

République Algérienne Démocratique et Populaire
Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique
Université 8 Mai 1945 Guelma



Faculté des Sciences et de la Technologie
Département de Génie des Procédés
Laboratoire de domiciliation des Silicates, Polymères et Nanocomposites (LSPN)

THÈSE

En Vue de l'Obtention du Diplôme de Doctorat de Troisième Cycle

Domaine : Sciences et Technologie Filière : Génie des Procédés
Spécialité : Génie Chimique.

Présentée par

Nom et Prénom
Beghour Yassine
Intitulée

**Utilisation des relations quantitatives structure-propriétés (QSPR) dans
l'estimation de propriétés physico-chimiques**

Soutenue le : 12-02-2026

Devant le Jury composé de :

Nom et Prénom	Grade		
Mr SATHA Hamid	Professeur	Univ.de Guelma	Président
Mme LAHIOUEL Yasmina	Professeur	Univ.de Guelma	Encadreur
Mme BENHAMIDA Aida.	Professeur	Univ.de Guelma	Examineur
Mr LAYACHI Abdelheq	Professeur	Univ.de Constantine 1	Examineur

Année Universitaire : 2025/2026

Dédicaces

À ma chère mère et à mon cher père,
pour leur amour inconditionnel, leurs sacrifices et leurs prières qui m'ont
porté tout au long de ce parcours.

À mon frère **Oussama** et à mes sœurs **Sabrina** et **Wissam**,
pour leur affection et leur soutien constants.

À mon oncle **Rabi yar7mha zohra** ,
pour sa bienveillance et ses encouragements.

À mes amis, en particulier **Ali Djebabla** et **Ela Eddine Soudani**,
dont l'amitié et le soutien indéfectible ont été une source précieuse de
motivation,
ainsi qu'à **Saleh, Safir et Foutouhi Chihab Eddinne**, pour leur présence et leur
sincérité.

À tous mes amis et collègues de laboratoire, ainsi qu'aux doctorants de
l'Université 8 Mai 1945 de Guelma,
pour les échanges, l'entraide et les moments partagés.

À ma promotion (2020) de **Génie des procédés**,
pour les expériences collectives et l'esprit de solidarité tout au long de notre
formation.

À ma grande famille paternelle **Beghour** et maternelle **Chouati**,
sans exception, pour leur soutien et leur présence à chaque étape de ma vie.

À vous tous, je dédie humblement ce travail, avec toute ma reconnaissance et
ma profonde gratitude

Remerciements et gratitude

Je tiens tout d'abord à exprimer ma profonde gratitude à ALLAH Tout-Puissant, qui m'a guidé, soutenu et accordé la patience, la persévérance et la force nécessaires pour accomplir ce travail de recherche.

Je souhaite adresser mes remerciements les plus sincères et un grand merci à **Madame Yasmina LAHIOUEL**, pour sa grande disponibilité, sa patience exemplaire et ses conseils éclairés, qui ont été déterminants dans l'aboutissement de cette thèse.

J'exprime également ma reconnaissance à Monsieur le **Professeur Hamid SATHA**, Directeur du laboratoire LSPN et Responsable de la formation doctorale, ainsi qu'à le **Professeur Chelaghmia Mohamed Lyamine**, pour leur appui constant et leurs encouragements.

Mes remerciements vont aussi à l'ensemble des membres du laboratoire LSPN, avec une mention particulière au Professeur **SATHA**.

Résumé

Résumé

Cette étude vise à développer des modèles fondés sur une approche quantitative de la relation structure-propriétés (QSPR) afin de prédire certains paramètres physico-chimiques, à savoir la température normale d'ébullition (T_b) et les propriétés critiques : température critique (T_c), pression critique (P_c) et volume critique (V_c) des composés organiques.

Les modèles utilisent un algorithme d'apprentissage automatique, plus précisément le réseau de neurones artificiels multilayer (MLP-ANN), pour la modélisation non linéaire, en utilisant des descripteurs moléculaires pertinents comme variables d'entrée.

Une comparaison avec la régression par vecteurs de support (SVR) a été effectuée afin d'évaluer les performances des modèles PMC-ANN pour des ensembles de données comprenant respectivement **417**, **412**, **411** et **418** composés organiques pour T_b , T_c , P_c et V_c . Pour chaque modèle, la base de données a été divisée de manière aléatoire en deux sous-ensembles : 80 % pour l'entraînement et 20 % pour les tests.

Les configurations optimales pour les modèles **PMC-ANN** étaient **(25-17-1)** pour T_b , **(25-14-1)** pour T_c , **(24-17-1)** pour P_c et **(18-10-1)** pour V_c .

Les résultats ont été les suivants : pour le modèle PMC-ANN T_b , les résultats comprenaient $R^2 = 0,9974$, IOA = 0,9992, MAE = 3,6331 k, MAPE = 1,0165 % et RMSE = 4,9321 k. Pour le modèle T_c , les résultats étaient $R^2 = 0,9935$, IOA = 0,9982, MAE = 7,0545 k, MAPE = 1,0436 % et RMSE = 9,5482 k. Pour le modèle P_c , les résultats étaient les suivants : $R^2 = 0,9907$, IOA = 0,9992, MAE = 87,5193 mPa, MAPE = 2,4352 % et RMSE = 122,5629 mPa. Pour le modèle V_c , les résultats étaient $R^2 = 0,9982$, IOA = 0,9998, MAE = 6,8173 cm³/mol, MAPE = 2,3525 % et RMSE = 9,4734 cm³/mol.

Les modèles **PMC-ANN** ont systématiquement surpassé les modèles SVR, démontrant une précision, une stabilité et une capacité de généralisation supérieures.

La méthode d'analyse de sensibilité (méthode des poids) a été utilisée pour évaluer individuellement la contribution de chaque descripteur d'entrée dans les modèles QSPR-ANN. Les résultats ont montré que la plupart des descripteurs avaient un niveau d'influence élevé ou moyen. De plus, l'analyse du domaine d'applicabilité (AD) a confirmé la fiabilité et la généralisation des modèles, la plupart des points de données se situant dans une fourchette acceptable.

Enfin, la comparaison avec les modèles précédents a démontré que les modèles PMC-ANN proposés surpassaient les modèles existants en termes de précision et de robustesse, confirmant leur fort potentiel pour fournir des prévisions précises.

Abstract

Abstract

This study aims to develop models using a Quantitative Structure–Property Relationship (QSPR) approach to predict selected physicochemical parameters, namely, the normal boiling point temperature (T_b) and the critical properties: critical temperature (T_c), critical pressure (P_c), and critical volume (V_c) of organic compounds. The models employ a machine learning algorithm, specifically the multilayer perceptron artificial neural network (MLP-ANN), for nonlinear modeling, using relevant molecular descriptors as input variables.

A comparison with support vector regression (SVR) was carried out to evaluate the performance of the MLP-ANN models for datasets comprising 417, 412, 411, and 418 organic compounds for T_b , T_c , P_c , and V_c , respectively. For each model, the database was randomly divided into two subsets: 80% for training and 20% for testing.

The optimal configurations for the MLP-ANN models were (25-17-1) for T_b , (25-14-1) for T_c , (25-17-1) for P_c , and (25-14-1) for V_c .

The results were as follows: For the MLP-ANN T_b model, the results included $R^2 = 0.9974$, IOA = 0.9992, MAE = 3.6331k, MAPE = 1.0165%, and RMSE = 4.9321k. For the T_c model, results were $R^2 = 0.9935$, IOA = 0.9982, MAE = 7.0545 k, MAPE = 1.0436%, and RMSE = 9.5482 k. For P_c model, results included $R^2 = 0.9907$, IOA = 0.9992, MAE = 87,5193 mPa, MAPE = 2,4352 mPa, and RMSE = 122,5629 mPa. For the V_c model, results were $R^2 = 0.9982$, IOA = 0.9998, MAE = 6,8173 cm³/mol, MAPE = 2,3525 %, and RMSE = 9,4734cm³/mol.

The MLP-ANN models consistently outperformed the SVR models, demonstrating superior accuracy, stability, and generalization capability.

The sensitivity analysis method (weight method) was used to individually assess the contribution of each input descriptor in the QSPR-ANN models. The results showed that most descriptors had a high or medium level of influence. Furthermore, the applicability domain (AD) analysis confirmed the reliability and generalizability of the models, with most data points falling within an acceptable range.

Finally, comparison with previous models demonstrated that the proposed MLP-ANN models surpass existing ones in terms of precision and robustness, confirming their strong potential to provide accurate predictions.

تسعى هذه الدراسة إلى اعداد نماذج باستخدام طريقة العلاقة الكمية بين التركيب والخصائص (QSPR) للتنبؤ بمعلمات فيزيائية كيميائية محددة، وهي درجة حرارة الغليان العادية والخصائص الحرجة: درجة الحرارة الحرجة، والضغط الحرج (Pc)، والحجم الحرج (Vc) للمركبات العضوية. تستخدم النماذج خوارزمية التعلم الآلي، وتحديدًا الشبكة العصبية الاصطناعية متعددة الطبقات (MLP-ANN)، للنمذجة غير الخطية، باستخدام واصفات جزيئية ذات صلة بمتغيرات إدخال.

أجريت مقارنة مع انحدار المتجه الداعم (SVR) لتقييم أداء نماذج MLP-ANN لمجموعات البيانات التي تضم 417 و412 و411 و418 مركبًا عضوياً لـ Tb و Tc و Pc و Vc على التوالي. بالنسبة لكل نموذج، تم تقسيم قاعدة البيانات عشوائياً إلى مجموعتين فرعيتين: 80% للتدريب و20% للاختبار.

كانت التكوينات المثلى لنماذج MLP-ANN هي (1-17-25) لـ Tb، و(1-14-25) لـ Tc، و(1-17-24) لـ Pc، و(1-18-10) لـ Vc.

وكانت النتائج كما يلي: بالنسبة لنموذج MLP-ANN Tb، شملت النتائج $R^2 = 0.9974$ ، و $IOA = 0.9992$ ، و MAE = 3.6331، و MAPE = 1.0165، و $RMSE = 4.9321$. بالنسبة لنموذج Tc، كانت النتائج $R^2 = 0.9935$ ، و $IOA = 0.9982$ ، و MAPE = 1.0436، و MAE = 7.0545، و $RMSE = 9.5482$. بالنسبة لنموذج Pc، تضمنت النتائج $R^2 = 0.9907$ ، و MAPE = 2,4352، و MAE = 87,5193، و $IOA = 0.9992$ ، و $RMSE = 122,5629$. بالنسبة لنموذج Vc، كانت النتائج $R^2 = 0,9982$ ، و MAPE = 2,3525، و MAE = 6,8173، و $IOA = 0,9998$ ، و $RMSE = 9,4734$.

تفوقت نماذج MLP-ANN باستمرار على نماذج SVR، مما يدل على دقتها الفائقة واستقرارها وقدرتها على التعميم.

تم استخدام طريقة تحليل الحساسية (طريقة الوزن) لتقييم مساهمة كل واصف مدخلات على حدة في نماذج QSPR-ANN. أظهرت النتائج أن معظم الواصفات لها تأثير عالٍ أو متوسط. علاوة على ذلك، أكد تحليل مجال التطبيق (AD) موثوقية النماذج وقابليتها للتعميم، حيث تقع معظم نقاط البيانات ضمن نطاق مقبول.

أخيراً، أظهرت المقارنة مع النماذج السابقة أن نماذج MLP-ANN المقترحة تفوق النماذج الحالية من حيث الدقة والمتانة، مما يؤكد قدرتها القوية على توفير تنبؤات دقيقة.

Table des matières

Table des matières	i
Abréviations	ii
Nomenclatures et symboles.....	vi
Liste des Tableaux	vii
Liste des figures	x
Articles scientifiques publiés dans des revues internationales à comité de lecture	xiii
Introduction Générale.....	1
Chapitre I. Généralités sur les molécules organiques	
I 1. Introduction.....	4
I.2. Généralités sur les molécules organiques	4
I.2.2. Définition de molécules organiques	4
I.3. Description générale Des molécules organiques	5
I.4. Classification Des molécules organiques par Groupes fonctionnels	7
I.4.1. Groupes fonctionnels.....	7
I.4.2. Les composés organiques sont classés selon leur polarité	14
I.5. Propriétés usuelles des molécules organiques.....	14
I.5.1. Propriétés physicochimiques	14
I.5.2. Propriétés critiques (Tc, Pc, Vc, Zc)	15
I.5.3. Propriétés thermodynamiques	16
I.5.4. Autres Propriétés	17
I.6. L'identification structurale des composés organiques.....	18
I.6.1. Spectroscopie Infrarouge IR.....	18
I.6.2. La résonance magnétique nucléaire (RMN).....	18
I.6.3. Méthodes instrumentales	19
I.7. Applications dans les domaines de la science et de la technologie	19
I.8. Conclusion	21
Chapitre II . Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA	
II.1. Introduction	22
II.2. Approche relations quantitatives structures propriétés/activités	22
II.2.1. Définition	22
II.2.2. Historique QSPR.....	22
II.2.3. Principe et méthodologie de base des études RQSP/RQSA	23

Table des matières

II.3. Représentation et Optimisation de la Structure	24
II.4. Notions de base sur les descripteurs	25
II.4.1. Définition descripteurs	25
II.4.2. Classification des descripteurs	25
II.5. Logiciels de calcul des descripteurs moléculaires.....	28
II.6. Sélection et réduction du nombre de descripteurs	28
II.6.1 Sélection objective	29
II.6.2. Sélection subjective	29
II.7. Méthodes d'apprentissage statistiques	30
II.7.1. Régression linéaire multiple	31
II.7.2. Réseaux de neurones artificiels.....	31
II.7.3. Support (Vector Regression) (SVR).....	40
II.8. Études statistiques, vérification et comparaison.....	41
II.9. Conclusion	43
Chapitre III Etat de l'art revue critique de la littérature sur la détermination des propriétés des composés organiques	
III.1. Introduction	44
III.2. Les outils informatiques utilisés pour le développement et l'analyse des modèles de RQSP.....	44
III.3. La méthodologie globale mise en œuvre pour la modélisation RQSP.....	45
III.3.1. Rassemblement et traitement des données.	46
III.3.2. Notion SDF et optimisation des chimiques des molécules organiques	47
III.3.4. Procédure de prétraitement pour la sélection des descripteurs pertinents.....	50
III.3.5. Critères de sélection des paramètres pour l'apprentissage des modèles RQSP-RNA et RQSP-SVR.	51
III.3.6. Évaluation de la performance des modèles RQSP-ARN optimaux	53
III.4. L'état de l'art et la revue critique de la littérature sur la détermination des propriétés des composés organiques.	56
III.5. Travaux réalisés sur la modélisation de la température normale d'ébullition :	557
III.6. Travaux réalisés sur la modélisation des propriétés physico-chimiques (T _b , T _c , P _c , V _c)	59
III.7. Revue des travaux sur la prédiction des propriétés d'intérêts des réalisés par d'autres méthodologies	61
III.8. Conclusion	64
Chapitre IV .Résultats et discussions	
IV.1. Introduction	65

Table des matières

IV.2. Caractéristiques des descripteurs pertinents sélectionnés	65
IV.3. Architectures des meilleurs modèles RQSP-RNA obtenus	70
IV.4. Application des expressions mathématiques des modèles RQSP-RNA obtenus.....	71
IV.5. Construction modèles RQSP-SVR obtenus	72
IV.6. Prédiction des propriétés physicochimiques des composés organiques par des modèles QSPR basés sur les réseaux de neurones artificiels (RNA).	73
IV.6.1. Comparaison graphique entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées à partir des modèles RQSP-RNA	74
IV.6.2. Calculs des paramètres de performance et analyse statistique des modèles de type RQSP-RNA obtenus	77
IV.6.3. Analyse de sensibilité des descripteurs dans chaque modèle RQSP-RNA par la méthode de poids	82
IV.6.4. Comparaison avec différents modèles	88
IV.7..Conclusion	97
Conclusion générale.....	98
Références bibliographiques.....	99
Annexes	109

Abréviations

Abréviation

Abréviation	Définition
3DMoRSE	3D-Molecule Representation of Structures based on Electron diffraction
AA	Algorithme d'Apprentissage / Average Absolute Deviation
AAD	Average Absolute Deviation
AAE	Average Absolute Error
AARD	Average Absolute Relative Deviation
AD	Absolute Deviation
AG	Algorithme Génétique
ANN	Artificial Neural Network
ARTMAP	Adaptive Resonance Theory MAP
ARTN	Adaptive Resonance Theory Networks
BFGS	Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno algorithm
BP	Boiling Point
bpNN	back-propagation Neural Network
C	Carbone
CG	Contribution des Groupes
CIG	Contribution à Interaction des Groupes
CN	Competitive Networks
CNN	Competitive Neural Network
DA	Domaine d'Applicabilité
DS	Déviation Standard (Écart type)
DSR	Déviation Standard Relative (Écart type relatif)
E-Dragon	Electronic Dragon
EQM	Erreur Quadratique Moyenne
ERAM	Erreur Relative Absolu Moyenne
ERM	Erreur Relative Moyenne
ESP	Erreur Standard de Prédiction
FBR	Fonction de Base Radiale
FF-ANN	Feed Forward-Artificial Neural Network
GA	Genetic Algorithm
GC	Group Contribution method
GETAWAY	GEometry, Topology, and Atom-Weights Assembly
GVS	Group Vector Space
H	Hydrogène
IR	Importance Relative / Infra rouge
LM	Levenberg–Marquardt
LSSVM	Least Squares Support Vector Machine
MAPE	Mean Absolute Percentage Error
MD	Mean Deviation
MLP	Multi Layer Perceptron
MLR	Multiple Linear Regression
MPE	Mean Percentage Error
MS	Mass Spectrometry
MVS	Machines à Vecteurs de Supports
MW	Molecular Weight
PLS	Partial Least Squares
PMC	Perceptron Multi Couche
QSAR	Quantitative Structure Activity Relationship

Abréviation

Abréviations

QSPR	Quantitative Structure Property Relationship
RBFN	Radial Basis Function Network
RBF-NN	Radial Basis Function-Neural Network
REQM	Racine d'Erreur Quadratique Moyenne
RFBR	Réseau à Fonctions de Base Radiale
RLM	Régression Linéaire Multiple
RMN	Résonance Magnétique Nucléaire
RMSE	Root Mean Squared Error
RN	Réseau de Neurone
RNA	Réseau de Neurone Artificiel
RNA _s	Réseaux de Neurones Artificiels
RN-FBR	Réseaux de Neurones à Fonction de Base Radiale
RNFF	Réseau de Neurones de type Feed Forward
RON	Research Octane Number
RQSA	Relation Quantitative Structure Activité
RQSP	Relation Quantitative Structure Propriété
RSD	Relative Standard Deviation
RSV	Résidu Sous Vide
RVS	Régression à Vecteur de Support
SOS	Sum Of Squares
SVM	Support Vector Machine
SVR	Support Vector Regression
VCCLAB	Virtual Computational Chemistry Laboratory
IOA	Indice d'accord

Abréviations

Nomenclatures et symboles

Abréviation	Terme complète / Signification	Unité / Remarque
0-D	0 Dimension	(-)
1-D	1 Dimension	(-)
2-D	2 Dimensions	(-)
3-D	3 Dimensions	(-)
4-D	4 Dimensions	(-)
h	Levier (leverage)	(-)
h*	Levier standard (standard leverage)	(-)
$dH^{\circ}f$	Enthalpie standard de formation	J/mole
Indice de Balaban	Indice topologique	(-)
R	Coefficient de corrélation ou de régression	(-)
R²	Coefficient de détermination	(-)
Std	Standard	-
Tb	Température du point d'ébullition normal	K ou °C
Tc	Température critique	K ou °C
Pc	Pression critique	kpas
Vc	Volume critique	cm³/mol
M	Le poids moléculaire	g/mol
Valeur-P	Valeur de probabilité (P-value, Probability value)	-
W	Indice de Wiener	(-)
Y	Sortie du réseau	-
Z	Facteur de compressibilité	-
Zj	Sortie de la couche cachée	-

Liste des Tableaux

Liste des Tableaux

Chapitre I. Généralités sur les molécules organiques		
Tableau I.1	Exemple de quelques Alcanes avec leur formule chimique et structure	8
Tableau I.2	Quelques exemples d'alcènes avec leurs formules chimiques et structures moléculaires	8
Tableau I.3	Quelques exemples d'alcynes avec leurs formules chimiques et structures moléculaires	9
Tableau I.4	Quelques exemples de Cycloalcanes avec leurs formules chimiques et structures moléculaires	9
Tableau I.5	Quelques exemples d'aromatiques avec leurs formules chimiques et structures moléculaires	10
Tableau I.6	Quelques exemples de composés oxygénés avec leurs formules chimiques et structures moléculaires	11
Tableau I.7	Quelques exemples de Composés contenant de l'azote avec leurs formules	12
Tableau I.8	Quelques exemples de composés soufrés avec leurs formules chimiques et structures moléculaires	13
Tableau I.9	Quelques exemples de halogénoalcanes avec leurs formules chimiques et structures moléculaires	13

Chapitre II. Approches fondamentales, méthodologie de développement, validation et mise en œuvre des méthodes RQSP/RQSA		
Tableau II.1.	Répertorie quelques fonctions de transfert utilisées dans les réseaux de neurones artificiels, telles qu'implémentées dans le Logiciel	34

Chapitre III Techniques et matériels		
Tableau I.V.1.	Tableau de descripteurs de E-Dragon en ligne	49

Liste des Tableaux

Chapitre IV. Résultats et discussions		
Tableau IV.1	Caractéristiques des descripteurs sélectionnés à l'aide de l'analyse S-MLR pour Tb	66
Tableau IV.2	Caractéristiques des descripteurs sélectionnés à l'aide de l'analyse S-MLR pour Tc	67
Tableau IV.3	Caractéristiques des descripteurs sélectionnés à l'aide de l'analyse S-MLR pour Vc	68
Tableau IV.4	Caractéristiques des descripteurs sélectionnés à l'aide de l'analyse S-MLR pour Pc	69
Tableau IV.5	Structures des meilleurs modèles QSPR-RNA obtenus pour chaque paramètre.	70
Tableau IV.6	Paramètres des meilleurs modèles SVR.	74
Tableau IV.7	Paramètres statistiques des meilleurs modèles RQSP-RNA pour les quatre propriétés.	79
Tableau IV.8	Paramètres statistiques des meilleurs modèles RQSP-SVR pour les quatre propriétés.	79
Tableau IV.9	Comparaison de la température d'ébullition de quelques modèles établis dans la littérature et dans cette étude	90
Tableau IV.10	Comparaison de la température critique de quelques modèles établis dans la littérature et de cette étude	92
Tableau IV.11	Comparaison de la Pression e critique de quelques modèles établis dans la littérature et de cette étude	94
Tableau IV.12	Comparaison de Volume critique de quelques modèles établis dans la littérature et de cette étude	96

Annexes A		
Tableau A.1.	Valeurs des descripteurs pertinentes utilisées pour l'élaboration du modèle de RQSP pour Tb	109
Tableau A.2	Valeurs des descripteurs pertinentes utilisées pour l'élaboration du modèle de RQSP pour Tc	124
Tableau A.3	Valeurs des descripteurs pertinentes utilisées pour l'élaboration du modèle de RQSP pour Pc	139
Tableau A.4	Valeurs des descripteurs pertinentes utilisées pour l'élaboration du modèle de RQSP pour Vc	154
Annexes B		

Liste des Tableaux

Tableau B.1	Valeurs expérimentales et valeurs prédites par les modèles RQSP-RNA pour Tb et Tc des propriétés physicochimiques des composés organiques, ainsi que leurs rangs de répartition dans les ensembles d'apprentissage et de test pour chaque paramètre	171
Tableau B.2	Valeurs expérimentales et valeurs prédites par les modèles RQSP-RNA pour Pc et Vc des propriétés physicochimiques des composés organiques, ainsi que leurs rangs de répartition dans les ensembles d'apprentissage et de test pour chaque paramètre	193
Tableau B.3	Valeurs expérimentales et prédites par les modèles QSPR-SVR pour Tb et Tc des composés organiques, ainsi que leurs rangs dans les ensembles d'apprentissage et de test pour chaque propriété	214
Tableau B.4	Valeurs expérimentales et prédites par les modèles QSPR-SVR pour Pc et Vc des composés organiques, ainsi que leurs rangs dans les ensembles d'apprentissage et de test pour chaque propriété	235
Annexes C		
Tableau C.1	Poids et biais du meilleur modèle RQSP-RNA pour Tb	252
Tableau C.2	Poids et biais du meilleur modèle RQSP-RNA pour Tc	253
Tableau C.3	Poids et biais du meilleur modèle RQSP-RNA pour Pc	254
Tableau C.4	Poids et biais du meilleur modèle RQSP-RNA pour Vc	255

Liste des figures

Liste des figures

Chapitre I. Généralités sur les molécules organiques		
Figure I.1	Classification des principales coupes pétrolières selon les intervalles de la température d'ébullition et le nombre d'atomes de carbone	06
Figure I.2	Représentation de la structure du motif Porphyrine ou Porphine (C ₂₀ H ₁₄ N ₄)	14
Figure I.3	Diagramme de coordonnées (P-T) des trois équilibres d'un corps pur.	16

Chapitre II. Approches fondamentales, méthodologie de développement, validation et mise en œuvre des méthodes RQSP/RQSA		
Figure II.1	Principe et méthodologie de base des modèles RQSP/RQSA.	24
Figure II .2	Fille sdf de compound méthanol	25
Figure II .3	Conception de neurones biologiques	32
Figure II.4	Illustration distinctive d'un neurone artificiel formel	32
Figure II.5	Phénomènes d'apprentissage optimale, sous-apprentissage et sur-apprentissage	37
Figure II.6	Structure d'un perceptron multi couches non-bouclé.	39
Figure II.7	SVR structure	41

Liste des figures

Chapitre III. Techniques et matériels		
Figure III.1.	Capture d'écran des logiciels utilisés dans cette L'étude de QSPR	44
Figure III.2	Aperçu des procédures de développement des modèles QSPR dans cette étude.	46
Figure III.3.	Notations SDF de molécule	48
Figure III.4.	Interface de le logiciel E-Dragon en ligne	48
Figure III.5.	Capture d'écran pour le choix des fonctions d'activation sur STATISTICA	50
Figure III .6	Organigramme du MLP-ANN et du SVR résumant le processus de développement des modèles	53
Figure III.7	Interface de la boîte à outils du Milano Chemometrics and QSAR Research Group utilisée pour l'évaluation du domaine d'applicabilité (DA).	54
Figure III.8	Performance de la méthode du bilan énergétique pour l'évaluation de la contribution des descripteurs.	56
Figure III.9	Répartition du nombre de publications relatives aux études QSPR Appliquées aux substances chimiques, recensées dans la base de données Science Direct au cours des quinze (16) dernières années.	58
Figure III.10	Les statistiques des publications consacrées à ces deux approches QSPR-RNA et QSPR-SVR au cours des quinze (16) dernières années.	59
Figure III.11	Les statistiques des publications consacrées à ces deux approches RNA et SVR au cours des quinze (16) dernières années.	59

Chapitre IV. Résultats et discussions		
Figure IV.1	Représentation schématique d'un réseau du modèle de type RQSP-RNA,	72
Figure IV.2	Comparaison entre la température critique observée et prédite (T_b) pour les ensembles de données de formation et de test	75
Figure IV.3	Comparaison entre la température critique observée et prédite (T_c) pour les ensembles de données de formation et de test	75
Figure IV.4	Comparaison entre la température critique observée et prédite (P_c) pour les ensembles de données de formation et de test	76
Figure IV.5	Comparaison entre la température critique observée et prédite (V_c) pour les ensembles de données de formation et de test	76
Figure IV.6	Diagrammes de Taylor des modèles SVR et MLP-ANN développés pour la prédiction de T_b .	80

Liste des figures

Figure IV.7	Diagrammes de Taylor des modèles SVR et MLP-ANN développés pour la prédiction de T_c .	80
Figure IV.8	Diagrammes de Taylor des modèles SVR et MLP-ANN développés pour la prédiction de V_c .	81
Figure IV.9	Diagrammes de Taylor des modèles SVR et MLP-ANN développés pour la prédiction de P_c .	81
Figure IV.10	Analyse des contributions relatives des descriptif d'entrée Significatifs dans le modèle QSPR-RNA de prédiction de la Température d'ébullition normale (T_b).	82
Figure IV.11	Analyse des contributions relatives des descriptif d'entrée Significatifs dans le modèle QSPR-RNA de prédiction de la Température d'ébullition normale (T_c).	83
Figure IV.12	Analyse des contributions relatives des descriptif d'entrée Significatifs dans le modèle QSPR-RNA de prédiction de la Température d'ébullition normale (V_c).	84
Figure IV.13	Analyse des contributions relatives des descriptif d'entrée Significatifs dans le modèle QSPR-RNA de prédiction de la Température d'ébullition normale (P_c).	85
Figure IV.14	Représentation du domaine d'applicabilité (DA) à l'aide du diagramme de Williams pour le modèle QSPR-RNA de la température critique (T_b)	86
Figure IV.15	Représentation du domaine d'applicabilité (DA) à l'aide du diagramme de Williams pour le modèle QSPR-RNA de la température critique (T_c)	86
Figure IV.16	Représentation du domaine d'applicabilité (DA) à l'aide du diagramme de Williams pour le modèle QSPR-RNA de la température critique (V_c)	87
Figure IV.17	Représentation du domaine d'applicabilité (DA) à l'aide du diagramme de Williams pour le modèle QSPR-RNA de la température critique (P_c)	88

Articles scientifiques publiés dans des revues internationales à comité de lecture

Beghour, Y., Lahiouel, Y., 2025. Using machine learning in QSPR to estimate the boiling and critical temperatures of pure organic compounds. *Chem Eng Sci* 309, 121228. <https://doi.org/10.1016/J.CES.2025.121228>

Communications internationales avec comité de lecture

1. Beghour, Y., Lahiouel, Y., (2023). Estimation of the Boiling Temperature of Organic Molecules: A Comparison Between QSPR-SVR and QSPR-ANN Approaches. 7th International Workshop on Applied Mathematics and Modeling (WIMAM'2023), December 12–13, 2023, Université 08 Mai 1945 Guelma, Guelma, Algeria. Poster Presentation.

