237	3	5.2	14.7	9.5	0
831	1.34	4.67	4.1	15.8	10.2	0
295	1.28	0.78	5.3	17.1	9.1	0
922	1.237	3	4.7	17.7	10.6	0
958	1.28	0.78	5.2	15.8	6.3	0
300	1.237	1.7	5.5	16.5	9.8	0
80	1.34	3	4.1	16	4.2	0
291	1.34	3	4.6	16	7.9	0
271	1.05	-0.67	5.1	15.2	14.7	0
220	1.34	2.42	4.1	15.8	7.2	0
978	1.237	3	4.7	17.7	10.6	0
171	1.34	0.83	4.6	15.8	7.1	0
900	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0

ตารางที่ ด.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	CR _e	DoubleCC _{Re}	TripleCC	Bracket	Benzene	Cycle _{Re}	SingleCO	DoubleCO
903	9	0	1	0	0	0	3	0
496	10	1	0	5	0	1	0	0
495	12	0	0	0	0	2	5	0
706	10	0	0	8	0	0	2	0
992	11	1	2	2	0	0	3	0
909	10	1	0	5	0	0	0	1
472	11	0	2	1	0	0	3	0
116	8	1	0	5	0	0	1	0
494	11	0	0	4	0	0	3	0
910	9	1	0	5	0	0	0	1
480	10	1	0	5	0	0	1	1
575	12	1	1	4	0	0	3	0
610	7	0	0	0	0	0	4	1
763	9	2	1	0	0	0	3	0
899	11	1	0	0	0	1	5	0
177	12	0	0	0	0	2	4	0
938	11	2	0	0	0	0	3	0
397	9	0	0	5	0	1	1	0
882	12	0	0	2	0	0	3	0
634	11	0	0	0	0	1	5	0

ตารางที่ ด.3 แสดงผลที่ได้จากการ Selection การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Index	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
903	1.74	3.77	4.8	15.85	7.1	0
496	1.237	2.54	4.7	17.7	10.6	0
495	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
706	2.46	3	4.1	14.7	8.2	0
992	1.34	2.42	4.1	15.8	4.2	0
909	1.237	2.54	5.5	15.3	9.8	0
472	1.34	2.42	4.1	15.8	10.2	0
116	1.237	2.54	5.2	14.7	4.2	0
494	1.34	4.67	4.1	14.7	8.2	0
910	1.237	2.54	5.3	15.3	9.8	0
480	1.237	2.54	5.5	15.3	9.8	0
575	1.34	4.67	4.1	14.7	4.2	0
610	2.65	2.04	5.7	17.7	11.9	0
763	1.74	1.54	4.8	16	7.9	0
899	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
177	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
938	1.34	3	4.6	16	7.9	0
397	1.237	3	4.9	16.6	10.6	0
882	1.34	4.67	4.1	15.8	7.2	0
634	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0

ตารางที่ ด.4 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Iteration	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
1	12	0	1	5	0	0	3	0
	8	0	1	5	0	0	1	0
	11	0	0	2	0	2	3	0
	9	0	1	0	0	0	3	0
	12	0	0	3	0	1	5	0
	11	1	1	0	0	1	4	0
	12	0	1	0	0	1	6	0
	11	0	1	2	0	1	3	0
	12	0	3	3	0	0	3	0
	9	0	1	5	0	0	0	1
	10	1	0	5	0	1	0	0
	12	0	0	5	0	1	4	0
	11	0	0	0	0	1	7	0
	12	0	0	3	0	1	4	0
	12	0	3	0	0	0	3	0
	12	3	0	3	0	0	3	0
	9	1	0	1	0	0	0	3
	12	3	0	1	0	0	3	0
	11	0	0	2	0	1	6	0
	12	0	1	2	0	1	4	0

ตารางที่ ด.4 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Iteration	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
1	1.34	4.67	4.1	14.7	8.2	0
	1.237	3	5.2	14.7	9.5	0
	1.34	4.67	4.7	16.65	6.6	0
	1.74	3.77	4.8	15.85	7.1	0
	1.07	4.67	6	16.65	9.3	0
	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
	1.34	4.67	4.7	16.65	7.3	0
	1.34	2.42	4.1	15.8	7.2	0
	1.237	3	5.3	15.3	9.8	0
	1.237	2.54	4.7	17.7	10.6	0
	1.07	4.67	6	16.65	9.3	0
	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
	1.07	4.67	6	16.65	9.3	0
	1.34	0.83	4.6	15.8	7.1	0
	1.34	4.04	4.1	16	4.2	0
	1.28	2.825	5.3	16.8	10.5	0
	1.34	3	4.1	16	4.2	0
	1.07	4.67	6	16.65	9.3	0
	1.07	4.67	6	16.65	9.3	0