2. Beghour, Y., Lahiouel, Y., (2024). Quantitative Structure– Activity/Property Relationship (QSAR) Modeling for Toxicity Prediction of Bioactive Molecules. 1st International Congress on Medical and Veterinary Entomology, Health and Environmental Risks (ICMVE2024), December 16–17, 2024, Université 08 Mai 1945 Guelma, Guelma, Algeria. Poster Presentation.

Communications nationales avec comité de lecture

1. Beghour, Y., Lahiouel, Y. (2023). Estimation of the Boiling Temperature of Organic Molecules: Construction of a QSPR Model for Predicting the Critical Temperature of Molecules. 2nd National Seminar on Molecular Applied Chemistry (WIMAM'2023), December 19, 2023, University 08 May 1945 Guelma, Guelma, Algeria. Poster Presentation.

2. Beghour, Y., Lahiouel, Y. (2023). Estimation of the Boiling Temperature of Organic Molecules: Development of a QSPR Model for Predicting the Critical Temperature of Chemical Compounds. 3rd National Seminar on Applied Chemistry (WIMAM'2023), December 19, 2023, University 08 May 1945 Guelma, Guelma, Algeria. Poster Présentation.

Introduction générale

Introduction Générale

Introduction Générale

La chimie organique est une branche fondamentale de la chimie, dédiée à l'étude des structures, des propriétés, des méthodes de synthèse et des réactions des composés organiques. Ces derniers se caractérisent par la présence d'atomes de carbone comme éléments centraux, formant des ossatures auxquelles se lient divers atomes tels que l'hydrogène (H), l'azote (N), l'oxygène (O), le soufre (S) et les halogènes (F, Cl, Br, I). Cette diversité de liaisons confère aux composés organiques une richesse structurale et fonctionnelle remarquable.

Dans le langage courant, le terme « organique » est souvent associé à la naturalité. Cette conception trouve son origine dans les premières théories scientifiques, selon lesquelles les composés organiques ne pouvaient provenir que des êtres vivants et nécessitaient une « force vitale » pour exister. Cependant, cette vision a été remise en cause dès le XIX^e siècle, lorsqu'il a été démontré que ces composés pouvaient être synthétisés en laboratoire à partir de substances inorganiques. Aujourd'hui, la majorité des composés organiques sont obtenus à partir de matières premières fossiles, notamment le pétrole brut et le charbon.

La connaissance des propriétés physiques et des données thermodynamiques des composés organiques est essentielle pour la conception et l'optimisation des procédés industriels. Ces informations permettent de prévoir le comportement des substances en conditions opératoires et d'ajuster les méthodes de transformation, de transfert de matière et de séparation, dans le but de réduire les coûts tout en améliorant la sécurité et l'efficacité des procédés (Bouhedjar et al., 2019 ; Espinosa et al., 2001 ; Niu et al., 2024 ; Yao et al., 2002).

Étant donné les difficultés expérimentales liées à la mesure précise de ces propriétés, au coût, à la complexité et aux lacunes dans les bases de données, les chercheurs ont développé des méthodes d'estimation. Parmi elles, la modélisation moléculaire s'impose comme une approche pertinente pour prédire les comportements à partir des structures chimiques.

La technique **QSAR/QSPR (Quantitative Structure–Activity/Property Relationships)** est particulièrement utilisée pour prédire les propriétés physico-chimiques et biologiques des composés organiques en se basant sur leur structure moléculaire. Elle constitue un outil puissant pour pallier l'absence de données expérimentales et accélérer le développement de nouveaux matériaux ou composés fonctionnels (Guendouzi, 2016). Cette approche présente l'avantage de reposer uniquement sur la connaissance de la structure chimique, sans nécessiter d'expériences supplémentaires : une fois la corrélation identifiée et validée, elle permet de prédire les propriétés de nouveaux composés (Wang et al., 2015).

Parmi les propriétés thermodynamiques les plus critiques figurent la température d'ébullition, la température critique et la pression critique. Ces paramètres interviennent directement dans les équations d'état utilisées pour simuler le comportement des substances sous différentes conditions de température et de pression. Ils jouent un rôle essentiel dans des procédés tels que l'extraction par fluide supercritique ou la récupération assistée du pétrole, où une connaissance précise des transitions de phase et des équilibres est indispensable à l'optimisation des performances.

Le principal objectif de cette étude consiste à élaborer des modèles mathématiques basés sur les informations structurales des composés organiques, en utilisant l'apprentissage automatique, et plus spécifiquement des réseaux de neurones artificiels à perceptrons multicouches (en Anglais : Multi-Layer Perceptron – Artificial Neural Network MLP-ANN)

Introduction Générale

afin de prédire certaines propriétés physico-chimiques, à savoir la température d'ébullition normale (T_b) et les propriétés critiques (température critique T_c , pression critique P_c et volume critique V_c). Les performances des modèles MLP-ANN ont été rigoureusement comparées à celles obtenues par la méthode de régression par vecteurs de support (SVR), reconnue pour son efficacité dans la prédiction de variables continues et sa capacité à traiter des relations linéaires et non linéaires.

Le développement des modèles QSPR basés sur les réseaux de neurones artificiels (RNA) et la SVR s'est déroulé en plusieurs étapes :

- La collecte et le traitement rigoureux de la base de données expérimentale ;
- Le calcul et la sélection des descripteurs moléculaires les plus pertinents ;
- Le développement, l'optimisation et la sélection des modèles QSPR-RNA les plus performants.

L'efficacité et la précision des modèles ont été évaluées à l'aide d'indicateurs statistiques tels que le coefficient de détermination (R), la racine carrée de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) et l'erreur relative moyenne (ERM). Par ailleurs, une analyse de sensibilité basée sur les poids synaptiques a permis de quantifier l'influence de chaque descripteur d'entrée sur les performances des modèles. Ces derniers ont ensuite été validés à l'aide de l'approche du domaine d'applicabilité (DA), afin de garantir la fiabilité des prédictions dans l'espace chimique étudié. Enfin, les performances obtenues ont été comparées à celles rapportées dans la littérature.

La présente thèse est organisée en cinq chapitres principaux, suivis d'une conclusion générale :

- **Chapitre I** : Revue bibliographique sur les composés organiques. Il présente leur définition, origine, composition, classification, ainsi que leurs caractéristiques structurales et physico-chimiques. Ce chapitre expose également leurs domaines d'application et les méthodes classiques de détermination de leurs propriétés.
- **Chapitre II** : Méthodes de modélisation, avec un accent particulier sur les relations quantitatives structure–propriété/activité (RQSP/RQSA). Les approches d'apprentissage automatique, notamment les RNA et la SVR, y sont abordées, ainsi que les principes de construction des modèles, les descripteurs moléculaires, les étapes de sélection et de traitement des données, et les méthodes de validation statistique.
- **Chapitre III** : Ce chapitre présente en détail les matériaux et méthodes utilisés dans cette étude. Il couvre la constitution de la base de données, le calcul et le prétraitement des descripteurs moléculaires, la sélection des variables pertinentes, ainsi que le développement et l'évaluation des modèles QSPR-RNA. Une analyse de sensibilité basée sur les poids synaptiques et une étude du domaine d'applicabilité (DA) y sont également incluses. Par

Ailleurs, ce chapitre propose une analyse critique de la littérature récente sur la modélisation des propriétés physico-chimiques et thermodynamiques des hydrocarbures, mettant en lumière les travaux antérieurs fondés sur les approches QSPR/QSAR, et en particulier ceux intégrant les RNA ou des techniques similaires.

Introduction Générale

Chapitre IV : Ce chapitre est consacré à la présentation et à la discussion des résultats de modélisation obtenus pour les propriétés étudiées. Il examine dans un premier temps l'évolution des descripteurs sélectionnés ainsi que les architectures optimales des modèles de réseaux de neurones artificiels (RNA) développés. L'évaluation des performances des modèles est effectuée à l'aide de différents types d'erreurs et de coefficients statistiques, permettant ainsi d'apprécier la précision de chaque modèle dans l'estimation des quatre propriétés physico-chimiques considérées.

Dans un second temps, une attention particulière est accordée à la méthode des Support Vecteur Régression (SVR), qui constitue une approche de référence dans la modélisation QSPR grâce à sa capacité à gérer efficacement la non-linéarité et à limiter le risque de sur apprentissage. Les performances obtenues par la SVR sont systématiquement comparées à celles des modèles RNA, permettant de mettre en évidence les atouts et les limites respectives de chaque approche. Cette comparaison croisée contribue à évaluer la robustesse des modèles développés et à souligner la valeur ajoutée de l'intégration des réseaux neuronaux dans la prédiction des propriétés étudiées.

Par ailleurs, l'importance relative des descripteurs d'entrée est analysée au moyen d'une étude de sensibilité, permettant de les hiérarchiser en fonction de leur contribution individuelle et de leur rôle au sein de leur famille respective. Les résultats relatifs à la détermination du domaine d'applicabilité des modèles sont également discutés. Enfin, ce chapitre s'achève par une comparaison critique entre les modèles développés dans le cadre de cette thèse et ceux rapportés dans la littérature, ce qui permet de situer l'apport et la portée scientifique du présent travail au regard des études antérieures menées dans ce domaine de recherche

À la fin de cette thèse, nous avons proposé une conclusion générale qui récapitule les principaux résultats obtenus au cours de ce travail. Également présenté quelques perspectives susceptibles de constituer une orientation de référence pour les recherches futures menées dans ce domaine.

Chapitre I. Généralités sur les molécules organiques

I.1. Introduction

Nous entendons souvent le terme « organique » dans le langage courant, où il décrit ou fait référence à des substances considérées comme « naturelles ». Ce terme provient probablement de la notion scientifique ancienne selon laquelle tous les composés organiques provenaient de systèmes vivants et possédaient une « force vitale ». Cependant, les chimistes ont découvert il y a plus de 170 ans que ce n'était pas le cas. Si les composés organiques sont des composants majeurs des systèmes vivants, nombre d'entre eux peuvent être synthétisés en laboratoire à partir de substances n'ayant aucun lien direct avec les organismes vivants. D'un point de vue chimique, un échantillon pur d'un composé organique tel que la vitamine C, qu'il soit préparé en laboratoire ou isolé à partir d'une source naturelle telle qu'une orange ou un autre agrume, est identique en termes de composition et de structure.

La chimie organique décrit les structures, les propriétés, la préparation et les réactions d'une vaste gamme de molécules connues sous le nom de composés organiques. Bien qu'il existe

Nombreux types différents de composés organiques, ils ont tous le carbone comme principal atome constitutif. Ces atomes de carbone forment un squelette ou une colonne vertébrale de carbone, auquel sont liés d'autres atomes tels que l'hydrogène (H), l'azote (N), l'oxygène (O), le soufre (S) et les halogènes (fluor (F), chlore (Cl), brome (Br) et iode (I)(Navratilova et al., 2012). La compréhension des caractéristiques physiques et des propriétés thermodynamiques des composés organiques est essentielle pour optimiser l'efficacité des processus chimiques industriels. Ces propriétés influencent la cinétique des réactions, le comportement des phases, les processus de séparation et la consommation d'énergie. La connaissance précise de paramètres tels que les points d'ébullition, les températures critiques, les pressions de vapeur et les capacités thermiques permet aux ingénieurs de concevoir des conditions de processus optimales, de sélectionner des solvants appropriés et d'améliorer les mesures de sécurité.

(Bouhedjar et al., 2019 ; Yao et al., 2002).

I.2. Généralités sur les molécules organiques

I.2.1. Historique des molécules organiques

Au XVII^e siècle, Pierre Gassendi (1658) définit les atomes comme les plus petites parties de la matière, formant des corpuscules appelés molécules (Gassendi, 1658). Walter Charleton en Angleterre reprend cette conception en parlant de petites masses de diverses formes (W. Charleton, 1654). En 1749, Georges-Louis Leclerc, comte de Buffon, introduit la notion de molécules organiques, issues de la matière organique des aliments et impliquées dans la nutrition et la reproduction des corps organisés, par opposition aux molécules brutes rejetées (Georges-Louis Leclerc, 1749). En 1762, Charles de Bonnet emploie également les termes molécules organiques, corpuscules et particules organiques, reliant ces entités à l'existence de germes préformés responsables de la reproduction. (Bonnet, 1762).

En 1777, Torbern Bergman distingue de manière systématique les corps organiques (organiska kroppar) des corps inorganiques (oorganiska kroppar). Les premiers, identifiés aux êtres vivants (animaux et plantes), se caractérisent par des structures internes permettant la nutrition, la croissance et la reproduction, tandis que les seconds ne croissent que par addition externe. À cette époque, seules quelques substances organiques discrètes étaient connues : l'éthanol, certains acides et sels végétaux (tartrique, citrique, oxalique, acétique), le sucre, et quelques

graisses et huiles animales. Sa classification des substances minérales restait liée à la théorie du phlogistique ([Torbern Olof Bergman., 1777](#)).

Enfin, en 1794, Friedrich A. C. Gren décrit les transformations spontanées (von selbst) des corps organiques, qu'il propose de nommer fermentations. Il les illustre par la fermentation du vin, la distillation de l'alcool, le brassage de la bière ou la putréfaction des fruits. Bien que la composition chimique précise des corps organiques reste inconnue, Gren amorce une interprétation en termes de réactions chimiques ([Friedrich A. C. Gren.,1794](#)).

Ainsi, du XVIIe au XVIIIe siècle, Gassendi, Charleton, Buffon, Bonnet, Bergman et Gren contribuent à poser les bases conceptuelles d'une distinction entre corps organiques et inorganiques, sans que la chimie organique n'existe encore en tant que discipline autonome.

I.2.2. Définition de molécules organiques

La chimie organique a commencé par être la chimie de la vie lorsqu'on pensait qu'elle était différente de la chimie en laboratoire. Elle est ensuite devenue la chimie des composés du carbone, en particulier ceux que l'on trouve dans le charbon. Aujourd'hui, elle est les deux à la fois. C'est la chimie des composés formés par le carbone et d'autres éléments tels qu'on les trouve dans les êtres vivants, dans les produits des êtres vivants et partout où l'on trouve du carbone. Les composés organiques les plus abondants sont ceux présents dans les êtres vivants et ceux qui se sont formés au cours de millions d'années à partir d'êtres morts. Autrefois, les composés organiques connus de la nature étaient ceux des « huiles essentielles » que l'on pouvait distiller à partir des plantes et des alcaloïdes que l'on pouvait extraire des plantes broyées avec de l'acide. Le menthol est un exemple célèbre de composé aromatique issu de l'huile essentielle de menthe verte et la cis-jasnone est un exemple de parfum distillé à partir de fleurs de jasmin ([Neuman., 2013](#)).

I.3. Description générale de molécules organiques

Toutes les molécules organiques contiennent du carbone (C), la grande majorité contient également de l'hydrogène (H), et la plupart renferment de l'oxygène (O) et/ou de l'azote (N). De nombreux composés organiques incluent aussi des halogènes tels que le fluor (F), le chlore (Cl), le brome (Br) ou l'iode (I). D'autres éléments, comme le soufre (S), le phosphore (P), ainsi que le bore (B), l'aluminium (Al) et le magnésium (Mg), peuvent également être présents. Les molécules organiques sont classées en différentes familles chimiques selon leurs groupes fonctionnels. Chaque composé possède une formule brute, par exemple $C_xH_yO_z$, mais plusieurs molécules différentes peuvent partager la même formule brute, ce qui définit des isomères. Ainsi, la formule brute seule est insuffisante pour caractériser un composé ([David R. Klein, 2015](#)). Les composés organiques sont extraits des matières premières, notamment du pétrole brut et du charbon, à travers une série de procédés physiques et chimiques complexes visant à transformer ces ressources naturelles en substances organiques à haute valeur industrielle. La première étape de ce processus est la distillation fractionnée comme représentée dans la figure, qui permet de séparer les constituants du pétrole brut selon leurs points d'ébullition. Cette opération fournit différentes fractions telles que les gaz légers, l'essence, le kérosène et les huiles lourdes, chacune contenant un mélange d'hydrocarbures servant de base à la synthèse de composés organiques variés. Huiles lourdes, chacune contenant un mélange d'hydrocarbures servant de la synthèse de composés organiques variés.

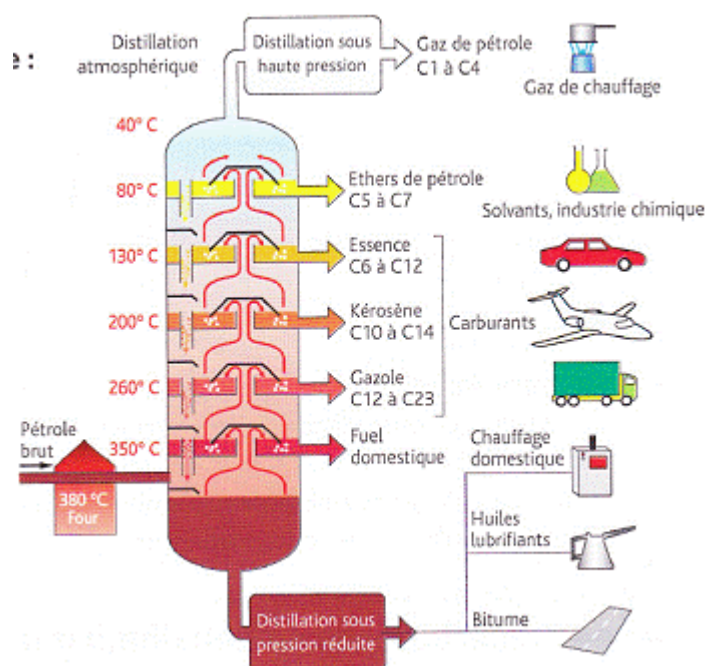


Figure I.1. Classification des principales coupes pétrolières selon les intervalles de la température d'ébullition et le nombre d'atomes de carbone

En particulier, les hydrocarbures gazeux doivent être distillés sous haute pression afin de les liquéfier. L'essence utilisée pour les véhicules est constituée de molécules C6 à C12, c'est-à-dire de molécules contenant 6 à 12 atomes de carbone. On constate que la température d'ébullition d'un hydrocarbure augmente lorsque le nombre d'atomes de carbone qu'il contient augmente.

Ces fractions subissent ensuite des procédés tels que le craquage thermique ou catalytique, dont l'objectif est de casser les grosses molécules pour produire des molécules plus petites et plus réactives comme l'éthylène et le propylène, éléments clés de l'industrie pétrochimique. D'autres techniques, comme le reformage catalytique, permettent la transformation des alcanes en composés aromatiques, tandis que l'alkylation sert à produire des alcanes ramifiés à haut poids moléculaire utilisés dans les carburants de haute performance.

En parallèle, des méthodes d'extraction par solvants organiques sont appliquées, en particulier pour isoler des composés spécifiques à partir de sources végétales ou du charbon. Ces procédés utilisent des solvants tels que l'éthanol ou l'hexane pour extraire des huiles essentielles, des alcaloïdes ou d'autres substances bioactives. Enfin, des réactions de fonctionnalisation chimique comme l'oxydation, la nitration ou l'halogénéation permettent de transformer les hydrocarbures en alcools, acides, dérivés halogénés ou composés nitro aromatiques.

Ainsi, l'extraction des composés organiques constitue un système intégré reposant sur une maîtrise fine des conditions de réaction et des paramètres opérationnels, dans le but de produire des substances pures et performantes pour des applications variées dans les domaines de l'énergie, de la santé et des matériaux avancés.

I.4. Classification de molécules organiques par groupes fonctionnels

I.4.1. Groupes fonctionnels

Les composés organiques représentent plus de 80 % des composés chimiques connus, ce qui en fait un groupe extrêmement diversifié et complexe. Pour gérer cette diversité et permettre la manipulation et la création de nouveaux composés, il est essentiel de disposer d'un système de classification permettant d'organiser les composés organiques selon leurs propriétés caractéristiques. Initialement, les chimistes ont regroupé les composés organiques en fonction des réactions chimiques qu'ils subissaient, ce qui a conduit à l'élaboration de tests qualitatifs, appelés tests de classification. Ces tests sont encore largement utilisés aujourd'hui et sont collectivement connus sous le nom d'analyse qualitative organique. Avec l'évolution de la chimie et la découverte des structures moléculaires, la définition des classes fonctionnelles a évolué. Aujourd'hui, le comportement des composés organiques est organisé autour de groupes récurrents d'atomes appelés groupes fonctionnels. Ces groupes sont les sites où se produisent les réactions chimiques dans les molécules, tandis que le reste de la molécule reste inchangé après la réaction. Ce changement conceptuel simplifie considérablement l'étude des composés organiques : il suffit de reconnaître les groupes fonctionnels présents pour prévoir le comportement chimique du composé. Cette approche permet de classer un grand nombre de composés à partir d'un nombre relativement restreint de groupes fonctionnels. Ainsi, il devient fondamental pour l'étude de la chimie organique de maîtriser ces groupes, en termes de noms, de structures et de formules. Comprendre et savoir identifier les groupes fonctionnels est essentiel pour la prévision des réactions chimiques et pour le développement de nouveaux composés (David R. Klein, 2015 ; Navratilova et al., 2012 ; Neuman, 2013 ; Riazi, 2005). Sur la base des groupes fonctionnels et de la structure globale de la molécule, on identifie plusieurs familles principales.

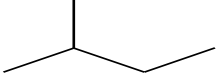
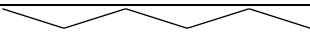

I.4.1.1. Hydrocarbonés

Les hydrocarbures, au sens strict, sont des molécules organiques constituées uniquement d'atomes de carbone et d'hydrogène. Ils représentent la majeure partie des bruts et des fractions pétrolières. Les hydrocarbures sont généralement classés en quatre familles chimiques : alcanes, alcynes, alcènes et aromatiques.

A. Les Alcanes

Le terme « alcanes » désigne l'ensemble des molécules classées en chimie organique parmi les hydrocarbures aliphatiques saturés, également appelés paraffines dans le domaine pétrolier. Les alcanes sont une classe d'hydrocarbures ne contenant que des atomes de carbone (C) et d'hydrogène (H). Comme ils constituent les principaux composants du pétrole et du gaz naturel, ils servent souvent de matière première commerciale pour la synthèse de nombreuses autres classes de composés organiques. La formule moléculaire générale d'un alcane est C_nH_{2n+2} , où n est un entier. Par exemple, si un alcane possède un atome de carbone, il doit comporter quatre atomes d'hydrogène ; s'il possède deux atomes de carbone, il doit en avoir six. La chaîne carbonée des alcanes peut être soit linéaire, soit ramifiée (BelghitChafik, 2019).

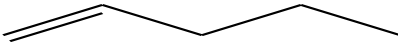
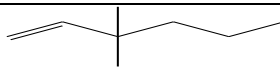
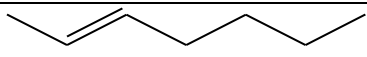
Tableau I.1. Exemple de quelques Alcanes avec leur formule chimique et structure

Nom	Formule chimique	Structure moléculaire
2-Méthylbutane	C₅H₁₀	
n-héxane	C₆H₁₄	
2-méthyl-octane	C₉H₂₀	

B. Les Alcènes

Dénommées également dans le domaine pétrolier les oléfines sont des hydrocarbures aliphatiques insaturés contenant au moins une double liaison carbone-carbone (C=C), qui constitue le groupe fonctionnel et le centre de réactivité. La formule moléculaire générale d'un alcène acyclique est $C_nH_{2(n-d+1)}$, où n représente le nombre d'atomes de carbone et d le nombre de doubles liaisons. Cette formule reflète que les alcènes possèdent deux atomes d'hydrogène de moins que les alcanes ayant le même nombre d'atomes de carbone en raison de la présence de la double liaison (Atkins et Paula, 2012). Comme les paraffines, les oléfines peuvent également avoir une structure en chaîne linéaire


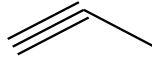
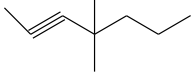
Tableau I.2 Quelques exemples d'alcènes avec leurs formules chimiques et structures moléculaires

Nom	Formule chimique	Structure moléculaire
1-pentène	C₅H₁₀	
3-diméthylhex-1-ène	C₈H₁₆	
2-heptène	C₇H₁₄	

C. Les alcynes

Aussi appelés hydrocarbures aliphatiques, les alcynes sont des composés insaturés caractérisés par la présence d'une liaison triple entre deux atomes de carbone dans leur chaîne principale. Le suffixe associé au groupe fonctionnel des alcynes est « -yne ». La formule moléculaire générale d'un alcyne est C_nH_{2n-2} , cette liaison triple diminuant de deux le nombre d'atomes d'hydrogène par rapport à celle d'un alcane saturé (C_nH_{2n+2}). Cette formule (C_nH_{2n-2}) s'applique aux alcynes linéaires ou non ramifiés. Pour les alcynes ramifiés, bien que la disposition des atomes diffère, la formule moléculaire reste inchangée (Rebas, 2016).


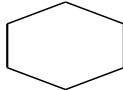
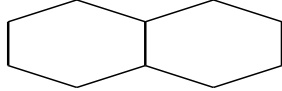
Tableau I.3. Quelques exemples d'alcynes avec leurs formules chimiques et structures moléculaires

Nom	Formule chimique	Structure moléculaire
Acétylène	C ₂ H ₂	
Propène	C ₃ H ₄	
4,4-diméthylhept-2-yne	C ₉ H ₁₆	

D. Cycloalcanes

Cycloalcanes, également appelés les naphtènes, sont des alcanes dont les atomes de carbone sont disposés en cycle. En raison de cette structure cyclique, un cycloalcane possède deux atomes d'hydrogène de moins qu'un alcane acyclique (non cyclique) contenant le même nombre d'atomes de carbone. Cela signifie que la formule moléculaire générale d'un cycloalcane est obtenue en ajoutant le préfixe « cyclo » au nom de l'alcane correspondant au nombre d'atomes de carbone dans le cycle (Atkins et Paula, 2012). La formule chimique générale des naphtènes est C_nH_{2(n-c+1)}, où *c* représente le nombre de cycles dans la molécule (Rebas, 2016).

Tableau I.4. Quelques exemples de Cycloalcanes avec leurs formules chimiques et structures moléculaires


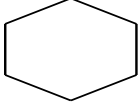
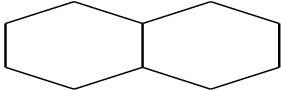
Nom	Formule chimique	Structure moléculaire
cyclobutène	C ₄ H ₈	
cyclohexane	C ₆ H ₁₂	
Décaline	C ₁₀ H ₁₈	

E. Aromatiques

Les hydrocarbures aromatiques sont des composés polycycliques insaturés contenant au moins un noyau benzénique, constitué de six atomes de carbone liés par des liaisons alternant simples et doubles, provenant de trois doubles liaisons conjuguées.

La formule chimique générale des aromatiques dépend de leur dérivation par rapport à la structure benzénique de base. Pour les alkylbenzènes, ils sont C_nH_{2n-6}. Les composés aromatiques comportant des cycles naphténiques présentent une formule brute C_nH_{2(n-c-6)}, où *c* désigne le nombre de cycles naphténiques dans la molécule. Les d'aromatiques de type diphényle alkylé (Rebas, 2016).

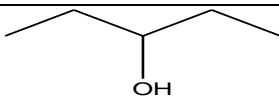
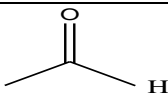
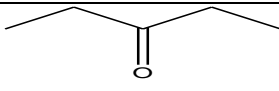
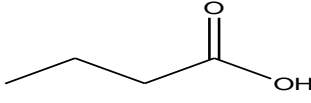
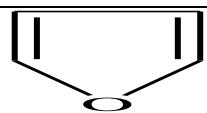
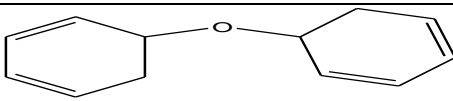
Tableau I.5. Quelques exemples d'aromatiques avec leurs formules chimiques et structures moléculaires

Nom	Formule chimique	Structure moléculaire
cyclobutene	C_4H_8	
cyclohexane	C_6H_{12}	
Décaline	$C_{10}H_{18}$	

I.4.1.2. Composés contenant de l'oxygène

Les composés contenant de l'oxygène incluent les alcools, les phénols, les acides carboxyliques, les aldéhydes, les cétones et les éthers. Les alcools possèdent un groupe hydroxyle (-OH) remplaçant un hydrogène d'un alcane et se classent en primaires, secondaires ou tertiaires selon la liaison du carbone porteur du -OH. Les phénols, quant à eux, sont des composés aromatiques où le groupe hydroxyle est directement attaché à un noyau aromatique, ce qui leur confère des propriétés spécifiques. Les acides carboxyliques, caractérisés par le groupe fonctionnel carboxyle (-COOH), forment des liaisons hydrogène fortes et existent souvent sous forme de dimères. Les aldéhydes et cétones, tous deux porteurs d'un groupe carbonyle (C=O), diffèrent par la nature des groupes liés à ce dernier : les aldéhydes ont un hydrogène et un groupe R, tandis que les cétones possèdent deux groupes R. Enfin, les éthers, de formule générale R-O-R', se distinguent par un atome d'oxygène lié à deux groupes alkyles ou aryles, symétriques ou asymétriques (Navratilova et al., 2012 ; Neuman, 2013).

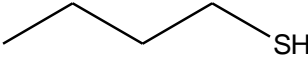
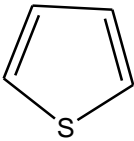
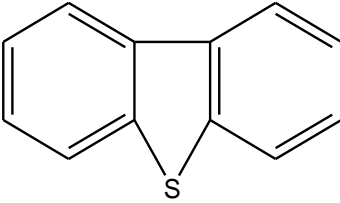
Le Tableau I.6. Quelques exemples de composés oxygénés avec leurs formules chimiques et structures moléculaire

Nom	Formule chimique	Structure moléculaire
Pentana-3-ol	C ₅ H ₁₁ OH	
Ethan-2-al	C ₂ H ₄ O	
Penta-2-one	C ₅ H ₁₀ O	
Butanoïque	C ₄ H ₈ O ₂	
Para-Dinitrobenzène	C ₆ H ₄ N ₂ O ₄	
1,3,5-Trinitrobenzène	C ₆ H ₃ N ₃ O ₆	

I.4.1.3. Composés contenant de l'azote

Les composés contenant de l'azote incluent les amines, les composés nitro, les amides et les nitriles. Les amines sont des dérivés de l'ammoniac où un ou plusieurs hydrogènes sont remplacés par des groupes alkyles, et elles se classent en primaires, secondaires ou tertiaires selon le nombre de groupes alkyles liés à l'azote. Les composés nitro, de formule générale R-NO₂, contiennent un groupe nitro (-NO₂) lié à un atome de carbone et se divisent en types aliphatiques ou aromatiques selon la nature de la chaîne R. Les amides, présents dans les protéines, se forment par condensation entre le groupe carboxylique d'un acide aminé et le groupe amine d'un autre, créant une liaison amide (ou peptidique). Les exemples d'amides incluent l'aspartame et le paracétamol. Enfin, les nitriles ou cyanures, de formule R-C≡N, possèdent un groupe cyano qui peut être introduit par réaction entre le cyanure de potassium et des halogénoalcanes. Les propriétés des nitriles organiques diffèrent de celles des cyanures inorganiques, certains étant étudiés comme médicaments potentiels (Bruice, 2007 ; Rebas, 2016 ; Riazi, 2005).

Tableau I.7. Quelques exemples de Composés contenant de l'azote avec leurs formules chimiques et structures moléculaires et structure.

Nom	Formule chimique	Structure moléculaire
Propanthiole	C ₃ H ₈ S	
Thiophène	C ₄ H ₄ S	
Dibenzothiophène	C ₁₂ H ₈ S	

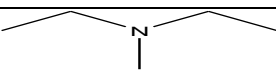
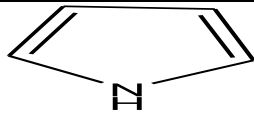
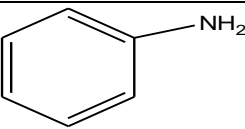
I.4.1.4. Composés contenant du soufre

Le soufre constitue généralement l'hétéroélément le plus abondant dans le pétrole brut ainsi que dans ses fractions. Il peut se présenter sous deux formes principales : (1) à l'état inorganique, notamment comme soufre élémentaire ou sulfure d'hydrogène (H₂S), et (2) intégré au sein de composés organiques (Rebas, 2016).

Dans les composés organiques, le soufre peut se rencontrer principalement sous trois formes structurales : les mercaptans, les sulfures et les thiophènes. Les mercaptans, également appelés thiols, sont des dérivés organiques du sulfure d'hydrogène (H₂S), dont l'un des atomes d'hydrogène est remplacé par un groupe hydrocarboné. Ils suivent la formule moléculaire générale RSH, où leurs propriétés chimiques et physiques sont principalement influencées par la longueur et la structure de la chaîne hydrocarbonée (R). Les atomes terminaux de la chaîne alkyle (C_nH_{2n+1}) contribuent de manière significative à ces propriétés, en influençant leur réactivité et leur comportement dans divers contextes chimiques. Kohl, Richard B. Nielsen, in Gas Purification (David R. Klein, 2015).

- **Thioesters** : Les thiophènes sont une classe d'importants composés aromatiques hétérocycliques contenant du soufre, basés sur un anneau à cinq membres composés d'un atome de soufre et de quatre atomes de carbone. Le noyau du thiophène est bien établi en tant que groupement intéressant, avec de nombreuses applications dans divers domaines de recherche (Nobile et al., 2024).
- **Sulfures** : Les sulfures constituent une famille de composés caractérisés par la présence d'une ou plusieurs liaisons soufre au sein de chaînes hydrocarbonées. On distingue généralement les sulfures, les disulfures et les polysulfures, selon le nombre d'atomes de soufre reliés en série. Dans le cas des sulfures simples, l'atome de soufre s'insère directement dans la chaîne carbonée (ex. : diméthylsulfure) (Castanheiro et al., 2017).

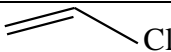
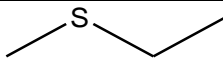
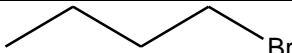
Tableau I.8. Quelques exemples de **composés soufrés** avec leurs formules chimiques et structures moléculaires

Nom	Formule chimique	Structure moléculaire
Diethylmethyamine	C ₅ H ₁₃ N	
Pyridine	C ₅ H ₅ N	
Analine	C ₆ H ₇ N	

I.4.1.5. Les halogénoalcanes

Les halogénoalcanes sont des composés dans lesquels un atome d'hydrogène d'un alcane a été remplacé par un atome d'halogène. Ils sont classés en primaires, secondaires ou tertiaires selon la nature du carbone auquel l'halogène est lié : les halogénoalcanes primaires possèdent un halogène lié à un carbone primaire, les secondaires à un carbone secondaire, et les tertiaires à un carbone tertiaire. Les doublets électroniques non liants des halogènes ne sont généralement pas représentés, sauf lorsqu'ils sont nécessaires pour illustrer une propriété chimique particulière de l'atome (Atkins and De Paula, 2006 ; Navratilova et al., 2012; Neuman, 2013).

Tableau I.9. Quelques exemples de halogénoalcanes avec leurs formules chimiques et structures moléculaires

Nom	Formule chimique	Structure moléculaire
Chlorure de vinyle	C ₂ H ₃ Cl	
Sulfure méthyl éthylique	C ₃ H ₈ S	
Bromure de butyle	C ₄ H ₉ Br	

I.4.1.6. Les composés organométalliques

Dans les fractions pétrolières les plus lourdes, certains métaux peuvent se rencontrer sous forme de complexes. Le nickel et le vanadium sont les éléments les plus fréquemment présents. Ces composés organométalliques adoptent une structure porphyrinique, constituée de quatre cycles pyrroliques, au centre desquels le métal est coordonné, généralement sous forme de Ni²⁺ ou de VO⁺ complexé.

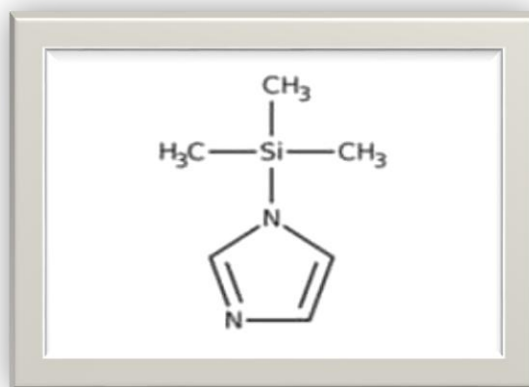


Figure I.2. Montre

structure de ce motif

porphyrinique

I.4.2. Les composés organiques sont classés selon leur polarité

Les composés organiques sont généralement classés en composés polaires et non polaires en fonction de la distribution de charge au sein de la molécule. Les composés polaires ont des liaisons avec une différence significative d'électronégativité entre les atomes, ce qui conduit à la formation de charges partielles qui les rendent capables d'interagir avec d'autres composés polaires. Pour les composés organiques, les hydrocarbures (C_xH_y) sont toujours apolaires. Cela est principalement dû à la faible différence d'électronégativité entre les atomes de carbone et les atomes d'hydrogène, ce qui fait que les liaisons C-H sont techniquement des liaisons non polaires. Les autres composés organiques qui contiennent des groupes fonctionnels avec des hétéroatomes, comme R-O-R, C=O, OH et NH, sont tous des molécules polaires.

- Les substances non polaires sont généralement solubles dans des solvants non polaires.
- Les substances polaires et ioniques sont généralement solubles dans des solvants polaires.
- Les substances polaires et non polaires sont insolubles l'une dans l'autre.

I.5. Propriétés usuelles des molécules organiques

I.5.1. Propriétés physicochimiques

I.5.1.1. Point d'ébullition.

Le point d'ébullition, désigné par T_b (the boiling temperature), indique la température à laquelle un liquide passe à l'état gazeux sous des conditions de pression données (Beghour et Lahiouel, 2025). Il dépend du type de substance et des conditions de pression. Il augmente lorsque la pression est plus élevée et diminue lorsque la pression est plus faible. Dans le cas particulier où la pression externe est de 1 atm, la température d'ébullition est appelée point d'ébullition normal (Bruice, 2007).

I.5.1.2. Température de congélation et de fusion

Le point de fusion correspond à la température à laquelle la phase solide d'un composé est en équilibre avec la phase liquide à la pression atmosphérique. Il est important de noter que la température de fusion d'une substance est égale à sa température de congélation, car une substance fond à la même température qu'elle gèle. La température de congélation lorsque la pression est de 1 atm est appelée point de congélation normal, T_f , et son point de congélation lorsque la pression est de 1 bar est appelé point de congélation standard. Il est à noter que les différences entre les points de congélation normaux sont négligeables dans la plupart des cas. Par ailleurs, le point de congélation normal est également appelé point de fusion normal (Bruice, 2007 ; Riazi, 2005).

I.5.1.3. Poids moléculaire

Le poids moléculaire (M) est utilisé pour convertir les quantités molaires en bases de masse pour les applications pratiques. Les relations thermodynamiques produisent toujours des quantités molaires (c'est-à-dire la densité molaire), alors que dans la pratique, des valeurs spécifiques à la masse (c'est-à-dire la densité absolue) sont nécessaires. Le poids moléculaire est également utilisé pour caractériser les huiles, pour prédire leur composition et leur qualité, ainsi que pour prédire leurs propriétés physiques, telles que la viscosité (Riazi, 2005).

I.5.2. Propriétés critiques (T_c , P_c , V_c , Z_c)

Le concept de « critique » a été introduit par Andrews entre 1869 et 1876 à travers ses travaux sur les propriétés du dioxyde de carbone. Par la suite, les recherches de Van der Waals en 1873, associées au développement de la loi des états correspondants, ont marqué le point de départ d'un large éventail de méthodes expérimentales destinées à la détermination des propriétés critiques des corps purs (Riazi, 2005).

Le point critique définit les coordonnées de la température (T_c), de la pression (P_c) et du volume critique (V_c), qui permettent notamment de calculer un paramètre physicochimique essentiel : le facteur de compressibilité critique (Z_c), où R est la constante des gaz. La température critique (T_c) correspond à la température maximale à laquelle un gaz peut être liquéfié, et au-delà de laquelle l'état liquide n'existe plus, quelle que soit la pression appliquée. La pression critique (P_c) est la pression minimale nécessaire pour liquéfier un gaz à sa température critique.

Dans un diagramme pression-température, les coordonnées critiques correspondent au point critique, qui représente un état thermodynamique caractéristique marquant la fin de la ligne de coexistence entre les phases. À l'équilibre liquide-vapeur, la densité du liquide devient identique à celle de la vapeur au point critique, le ménisque disparaît, la chaleur latente de vaporisation s'annule, l'indice de réfraction se confond pour les deux phases et la tension interfaciale est nulle (Dubert, 1997).

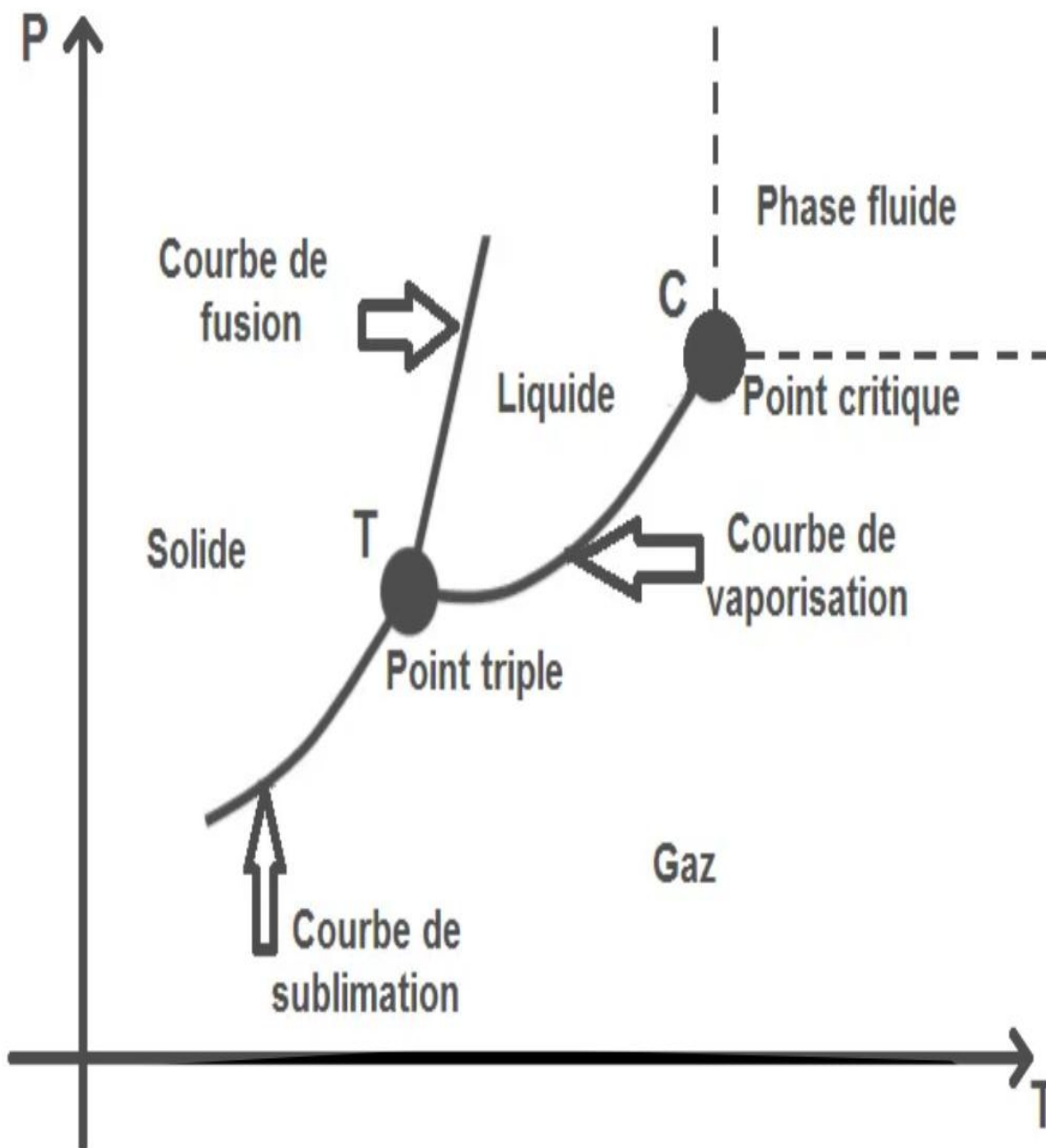


Figure I.3. Diagramme de coordonnées (P-T) des trois équilibres d'un corps pur.

I.5.3. Propriétés thermodynamiques

I.5.3.1. Enthalpie de formation

L'enthalpie de formation est définie comme la variation d'enthalpie nécessaire pour former une espèce à partir d'éléments chimiques dans leur état standard, par une réaction isotherme. Dans un tel schéma de réaction, les éléments sont supposés être initialement à la température de réaction, sous une pression de 1 atm, et dans leur phase la plus stable, par exemple l'oxygène diatomique en tant que gaz idéal, le carbone en tant que solide sous forme de graphite, le brome en tant que liquide pur saturé, etc. Les valeurs numériques des propriétés des éléments constitutifs ne sont pas prises en compte, car lorsqu'on calcule l'enthalpie standard d'une

réaction avec plusieurs espèces, toutes les enthalpies de formation des éléments s'annulent. Des corrections doivent être apportées pour une réaction en dehors des conditions standard, par exemple pour prendre en compte la non-idéalité des fluides

I.5.3.2. Chaleur de combustion

La chaleur de combustion à l'état standard est définie comme la différence d'enthalpie d'un composé et de ses produits de combustion à l'état gazeux, à 298 K et 1 atm. Les produits de combustion sont supposés être H₂O(g), CO₂(g), SO₂(g), N₂(g) et HX(g), où X représente un atome d'halogène. Lorsque l'eau produite est à l'état gazeux, cette enthalpie de combustion est communément appelée enthalpie inférieure de combustion. Dans le cas où l'eau produite est liquide, l'énergie libérée par la condensation s'ajoute à l'enthalpie inférieure pour donner l'enthalpie supérieure de combustion (Elliott, 2023).

I.5.4. Autres Propriétés

I.5.4.1. Facteur centrique

Le facteur acentrique a été défini à l'origine par Pitzer pour améliorer la précision des corrélations d'états correspondants pour les composés plus lourds et plus complexes. Le facteur acentrique est un paramètre défini et non une quantité mesurable. Il s'agit d'un paramètre sans dimension représenté par w et défini comme suit :

$$W = -\log_{10}(\text{PI vap}) - 1,0. \quad (\text{I.1})$$

Le facteur acentrique est défini de telle sorte que pour les fluides simples tels que l'argon et le xénon, il est égal à zéro et que sa valeur augmente à mesure que la taille et la forme de la molécule changent. Pour le méthane, il est de 0,001 et pour le décane, il est de 0,489. Les valeurs indiquées pour le facteur acentrique des composés purs sont calculées sur la base de l'équation (2.10), qui dépend des valeurs de la pression de vapeur. C'est pourquoi les valeurs indiquées pour le facteur acentrique d'un composé peuvent varier légèrement d'une source à l'autre, en fonction de la relation utilisée pour estimer la pression de vapeur. En outre, étant donné que le calcul du facteur acentrique nécessite des valeurs de température et de pression critiques, les valeurs rapportées pour w dépendent également des valeurs de T_c et P_c utilisées (Riazi, 2005).

I.5.4.2. Viscosité cinématique

La viscosité cinématique est définie comme le rapport entre la viscosité (dynamique) absolue/ ρ et la densité absolue ρ à la même température, selon la formule suivante : Elle est exprimée en unités **cSt**, **SUS** et **SFS**. La viscosité cinématique des liquides organiques constitue un paramètre fondamental pour la caractérisation de leurs propriétés physiques et influe sur leur comportement en phase liquide. Les mesures de cette viscosité sont couramment réalisées à différentes températures de référence – notamment 25 °C, 40 °C et 50 °C – afin d'étudier l'effet de la température sur leur fluidité. En général, la viscosité des liquides organiques diminue avec l'augmentation de la température, en raison de la réduction des interactions intermoléculaires. Ce paramètre revêt une importance particulière pour les composés de haute masse molaire ou présentant des liaisons intermoléculaires significatives, car les variations de viscosité peuvent

affecter leur utilisation dans divers domaines tels que la chimie fine, la pharmaceutique et la pétrochimie.

I.6. L'identification structurale des composés organiques

Jusqu'au milieu du vingtième siècle, la distinction des composés organiques se fondait principalement sur des critères physiques et chimiques élémentaires. Cependant, ces caractéristiques ne fournissaient que des indications superficielles sur la structure moléculaire d'un composé. La détermination de cette structure, en particulier pour les grosses molécules, était un processus complexe qui requérait une analyse approfondie des différentes voies de réaction. Les chercheurs en chimie se trouvent alors dans l'incapacité d'observer directement les structures moléculaires, car celles-ci sont de taille trop réduite pour être visualisées à l'aide de microscopes conventionnels. Depuis lors, la mise au point de plusieurs techniques instrumentales de spectroscopie a permis de remédier à cette difficulté. La spectroscopie est une discipline scientifique qui s'attache à étudier l'interaction entre la matière et le rayonnement électromagnétique et à quantifier, analyser et interpréter ces interactions. Ainsi, elle permet de mieux comprendre la structure de la matière. Ainsi, diverses méthodes spectroscopiques, telles que la résonance magnétique nucléaire (RMN), la spectroscopie infrarouge (IR) et la spectrométrie de masse, ont été utilisées pour identifier les structures des composés organiques.

I.6.1. Spectroscopie Infrarouge IR

La spectroscopie infrarouge est une technique spectroscopique essentielle pour l'identification des groupes fonctionnels et des séquences de liaisons dans un composé, reposant sur l'absorption de la lumière dans la région infrarouge du spectre électromagnétique. Dans les molécules organiques, les liaisons covalentes ne sont pas statiques mais se comportent comme des ressorts en vibration. À température ambiante, ces molécules sont en perpétuel mouvement et présentent divers modes vibratoires, tels que l'élongation, la flexion et la torsion. L'élongation correspond aux vibrations le long de l'axe de liaison, modifiant ainsi sa longueur. La flexion, quant à elle, entraîne une variation des angles de liaison sans se produire le long de l'axe, à l'image d'un mouvement de balancement. Certains modes de flexion spécifiques sont désignés par des termes descriptifs comme le cisaillement (scissoring) ou la torsion (twisting). Bien que l'analyse d'un spectre infrarouge ne permette pas, à elle seule, de déterminer entièrement la structure d'une molécule, la spectroscopie infrarouge constitue un outil puissant et complémentaire à la spectroscopie RMN pour l'élucidation structurale (Wong, 2015).

I.6.2. La résonance magnétique nucléaire (RMN)

Dans le domaine de l'analyse chimique, la résonance magnétique nucléaire (RMN) constitue un outil analytique puissant qui fournit des informations essentielles sur la taille (par analyse indirecte), la structure, la composition, la pureté et les variations conformationnelles des molécules, ce qui se révèle particulièrement utile dans la caractérisation des nanoparticules vertes issues de plantes. Bien que d'autres techniques offrent des données précieuses sur les composés, elles ne permettent pas de déterminer l'agencement complet des liaisons, telles que celles entre atomes de carbone (C–C) et entre carbone et hydrogène (C–H). La RMN repose sur des principes analogues à ceux de l'imagerie par résonance magnétique (IRM) en médecine, qui permet d'examiner le corps humain de manière non invasive et sans douleur. Tandis que l'IRM est utilisée pour diagnostiquer des pathologies internes, la RMN permet aux chimistes organiciens de reconstituer la structure moléculaire en décryptant l'agencement atomique et les

liaisons chimiques. Généralement, l'interprétation du spectre RMN s'effectue en complément d'autres informations telles que les réactifs employés et les conditions de réaction, ce qui aide à confirmer la structure attendue ou, le cas échéant, à orienter des recherches supplémentaires en cas d'inadéquation. Ainsi, malgré sa puissance analytique indéniable, la RMN doit être intégrée à d'autres techniques pour résoudre pleinement les problèmes structuraux. (Robert M. Silverstein, 2014).

I.6.3. Méthodes instrumentales

Lorsqu'un ou plusieurs produits de réaction sont obtenus sous forme pure, les méthodes instrumentales modernes de détermination de la structure, et non les méthodes humides traditionnelles, offrent un moyen efficace de déterminer la fonctionnalité et la connectivité présentes. Le chimiste contemporain dispose d'un ensemble d'outils pour sonder la structure des molécules. Cependant, pour déterminer la structure des molécules organiques, les « trois grands » outils de la chimie sont la spectroscopie de résonance magnétique nucléaire (RMN), la spectroscopie infrarouge (IR) et la spectrométrie de masse (SM). Il est à noter que la fréquence d'utilisation de ces techniques suit généralement le même ordre (RMN > IR > SM). Les deux premières méthodes (RMN et IR) sont des techniques spectroscopiques au cours desquelles la molécule est interrogée par un rayonnement électromagnétique dans une gamme particulière de fréquences (la RMN utilise des fréquences radio et la spectroscopie IR utilise un rayonnement infrarouge). Seules certaines fréquences seront absorbées par un composé particulier, et les fréquences absorbées peuvent être utilisées pour déduire des détails structurels sur le composé. La spectrométrie de masse ne peut pas être considérée comme une technique spectroscopique, car l'absorption de l'énergie électromagnétique n'intervient en aucune manière. Dans le cadre de la SM, la molécule subit une fragmentation en ions, puis ces fragments chargés sont séparés selon leur rapport masse/charge. La charge habituelle étant de +1, les masses des fragments sont déterminées. La connaissance des masses de ces fragments permet de reconstruire la structure du composé. Une autre distinction entre ces techniques est l'information structurelle qu'elles peuvent révéler. La résonance magnétique nucléaire (RMN) et la spectroscopie de masse établissent toutes deux la connectivité entre les atomes et les groupes d'une molécule (quoique de manière légèrement différente). En outre, elles suggèrent la présence de groupes fonctionnels. La spectroscopie infrarouge n'établit généralement pas de connectivité, mais elle est inégalée pour identifier les groupes fonctionnels présents dans la molécule. En combinant ces trois méthodes principales, il est possible de déterminer rapidement et efficacement les groupes fonctionnels, le poids moléculaire ainsi que la connectivité des atomes et des groupes. L'écriture de la structure de la molécule devient alors une étape triviale.