ตารางที่ ด.4 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Iteration	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
1	12	0	0	2	0	2	3	0
	12	1	0	2	0	0	3	0
	12	0	0	1	0	0	3	0
	8	0	0	7	0	0	0	0
	12	0	1	1	0	0	3	0
	9	0	0	3	0	0	0	3
	10	0	0	5	0	1	0	0
	8	0	0	2	0	0	0	3
	10	0	0	5	0	0	1	2
	12	2	2	1	0	0	3	0
	11	2	2	0	0	0	3	0
	4	0	0	2	0	0	1	0
	12	0	2	2	0	0	3	0
	10	0	0	7	0	1	0	0
	12	0	2	0	0	0	3	0
	12	0	1	0	0	1	7	0
	12	0	0	0	0	2	5	0
	10	0	0	8	0	0	2	0
	11	1	2	2	0	0	3	0
	10	1	0	5	0	0	0	1

ตารางที่ ด.4 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Iteration	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
1	1.34	4.67	4.7	16.65	5.8	0
	1.34	4.67	4.1	15.8	4.2	0
	1.34	4.67	4.1	15.8	10.2	0
	1.237	3	5.2	14.7	9.5	0
	1.34	4.67	4.1	15.8	10.2	0
	1.28	0.78	5.3	17.1	9.1	0
	1.237	3	4.7	17.7	10.6	0
	1.28	0.78	5.2	15.8	6.3	0
	1.237	1.7	5.5	16.5	9.8	0
	1.34	3	4.1	16	4.2	0
	1.34	3	4.6	16	7.9	0
	1.05	-0.67	5.1	15.2	14.7	0
	1.34	2.42	4.1	15.8	7.2	0
	1.237	3	4.7	17.7	10.6	0
	1.34	0.83	4.6	15.8	7.1	0
	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
	2.46	3	4.1	14.7	8.2	0
	1.34	2.42	4.1	15.8	4.2	0
	1.237	2.54	5.5	15.3	9.8	0

ตารางที่ ด.4 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Iteration	CRe	DoubleCCRe	TripleCC	Bracket	Benzene	CycleRe	SingleCO	DoubleCO
1	11	0	2	1	0	0	3	0
	8	1	0	5	0	0	1	0
	11	0	0	4	0	0	3	0
	9	1	0	5	0	0	0	1
	10	1	0	5	0	0	1	1
	12	1	1	4	0	0	3	0
	7	0	0	0	0	0	4	1
	9	2	1	0	0	0	3	0
	11	1	0	0	0	0	5	0
	12	0	0	0	0	2	4	0
	11	2	0	0	0	0	3	0
	9	0	0	5	0	1	1	0
	12	0	0	2	0	0	3	0
	11	0	0	0	0	1	5	0
	12	0	1	4	0	0	3	0
	8	0	1	5	0	0	0	0
	12	0	1	3	0	1	3	0
	12	0	0	1	0	1	6	0
	10	0	0	6	0	1	0	0
	12	0	2	3	0	0	3	0

ตารางที่ ด.4 แสดงผลลัพธ์ที่ได้จากการทำกระบวนการ Genetic Algorithm การละลายเมื่อตั้งค่าน้ำหนัก 2 ตัวครั้งที่ 3 (รอบที่ 1)

Iteration	Predict Log S	Predict Log P	Predict Hansen Polarity	Predict Hansen dispersion	Predict Hansen H bond	Error (%)
1	1.34	2.42	4.1	15.8	10.2	0
	1.237	2.54	5.2	14.7	4.2	0
	1.34	4.67	4.1	14.7	8.2	0
	1.237	2.54	5.3	15.3	9.8	0
	1.237	2.54	5.5	15.3	9.8	0
	1.34	4.67	4.1	14.7	4.2	0
	2.65	2.04	5.7	17.7	11.9	0
	1.74	1.54	4.8	16	7.9	0
	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
	1.34	3	4.6	16	7.9	0
	1.237	3	4.9	16.6	10.6	0
	1.34	4.67	4.1	15.8	7.2	0
	1.07	-0.68	6	16.65	9.3	0
	1.34	4.67	4.1	14.7	8.2	0
	1.237	3	5.2	14.7	9.5	0
	1.34	4.67	4.7	16.65	7.3	0
	1.07	4.67	6	16.65	9.3	0
	1.237	3	4.7	17.7	10.6	0
	1.34	2.42	4.1	15.8	7.2	0