I.7. Applications dans les domaines de la science et de la technologie

Les molécules organiques trouvent une large application dans la science des matériaux, où elles sont utilisées pour concevoir et fabriquer des matériaux aux propriétés adaptées à diverses applications. Les polymères, composés d'unités organiques répétitives, sont omniprésents dans la vie quotidienne, servant de base aux plastiques, aux fibres, aux revêtements, aux adhésifs et à d'innombrables autres matériaux. Ces matériaux polyvalents présentent un large éventail de propriétés, notamment la flexibilité, la résistance, la durabilité et la biodégradabilité, ce qui les rend indispensables dans des secteurs tels que l'emballage, la construction, le textile et

l'automobile. En outre, les molécules organiques jouent un rôle crucial dans le développement de matériaux et de dispositifs électroniques, notamment les semi-conducteurs, les polymères conducteurs et les diodes électroluminescentes organiques (OLED). Les semi-conducteurs organiques, caractérisés par leur faible coût, leur flexibilité et leurs propriétés accordables, sont prometteurs pour des applications dans l'électronique flexible, les dispositifs portables et les photovoltaïques organiques (OPV). Les OLED, basées sur des molécules organiques qui émettent de la lumière lorsqu'elles sont soumises à un courant électrique, sont largement utilisées dans les écrans, l'éclairage et la signalisation, offrant des alternatives à faible consommation d'énergie aux technologies d'éclairage traditionnelles (Kryshtafovych et al., 2021). Outre la science des matériaux, les molécules organiques jouent un rôle essentiel dans le domaine pharmaceutique, où elles servent de base à une vaste gamme d'agents thérapeutiques utilisés pour le diagnostic, la prévention et le traitement des maladies. Les produits pharmaceutiques englobent les petites molécules, les peptides, les protéines, les acides nucléiques et les produits biologiques conçus pour cibler des voies biologiques spécifiques ou des cibles moléculaires impliquées dans les processus pathologiques. Ces molécules sont synthétisées à l'aide de techniques de chimie organique, telles que la synthèse chimique, la biocatalyse et la fermentation, afin de produire des médicaments dotés des propriétés pharmacologiques et des effets thérapeutiques souhaités. L'une des applications les plus importantes des molécules organiques dans le domaine pharmaceutique est le développement d'antibiotiques, de médicaments antiviraux et d'agents anticancéreux pour lutter contre les maladies infectieuses et le cancer (Sarkar et Kellogg, 2010). En outre, les molécules organiques jouent un rôle essentiel dans le domaine de l'énergie, où elles sont utilisées dans les technologies d'énergie renouvelable telles que les cellules solaires, les batteries et les piles à combustible. Les systèmes photovoltaïques organiques (OPV), basés sur des semi-conducteurs organiques qui convertissent la lumière du soleil en électricité, offrent des alternatives légères, flexibles et rentables aux cellules solaires traditionnelles à base de silicium. Les batteries organiques, qui utilisent des électrodes et des électrolytes organiques, sont prometteuses pour des solutions de stockage d'énergie à haute performance avec une sécurité et une durabilité accrue. Les piles à combustible organiques, qui utilisent des catalyseurs et des membranes organiques, offrent des moyens efficaces et écologiques de produire de l'électricité à partir de réactions chimiques. En outre, les molécules organiques jouent un rôle crucial dans la durabilité environnementale, où elles sont utilisées dans le développement de processus de chimie verte, de matériaux biodégradables et de biocarburants renouvelables. La chimie verte vise à minimiser l'impact sur l'environnement et la consommation de ressources en concevant des procédés chimiques et des produits sûrs, efficaces et durables. Les matériaux biodégradables, dérivés de ressources renouvelables telles que les polymères d'origine végétale, offrent des alternatives aux plastiques et matériaux d'emballage traditionnels, réduisant ainsi la pollution plastique et la dégradation de l'environnement. Les biocarburants renouvelables, produits à partir de matières premières organiques telles que la biomasse et les algues, offrent des alternatives durables aux combustibles fossiles, réduisant les émissions de gaz à effet de serre et la dépendance à l'égard de ressources limitées.

Les molécules organiques sont à la base d'une multitude d'avancées dans divers domaines de la science et de la technologie, stimulant l'innovation et le progrès dans divers secteurs. Ces

molécules, caractérisées par la présence d'atomes de carbone liés à l'hydrogène et à d'autres éléments, présentent une polyvalence et une fonctionnalité remarquables qui les rendent indispensables dans de nombreuses applications. De la science des matériaux et des produits pharmaceutiques à l'énergie et à la durabilité environnementale, les molécules organiques jouent un rôle essentiel dans le façonnement du monde moderne (Kellogg et al., 2023). Dans le domaine de la science des matériaux, les molécules organiques jouent un rôle déterminant dans la conception et le développement d'une large gamme de matériaux aux propriétés et aux fonctionnalités adaptées. Les polymères, composés d'unités organiques répétitives, sont les éléments constitutifs des plastiques, des fibres, des revêtements et des adhésifs, entre autres. Ces matériaux polyvalents offrent une combinaison de propriétés telles que la flexibilité, la résistance, la durabilité et la biodégradabilité, ce qui les rend essentiels dans des industries allant de l'emballage et de la construction à la fabrication automobile et à l'électronique. En outre, les molécules organiques sont cruciales dans le domaine de l'électronique, où elles sont utilisées pour créer des matériaux et des dispositifs électroniques aux propriétés et aux applications uniques. (Ahmed et al., 2015).

I.8. Conclusion

Ce chapitre a permis de présenter les concepts fondamentaux relatifs aux composés organiques, en mettant en évidence leur définition, leur origine, leur composition et leur classification. Les principales caractéristiques structurales et physico-chimiques de ces composés ont également été abordées, ainsi que leurs domaines d'application dans différents secteurs. Enfin, les méthodes classiques utilisées pour la détermination de leurs propriétés ont été exposées, ce qui permet de mieux comprendre l'importance de leur étude et la nécessité de développer des approches alternatives de prédiction.

**Chapitre II. Approches méthodologiques pour le
développement, la validation et l'implémentation des
méthodes RQSP/RQSA**

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

II.1. Introduction

Les procédures expérimentales visant à déterminer les caractéristiques physiques, chimiques, biologiques ainsi que les informations thermodynamiques sont souvent complexes, ce qui entraîne des lacunes dans les données disponibles. Par conséquent, les méthodes d'estimation deviennent essentielles. La technique des relations quantitatives structure-propriété (QSPR) ou structure-activité (QSAR) est couramment utilisée pour estimer ces paramètres.

Le QSPR/QSAR établit une corrélation entre une propriété ou une activité et la structure moléculaire. Les structures moléculaires sont décrites à l'aide de divers descripteurs moléculaires, définis par les chimistes (Niu et al., 2024 ; Sola et al., 2008) Ces modèles permettent une prédiction rapide des propriétés et des activités sans nécessiter de procédures expérimentales. De plus, ils facilitent la conception de molécules ou de médicaments en identifiant les descripteurs structuraux optimisant la propriété ou l'activité ciblée (Sola et al., 2008).

Les descripteurs moléculaires sont calculés pour différentes molécules en fonction de leurs structures chimiques et sont classés en descripteurs 0D, 1D, 2D, 3D et 4D. Les modèles QSPR sont construits à l'aide de différentes méthodes computationnelles, dont l'efficacité varie selon le contexte et le jeu de données. Ces méthodes peuvent être globalement divisées en techniques statistiques traditionnelles, telles que la régression linéaire multiple (MLR) (Gramatica et al., 2013) et l'analyse des moindres carrés partiels (PLS) (Geladi et Kowalski, 1986; Golmohammadi et Dashtbozorgi, 2010), ainsi qu'en algorithmes avancés d'apprentissage automatique, incluant les machines à vecteurs de support et les réseaux de neurones artificiels.

II.2. Approche relations quantitatives structures propriétés/activités RQSP/RQSA

II.2.1. Définition

Les méthodes « QSAR (Relations Quantitatives Structure-Activité) / QSPR (Relations Quantitatives Structure-Propriété) » établissent un lien entre l'activité biologique ou une propriété et la structure d'une molécule en formulant une relation mathématique, plus ou moins complexe. En outre, lorsque les paramètres moléculaires sont quantifiés, il est possible de proposer une relation quantitative entre la structure et l'activité ou la propriété (BELGHIT Chafik, 2019; Mounia ZINE, 2020). Ces méthodes permettent d'expliquer les données expérimentales disponibles et de prédire les propriétés ou les activités de nouveaux composés ou de composés pour lesquels les données expérimentales ne sont pas accessibles (Chtita, 2017).

Par définition, une RQSA/RQSP est un modèle mathématique qui relie un ou plusieurs paramètres quantitatifs dérivés de la structure chimique à une mesure quantitative d'une propriété ou d'une activité (GUENDOZI, 2016).

II.2.2. Historique QSPR

Il y a plus de 150 ans, en 1863, Cros (Cros, 1863) observa que les points d'ébullition et de fusion des alcanes augmentent avec le nombre d'atomes de carbone et la masse moléculaire, tandis que la solubilité des alcools dans l'eau décroît dans les mêmes conditions, constituant ainsi l'une des premières formulations générales en QSPR. En 1868, Crum-Brown et Fraser

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

(Crum-Brown et Fraser, 1868) avancèrent que l'activité biologique d'une molécule est fonction de sa structure chimique. En 1893, Richet ([Richet, 1893](#)) démontra que la cytotoxicité de certains composés organiques varie inversement avec leur solubilité aqueuse. Vers la fin du XIX^e siècle, Meyer et Overton identifièrent indépendamment une relation linéaire entre l'activité narcotique et le coefficient de partage huile-eau. En 1901, Fühner et Neubauer montrèrent que l'activité des homologues narcotiques croît selon une progression géométrique, soulignant ainsi le rôle crucial des groupements fonctionnels ([Meyer et Overton, 1901](#)).

Plus tard, en 1962, Hansen ([Hansen, 1962](#)) établit une corrélation entre la toxicité des acides benzoïques substitués et les constantes électroniques « σ » des substituants. L'année 1964 marque le début des approches modernes RQSPR/RQSA, lorsque Hansch et Fujita relient des propriétés physico-chimiques telles que log P, pKa, et des paramètres stériques et électroniques à l'activité biologique, inaugurant les analyses de Hansch et de Free-Wilson. Enfin, en 1971, Free-Wilson ([Free Wilson, 1971](#)) ainsi que Hansch et Lien réalisèrent des études QSAR sur différentes familles d'antifongiques.

II.2.3. Principe et méthodologie de base des études RQSP/RQSA

Une étude QSAR/QSPR vise à établir une relation mathématique qui quantifie le lien entre l'activité biologique ou une propriété mesurée d'une série de composés similaires, étudiés dans des conditions expérimentales identiques, et leurs descripteurs moléculaires, à l'aide d'outils statistiques. L'objectif principal de ces travaux est d'exploiter les données structurales pour identifier les facteurs déterminants influençant l'activité ou la propriété étudiée. Différents types de méthodes statistiques peuvent être utilisés à cet effet (voir la section sur les méthodes statistiques). L'expression mathématique obtenue peut ensuite servir de modèle prédictif pour estimer la propriété ou l'activité étudiée pour de nouvelles molécules, ou pour celles dont les données expérimentales sont indisponibles. Cette relation peut être représentée par l'équation suivante : ([BELGHIT Chafik, 2019](#)).

$$(\text{Propriété, Activité}) = f(\text{descripteurs})$$

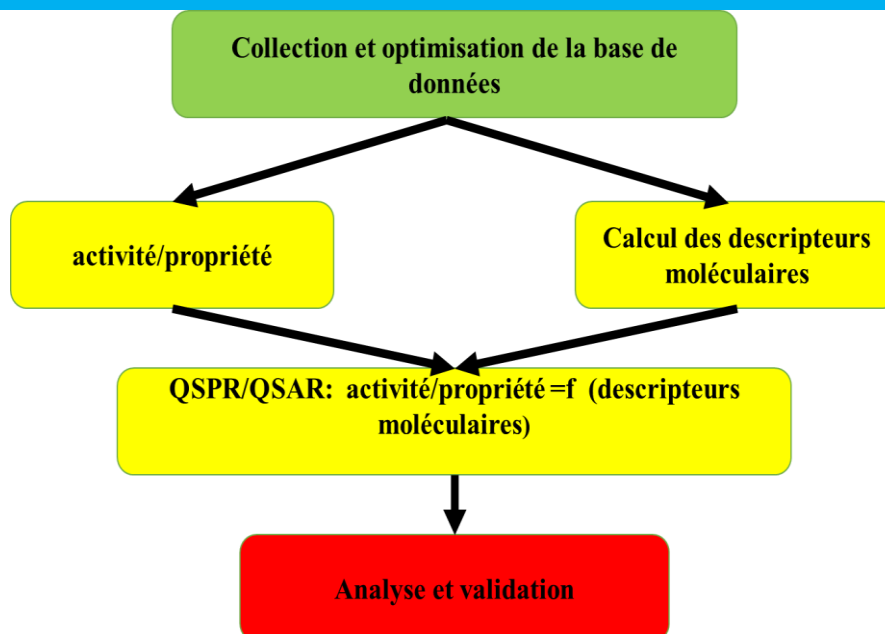


Figure I.1. Principe et méthodologie de base des modèles RQSP/RQSA.

II.3. Représentation et Optimisation de la Structure

Les molécules sont représentées par diverses structures chimiques, exprimées sous forme développée ou semi-développée. Pour les quantifier dans le cadre de la modélisation, un encodage préalable est nécessaire afin de les rendre interprétables par les outils informatiques. Par la suite, les informations structurelles sont extraites et utilisées pour la construction du modèle RQSP. Il existe plusieurs types de représentations développées et semi-développées, telles que **Structure Data File (SDF)**.

Le format Structure Data File (SDF) est largement utilisé en chimie-informatique pour stocker les structures moléculaires et les données connexes. Ce format textuel contient des informations détaillées sur les atomes, les liaisons, la connectivité et les propriétés physicochimiques des molécules. Les fichiers SDF fournissent des informations sur les positions spatiales des atomes individuels, représentées dans un espace bidimensionnel (2D) ou tridimensionnel (3D), et encodent des données concernant la connectivité atomique et les états d'hybridation. Enfin, une structure tridimensionnelle (3D) est générée par une optimisation en utilisant une méthode quantique (Khair-Eddine KRAIM, 2009).

```
méthanol (CH3OH)
  6  5  0      0  0  0  0  0  0999 v2000
    2.5369 -0.2500  0.0000 O  0  0  0  0  0  0  0  0
0  0  0
    3.4030  0.2500  0.0000 C  0  0  0  0  0  0  0  0
0  0  0
    3.7130 -0.2869  0.0000 H  0  0  0  0  0  0  0  0
0  0  0
    3.9399  0.5600  0.0000 H  0  0  0  0  0  0  0  0
0  0  0
    3.0930  0.7869  0.0000 H  0  0  0  0  0  0  0  0
0  0  0
    2.0000  0.0600  0.0000 H  0  0  0  0  0  0  0  0
0  0  0
  1  2  1  0  0  0  0
  1  6  1  0  0  0  0
  2  3  1  0  0  0  0
  2  4  1  0  0  0  0
  2  5  1  0  0  0  0
M  END
```

Figure I.2. Fille sdf de compound méthanol

II.4. Notions de base sur les descripteurs

II.4.1. Définition descripteurs

Les descripteurs moléculaires sont des représentations mathématiques formelles d'une molécule, obtenues à partir d'un algorithme appliqué à une représentation moléculaire donnée ou par une procédure expérimentale standardisée. Comme le définit la littérature : « un descripteur moléculaire est le résultat final d'une procédure logique et mathématique qui transforme l'information chimique encodée dans une représentation symbolique d'une molécule en un nombre utile ou le résultat d'une expérience standardisée ».

Les descripteurs moléculaires jouent un rôle central dans divers domaines, notamment la chimie, les sciences pharmaceutiques, la réglementation environnementale, la toxicologie, l'écotoxicologie, la recherche en santé et le contrôle de la qualité. L'importance de ces descripteurs se reflète dans la diversité des approches développées : plus de 10 000 descripteurs, issus de théories et méthodes variées, sont aujourd'hui définis et peuvent être calculés à l'aide de logiciels spécialisés (Raschka et Kaufman, 2020).

II.4.2. Classification des descripteurs

L'importance du nombre de descripteurs est notable, car avec plus de 10 000 descripteurs répertoriés pour caractériser une molécule, toute tentative de classification ou de présentation de ces derniers reste incomplète (Chtita, 2017). Historiquement, deux principaux systèmes de classification des descripteurs moléculaires ont été développés : le premier basé sur leur origine

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

(constitutionnelle, topologique, géométrique, quantique, thermodynamique, etc.), et le second sur leur dimensionnalité (1D, 2D, 3D ou 4D).

II.4.2.1. Descripteurs 0D

Les modèles 0D contiennent l'interprétation moléculaire la plus simple, qui ne contient aucune information sur les connexions entre les atomes. La formule chimique, qui organise les types d'atomes et leurs occurrences dans une molécule, est indépendante de toute information sur la structure moléculaire.

II.4.2.2. Descripteurs 1D

La représentation sous forme de liste de sous-structures peut être classée comme une description 1D et contient des fragments structuraux d'une molécule tels que les groupes fonctionnels, les liaisons, les cycles et les substituants. Par conséquent, les descripteurs 1D ne contiennent pas d'information complète sur la structure moléculaire. Ces descripteurs sont insensibles aux variations de conformation et ne distinguent pas les isomères

(Hamadache, 2014).

➤ **Le poids moléculaire :**

Le poids moléculaire (MW), également appelé poids de formule, est exprimé en daltons (Da) et correspond à la somme des masses atomiques de tous les atomes constituant la molécule. Les composés présentant des poids moléculaires élevés sont généralement moins absorbés et, par conséquent, moins susceptibles d'atteindre leur site d'action. Il est donc préférable de maintenir le poids moléculaire aussi bas que possible afin d'optimiser l'efficacité d'un médicament. Pour les médicaments administrés par voie orale, le poids moléculaire recommandé est inférieur ou égal à 500 Da, avec un optimum autour de 300 Da (DJELLOUL Karima, 2021) .

II.4.2.3. Descripteurs 2D

Les modèles 2D intègrent des informations sur la structure d'un composé basées sur sa formule structurale. Provenant de la représentation topologique des molécules, ils peuvent être considérés comme des descripteurs de structure. Ces descripteurs codent numériquement des données relatives à la forme moléculaire, à la taille, à la ramification, ainsi qu'à la présence d'hétéroatomes et de liaisons multiples. Les paramètres topologiques reflètent la connectivité des atomes en fonction de la nature des liaisons chimiques (Toropova et Toropov, 2023).

Parmi les descripteurs les plus importants de cette classe se trouvent les indices topologiques et les indices constitutionnels.

- **Les indices constitutionnels** caractérisent les différents composants d'une molécule. Ils incluent, par exemple, le nombre de liaisons simples ou multiples ainsi que le nombre de cycles présents dans la structure moléculaire.
- **Les indices topologiques.** Ces descripteurs caractérisent les différents composants d'une molécule en décrivant la connectivité atomique et en fournissant des informations sur sa taille et sa forme globale. Ils sont dérivés de la théorie des graphes et appliqués à

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

la table de connectivité, qui constitue une représentation compacte des liaisons interatomiques au sein de la molécule (GUENDOUZI, 2016).

Voici quelques exemples principaux d'indices topologiques :

- **L'indice de Wiener ("W")**, introduit en 1947 (Wiener, 1947) C'est un descripteur de forme représentant la somme de toutes les distances géométriques interatomiques dans une molécule.
- **L'indice de Randić ("χ")**, introduit en 1975 (Randić, 1975).
- **L'indice de Balaban ("J")**, introduit en 1982 (Balaban, 1982).

Qui utilise les degrés des distances géométriques au lieu des degrés des distances topologiques.

II.4.2.4. Descripteurs 3D

Ce type de descripteurs nécessite une conformation tridimensionnelle de la molécule. Ils sont calculés à partir des positions relatives des atomes dans l'espace, ce qui permet de caractériser des aspects structurels plus complexes. Leur détermination requiert donc généralement l'obtention de la géométrie 3D de la molécule, obtenue soit par modélisation moléculaire empirique, soit par des méthodes *ab initio*. D'après Chtita (2017), ces informations structurales complètes englobent la composition, la topologie et la forme stérique de la molécule, mais se rapportent uniquement à un conformère unique. Ces motifs représentent les descripteurs les plus couramment employés en analyse moléculaire (Bouarra Nabil, 2018).

➤ Descripteurs géométriques

Les descripteurs géométriques d'une molécule sont dérivés des positions relatives de ses atomes dans l'espace et offrent la possibilité de caractériser des propriétés structurelles plus complexes (Guendouzi, 2016). Les descripteurs les plus fréquemment employés incluent le volume moléculaire, la surface moléculaire et le volume de Van der Waals

➤ Les descripteurs 3D électroniques

Ces descripteurs permettent de quantifier différents types d'interactions inter- et intramoléculaires, qui ont une influence majeure sur l'activité biologique des molécules. Le calcul de la plupart d'entre eux nécessite de déterminer la géométrie correspondant à une énergie stérique minimale, ce qui fait souvent appel à la chimie quantique. Parmi les descripteurs les plus couramment retenus figurent les énergies de la plus haute orbitale moléculaire occupée (HOMO) et de la plus basse orbitale vacante (LUMO). D'autres paramètres importants comprennent le moment dipolaire, le potentiel d'ionisation et diverses énergies associées à la molécule (Djelloul Karima, 2021).

II.4.2.5. Descripteurs 4D

Ces modèles sont comparables aux modèles 3D, mais à la différence de ces derniers, les données structurelles sont analysées sur un ensemble de conformères, ajoutant ainsi une dimension supplémentaire pour représenter une conformation stable. Ils permettent d'obtenir des informations sur la structure de la cible, comme une protéine. On distingue ainsi les descripteurs 4D, qui nécessitent un alignement moléculaire basé sur l'étude des complexes ligand-cible ou

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

sur des contraintes visant à optimiser le recouvrement spatial des champs stériques et électrostatiques des ligands, même en l'absence de données précises sur le mode de liaison à la cible. Ces descripteurs sont obtenus par le calcul des champs d'interaction moléculaire CoMFA et CoMSIA entre la molécule et une sonde représentée par une autre molécule, telle que l'eau ou un amide (Chtita, 2017).

II.5. Logiciels de calcul des descripteurs moléculaires.

À ce jour, des milliers de descripteurs moléculaires ont été répertoriés, offrant une large diversité d'informations sur la structure et les propriétés des composés chimiques. Ces descripteurs peuvent être obtenus soit par des méthodes empiriques, soit par des calculs basés sur des algorithmes spécifiques. L'information qu'ils encodent dépend non seulement du type de représentation moléculaire utilisé (2D, 3D, graphes moléculaires, etc.), mais également des méthodes de calcul adoptées (Hadaji Elghalia, 2018).

Pour répondre aux besoins croissants des chercheurs en modélisation moléculaire, plusieurs logiciels et plateformes informatiques ont été développés afin de permettre une extraction efficace et rapide des descripteurs. Parmi les outils les plus couramment utilisés, on peut citer plusieurs logiciels dédiés au calcul des descripteurs moléculaires, tels que RDKit (RDKit: Software), CODESSA et Dragon (version 7.0) (Kode, 2013).

Dans cette thèse, nous avons utilisé le serveur E-DRAGON1 (VCCLAB, 2005), développé par le Milano Chemometrics and QSAR Research Group. Ce serveur, structuré en 20 blocs logiques, intègre une suite de programmes permettant de générer et de calculer en ligne plus de 1 600 descripteurs moléculaires.

II.6. Sélection et réduction du nombre de descripteurs

Lors de la modélisation d'une grandeur telle qu'une activité ou une propriété, un large éventail de descripteurs est généralement recueilli. Cela est dû à l'incertitude quant aux facteurs déterminants du processus étudié, qui ne sont pas toujours connus a priori. Cependant, tous les descripteurs collectés n'ont pas un impact équivalent sur la grandeur à modéliser, et certains peuvent même être corrélés entre eux, remettant en cause leur indépendance. Ainsi, l'objectif principal est d'identifier et de conserver uniquement les descripteurs ayant une influence significative.

Pour cela, il est crucial que les paramètres utilisés soient à la fois pertinents et interprétables, notamment d'un point de vue chimique. En effet, les descripteurs sélectionnés doivent offrir une vision claire du mécanisme du phénomène étudié, ce qui renforce leur pertinence dans la modélisation (Beghour et Lahiouel, 2025). L'approche consiste donc à éliminer les descripteurs dont l'effet est négligeable, c'est-à-dire ceux dont l'influence est inférieure à celle de l'erreur expérimentale ou du bruit. En règle générale, un descripteur sera conservé tant que sa suppression entraîne une dégradation notable de la performance du modèle. Cette sélection doit donc être réalisée de manière prudente afin de ne pas perdre d'informations essentielles.

La réduction de la dimensionnalité des variables d'entrée est une étape clé dans ce processus. Pour y parvenir, plusieurs stratégies peuvent être adoptées :

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

1. **Réduction de la dimensionnalité de l'espace des variables** : Cela consiste à réduire le nombre total de descripteurs en éliminant ceux qui apportent peu d'informations supplémentaires à la modélisation.
2. **Création de variables synthétiques** : Les variables fortement corrélées peuvent être combinées pour créer de nouvelles variables qui résument l'information contenue dans les variables initiales. Cette approche permet de simplifier le modèle tout en conservant les informations pertinentes.
3. **Sélection des variables les plus pertinentes** : Cette méthode consiste à identifier et à conserver uniquement les variables qui contribuent de manière significative à la modélisation du phénomène d'intérêt ([Hadaji Elghalia, 2018](#)).

Les techniques de sélection et de réduction des descripteurs sont couramment mises en œuvre en deux étapes distinctes : une première étape visant à réduire la redondance entre les variables, suivie d'une deuxième étape de validation où l'on vérifie l'impact de chaque descripteur sur la performance globale du modèle. Ce processus garantit qu'aucune information cruciale n'est perdue tout en améliorant l'efficacité et la robustesse du modèle.

- **Sélection objective**
- **Sélection subjective**

II.6.1. Sélection objective

La sélection des variables a pour objectif de réduire le nombre de descripteurs sans prendre en compte la variable dépendante (c'est-à-dire la réponse biologique), afin de minimiser les corrélations entre les descripteurs eux-mêmes ([Khair-Eddine Kraim, 2009](#)). Ce processus consiste à éliminer les descripteurs dépourvus d'influence significative et à éviter les redondances. Par exemple, un descripteur présentant un pourcentage élevé de valeurs identiques sur l'ensemble des composés doit être retiré dès le début afin d'empêcher son inclusion involontaire dans le modèle final. De plus, lorsque deux descripteurs présentent un coefficient de corrélation de Pearson supérieur à 0,90, l'un d'eux doit être supprimé pour réduire la multicolinéarité ([Beghour et Lahiouel, 2025](#)).

II.6.2. Sélection subjective

La sélection subjective consiste à choisir les variables finales, c'est-à-dire les descripteurs optimaux, à partir d'un sous-ensemble de descripteurs déjà réduits. Cette étape est cruciale pour l'élaboration de modèles de type RQSP/RQSA, en tenant compte de l'impact de la variable dépendante. Étant donné le grand nombre de combinaisons possibles entre les descripteurs, des techniques statistiques et informatiques, telles que la méthode de sélection ascendante pas à pas (Forward Stepwise Selection), sont fréquemment utilisées pour explorer les différentes configurations du modèle. ([Khairedine KRAIM, 2009](#)).

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

➤ Sélection progressive étape par étape

La méthode de régression pas à pas, dite stepwise régression, repose sur une évaluation itérative de l'importance des variables. À chaque étape, le modèle est analysé pour déterminer si l'ajout d'une nouvelle variable, sur la base d'un seuil d'entrée prédéfini, améliore significativement la qualité de la régression. Parallèlement, les variables déjà intégrées au modèle sont réévaluées et peuvent être retirées si leur pertinence diminue, selon un seuil de sortie fixé. Ce mécanisme permet d'optimiser progressivement le modèle en conservant uniquement les descripteurs les plus informatifs et en éliminant les redondances ou variables non significatives. La procédure se termine lorsque l'inclusion ou l'exclusion de nouvelles variables n'apporte plus d'amélioration statistiquement significative (Mounia Zine, 2020).

➤ La méthode de régression des moindres carrés partiels

La régression par moindres carrés partiels (MCP ou PLS) est une méthode statistique destinée à construire des modèles prédictifs dans des situations où le nombre de variables est élevé et où celles-ci présentent de fortes corrélations. Cette approche combine les concepts de l'analyse en composantes principales et de la régression multiple. Elle consiste à projeter l'espace initial des variables dans un espace de dimension réduite, défini par un petit nombre de « variables latentes » construites de manière itérative. Ces variables latentes, orthogonales et non corrélées, représentent des combinaisons linéaires des variables originales. À la différence des composantes principales classiques, elles sont calculées en tenant compte de leur corrélation avec la variable à prédire, afin d'optimiser l'explication de la covariance entre les variables explicatives et la variable réponse. Une fois obtenues, ces variables latentes servent de nouvelles variables explicatives dans un modèle de régression classique, tel que la régression linéaire multiple (Djelloul Karima, 2021).

➤ Sélection par les Algorithmes génétiques

Les algorithmes génétiques, introduits dans les années 1970 par John Holland, constituent des méthodes d'optimisation inspirées des principes de la génétique et des mécanismes évolutifs naturels, tels que le croisement, la mutation et la sélection. Ces algorithmes, souvent désignés par l'acronyme AG, appartiennent à la catégorie des méthodes d'optimisation stochastiques appelées algorithmes évolutionnaires, qui sont des métaheuristiques fondées sur les principes de l'évolution darwinienne des populations biologiques (Djelloul Karima, 2021). Leur particularité réside dans leur capacité à explorer simultanément plusieurs solutions, chacune explorant différentes régions de l'espace de recherche (Khair-Eddine Kraim, 2009).

II.7. Méthodes d'apprentissage statistiques

Durant la dernière décennie, les algorithmes d'apprentissage statistique ont éveillé un grand intérêt dans les milieux académiques et les entreprises de multiples industries. Ils ont été mis en œuvre avec succès pour réaliser des tâches prédictives en lien avec des processus statistiques observés, pour lesquels de nombreuses variables explicatives peuvent être identifiées (hamadache, 2014).

Au cours de la dernière décennie, les algorithmes d'apprentissage statistique ont suscité un intérêt considérable tant dans le milieu académique que dans diverses industries. Ils ont été appliqués avec succès à des tâches prédictives reposant sur des processus statistiques observés,

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

pour lesquelles de nombreuses variables explicatives peuvent être identifiées (Hamadache, 2014).

Une fois les descripteurs collectés, la démarche statistique consiste à traiter et analyser les informations obtenues sur ces molécules. L'objectif de la modélisation est de construire un modèle capable de s'ajuster aux données d'apprentissage tout en conservant la capacité de généraliser, c'est-à-dire de prédire la sortie pour de nouvelles données. Pour établir un lien entre la structure moléculaire et les propriétés expérimentales, différentes techniques sont employées afin de développer des modèles linéaires ou non linéaires, interprétables ou non, d'identifier les paramètres les plus significatifs, de valider les modèles (internes ou externes) et de définir leur domaine d'application (Djelloul Karima, 2021).

II.7.1. Régression linéaire multiple

La régression linéaire multiple est considérée parmi les méthodes les plus couramment utilisées dans le développement des modèles prédictifs. RLM est la méthode de modélisation la plus simple et traditionnelle, reliant les descripteurs à la variable à modéliser. Le modèle général de régression linéaire multiple avec la variable de réponse Y_i et les termes X_1, X_n prend la forme suivante :

$$Y_i = a_0 + a_1 X_1 + \dots + a_n X_n \quad (\text{II.1})$$

Y_i : Est la variable dépendante

a_n : Représentent les coefficients du modèle

a_0 : Est le constant de l'équation du modèle

X_1 : La variable indépendante

II.7.2. Réseaux de neurones artificiels

Les réseaux de neurones ont été étudiés depuis les années. Les réseaux de neurones sont des algorithmes modélisés selon la structure du cerveau humain. Un réseau de neurones est un ensemble interconnecté d'éléments, d'unités ou de nœuds de traitement simples dont la fonctionnalité est vaguement basée sur le neurone animal. La capacité de traitement du réseau est stockée dans les forces de connexion inter-unités, ou poids, qui sont obtenues par un processus d'adaptation ou d'apprentissage à partir d'un ensemble de modèles de formation. Les réseaux de neurones sont souvent utilisés pour l'analyse statistique et la modélisation des données, où ils sont considérés comme une alternative aux techniques standard de régression non linéaire ou d'analyse en grappes (Cheng, 1994).

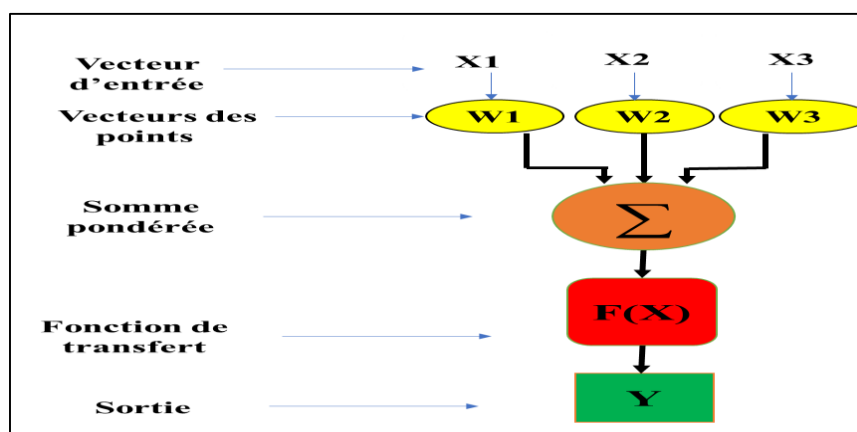
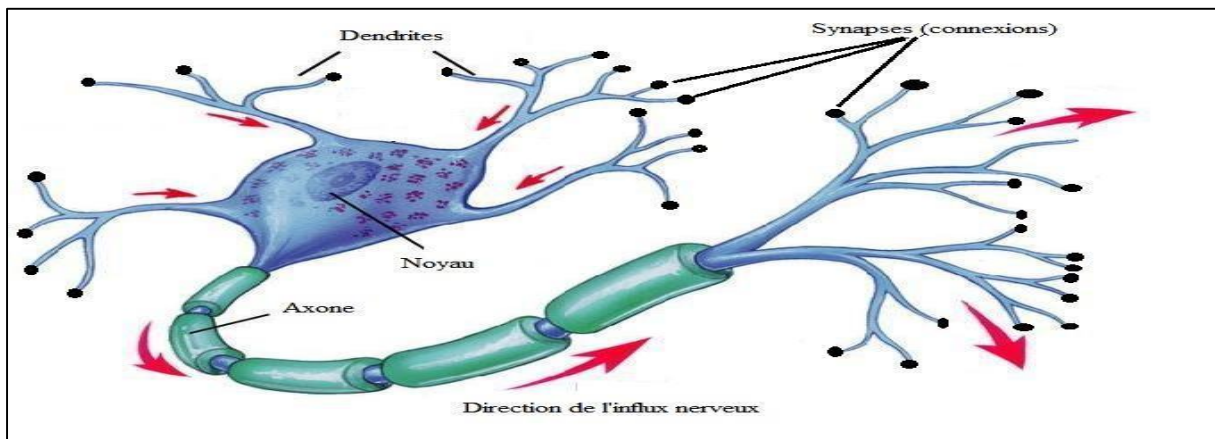
Les RNA sont des algorithmes flexibles qui déchiffrent des relations non linéaires complexes entre les caractéristiques d'entrée et de sortie par le biais d'un processus d'apprentissage. Cette puissance et cette flexibilité se font au prix de beaucoup plus de données d'entraînement et leur performance dépend fortement des données spécifiques utilisées pour leur formation. Bien que la quantité de données sur l'entraînement et les essais ne soit pas précisée, on sait qu'avec un modèle conçu adéquatement, la précision des prédictions s'améliore avec la quantité de données pertinentes sur l'entraînement. Comme les AINS ne sont pas linéaires, ils nécessitent beaucoup

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

plus de données pour apprendre les schémas du problème à l'étude (David, 1991 ; Sildir et al., 2022).

II.7.2.1. Du neurone biologique au neurone artificiel formel

Les neurones artificiels constituent les unités de base de tout réseau de neurones artificiels. Leur structure et leur fonctionnement s'inspirent des neurones biologiques, composants essentiels des réseaux neuronaux biologiques tels que le cerveau, la moelle épinière et les ganglions périphériques. Cette analogie est illustrée à la Figure I.3 : le côté gauche représente un neurone biologique avec son soma, ses dendrites et son axone, tandis que le côté droit montre un neurone artificiel, comprenant ses entrées, ses poids, sa fonction de transfert, son biais et ses sorties.



Dans un neurone biologique, l'information est captée par les dendrites, intégrée et traitée par le soma, puis transmise le long de l'axone. L'analogue artificiel de ce processus repose sur un

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

neurone artificiel dont les entrées reçoivent des signaux pondérés, chaque entrée étant multipliée par un coefficient spécifique, appelé poids. Le neurone calcule ensuite la somme de ces entrées pondérées, y ajoute un biais, puis applique une fonction de transfert afin de moduler la sortie. Cette sortie représente l'information traitée par le neurone artificiel, qui peut alors être transmise aux neurones suivants dans le réseau. La grande simplicité de ce modèle se reflète dans sa formulation mathématique, qui permet de représenter de manière concise et rigoureuse le traitement de l'information par un neurone artificiel.

$$Y_i = Fv_i = F(b_0 + \sum w_i X_i) \quad (\text{II.2})$$

- **F** : fonction de transfert
- X_i : valeur d'entrée en temps discret k où i varie de 0 à m
- b_0 : biais
- w_i : poids de connexion
- Y_i : valeur de sortie
- v_i : potentiel du neurone

Comme le montrent le modèle de neurone artificiel et son équation (1), la principale inconnue dans un réseau de neurones artificiels réside dans la fonction de transfert. Cette fonction détermine le comportement du neurone et peut correspondre à n'importe quelle fonction mathématique adaptée au problème étudié. À la différence des neurones biologiques, qui présentent un état binaire, la plupart des fonctions de transfert sont continues et peuvent prendre une infinité de valeurs dans les intervalles $[0,1]$ ou $[-1,1]$ (Parmi les formes de fonctions de transfert couramment utilisées, on retrouve l'identité, la fonction logistique, la tangente hyperbolique, l'exponentielle ou encore la fonction sinusoïdale (Suzuki, 2011)).

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

Tableau I.1. Répertoire quelques fonctions de transfert utilisées dans les réseaux de neurones artificiels, telles qu'implémentées dans le logiciel (Cybenkot, 1989; STATISTICA, 2013).

Fonction (Nom en Stata soft)	Définition	Description	Intervalle	
Identity	a	La fonction d'activation du neurone est transmise directement en sortie	$(-\infty, +\infty)$	
Tangente hyperbolique	$\frac{e^n - e^{-n}}{e^n + e^{-n}}$	Une courbe sigmoïde, comme la tangente hyperbolique, est semblable à la fonction logistique. Elle est souvent plus efficace que cette dernière en raison de sa symétrie. Elle est particulièrement adaptée aux perceptrons multicouches, notamment pour les couches cachées.	$(-1, +1)$	
Logistique	$\frac{1}{1 + e^{-n}}$	Une courbe adoptant la forme d'un S.	$(0, +1)$	
Exponentielle	e^{-n}	La fonction exponentielle négative	$(0, +\infty)$	
Sinus	$\text{Sin}(n)$	Peut-être pertinent pour identifier des données à distribution radiale.	$[0, +1]$	
Soft max	$\frac{(e_i^n)}{\sum(e_i^n)}$	Principalement employé pour les tâches de classification, mais sans s'y limiter. Il est utile pour concevoir des réseaux de neurones avec des sorties multiples normalisées, ce qui le rend particulièrement adapté à la construction de classificateurs neuronaux produisant des sorties probabilistes.	$[0, +1]$	
Gaussien	$\frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{2\sigma^2}\right)$	Cette fonction d'activation gaussienne isotrope est exclusivement utilisée par les unités cachées d'un réseau neuronal RBF, également appelées fonctions de base radiales. La position, aussi désignée sous le terme de vecteurs prototypes, ainsi que les paramètres de propagation, sont équivalents aux poids de la couche cachée en entrée d'un réseau neuronal MLP.	/	

(n) C'est l'entrée nette d'un neurone (Somme pondérée des entrées du neurone pour les **PMC**).

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

II.7.2.2 Architecture d'un réseau de neurones

Le fait que l'interconnexion puisse se réaliser de diverses manières donne lieu à de nombreuses topologies possibles, qui se divisent en deux grandes familles principales.

- **Les réseaux de neurones non bouclés** : Une hiérarchie d'unités regroupées en fonction complexe constitue un **réseau de type feed-forward (FFN)**. Un réseau de neurones artificiels avec une topologie *feed-forward* est appelé **réseau de neurones artificiels feed-forward**, et il obéit à une seule condition : l'information doit circuler de l'entrée vers la sortie dans une seule direction, sans rétro-boucles.

Il n'existe pas de limitation concernant le nombre de couches, le type de fonction de transfert utilisée dans les neurones artificiels individuels, ni le nombre de connexions entre ces neurones. Le réseau feed-forward le plus simple est le **perceptron simple**, qui n'est capable d'apprendre que des problèmes linéairement séparables

. (Charles-Albert Lehalle, 2005; Suzuki, 2011).

- **Les réseaux de rétroaction neuronaux (les réseaux de neurones bouclés)** sont décrits par des systèmes dynamiques évoluant en temps continu ou discret. Ensuite, ils peuvent être classés en deux types : réseaux de rétroaction discrets et réseaux de rétroaction continus. Dans les deux cas, le processus de transition commence lorsqu'une entrée initiale est imposée au réseau. La réponse des neurones à l'entrée initiale est introduite dans les neurones comme une entrée mise à jour, ce qui, à son tour, produit une réponse mise à jour. Le processus se poursuit jusqu'à ce que la réponse ne change plus dans une précision donnée. En d'autres termes, le réseau produit la sortie lorsqu'il atteint un équilibre du système dynamique (Suzuki, 2011).
- **Houblonnière artificielle**

Un réseau de neurones artificiels de Hopfield est un type de réseau de neurones artificiels récurrents utilisé pour stocker un ou plusieurs vecteurs cibles stables. Ces vecteurs stables peuvent être considérés comme des mémoires que le réseau rappelle lorsqu'il est fourni avec des vecteurs similaires qui agissent comme un indice à la mémoire du réseau. Ces unités binaires ne prennent que deux valeurs différentes pour leurs états, qui sont déterminés par le fait que l'entrée des unités dépasse ou non leur seuil (Vakulenko, 2002)

II.7.2.3. Classification des réseaux de neurones selon leurs modes d'apprentissage

Une fois l'architecture définie, elle passe par une phase d'apprentissage. Cette étape permet de calculer les poids w_i de manière à ce que les sorties du réseau soient, pour les exemples d'apprentissage, aussi proches que possible des résultats attendus. Ces derniers représentent soit la valeur de la fonction à approcher, soit la sortie du processus à modéliser. Ainsi, l'apprentissage correspond à la phase de développement du réseau où les coefficients de régression sont ajustés jusqu'à atteindre le comportement souhaité (Hamadache, 2014).

Il existe trois principaux paradigmes d'apprentissage : l'apprentissage supervisé, l'apprentissage non supervisé et l'apprentissage imposé ou forcé. Ces paradigmes peuvent généralement être

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

utilisés avec tout type de réseau de neurones artificiels. Chacun d'entre eux comprend divers algorithmes d'apprentissage ([Charles-Albert Lehalle, 2005](#); [Suzuki, 2011](#)).

- **L'apprentissage supervisé**

L'apprentissage supervisé implique la présence d'un "professeur" qui connaît l'environnement et fournit des cibles désirées pour chaque entrée. Ces connaissances sont exprimées sous forme de paires de vecteurs d'entrée et de sortie, permettant au réseau d'ajuster ses réponses en corrigeant les erreurs. Ainsi, les poids du réseau sont modifiés pour produire une réponse optimale. Ce processus continue jusqu'à ce que le réseau fonctionne de manière autonome. Cependant, en l'absence d'un professeur, il se limite aux cas déjà appris ([Sildir et al., 2022](#)).

- **L'apprentissage par renforcement**

Contrairement à l'apprentissage supervisé, l'apprentissage par renforcement utilise un indice de satisfaction scalaire au lieu d'un signal d'erreur. Inspirée des travaux de (Thorndike, 2012) En psychologie expérimentale, cette méthode renforce les réponses associées à la satisfaction et diminue celles conduisant à un inconfort. Les comportements évoluent donc selon leurs conséquences. Bien que simple, cette approche établit des règles d'apprentissage efficaces. Les algorithmes basés sur l'apprentissage par renforcement sont particulièrement utilisés dans les systèmes de contrôle ([Sildir et al., 2022](#)).

- **L'apprentissage non supervisé**

L'apprentissage non supervisé, ou « autoorganisé », se distingue par l'absence de supervision ou de signal d'erreur. Le réseau neuronal apprend à modéliser les stimuli de l'environnement de manière autonome en optimisant ses poids synaptiques. À la fin du processus, il crée des représentations internes et classe les stimuli similaires. Ce type d'apprentissage repose souvent sur des mécanismes compétitifs, où les neurones agissent comme prototypes des stimuli. La qualité du modèle est évaluée par la distance entre les stimuli et leurs prototypes ([Hamadache, 2014](#)).

II.7.2.4. Phénomènes de sous-apprentissage et sur-apprentissage

En général, l'augmentation du nombre de neurones dans la couche cachée tend à améliorer les performances d'apprentissage. Cependant, sélectionner un modèle uniquement sur la base de ses performances sur l'ensemble d'apprentissage peut s'avérer problématique. En effet, cela présente un risque élevé de surapprentissage. ([Hamadache, 2014](#)).

La tâche d'apprentissage ne réussit pas toujours en raison de certains obstacles fréquents. Parmi les plus connus figurent le sous-apprentissage et le sur- ([Bishop, 1995](#)).

- **Sous-apprentissage** : Le sous-apprentissage, ou « underfitting », se produit lorsque le modèle ne parvient pas à capturer suffisamment de détails dans les données, souvent en raison d'un nombre insuffisant d'itérations ou de neurones dans les couches cachées. Ce phénomène entraîne une faible performance, tant sur la base d'apprentissage que sur la base de tests. (SiMoussa, 2010). En apprentissage supervisé, un modèle qui souffre de sous-apprentissage ne parvient pas à bien généraliser à partir des données

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

d'entraînement vers des données inconnues. Cela est souvent le résultat d'un modèle trop simple ou mal adapté.

- **Sur-apprentissage** : Le sur-apprentissage, ou « overfitting », se produit lorsqu'un modèle est trop complexe, avec un trop grand nombre de neurones cachés. Cela entraîne un déséquilibre entre les performances sur les ensembles d'apprentissage et de test, avec des erreurs très faibles sur l'ensemble d'apprentissage (ce qui est souhaitable) et des erreurs élevées sur l'ensemble de test (ce qui est non souhaitable). Cela se produit parce que le modèle s'adapte trop bien aux données d'entraînement, y compris le bruit présent, au lieu d'apprendre la structure sous-jacente des données (Si Moussa, 2010).

Les modèles surappris mémorisent un excès de détails, y compris le bruit, ce qui limite leur capacité à généraliser sur de nouvelles données. Cela se traduit par des performances optimales sur l'ensemble d'entraînement, mais médiocres sur l'ensemble de test. Comme mentionné précédemment, aucune règle universelle ne définit le nombre optimal de neurones dans la couche cachée d'un MLP pour un problème donné. Ainsi, la stratégie d'essai-erreur (trial and error) demeure la plus appropriée. Le critère d'arrêt repose sur la capacité de généralisation, évaluée lors de la phase de validation du réseau, ainsi que sur une fonction de performance spécifique (Plumb et al., 2009). Cette capacité est quantifiée en calculant un vecteur de meilleur ajustement linéaire et en analysant les erreurs associées. Plusieurs critères d'arrêt peuvent être appliqués lors de l'apprentissage. Le premier consiste à fixer un nombre prédéfini de cycles ou d'itérations, mais il est difficile de déterminer a priori le nombre optimal pour atteindre l'objectif fixé. Un second critère repose sur une borne inférieure de l'erreur quadratique moyenne (MSE), permettant parfois de définir un seuil à atteindre. Dès que l'indice de performance choisi descend en dessous de cette limite, l'apprentissage est considéré comme suffisant et s'arrête. Toutefois, ce critère présente l'inconvénient potentiel de favoriser un sur apprentissage indésirable en pratique. Afin de réduire le temps de recherche et d'atténuer le risque de sur apprentissage, nous avons opté pour un apprentissage régularisé.

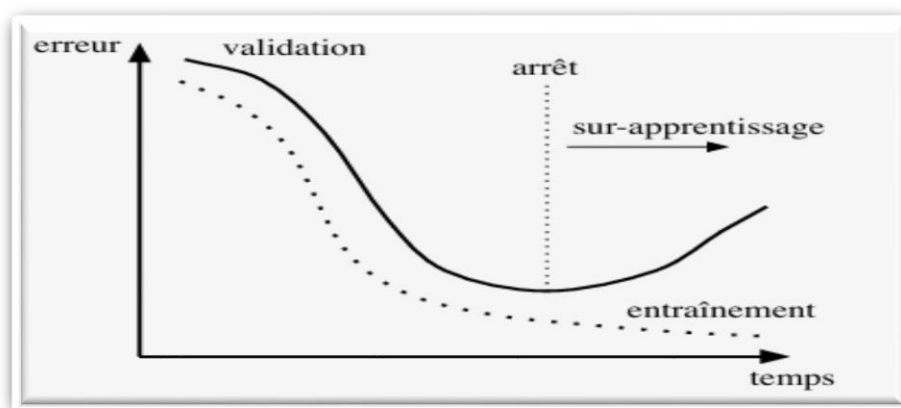


Figure I.5. Phénomènes d'apprentissage optimal, sous-apprentissage et sur-apprentissage.

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

II.7.2.5. Algorithme d'apprentissage

L'apprentissage des réseaux de neurones artificiels se fait à l'aide d'algorithmes spécifiques (Chtita, 2017). De nombreux algorithmes reposent sur la rétropropagation. Bien que chaque algorithme présente des avantages, notamment en termes de rapidité de calcul et de besoins en mémoire, aucun n'est universellement applicable à tous les problèmes. La performance de chaque méthode dépend du modèle à traiter. L'objectif de ce processus itératif est de déterminer les poids de connexion qui minimisent l'erreur du réseau sur l'ensemble d'apprentissage. Cette minimisation, réalisée à l'aide d'une méthode de gradient, aboutit à l'algorithme de rétropropagation. Plusieurs variantes de rétro propagation peuvent être utilisées, comme la descente de gradient, l'algorithme de Levenberg-Marquardt, la régularisation bayésienne, ou encore l'algorithme BFGS, parmi d'autres (Mounia ZINE, 2020 ; Si Moussa, 2010).

Le terme BFGS fait référence aux initiales de ses inventeurs : Broyden, Fletcher, Goldfarb et Shanno. Cet algorithme appartient aux méthodes d'optimisation *quasi-Newtoniennes*, qui sont une généralisation de la méthode de Newton (Urbani, 1995).

L'équation suivante décrit la mise à jour des paramètres θ Dans l'algorithme BFGS. Elle suit une approche de descente de gradient améliorée avec une matrice de pré conditionnement M_i , qui représente une approximation inverse du Hessien :

$$\theta^{(i)} = \theta^{(i-1)} - \mu_i M_i \nabla J(\theta^{(i-1)}) \quad (\text{II.3})$$

Où :

- $\theta^{(i)}$: vecteur des paramètres à l'itération i ,
- μ_i : facteur de pas ou taux d'apprentissage,
- M_i : approximation inverse de la matrice hessienne H_i^{-1} ,
- $\nabla J(\theta^{(i-1)})$: gradient de la fonction coût $J(\theta)$ par rapport aux paramètres à l'itération précédente.

Dans BFGS, M_i est mis à jour de manière itérative afin d'améliorer la direction de descente en capturant la courbure locale de $J(\theta)$. Cela permet une meilleure convergence que la descente de gradient classique.

La mise à jour de M_i est donnée par :

$$M_{i+1} = (I - \rho_i s_i y_i^T) M_i (I - \rho_i y_i s_i^T) + \rho_i s_i s_i^T \quad (\text{II.4})$$

Avec :

- $s_i = \theta^{(i)} - \theta^{(i-1)}$,
- $y_i = \nabla J(\theta^{(i)}) - \nabla J(\theta^{(i-1)})$,
- $\rho_i = \frac{1}{y_i^T s_i}$ (Facteur d'échelle),
- I C'est la matrice d'identité.

Où

$$y_{i-1} = \nabla J(\theta^{(i)}) - \nabla J(\theta^{(i-1)}) \quad (\text{II.5})$$

$$\delta_{i-1} = \theta^{(i)} - \theta^{(i-1)}.$$

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

On choisit comme valeur initiale M_0 La matrice d'identité. Si, au cours d'une itération, la matrice calculée n'est pas définie positivement, elle est réinitialisée à la matrice identité.

II.7.2.6. Réseaux de neurones perceptron multicouche

Les perceptrons multicouches (PMC) font partie des réseaux de neurones les plus utilisés, en raison de leur succès dans de nombreuses applications. L'architecture d'un PMC est définie par une couche d'entrée, une ou plusieurs couches cachées, et une couche de sortie, chaque couche comprenant au moins un neurone. Le vecteur d'entrée est traité par le PMC selon un passage en avant (« forward pass »), traversant chaque couche successivement (**Figure I.6**) Les réseaux multicouches (PMC) se composent d'entrées, d'une couche de sortie et d'une ou plusieurs couches cachées ([Mounia Zine, 2020](#)).

- **Couche d'entrée** : Cette couche reçoit les données du système et est constituée de neurones d'entrée correspondant aux différentes variables d'entrée.
- **Couches cachées** : Chaque couche cachée comprend un certain nombre de neurones, dont les fonctions d'activation appartiennent à la famille des fonctions sigmoïdes bornées. Ces neurones n'ont pas de connexion directe avec l'extérieur et sont donc appelés neurones cachés.
- **Couche de sortie** : Cette couche fournit les valeurs de sortie, obtenues à partir de la combinaison linéaire des fonctions sigmoïdes calculées dans les couches cachées.

Les neurones sont interconnectés par des liaisons pondérées. Ce sont ces poids qui déterminent le fonctionnement du réseau, en permettant de transformer l'espace des entrées en espace des sorties via une transformation non linéaire ([hamadache, 2014](#)).

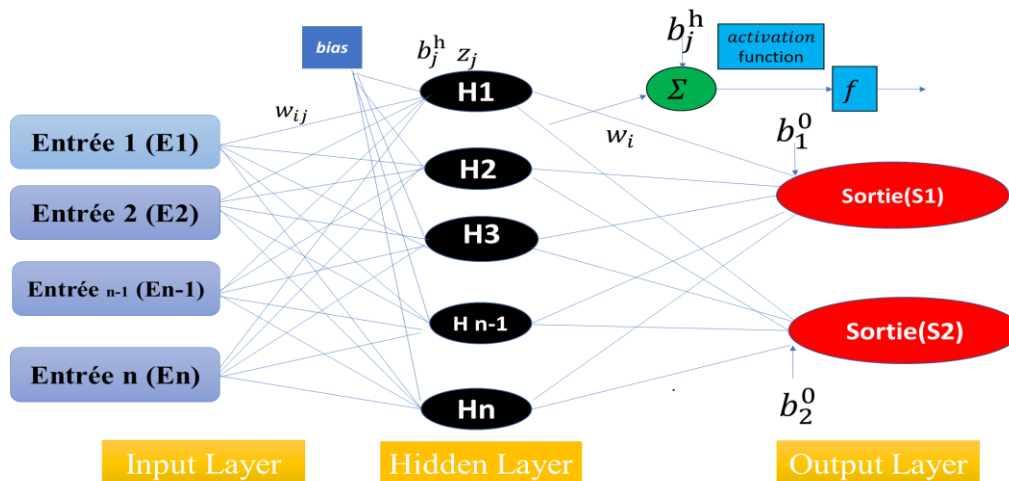


Figure I.6. Structure d'un perceptron multicouche non-bouclé.

Comme illustré à la Figure I.6, les neurones d'entrée X_i transmettent leurs signaux à chaque neurone de la couche cachée. Chaque neurone de cette couche applique sa fonction de transfert aux signaux reçus et transmet sa sortie. Le neurone de la couche de sortie intègre ensuite les

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

contributions de la couche cachée pour générer la réponse globale du réseau \mathbf{Y} . La fonction d'activation de la couche de sortie, notée \mathbf{F} , assure la connexion entre la couche cachée et la couche de sortie.

La sortie du réseau, notée \mathbf{Y} , correspond aux propriétés prédites : \mathbf{Tb} , \mathbf{Tc} , \mathbf{Pc} et \mathbf{Vc} . Les signaux de sortie des neurones cachés sont désignés par \mathbf{Z}_j . Les poids reliant la couche d'entrée aux couches cachées sont notés \mathbf{w}_{ij} , tandis que ceux reliant la couche cachée à la couche de sortie. Sont notés \mathbf{w}_i . Les neurones d'entrée sont représentés par \mathbf{X}_i . Les biais appliqués aux neurones de la couche cachée sont notés. \mathbf{b}_j^h , et le biais du neurone de la couche de sortie est \mathbf{b}_1^0 . \mathbf{p} représente le nombre de neurones dans la couche cachée et, \mathbf{q} C'est le nombre de couches d'entrée.

$$\mathbf{Y} = \mathbf{f}^0 \left[\sum_{i=1}^q \mathbf{w}_{ij} \mathbf{f}^H \left[\sum_{i=1}^p \mathbf{w}_{ij} \mathbf{X}_i + \mathbf{b}_j^h \right] + \mathbf{b}_1^0 \right] \quad (\text{II.6})$$

Fonctions de transfert (d'activation) usuelles dans logiciel Statistica ([Bishop 1995](#) ; [Statsoft 2020a](#) ; [Statsoft 2020b](#)).

II.7.3. Support Vecteur Régression) (SVR)

SVR : Support Vecteur Régression (SVR) est une technique d'apprentissage automatique pour prédire des variables continues. Le SVR est particulièrement bien adapté à la modélisation des relations non linéaires car il est connu pour sa grande capacité de généralisation et sa robustesse dans les tâches de régression. En outre, il est robuste aux valeurs aberrantes et garantit l'efficacité des calculs.

La régression par machines à vecteurs support (SVR). Le réseau à vecteurs support est une machine d'apprentissage pour les problèmes de classification à deux groupes. La machine met en œuvre l'idée que les vecteurs d'entrée sont représentés de manière non linéaire dans un espace de caractéristiques à très haute dimension. Dans cet espace, une surface de décision linéaire est construite. Les propriétés particulières de la surface de décision garantissent la grande capacité de généralisation de la machine d'apprentissage. L'idée qui sous-tend le réseau de vecteurs de support a été précédemment mise en œuvre pour le cas restreint où les données d'apprentissage peuvent être séparées sans erreur.

L'objectif principal des algorithmes d'apprentissage automatique basés sur la régression est de prédire la prédiction sur la base d'une fonction de mise en correspondance. Cette fonction de mise en correspondance est modélisée en alimentant un ensemble de caractéristiques et de données de prédiction, connu sous le nom d'ensemble de données d'apprentissage. Le SVR est utilisé dans de nombreuses applications, telles que le traitement d'images, la télédétection et la blockchain.

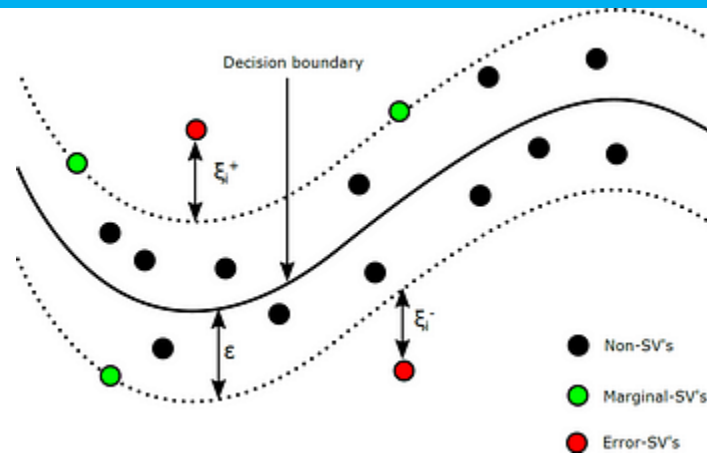


Figure I.7. : SVR structure (Singh et al., 2020).

Les modèles SVR utilisant le noyau RBF visent à trouver une fonction de régression $f(x)$ capable de caractériser de manière adéquate la relation entre les données d'entrée fournies. La fonction $f(x)$ représente la sortie Y , où w désigne le vecteur de poids de la fonction, b c'est le facteur de décalage, et ϕ c'est la transformation non linéaire.

$$Y = w\phi(x_i) + b \quad (\text{II.7})$$

- w : Il représente le vecteur de poids dans le modèle SVR. Dans les modèles linéaires traditionnels, les poids sont calculés directement. En revanche, dans le SVR utilisant le noyau RBF, le calcul est plus complexe et est influencé par les multiplicateurs de Lagrange, qui déterminent l'impact des vecteurs de support dans le modèle.
- ϕ : Il s'agit de la fonction de transformation qui projette les données d'entrée dans un espace de dimension supérieure à l'aide du noyau RBF.
- b : Il s'agit du biais ou de l'ordonnée à l'origine ajoutée à la prédiction. Il est essentiel d'ajuster le modèle afin de fournir des prédictions précises en fonction des données d'entrée.

Pour obtenir une fonction f aussi plate que possible, le vecteur de poids w doit être aussi petit que possible. Un problème d'optimisation convexe est utilisé pour minimiser le risque de régression R_{reg} , comme illustré dans l'équation suivante :

L'hypothèse selon laquelle la fonction f peut prédire avec une marge d'erreur ϵ (epsilon) n'est pas toujours valide, rendant ainsi le problème d'optimisation convexe non faisable. Par conséquent, des variables d'écart ξ_i et ξ_i^* sont ajoutées pour tenir compte des écarts en dehors de la bande ϵ .

La constante $C > 0$ est un paramètre de régularisation, appelé contrainte de boîte (*box constraint*), qui régule le compromis entre la platitude de f et la déviation maximale autorisée en dehors de la bande ϵ . Une valeur plus élevée de C entraîne une pénalité plus forte pour les erreurs, ce qui permet d'obtenir des prédictions plus précises. Cependant, un modèle avec une valeur C élevée sera plus complexe et aura une capacité de généralisation plus faible qu'un

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

modèle avec une valeur de C plus basse. Une fonction de perte insensible à ϵ , notée L , représente le coût des prédictions situées en dehors de la bande ϵ , comme illustré dans l'équation

$$\text{II.8 :} \quad \min \| \mathbf{w} \|^2 + C \sum_i^n (\xi_i^- + \xi_i^+) \quad (\text{II.8})$$

En utilisant l'équation de Lagrange et les conditions de Karush-Kuhn-Tucker (KKT), la nécessité explicite d'une fonction de transformation est éliminée, ce qui évite d'avoir à projeter les données dans un espace de dimension supérieure. Le problème est alors reformulé comme suit :

$$f(\mathbf{x}) = \sum_i^n (\alpha_i^* + \alpha_i) K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) + B \quad (\text{II.9})$$

où α_i et α_i^* sont des multiplicateurs de Lagrange qui rapprochent la prédiction du vecteur y_i . Une fonction noyau $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$ peut être utilisée pour remplacer le produit scalaire par une fonction qui effectue ce produit dans l'espace des caractéristiques de dimension supérieure, ramenant ainsi le problème d'optimisation à l'espace des dimensions d'entrée, comme montré dans l'équation **II.10** :

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = \gamma(\mathbf{x} \cdot \mathbf{x}_i + 1)^d \quad (\text{II.10})$$

La fonction noyau peut prendre différentes formes. Dans cette étude, la fonction noyau gaussienne (équation II.11) est utilisée avec le modèle SVR. Le noyau gaussien est largement employé dans les problèmes de régression en raison de sa capacité à gérer des frontières d'erreur complexes et de sa facilité de réglage.

L'équation de γ pour le noyau gaussien est défini comme suit :

$$K(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = \exp(-\gamma \| \mathbf{x} - \mathbf{x}_i \|^2) \quad (\text{II.11})$$

Où γ est l'échelle du noyau, qui régule l'influence de la variation des prédicteurs sur la variation du noyau.

Ses performances dépendent de plusieurs paramètres clés. Parmi eux, le facteur de régularisation C c'était le compromis entre la maximisation de la marge et la minimisation des erreurs de classification. Le paramètre ν (nu) Définit la marge d'erreur autour de la valeur prédite. Un autre facteur crucial concerne le choix du type de noyau approprié, tel que le polynôme, le sigmoïde ou la fonction à base radiale (RBF). Le paramètre γ détermine la portée de l'influence d'un seul exemple d'entraînement. Le noyau RBF est privilégié en raison de son équilibre entre précision et vitesse d'entraînement ([Cortes et al., 1995](#)).

II.8. Études statistiques, vérification et comparaison

Une fois le modèle mis en œuvre, sa validation est essentielle pour évaluer sa fiabilité, sa capacité de généralisation et sa reproductibilité. Elle permet également de déterminer la pertinence du modèle développé pour une application donnée, La validation repose sur l'analyse de divers paramètres statistiques visant à estimer la qualité du modèle. Ces tests ont pour objectif de réduire les risques de sous-apprentissage et de surapprentissage ([Khairedine Kraim, 2009](#))

Chapitre II. Approches méthodologiques pour le développement, la validation et l'implémentation des méthodes RQSP/RQSA

Parmi les métriques les plus couramment utilisées, on retrouve le coefficient de corrélation et le coefficient de détermination (R^2), qui mesurent la proportion de variance expliquée par le modèle. Une valeur de $R^2 = 0$ indique que la variable indépendante ne contribue en rien à l'explication de la variable dépendante, tandis qu'un $R^2 = 1$ signifie que l'ensemble de la variance de la variable dépendante est expliqué par le modèle.

L'évaluation du modèle repose également sur l'analyse des erreurs, qui peuvent être classées en deux catégories principales :

- Les erreurs absolues, exprimées dans l'unité de la variable cible, telles que la racine de l'erreur quadratique moyenne (RMSE) et l'erreur absolue moyenne (MAE – Mean Absolute Error).
- Les erreurs relatives, exprimées en pourcentage de la valeur réelle, telles que l'erreur absolue moyenne en pourcentage (MAPE – Mean Absolute Percentage Error) et l'erreur symétrique absolue moyenne en pourcentage (sMAPE – Symmetric Mean Absolute Percentage Error), une variante du MAPE plus stable lorsque les valeurs réelles sont proches de zéro (Chai and Draxler, 2014).

Ces métriques permettent de quantifier la performance prédictive du modèle et d'optimiser son paramétrage.

D'autres méthodes de validation spécifiques à certains types de modèles existent, telles que l'analyse de sensibilité, qui permet d'évaluer l'impact des différentes variables d'entrée sur les performances globales du modèle. Une autre approche couramment utilisée pour les modèles neuronaux est la procédure de partitionnement des poids de connexion, qui aide à déterminer l'importance relative des différentes entrées et à optimiser la structure du réseau afin d'améliorer l'interprétation des résultats (Goh, 1995).

II.9. Conclusion

Dans ce chapitre, les principales méthodes de modélisation utilisées dans l'étude des relations structure–propriété/activité ont été présentées. Une attention particulière a été accordée aux approches d'apprentissage automatique, notamment les réseaux de neurones artificiels et la régression par vecteurs de support. Les différentes étapes nécessaires à la construction de modèles prédictifs fiables ont également été décrites, incluant la sélection des descripteurs moléculaires, le traitement des données et les méthodes de validation statistique. Ces éléments constituent la base méthodologique pour le développement des modèles QSPR appliqués dans les chapitres suivants.

**Chapitre III. Etat de l'art et revue critique de la littérature sur
la détermination des propriétés des composés organiques**

III.1. Introduction

Les modèles de type RQSP sont construits en suivant plusieurs étapes fondamentales. Tout d'abord, le choix de la base de données expérimentale initiale revêt une importance critique. Pour garantir la qualité de cette base, il est indispensable qu'elle contienne des données expérimentales fiables, car les incertitudes et les barres d'erreur associées se propagent dans le modèle final. Ainsi, il convient de privilégier des données présentant de faibles incertitudes afin de limiter l'amplification de ces erreurs.

Dans cette étude, après avoir sélectionné un ensemble de propriétés moléculaires (T_b , T_c , P_c et V_c), nous avons élaboré nos modèles QSPR. Tout d'abord, nous avons extrait l'ensemble des descripteurs disponibles sur le serveur E-DRAGON pour un jeu de données composé de 412 à 419 molécules organiques. L'information structurale de ces molécules a été calculée, puis les descripteurs moléculaires les plus pertinents ont été sélectionnés. Par la suite, les deux premières étapes ont été reliées par une méthode d'apprentissage mathématique et numérique. Enfin, cette étude a permis de développer des modèles de type RQSP basés sur des réseaux de neurones artificiels (RNA) afin de prédire les quatre paramètres physico-chimiques (T_b , T_c , P_c et V_c) des molécules organiques. La relation entre les structures, représentées par les descripteurs moléculaires, et les propriétés physiques a ainsi été établie à l'aide d'un RNA-PMC. Par ailleurs, les performances des modèles PMC-ANN ont été rigoureusement évaluées en comparaison avec celles obtenues par la méthode de régression vectorielle de support (SVR) à l'aide de différents indicateurs d'erreur et paramètres statistiques.

III.2. Les outils informatiques utilisés pour le développement et l'analyse des modèles de RQSP

Divers outils logiciels ont été utilisés dans le cadre de ce travail, ainsi que le présente la Figure III.1



Figure III.1. Capture d'écran des logiciels utilisés dans cette étude

Chapitre III. Techniques matériels, l'état de l'art, et revue critique de la littérature sur la détermination des propriétés des composés organiques

Microsoft Office Excel 2021 utilisé pour l'organisation et le prétraitement de la base de données, principalement effectués manuellement.

- Pour le calcul des descripteurs moléculaires, nous avons utilisé le serveur **E-Dragon en ligne** ou Dragon 1.0 ([VCCLAB 2005](#) ; [Tetko et al. 2005](#)). Cet outil permet de calculer 1 666 descripteurs et est considéré comme l'un des meilleurs pour ce type d'analyse, en raison de l'inclusion de descripteurs significatifs, de sa facilité d'utilisation et de sa rapidité de calcul.
- Le logiciel **MATLAB R2021b** (The MathWorks Inc, 2021) a été utilisé, notamment à travers l'emploi de scripts, comme dans le cas de la boîte à outils du domaine d'applicabilité (*Applicability Domain*, DA). Ce dernier a été développé par un groupe de chercheurs italiens spécialisés en chimio-informatique et programmé en langage MATLAB ([Sahigara et al. 2012](#) ; [Sahigara et al. 2014](#)).
- Le logiciel Gaussian a été utilisé pour l'optimisation géométrique des molécules. La plupart des composés ont subi une minimisation d'énergie en utilisant la base B3LYP/6-311G (d, p) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (*Density Functional Theory*, DFT).
- En utilisant **STATISTICA**, l'analyse de régression linéaire multiple avec sélection progressive (*forward stepwise*) a été réalisée comme dernière étape pour sélectionner l'ensemble réduit de descripteurs et développer des **modèles QSPR** utilisant les techniques **PMC-ANN** et **SVR**. STATISTICA a facilité la mise en œuvre de ces méthodes, permettant une construction et une optimisation efficaces des modèles ([STATISTICA, 2013](#)).
- Enfin, **Google Colab** a été utilisé pour le filtrage des données. Son intégration avec les bibliothèques Python a permis une application fluide des protocoles de nettoyage des données ([Bisong, 2019](#)).

III.3. La méthodologie globale mise en œuvre pour la modélisation QSPR

Plusieurs étapes ont été utilisées dans le développement des modèles RQSP, comme décrit ci-dessus et résumé à la **Figure III.2**.

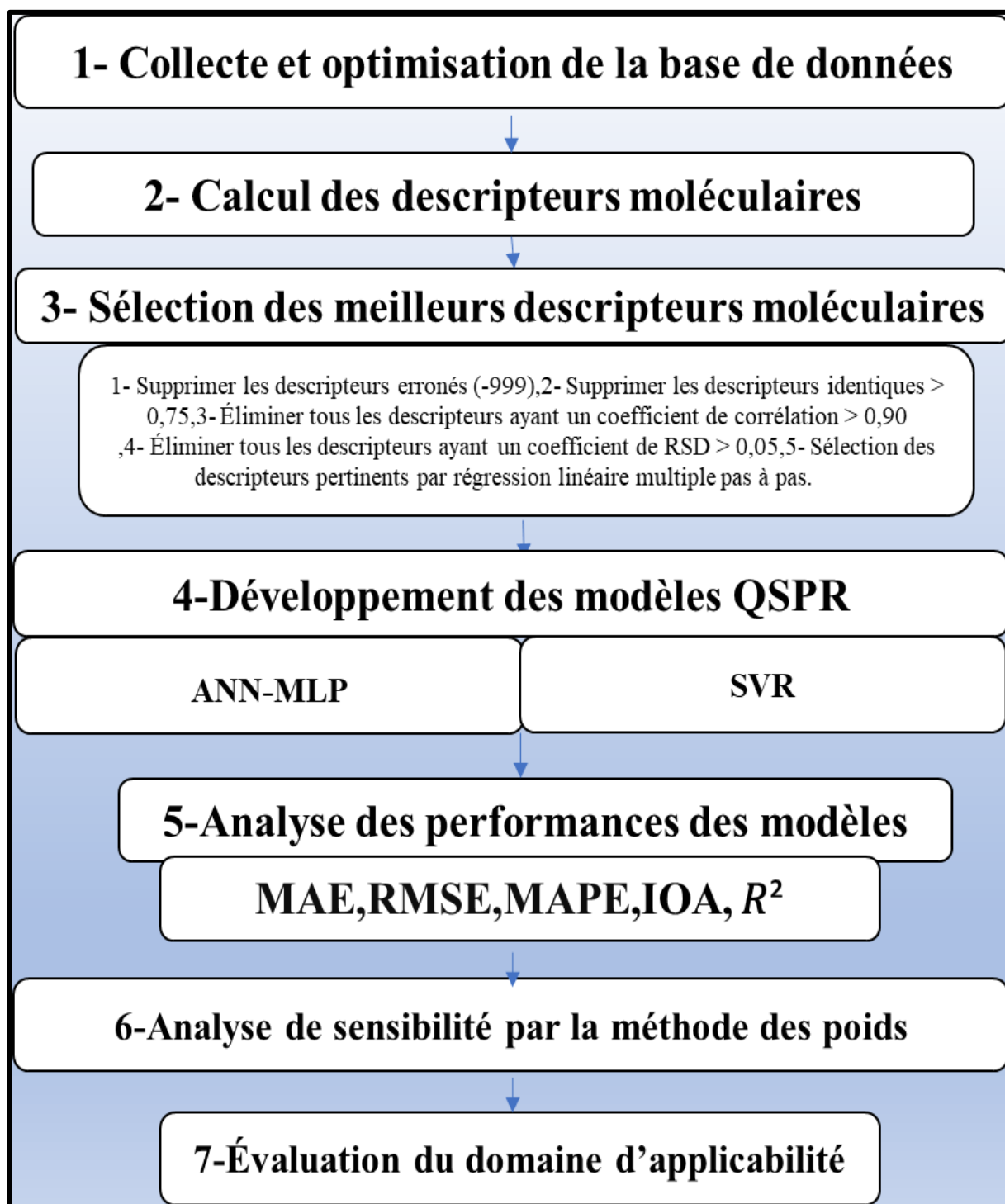


Figure III.2. Aperçu des procédures de développement des modèles QSPR dans cette étude.

III.3.1. Rassemblement et traitement des données.

La base de données initiale comprenait 419 composés organiques purs appartenant à diverses classes, telles que les hydrocarbures, les aldéhydes, les alcools, les acides carboxyliques, les amines, les amides, les esters, les éthers et les halogénures organiques. Cette base de données comprend des valeurs expérimentales ou mesurées étroitement liées aux observations

expérimentales, qui constituent l'épine dorsale de la construction de modèles. En outre, la base de données comprenait des valeurs calculées (basées sur des modèles mathématiques et statistiques). Toutefois, la fiabilité de ces valeurs calculées est sujette à caution en raison de la possibilité d'erreurs de calcul ou d'estimation résultant d'hypothèses simplificatrices ou de données brutes inexactes. C'est pourquoi les valeurs calculées ont été traitées avec une extrême prudence. Au cours d'entraînements répétés visant à trouver les meilleurs modèles, il a été noté que certaines de ces valeurs présentaient des écarts significatifs et inhabituels entre les chiffres observés et calculés, confirmant ainsi leur inexactitude et leur manque de fiabilité. Ces valeurs ont donc été exclues de l'ensemble de données afin d'éviter l'ajustement excessif et d'améliorer la précision, la généralisation et la stabilité des modèles. Par conséquent, la base de données finale comprend 417 composés pour le point d'ébullition (T_b), 412 pour la température critique (T_c), 411 pour la pression critique (P_c) et 418 pour le volume critique (V_c). L'ensemble de données final fournit des valeurs plus récentes et plus précises dérivées du livre (*Properties of Gases and Liquids*, 6th Edition) (J. Richard Elliott et al., 2023).

Les structures moléculaires de chaque composé ont été fournies au format SDF par PubChem (Kim et al., 2023). La plupart des composés sous

III.3.2. Notion SDF et optimisation des chimiques des molécules organiques

Chaque molécule organique a d'abord été récupérée à partir de la base de données PubChem, une ressource en ligne réputée pour la fiabilité et l'accessibilité de ses données chimiques, et les fichiers SDF 3D correspondants ont été extraits du même site. Par la suite, chaque composé a subi une optimisation par minimisation de l'énergie, réalisée selon la méthode B3LYP/6-311G(d, p) dans le cadre de la théorie de la fonctionnelle de la densité (DFT), afin de déterminer sa géométrie optimale.

La DFT conceptuelle constitue un outil puissant pour caractériser les propriétés de réactivité des composés chimiques au niveau moléculaire. Les descripteurs dérivés de cette approche fournissent un moyen à la fois simple et efficace de rationaliser le comportement chimique des molécules, en s'appuyant sur le principe HSAB (Hard and Soft Acids and Bases) de Pearson. Dans le contexte de la modélisation QSPR/QSAR, ces descripteurs sont particulièrement utiles pour corrélérer des caractéristiques électroniques avec des propriétés physico-chimiques ou biologiques, permettant ainsi de prédire et d'expliquer la réactivité chimique. Leur fiabilité et leur pertinence ont été confirmées par de nombreuses études théoriques, qui démontrent leur capacité à fournir des indicateurs quantitatifs robustes pour la conception et l'analyse de modèles prédictifs.

La DFT a été utilisée pour l'optimisation des molécules. Cette étape permet d'obtenir des structures géométriques stables et énergétiquement favorables, servant de base aux calculs des descripteurs électroniques. L'optimisation géométrique est essentielle pour assurer la cohérence et la fiabilité des propriétés prédictives dérivées.

Ce protocole permet de corriger les éventuelles déformations structurelles présentes dans les données initiales et d'obtenir une configuration moléculaire stable, condition essentielle pour assurer la fiabilité des prédictions des propriétés physico-chimiques. Les géométries ainsi optimisées ont été importées dans le logiciel E-Dragon 1.0 (VCCLAB, 2005) pour le calcul des

Chapitre III. Techniques matériels, l'état de l'art, et revue critique de la littérature sur la détermination des propriétés des composés organiques

descripteurs moléculaires. Au total, 1666 descripteurs ont été générés en ligne, répartis en 20 classes distinctes, présentées dans le Tableau III.1. Il est donc nécessaire de réduire ce nombre afin de ne conserver que les descripteurs les plus pertinents pour le processus de modélisation

```
méthanol (CH3OH)
6 5 0 0 0 0 0 0 0999 v2000
2.5369 -0.2500 0.0000 O 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0
3.4030 0.2500 0.0000 C 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0
3.7130 -0.2869 0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0
3.9399 0.5600 0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0
3.0930 0.7869 0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0
2.0000 0.0600 0.0000 H 0 0 0 0 0 0 0 0
0 0 0
1 2 1 0 0 0 0
1 6 1 0 0 0 0
2 3 1 0 0 0 0
2 4 1 0 0 0 0
2 5 1 0 0 0 0
M END
```

Figure III.3. Notations SDF de molécule

Welcome to the E-Dragon program!

VECLAIR

Name of this task:

Input FORMAT CONVERT molecules to 3D

List of molecular DESCRIPTORS:

<input checked="" type="checkbox"/> constitutional descriptors (48)	<input checked="" type="checkbox"/> topological descriptors (119)
<input checked="" type="checkbox"/> walk and path counts (46)	<input checked="" type="checkbox"/> connectivity indices (39)
<input checked="" type="checkbox"/> information indices (47)	<input checked="" type="checkbox"/> 2D autocorrelations (96)
<input checked="" type="checkbox"/> edge adjacency indices (107)	<input checked="" type="checkbox"/> Burden eigenvalues (96)
<input checked="" type="checkbox"/> geometrical descriptors (121)	<input checked="" type="checkbox"/> eigenvalue based indes (47)
<input checked="" type="checkbox"/> functional group counts (154)	<input checked="" type="checkbox"/> ring descriptors (32)
<input checked="" type="checkbox"/> hydrogen-bond acceptors (5)	<input checked="" type="checkbox"/> 3D MoRSE descriptors (45)
<input type="checkbox"/> do not save (SX)	<input checked="" type="checkbox"/> GETAWAY descriptors (273)
	<input checked="" type="checkbox"/> atom-contered fragments (120)
	<input checked="" type="checkbox"/> molecular properties (31)

[Click here to see or dita](#)

The input format for DRAGON should be 3D sdf. You can use CORINA to convert your molecules to it.

Figure III.4. Interface de le logiciel E-Dragon en ligne

Chapitre III. Techniques matériels, l'état de l'art, et revue critique de la littérature sur la détermination des propriétés des composés organiques

Tableau.III.1. Tableau de descripteurs de E-Dragon en ligne

Nom des Descripteurs		
En français	En anglais	Number
Descripteurs constitutionnels	<i>Constitutional descriptors</i>	48
Descripteurs topologiques	<i>Topological descriptors</i>	119
Comptage des promenades et des chemins	<i>Walk and path counts</i>	47
Indices de connectivité	<i>Connectivity indices</i>	33
Indices d'information	<i>Information indices</i>	47
Autocorrélations 2D	<i>2D autocorrelations</i>	96
Indices de contiguïté des bords	<i>Edge adjacency indices</i>	107
Descripteurs des valeurs propres du fardeau	<i>Burden eigenvalue descriptors</i>	64
Indices de charge topologique	<i>Topological charge indices</i>	21
Profils moléculaires aléatoires	<i>Randic molecular profiles</i>	41
Descripteurs géométriques	<i>Geometrical descriptors</i>	44
Descripteurs 3D-MoRSE	<i>3D-MoRSE descriptors</i>	120
Descripteurs WHIM	<i>WHIM descriptors</i>	160
Descripteurs GETAWAY	<i>GETAWAY descriptors</i>	99
Nombre de groupes fonctionnels	<i>Functional group counts</i>	157
Fragments centrés sur l'atome	<i>Atom-centred fragments</i>	154
Descripteurs RDF	<i>RDF descriptors</i>	150
Descripteurs de charge	<i>Charge descriptors</i>	14
<i>Propriétés moléculaires</i>	<i>Molecular properties</i>	29

Le nombre total de descripteurs calculés dans cette étude est de 1666. L'utilisation d'un grand nombre de descripteurs permet, dans un premier temps, de capturer l'ensemble des caractéristiques chimiques, topologiques, électroniques et structurales des composés étudiés. Cette approche vise à maximiser la quantité d'informations disponibles pour le modèle, afin de ne pas négliger d'éventuels paramètres pertinents susceptibles d'influencer la propriété cible. Cependant, la présence de descripteurs redondants, peu informatifs ou fortement corrélés peut nuire à la performance du modèle, en augmentant le risque de surapprentissage et en compliquant son interprétation. Il est donc nécessaire de réduire et de sélectionner les descripteurs les plus pertinents.

III 3.4. Procédure de prétraitement pour la sélection des descripteurs pertinents

L'élaboration d'un modèle de relation quantitative structure-propriété (QSPR) implique des étapes essentielles nécessitant une sélection rigoureuse de descripteurs robustes et informatifs parmi un large éventail de descripteurs disponibles ([Hamadache et al., 2016](#)).

- À l'étape initiale, nous avons supprimé manuellement les entrées contenant des valeurs manquantes (codées comme "999"). Les données manquantes peuvent réduire la puissance statistique d'une étude et produire des estimations biaisées ([Kang, 2013](#)).
- Tout descripteur présentant des valeurs uniformes sur au moins 75 % des échantillons a été éliminé.
- Les descripteurs avec un écart-type relatif inférieur ou égal à 0,05 ont été supprimés, car ils reflètent une variation minimale entre les valeurs. Ces étapes ont été mises en place afin de réduire la dimensionnalité du jeu de données, d'améliorer l'efficacité de l'apprentissage et de minimiser le risque de surajustement, car ces descripteurs n'apportent pas une contribution significative au pouvoir prédictif du modèle.
- Pour traiter la multi colinéarité, les paires de descripteurs dont le coefficient de corrélation de Pearson absolu dépassait 0,90 ont été analysées. Pour chaque paire, un descripteur a été supprimé afin de minimiser la redondance et d'améliorer la robustesse du modèle. Ces deux dernières étapes ont été réalisées à l'aide de Google Colab. Cette plateforme a été utilisée pour le filtrage des données, et son intégration avec les bibliothèques Python a facilité l'application transparente des protocoles de nettoyage des données.
- La phase finale a consisté à appliquer une régression linéaire multiple (MLR) progressive pour identifier les descripteurs optimaux. Il était important de réduire le nombre de descripteurs non significatifs, en excluant ceux ayant une valeur de p supérieure à 0,01. Cela garantissait que les descripteurs sélectionnés étaient statistiquement significatifs et fortement corrélés aux points d'ébullition et aux températures critiques.

III.3.5. Critères de sélection des paramètres pour l'apprentissage des modèles RQSP-RNA et RQSP-SVR.

Le **RNA-PMC** a été utilisé comme méthode principale d'apprentissage. Pour la validation, ses performances ont été comparées à celles de la régression vectorielle de support (**SVR**). La **Figure III.6** illustre le processus de développement des modèles.

III.3.5.1. Paramètres déterminants pour l'apprentissage et l'optimisation des modèles RQSP-RNA

- L'ensemble de données a été divisé en deux segments, 80 % étant destinés à l'entraînement du modèle et 20 % à la validation.
- Pour développer les modèles **QSPR**, nous avons utilisé l'approche **PMC-ANN**.
- L'algorithme Quasi-Newton à rétro propagation (pour l'approche PMC-ANN, plus précisément l'algorithme Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno, BFGS) a été utilisé comme algorithme d'apprentissage ([Wessel et Jurs, 1994](#)).
- Cinq fonctions d'activation ont été sélectionnées pour les tests : tenth, exceptionnel, sine, identifié et logistique. Ce choix a été fait afin d'évaluer plusieurs fonctions d'activation dans le but de développer un modèle optimisant les performances et améliorant la précision dans la prédiction du point d'ébullition (**T_b**), de la température critique (**T_c**), du volume critique (**V_c**) et de la pression critique (**P_c**) Cette stratégie permet de s'adapter aux caractéristiques des données et de choisir la fonction d'activation optimale pour obtenir les meilleurs résultats. Les neurones de chaque couche sont interconnectés par des poids attribués de manière linéaire aux neurones des couches adjacentes (couches cachées et de sortie). La combinaison optimale des fonctions d'activation pour les couches cachées et de sortie a été déterminée à l'aide du logiciel 'STATISTICA', avec plusieurs exécutions et de nombreuses itérations effectuées pour chaque propriété afin d'assurer le meilleur résultat.
- Concernant le nombre de couches cachées et vu qu'il existe une couche cachée dans le logiciel STATISTICA, version 12([STATISTICA, 2013](#)) J'ai utilisé une seule couche cachée pour tous les modèles de RQSP-RNA dans ce travail.
- Divers calculs ont été effectués pour déterminer le nombre optimal de nœuds dans la couche cachée, allant de 1 à 23.
- Le nombre d'itérations est étroitement lié à un autre facteur souvent négligé : l'initialisation des poids synaptiques ainsi que des biais des neurones cachés et de sortie. L'utilisation de différentes valeurs d'initialisation contribue à réduire le risque de convergence vers un minimum local et améliore la robustesse de l'apprentissage.

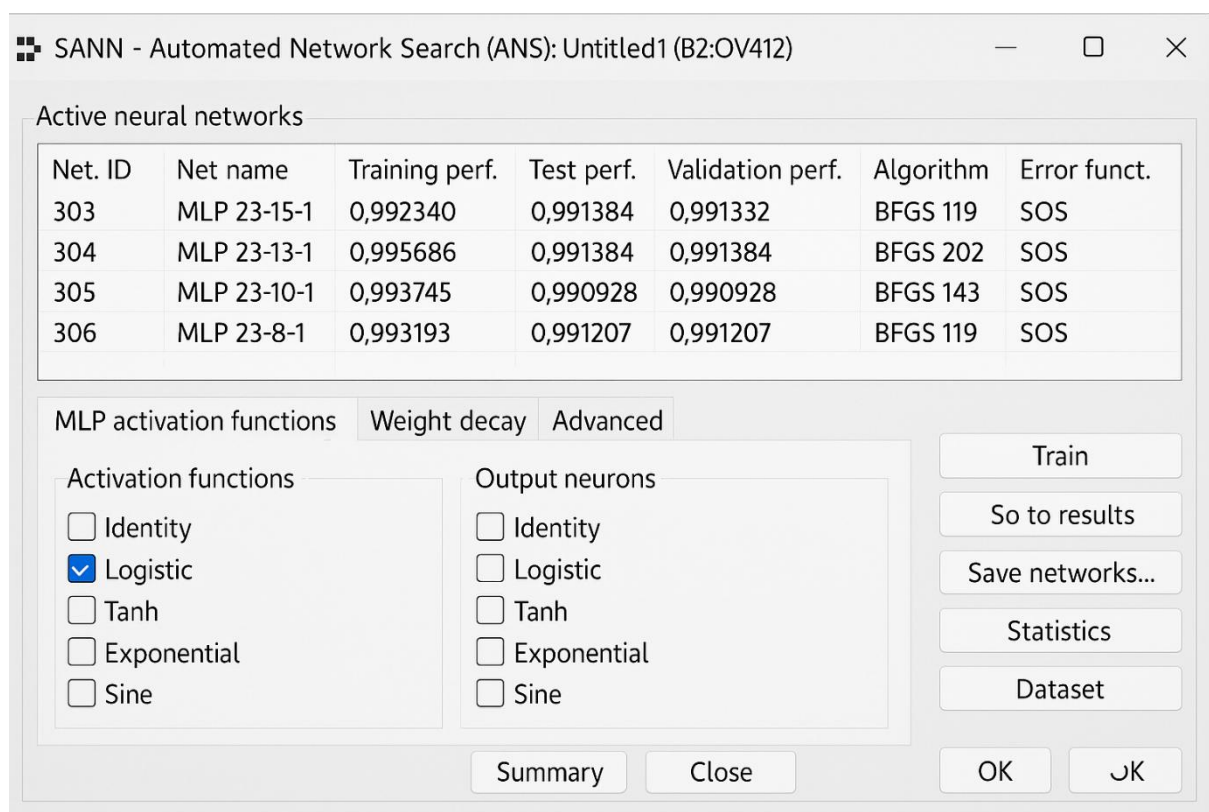


Figure III.5. Capture d'écran pour le choix des fonctions d'activation sur STATISTICA (STATISTICA, 2013).

III.3.5.2. Paramètres déterminants pour l'apprentissage et l'optimisation des modèles RQSP-SVR

Pour l'évaluation de la méthode PMC, celle-ci a été comparée à la méthode SVR. Le SVR a été choisi comme référence en raison de son efficacité reconnue pour la prédiction de variables continues, ainsi que de sa capacité à modéliser tant des relations linéaires que non linéaires.

- La validation croisée 5 fois ($CV = 5$) a été utilisée pour évaluer les performances du modèle sur des plages d'hyperparamètres prédéfinies.
- Les performances du modèle dépendent de plusieurs paramètres clés. Ces paramètres comprennent le facteur de régularisation (C), qui gère le compromis entre la maximisation de la marge et la minimisation des erreurs de classification, et ν , qui définit la marge d'erreur autour de la valeur prédite.
- Un autre facteur critique consiste à sélectionner le type de noyau approprié, tel que le polynôme, la sigmoïde ou la fonction de base radiale (**RBF**).
- Le paramètre gamma (γ) définit la plage d'influence d'un seul exemple d'apprentissage.
- Le noyau RBF est le choix préféré en raison de son équilibre entre la précision et la vitesse d'apprentissage

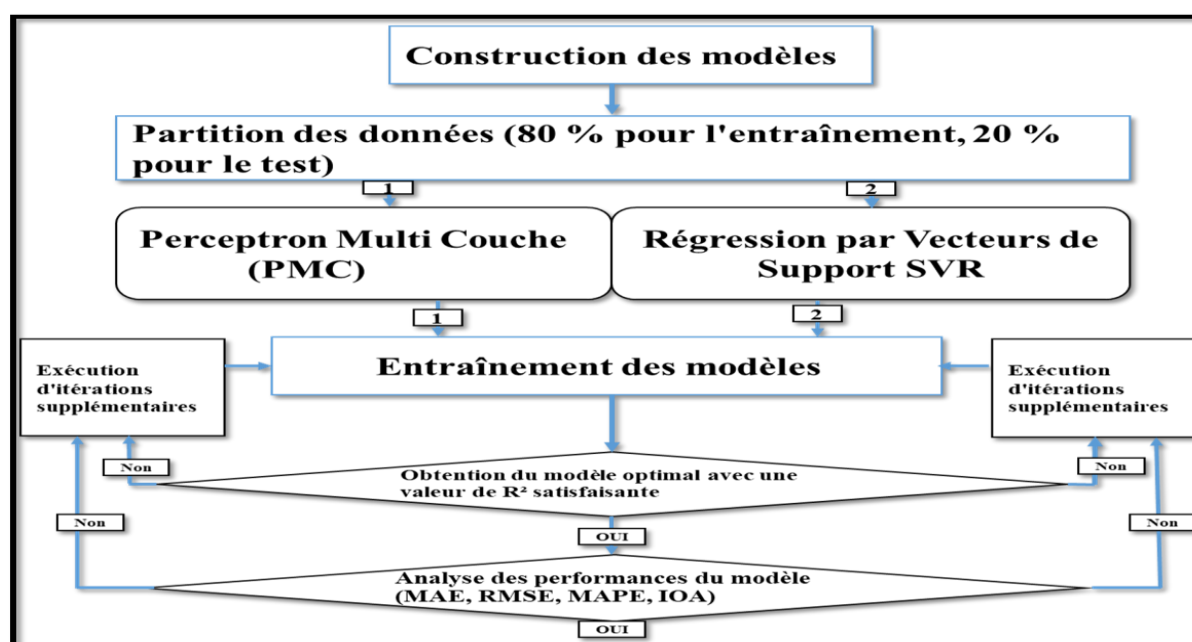


Figure III.6. Organigramme du PMC-ANN et du SVR résumant le processus de développement des modèles.

III.3.6. Évaluation de la performance des modèles RQSP-ARN optimaux

III.3.6.1. Analyses statistiques et calcul des erreurs

Cette étude a recours à des paramètres statistiques pour évaluer la performance des meilleurs modèles QSPR. Cinq indicateurs ont été analysés : le coefficient de corrélation R^2 , l'indice d'accord (IOA), l'erreur absolue moyenne (MAE), l'erreur quadratique moyenne (RMSE) et l'erreur absolue moyenne en pourcentage (MAPE). Le Tableau 4 présente un résumé des résultats analytiques, incluant les coefficients, les types d'erreurs et le nombre d'observations (N) pour les ensembles de formation et de test de chaque modèle. Les définitions mathématiques correspondantes sont fournies dans les équations (III.1) à (III.6).

$$\hat{y}^{ex} = \sum_{i=1}^N y_i^{ex} / N \quad (\text{III.1})$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i^{ex} - y_i^{cal})^2}{\sum_{i=1}^N (y_i^{ex} - \hat{y}^{ex})^2} \quad (\text{III.2})$$

$$\text{IOA} = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i^{cal} - y_i^{exp})^2}{\sum_{i=1}^N (|y_i^{ex} - \hat{y}^{ex}| + |y_i^{cal} - \hat{y}^{ex}|)^2} \quad (\text{III.3})$$

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} * \sum_{i=1}^N |y_i^{ex} - y_i^{cal}| \quad (\text{III.4})$$

$$\text{RMSE} = \sum_{i=1}^N (y_i^{ex} - y_i^{cal})^2 / N \quad (\text{III.5})$$

$$MAPE = \frac{100}{N} * (|(y_i^{ex} - y_i^{cal}) / y_i^{ex}|) \quad (III.6)$$

y^{ex} Représente la valeur observée ou expérimentale, y^{cal} Représente la valeur prédite où Calculée.

III.3.6.2. Domaine d'Applicabilité (AD)

Différentes approches sont utilisées pour délimiter le domaine d'applicabilité (DA), telles que la distribution de densité de probabilité, les méthodes géométriques, les méthodes d'étendue et les méthodes basées sur la distance. Les méthodes basées sur la distance sont parmi les plus utilisées, l'approche de l'effet de levier étant particulièrement préminente (Tropsha et al., 2003).

L'espace AD du modèle est défini comme une zone quadrillée dans la bande ± 3 pour les résidus standardisés. La boîte à outils créée par le Milano Chemometrics and QSAR Research Group a été utilisée dans ce travail pour vérifier le domaine d'applicabilité (AD) de nos modèles. (Sahigara et al., 2012, 2014), Les résultats du domaine d'applicabilité (AD) des modèles QSPR-MLP générés sont visibles dans le diagramme de Williams, qui illustre la relation entre les valeurs de levier calculées (h) et les résidus standardisés validés en croix sur l'axe Y. Les valeurs de levier des composés pour l'ensemble de la base de données, ainsi que les valeurs seuils de levier d'avertissement, sont également présentées. Ces mesures permettent d'identifier les composés influents et de détecter les points potentiellement atypiques dans l'ensemble des données.

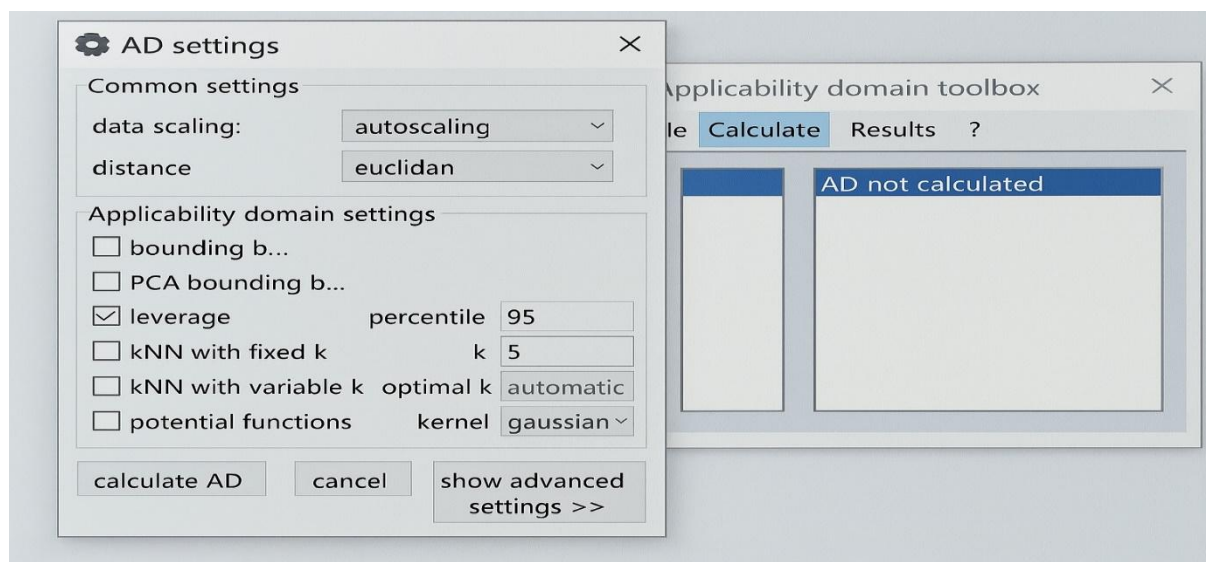


Figure III.7. Interface de la boîte à outils du Milano Chemometrics and QSAR Research Group utilisée pour l'évaluation du domaine d'applicabilité (DA).

Valeur est calculée à l'aide des équations suivantes :

$$h_i = X_i^t (X^t X)^{-1} X_i \quad (i = 1, \dots, n) \quad (III.7)$$

X_i^t . Est le vecteur de ligne du descripteur du composé considéré, X est la valeur des descripteurs d'apprentissage et n est le nombre de composés.

Le seuil de l'effet de levier h^* est déterminé selon la formule $h^* = 3(p + 1) / m$, où p représente le nombre total de descripteurs et m le nombre de composés. Le diagramme des composés de Williams dans cette étude illustre la relation entre les valeurs calculées de l'effet de levier (h)

III.3.6.4. Évaluation de la contribution des descripteurs dans chaque modèle de RQSP-RNA développé

L'analyse de sensibilité joue un rôle clé dans l'évaluation systématique des modèles mathématiques, notamment ceux de RQSP. Elle sert à valider le modèle, analyser le comportement des variables. Grâce à ce processus, nous pouvons identifier les facteurs d'entrée les plus influents et affiner la précision prédictive du modèle en mesurant leur contribution individuelle au modèle. Ainsi, son utilisation est indispensable pour les modèles des études RQSP/RQSA.

La procédure de partitionnement des poids de connexion pour déterminer l'importance relative des différentes variables d'entrée a été proposée pour la première fois par **Garson (David, 1991)** Puis reprise par **Goh**, cette méthode consiste à décomposer les poids de connexion entre la couche cachée et la sortie en composants associés à chaque neurone d'entrée (**Goh, 1995**).

Nous proposons une version simplifiée de cet algorithme qui donne des résultats identiques à ceux de la méthode initialement proposée :

Étape 1 : Calcul de Q_{ih} pour chaque neurone caché

Pour chaque neurone caché h , nous calculons la proportion de la valeur absolue du poids de connexion entre l'entrée et la couche cachée par rapport à la somme des valeurs absolues de tous les poids de connexion entre l'entrée et la couche cachée :

$$Q_{ih} = \frac{|W_{ih}|}{\sum_{i=1}^{n_i} |W_{ih}|} \quad (\text{III.8})$$

Où :

- W_{ih} Est le poids de connexion entre le neurone d'entrée i et le neurone caché h .
- n_i C'est le nombre total de neurones d'entrée.

Étape 2 : Calcul de l'importance relative (**RI**) de chaque neurone d'entrée

Pour chaque neurone d'entrée i , nous faisons la somme des Q_{ih} sur tous les neurones cachés, puis nous normalisons par la somme totale de tous les Q_{ih} sur toutes les entrées et les neurones cachés, avant de multiplier par 100 pour exprimer le résultat en pourcentage :

$$RI(\%)_i = \frac{\sum_{h=1}^{n_h} Q_{ih}}{\sum_{h=1}^{n_h} \sum_{i=1}^{n_i} Q_{ih}} \times 100 \quad (\text{III.9})$$

Où :

- $n_h C'$ C'est le nombre total de neurones cachés.

Cette méthode permet ainsi d'évaluer quantitativement la contribution relative de chaque variable d'entrée à la sortie du modèle.

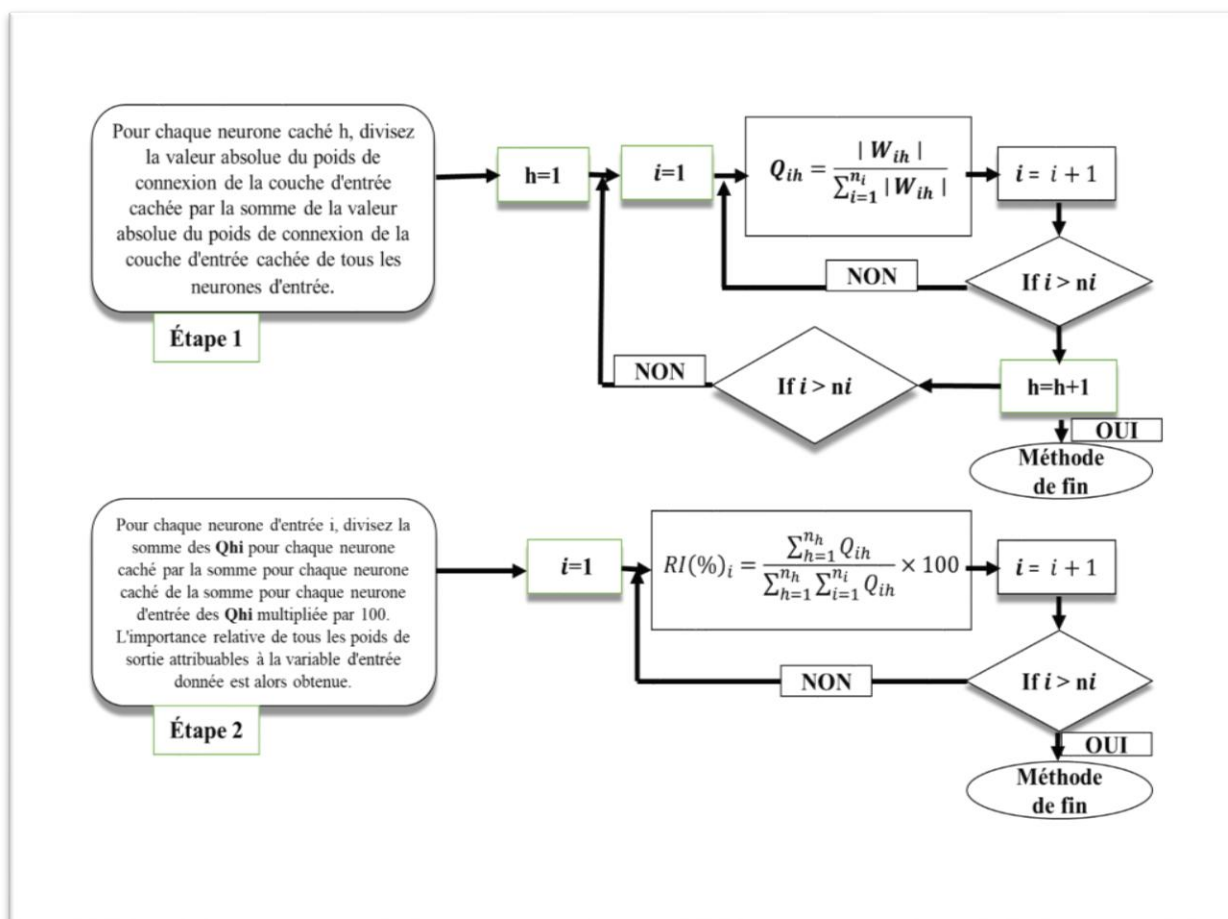


Figure IV.8. Performance de la méthode du bilan énergétique

III.4. L'état de l'art et la revue critique de la littérature sur la détermination des propriétés des composés organiques.

La température normale d'ébullition (T_b) et les propriétés critiques constituent des propriétés physico-chimiques fondamentales pour la caractérisation des substances chimiques, notamment des composés organiques purs. Sa prédiction fiable est cruciale dans de nombreux domaines industriels et scientifiques, tels que la conception de procédés chimiques, la formulation pharmaceutique et la modélisation environnementale. Cependant, la mesure expérimentale directe de la T_b peut s'avérer coûteuse, longue et parfois complexe, particulièrement pour les composés nouveaux ou peu étudiés (Zhou et al. 2017).

En réponse à la complexité croissante des systèmes pétroliers et au besoin de données fiables, de nombreux chercheurs ont entrepris des études visant à concevoir des méthodes capables d'évaluer diverses propriétés physico-chimiques et thermodynamiques des hydrocarbures purs

Chapitre III. Techniques matériels, l'état de l'art, et revue critique de la littérature sur la détermination des propriétés des composés organiques

ainsi que des fractions pétrolières. Ces travaux ont abouti à l'émergence de trois grandes catégories d'approches de modélisation :

1. **Les méthodes empiriques**, qui s'appuie essentiellement sur des jeux de données expérimentales ;
2. **Les corrélations physico-chimiques**, dont l'application requiert la connaissance préalable d'autres propriétés afin de calibrer les relations formulées ;
3. **Les méthodes de contribution de groupes**, fondées sur l'analyse des groupements fonctionnels constitutifs des molécules, permettent d'additionner les contributions individuelles pour prédire la propriété d'intérêt.

Dans cette optique, les modèles prédictifs basés sur les relations quantitatives structure-propriété (QSPR) constituent une approche prometteuse. Ces modèles utilisent des descripteurs moléculaires calculables à partir de la structure chimique des composés, permettant d'estimer de manière rapide et fiable des propriétés telles que la température d'ébullition, la pression critique (P_c) et d'autres constantes thermodynamiques essentielles.

Au fil des années, diverses approches d'apprentissage automatique et statistiques, telles que les réseaux de neurones artificiels (RNA), la régression par vecteurs de support (SVR) ou les méthodes de contribution de groupes, ont été développées et améliorées. Ces techniques Permettent aujourd'hui de construire des modèles robustes et généralisables, adaptés à un large éventail de composés.

Cette section fait le point sur les principales avancées dans la modélisation de la température normale d'ébullition et des propriétés thermodynamiques associées, en analysant les travaux majeurs qui ont contribué à l'évolution des méthodes QSPR au cours des quinze dernières années.

III.5. Travaux réalisés sur la modélisation de la température normale d'ébullition : État statistique des modèles de prédiction QSPR

Dans cette section de la revue bibliographique, nous examinons la littérature scientifique relative à l'application des relations quantitatives structure-propriété (QSPR) pour la prédiction des propriétés physico-chimiques, telles que la température d'ébullition (T_b), la pression critique (P_c) et l'enthalpie de vaporisation (ΔH_{vap}) des substances chimiques. La figure III.1 présente l'état statistique des références bibliographiques publiées au cours des quinze (15) dernières années dans différentes revues scientifiques indexées sur la plateforme Science Direct, notamment les études QSPR appliquées à divers domaines tels que les sciences des matériaux, les sciences de l'environnement, la biochimie et les sciences pharmaceutiques, avec un total de 4599 publications.

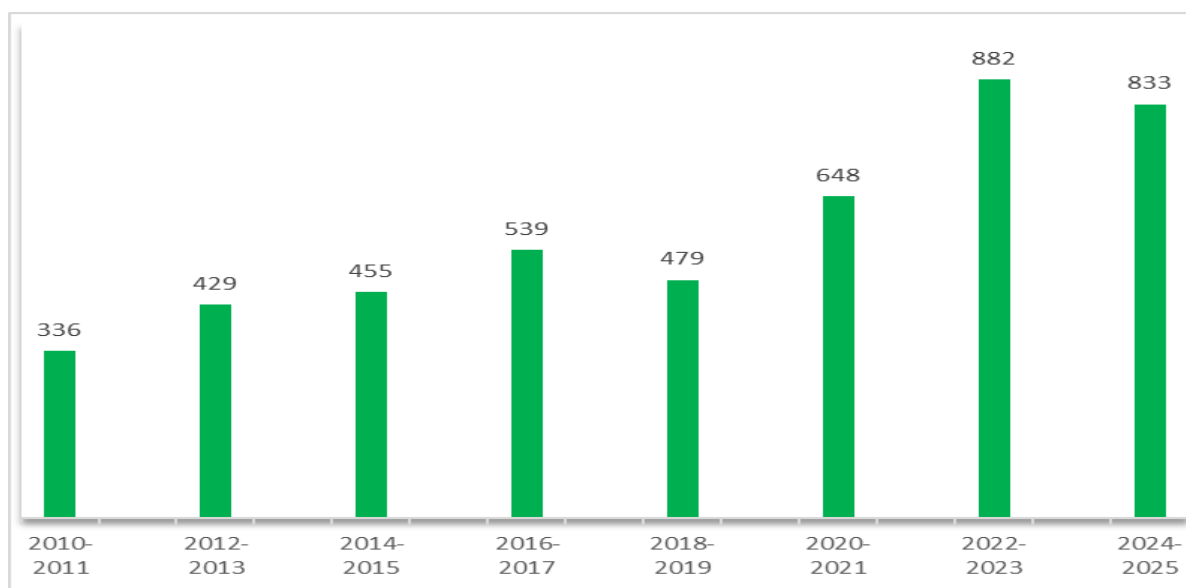


Figure III.9. Répartition du nombre de publications relatives aux études QSPR

Appliquées aux substances chimiques, recensées dans la base de données

Science Direct au cours des quinze (16) dernières années.

Le développement de modèles QSPR robustes, précis, stables et performants repose sur le choix d'une méthode d'apprentissage adaptée et efficace. Dans la présente étude, les réseaux de neurones artificiels (RNA) ont été utilisés et comparés à la régression par vecteurs de support (SVR). De nombreuses études antérieures ont également contribué à l'essor des approches QSPR-RNA et QSPR-SVR dans divers domaines scientifiques. La Figure III.9 présente l'évolution du nombre de publications consacrées à ces deux approches au cours des quinze (15) dernières années. La Figure III.10, quant à elle, indique que les méthodes basées sur les RNA totalisent 282 534 publications, tandis que les approches QSPR sont représentées dans 1 081 d'entre elles. En ce qui concerne les méthodes SVR, on dénombre 271 987 publications, dont 257 sont spécifiquement dédiées aux modèles QSPR-SVR.

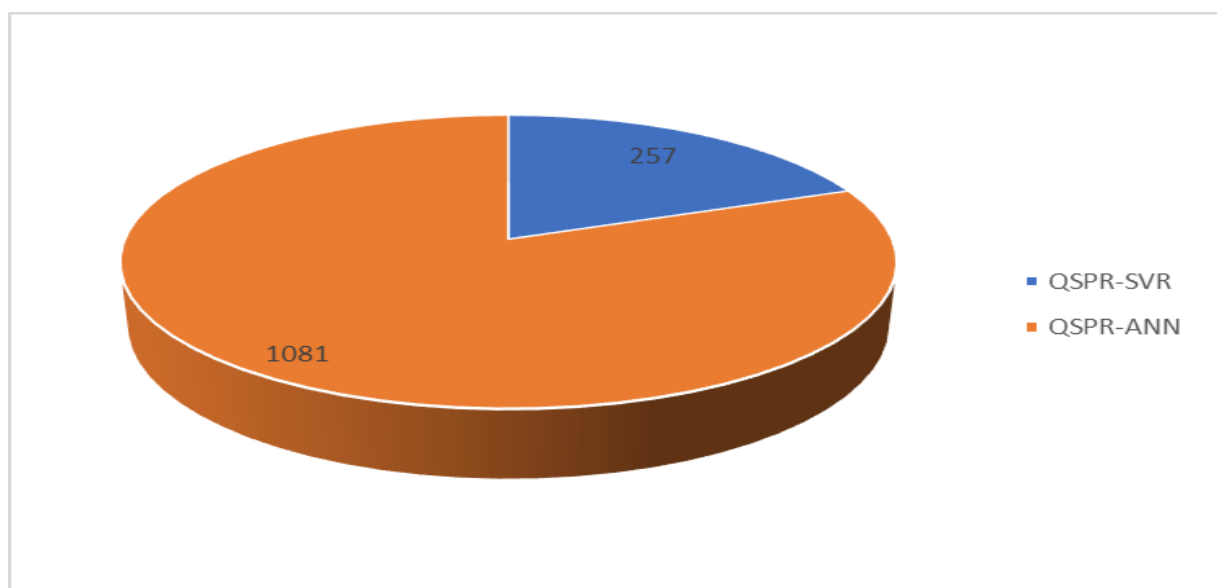


Figure III.10. Les statistiques des publications consacrées à ces deux approches QSPR-RNA et QSPR-SVR au cours des quinze (16) dernières années.

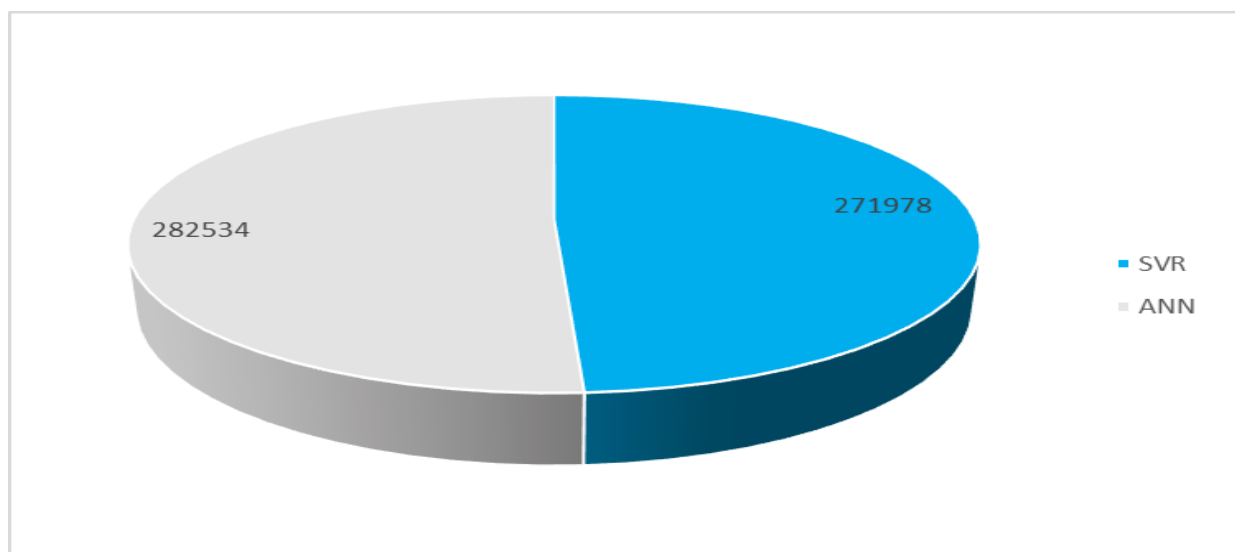


Figure III.11. Les statistiques des publications consacrées à ces deux approches RNA et SVR au cours des quinze (16) dernières années.

III.6. Travaux réalisés sur la modélisation des propriétés physico-chimiques (T_b, T_c, P_c, V_c).

En 2001, Espinosa et al. On conduit une étude QSPR dédiée à la prédiction de propriétés thermodynamiques fondamentales, à savoir la température d'ébullition (T_b), la température critique (T_c) et la pression critique (P_c), pour un ensemble de composés organiques purs. Deux

Chapitre III. Techniques matériels, l'état de l'art, et revue critique de la littérature sur la détermination des propriétés des composés organiques

approches basées sur les réseaux de neurones ont été développées dans ce cadre : la première reposait sur un réseau de type Fuzzy ARTMAP (Adaptive Resonance Theory Map floue), tandis que la seconde utilisait un réseau à rétropropagation classique (backpropagation neural network, bpNN). Les performances de ces modèles feront l'objet d'une analyse comparative approfondie dans le dernier chapitre de la présente thèse (Espinosa et al., 2001).

Dans une démarche similaire, Sola et al. (2008) ont mené une étude QSPR sur des composés organiques purs, visant également à prédire les propriétés thermodynamiques T_b , T_c et P_c . Cette étude reposait sur l'utilisation de la régression linéaire multiple (MLR) pour la modélisation (Sola et al., 2008).

En 2011, Gharagheizi et ses co-auteurs ont mené une étude QSPR pour prédire la température d'ébullition (T_b) de plusieurs familles de composés organiques à l'aide d'un réseau de neurones artificiels à propagation avant à trois couches (Gharagheizi et al., 2011).

En 2016, Jin et Bai ont développé des modèles basés sur la régression linéaire multiple (MLR) et des réseaux à fonctions de base radiale (RBFNN) non linéaires, pour prédire les températures d'ébullition (T_b) et critiques (T_c) de composés organiques contenant de l'oxygène (Jin and Bai, 2016).

En 2017, Varamesh et ses co-auteurs ont effectué une étude approfondie sur la modélisation des quatre propriétés (T_b , T_c , P_c et V_c) des composés organiques purs. Dans cette étude, une base de données a été utilisée pour développer quatre modèles distincts pour chaque propriété. Les modèles utilisés étaient :

- Un réseau de neurones multicouche (PMC-ANN)
- Un réseau à fonctions de base radiale (RBF-ANN)
- Une machine à vecteurs de support à moindres carrés (LSSVM)
- et un réseau GMDH (Group Method of Data Handling Neural Network). Ces modèles ne relèvent pas directement de l'approche QSPR classique, mais leurs performances seront comparées aux modèles QSPR développés dans cette thèse (Varamesh et al., 2017a, 2017b).

En 2018, Banchemo et Manna ont réalisé une étude importante portant sur la modélisation de la température critique (T_c) et de la pression critique (P_c) de différents composés organiques. Deux types de modèles QSPR ont été développés pour chaque propriété : l'un basé sur la régression linéaire multiple (MLR), l'autre sur un réseau à fonctions de base radiale (RBFNN) (Banchemo et Manna, 2018).

En 2019, Bouhedjar ont également développé des modèles pour la prédiction de la température critique (T_c) (Bouhedjar et al., 2019).

Plus récemment, en 2024, Haoren Niu et ses coauteurs ont proposé une étude sur la modélisation des propriétés thermodynamiques (T_b , T_c , P_c , V_c) des composés organiques purs, basée sur la régression linéaire multiple (MLR), intégrant également l'utilisation d'indices normés (Niu et al., 2024).

Les principaux résultats issus de ces modèles sont discutés et comparés dans le dernier chapitre de cette thèse.

III.7. Revue des travaux sur la prédiction des propriétés d'intérêts des réalisés par d'autres méthodologies

En 2005, Wang Zhen et ses collaborateurs ont proposé une méthode innovante fondée sur la technique dite Espace vectoriel de groupe composite (Composite Group Vector Space) (CGVS). Cette approche vise à représenter chaque composé comme un vecteur composite des contributions de groupes fonctionnels, en intégrant des relations vectorielles complexes entre ces groupes. À partir de cette représentation, des expressions mathématiques ont été établies pour prédire les constantes critiques fondamentales : température critique (**T_c**), pression critique (**P_c**) et volume critique (**V_c**). Les paramètres numériques associés ont été rigoureusement calibrés sur une base de données expérimentale représentative. Les performances étaient très prometteuses, avec des écarts relatifs moyens faibles (0,67 % pour **T_c**, 2,09 % pour **P_c**, 1,39 % pour **V_c**), ce qui marquait une nette amélioration par rapport aux modèles traditionnels purement additifs. Cette méthode a ouvert la voie à une meilleure prise en compte des interactions entre groupes au sein des molécules (Zhen et al., 2005).

En 2008, dans une perspective d'optimisation des paramètres, Souahi et Kaabeche ont recours aux algorithmes génétiques, techniques inspirées de la sélection naturelle, pour développer des modèles prédictifs adaptés aux composés organiques et aux fractions pétrolières. Ces modèles visaient à établir une fonction mathématique reliant les propriétés critiques à deux autres propriétés d'entrée : la température d'ébullition normale (**T_b**) et la densité relative des liquides, également appelée gravité spécifique (**SG**), à partir de la forme de fonction générale présentée dans l'équation ((III.10))

$$\Pi_c = \left(a \cdot T_b^b + c \cdot SG^d + e \cdot T_b^f \cdot SG^g \right) \cdot \exp \left(\frac{SG+h}{T_b+i} \right) \quad \text{(III.10)}$$

Où :

- Π_c Est la propriété critique à estimer (soit T_c , P_c , ou V_c)
- T_b : température d'ébullition normale (en K)
- SG : densité relative (*specific gravity*)
- $a, b, c, d, e, f, g, h, i$: constantes propres à chaque modèle

Modèle pour la température critique T_c :

$$T_c = \left(17,8443 \cdot T_b^{0,5965} \cdot SG^{0,2945} \right) \cdot \exp \left(\frac{SG}{T_b-100} \right) \quad \text{(III.11)}$$

Modèle pour la pression critique P_c :

$$P_c = (6,5243 \times 10^6 \cdot T_b^{-1,9781} \cdot SG^{1,8387}) \cdot \exp\left(\frac{SG}{T_b-250}\right) \quad (\text{III.12})$$

Modèle pour le volume critique V_c :

$$V_c = 0,0038 \cdot (T_b - 273,16)^2 + 0,9814 \cdot (T_b - 273,16) \cdot SG + 310,6783 \quad (\text{III.13})$$

Ils ont constitué une base de données de 109 composés variés comprenant des alcanes, alcènes, alcynes, composés aromatiques et naphthéniques, couvrant une large plage de chaînes carbonées (C6 à C30). La modélisation génétique a permis d'optimiser simultanément la sélection des groupes et leurs coefficients, réduisant considérablement les erreurs moyennes par rapport aux modèles existants : par exemple, l'erreur moyenne absolue (AAM) pour T_c est passée de 0,62 % à 0,35 %, pour P_c de 5,02 % à 2,72 %, et pour V_c de 2,08 % à 0,81 %. Cette étude a démontré l'efficacité des méthodes évolutionnaires pour affiner les modèles de contribution de groupes (Souahi et Kaabeche, 2008).

En 2016, une avancée majeure est intervenue avec l'introduction d'une méthode améliorée de contribution de groupes d'ordre deux, visant spécifiquement la prédiction de la température d'ébullition normale (T_b). Contrairement aux méthodes classiques qui se limitent aux contributions de groupes fonctionnels isolés (premier ordre), cette approche intègre aussi les effets de groupes voisins (second ordre), permettant ainsi de différencier les isomères structuraux et stéréo-isomères. L'étude s'appuyait sur un vaste ensemble de 2 036 points de données couvrant un large spectre de composés (1 à 36 carbones, masses molaires de 26 à 555 $\text{g} \cdot \text{mol}^{-1}$). L'optimisation des contributions a été réalisée via l'algorithme `fminsearch` sous MATLAB, qui permet une recherche efficace des minima locaux dans des espaces paramétriques complexes. Cette démarche a conduit à la sélection d'un total de 122 groupes fonctionnels, enrichissant considérablement la granularité des modèles et améliorant leur précision pour les composés organiques variés.

En 2019, Saba Tahami et ses collaborateurs ont proposé un modèle avancé de contribution de groupes pour l'estimation des constantes critiques des composés organiques, à savoir la température critique (T_c), la pression critique (P_c) et le volume critique (V_c). Leur approche se distingue des méthodes traditionnelles, notamment de celle de Joback et Reid, en intégrant une dimension supplémentaire : les interactions entre groupes.

Leur modèle est qualifié de modèle de contribution de groupes d'ordre deux, car il ne se limite pas aux effets individuels des groupes fonctionnels (ordre 1), mais prend également en compte les interactions binaires entre paires de groupes (ordre 2). Cette prise en compte permet de mieux représenter la complexité des structures moléculaires, notamment lorsque plusieurs groupes fonctionnels interagissent de manière significative à l'intérieur de la molécule (Tahami et al., 2019).

Les équations générales utilisées pour estimer les constantes critiques sont les suivantes :

➤ **Température critique (T_c)**

$$T_c = T_{c,0} + \sum_i n_i \cdot \Delta T_{c,i}^{(1)} + \sum_{i,j} n_i \cdot n_j \cdot \Delta T_{c,ij}^{(2)} \quad (\text{III.14})$$

➤ **Pression critique (P_c)**

$$P_c = P_{c,0} + \sum_i n_i \cdot \Delta P_{c,i}^{(1)} + \sum_{i,j} n_i \cdot n_j \cdot \Delta P_{c,ij}^{(2)} \quad (\text{III.15})$$

➤ **Volume critique (V_c)**

$$V_c = V_{c,0} + \sum_i n_i \cdot \Delta V_{c,i}^{(1)} + \sum_{i,j} n_i \cdot n_j \cdot \Delta V_{c,ij}^{(2)} \quad (\text{III.16})$$

Où:

- n_i Est le nombre d'occurrences du groupe fonctionnel i dans la molécule.
- $\Delta X_i^{(1)}$ Représente la contribution du groupe i à l'ordre 1.
- $\Delta X_{ij}^{(2)}$ Correspond à la contribution due à l'interaction entre les groupes i et j à l'ordre 2.
- X_0 (Avec $X = T_c, P_c, V_c$) C'est une constante de base dans chaque équation.

Afin d'évaluer la robustesse et la précision de leur approche, les auteurs ont bâti et testé leur modèle sur une base de données expérimentale très complète, comprenant 969 composés pour T_c , 715 pour P_c et 539 pour V_c . Les résultats ont montré une réduction significative des erreurs absolues moyennes par rapport à trois méthodes classiques, avec des valeurs de 1,12 %, 2,69 % et 2,67 % respectivement. Cette étude souligne la pertinence de la prise en compte des interactions entre groupes, même dans des ensembles de données chimiques étendus.

En 2024, plusieurs avancées majeures ont été rapportées dans deux études distinctes, portant sur l'évaluation et l'amélioration des méthodes de contribution de groupes :

- Dans une première étude comparative, plusieurs méthodes classiques ont été évaluées sur leur capacité à estimer la température d'ébullition normale et les propriétés critiques (T_c , P_c , V_c). La méthode dite « element and chemical bond 2 » a été identifiée comme la plus précise pour T_c (erreur moyenne relative de 2,98 %), tandis que la méthode Joback a mieux performé pour la prédiction de P_c (4,31 %) et V_c (4,83 %). Par ailleurs, Cette étude a innové en intégrant des groupes fonctionnels contenant du silicium dans la méthode de Constantinou–Gani, en utilisant une régression pour ajuster les contributions. La validation sur un ensemble indépendant de données a confirmé la robustesse et la pertinence du modèle modifié, avec des erreurs relatives moyennes de 3,08 % (T_b), 2,95 % (T_c), 3,37 % (V_c) et 2,45 % (P_c). Ces résultats élargissent le domaine d'application des méthodes de contribution de groupes aux composés organosiliciés, de plus en plus présents en chimie des matériaux et pharmaceutique.
- Une autre étude a développé un nouveau modèle prédictif basé sur l'approche de contribution de groupes par connectivité atomique (ACGC), combinant des facteurs de

forme moléculaire et des facteurs de connectivité atomique. Cette modélisation avancée permet une discrimination fine entre isomères, ce qui est crucial pour des prédictions précises. Le modèle a fait l'objet d'une validation rigoureuse, incluant des tests internes, externes et des tests d'Y-aléatorisations, garantissant l'absence de sur-apprentissage. Les performances étaient excellentes pour la température d'ébullition ($R^2 = 0,9767$; AARE = 1,70 %) et très satisfaisantes pour la température de fusion ($R^2 = 0,8423$; AARE = 8,73 %), démontrant l'efficacité et la fiabilité de cette approche innovante pour la prédiction de propriétés thermodynamiques essentielles (Groniewsky et Hégely, 2024).

III.8. Conclusion

Ce chapitre a présenté de manière détaillée les matériaux et les méthodes adoptés dans cette étude pour la modélisation des propriétés physico-chimiques des composés organiques. Les différentes étapes méthodologiques ont été décrites, par la constitution de la base de données, le calcul et le prétraitement des descripteurs moléculaires, ainsi que la sélection des variables les plus pertinentes. Le développement des modèles QSPR basés sur les réseaux de neurones artificiels et leur évaluation à l'aide de critères statistiques appropriés ont également été présentés. En outre, une analyse de sensibilité fondée sur les poids synaptiques ainsi qu'une étude du domaine d'applicabilité ont permis d'approfondir l'interprétation et la fiabilité des modèles obtenus. Enfin, une analyse critique de la littérature récente a été réalisée afin de situer ce travail dans le contexte des recherches existantes sur la modélisation des propriétés physico-chimiques et thermodynamiques des composés organiques.

\

Chapitre IV. Résultats et discussions

Chapitre IV. Résultats et discussions

IV.1. Introduction

Dans ce chapitre, je présenterai les résultats de la modélisation des propriétés physico-chimiques (**Tb**, **Tc**, **Pc** et **Vc**) obtenus à l'aide des modèles **RQSP-RNA**, puis je les comparerai à ceux des modèles **RQSP-SVR**.

Tout d'abord, le nombre de descripteurs sélectionnés pour chaque paramètre étudié a été analysé, suivi de la présentation des caractéristiques des descripteurs pertinents. Ensuite, les architectures des meilleurs modèles **RQSP-RNA** obtenus ont été examinées, ainsi que la détermination des paramètres clés du **RQSP-SVR**, notamment **C**, **v** et **γ** , pour chaque paramètre. Par la suite, l'application des expressions mathématiques associées à chaque modèle a été expliquée dans le cadre de la prédiction des cinq propriétés physico-chimiques. Ces descripteurs ont ensuite été utilisés comme données d'entrée pour identifier les meilleurs modèles, ceux-ci ayant été optimisés à travers plusieurs itérations afin d'atteindre la structure la plus performante. De plus, le calcul a été réalisé en utilisant la méthode **SVR** afin de confirmer la pertinence du choix du modèle **ANN-PMC**, reconnu pour sa flexibilité dans le traitement des données complexes. Enfin, les architectures des modèles optimaux ont été discutées, ainsi que l'application des expressions mathématiques obtenues pour chaque paramètre, tandis que la précision et la stabilité de ces modèles ont été évaluées à l'aide de critères d'analyse appropriés.

Les valeurs calculées ont été comparées aux valeurs expérimentales, suivies d'une analyse de sensibilité des descripteurs d'entrée de chaque modèle par la méthode des poids, permettant d'interpréter et de quantifier la contribution de chaque descripteur individuel aux modèles obtenus. Le domaine d'applicabilité a également été déterminé afin de mieux valider les modèles **RQSP-RNA** développés. Par ailleurs, des comparaisons de performance ont été réalisées entre les modèles **RQSP-RNA** de cette étude et d'autres modèles **RNA** et **RQSP** disponibles dans la littérature. Enfin, ce chapitre se conclut par une analyse et une interprétation globale des différents résultats obtenus.

IV.2. Caractéristiques des descripteurs pertinents sélectionnés

Après les étapes de sélection des descripteurs, j'ai obtenu les meilleurs descripteurs significatifs pour chaque paramètre, pour **Tb** et **Tc** **25** descripteur et pour **Pc** **24** descripteur et pour **Vc** **18**. Ces derniers seraient utilisés ensuite dans l'élaboration des modèles **RQSP-RNA** et **RQSP-SVR**. Les tableaux **IV.1**, **IV.2**, **IV.3** et **IV.4**, présentent les descripteurs sélectionnés pour **Tb**, **Tc**, **Pc** et **Vc**, respectivement. Chaque tableau fournit la valeur **p**, la classe des descripteurs, l'erreur standard (**Std**, **Er**) et la définition de chaque descripteur : **Tb**, **Tc**, **Pc** et **Vc**.

Chapitre IV. Résultats et discussions

Tableau IV.1. Caractéristiques des descripteurs sélectionnés à l'aide de l'analyse S-MLR pour Tb

Nom des descripteurs	Classe	St. Err	P-values
Sv	Descripteurs constitutionnels	0,8742	0
ncic	Descripteurs constitutionnels	5,0066	0
no	Descripteurs constitutionnels	3,1291	$8,0174 \cdot 10^{-5}$
SMTV	Descripteurs topologiques	$,074910^{-3}$	$8,0955 \cdot 10^{-4}$
Qindex	Descripteurs topologiques	0,9820	$2,7378 \cdot 10^{-9}$
Jhetv	Descripteurs topologiques	3,4873	0
Jhete	Descripteurs topologiques	2,6048	0
IC1	Indices d'information	4,5910	5,6621E-15
TIC1	Indices d'information	0,2610	1,7763E-15
ATS1m	Autocorrélations 2D	7,4698	$4,096 \cdot 10^{-5}$
ATS2m	Autocorrélations 2D	3,4986	$5,3377 \cdot 10^{-5}$
ATSm3m	Autocorrélations 2D	1,6773	$1,7191 \cdot 10^{-5}$
MATS1m	Autocorrélations 2D	3,0025	$9,9617 \cdot 10^{-6}$
MATS4m	Autocorrélations 2D	2,1305	$1,2589 \cdot 10^{-6}$
GGI4	Indices de charge topologies	7,3569	$2,8838 \cdot 10^{-7}$
RDF080	Descripteurs RDF	3,6950	$4,2196 \cdot 10^{-4}$
Mor15m	Descripteurs 3D-MoRSE	4,3674	$8,8106 \cdot 10^{-4}$
Mor 9m	Descripteurs 3D-MoRSE	7,5109	$1,1831 \cdot 10^{-7}$
Mor20m	Descripteurs 3D-MoRSE	6,8046	$1,0708 \cdot 10^{-3}$
E1s	Descripteurs WHIM	2,9914	6,1062E-15
R5u	Descripteurs GETAWAY	2,3552	$1,9429 \cdot 10^{-6}$
R2e	Descripteurs GETAWAY	3,2610	$5,3828 \cdot 10^{-3}$
HY	Facture hydrophile	2,5355	$1,5691 \cdot 10^{-7}$
TPSA(NO)	Propriétés moléculaires	$2,276510^{-1}$	0

Chapitre IV. Résultats et discussions

Tableau IV.2. Caractéristiques des descripteurs sélectionnés à l'aide de l'analyse S-MLR pour Tc

Nom des descripteurs	Classe	Std, Err	P-values
NCIC	Descripteurs constitutionnels	5,9133	$1,3270 \cdot 10^{-3}$
SMTIV	Descripteurs topologiques	0,00097	$5,3112 \cdot 10^{-4}$
Jhetv	Descripteurs topologiques	4,1491	0
Jhete	Descripteurs topologiques	5,0122	0
BLI	Descripteurs topologiques	3,2353	$3,3222 \cdot 10^{-5}$
X3sol	Indices de connectivité	2,9622	$1,8729 \cdot 10^{-12}$
IC1	Indices de connectivité	5,6317	0
TIC1	Indices de connectivité	0,3062	0
ATS1m	Autocorrélations 2D	6,7589	0
ATSm4m	Autocorrélations 2D	2,7252	$4,0110 \cdot 10^{-3}$
MATS4m	Autocorrélations 2D	4,6988	$3,5406 \cdot 10^{-10}$
GATS4m	Autocorrélations 2D	3,0961	$1,2895 \cdot 10^{-4}$
EEig01x	Indices d'adjacence des arêtes	5,7117	$4,7249 \cdot 10^{-5}$
EEig05x	Indices d'adjacence des arêtes	6,0351	$2,7191 \cdot 10^{-9}$
EEig05D	Indices d'adjacence des arêtes	4,0263	$1,1052 \cdot 10^{-4}$
Mor11u	Descripteurs 3D-MoRSE	2,5727	$9,9587e^{-14}$
Mor15m	Descripteurs 3D-MoRSE	5,5277	$1,6659 \cdot 10^{-10}$
Mor18m	Descripteurs 3D-MoRSE	8,4655	$2,4170 \cdot 10^{-3}$
Mor19m	Descripteurs 3D-MoRSE	11,8367	0
Mor20m	Descripteurs 3D-MoRSE	11,7717	$6,2731 \cdot 10^{-6}$
E1s	Descripteurs WHIM	3,7130	$1,7252 \cdot 10^{-13}$
R4u	Descripteurs GETAWAY	2,7828	$6,5949 \cdot 10^{-5}$
R2e	Descripteurs GETAWAY	4,0065	$3,0248 \cdot 10^{-4}$
TPSA(NO)	Propriétés moléculaires	0,1335	0
H-047	fragments centrés sur l'atome	0,8082	$1,1896 \cdot 10^{-5}$

Chapitre IV. Résultats et discussions

Tableau IV.3. Caractéristiques des descripteurs sélectionnés à l'aide de l'analyse S-MLR pour Pc

Nom de descripteurs	Classe	Std, Err	P-values
RBN	Descripteurs constitutionnels	23,3780	0
nO	Descripteurs constitutionnels	51,2558	0
TI1	Descripteurs topologiques	3,1773	0
Lop	Descripteurs topologiques	79,1375	$1,718 \cdot 10^{-5}$
X3sol	Indices de connectivité	37,2783	$3,391 \cdot 10^{-5}$
IDDE	Indices d'information	39,6432	$4271 \cdot 10^{-4}$
Vindex	Indices d'information	41,6325	$1,173 \cdot 10^{-3}$
ATS1m	Autocorrélations 2D	144,7559	$3,3306e^{-16}$
ATS3m	Autocorrélations 2D	64,0687	0
ATS2m	Autocorrélations 2D	35,3908	0
ATS5m	Autocorrélations 2D	32,4756	$3,00009 \cdot 10^{-6}$
ESpm03u	Indices d'adjacence des arêtes	23,9366	$4,54473 \cdot 10^{-3}$
ESpm01d	Indices d'adjacence des arêtes	24,3883	$5,0071e^{-14}$
EEig07d	Indices d'adjacence des arêtes	49,9042	$2,4494 \cdot 10^{-8}$
BELm2	BCUT descripteurs	88,9881	$7,2524 \cdot 10^{-5}$
RDF055v	Descripteurs RDF	23,8422	$4,1709 \cdot 10^{-3}$
Mor09u	Descripteurs 3D-MoRSE	36,1324	$8,01368 \cdot 10^{-7}$
E1s	Descripteurs WHIM	59,0009	$13101 \cdot 10^{-4}$
HATS0u	Descripteurs GETAWAY	81,2908	$3,7383 \cdot 10^{-12}$
R2e	Descripteurs GETAWAY	3,0200	$4,0996 \cdot 10^{-4}$
H0m	Descripteurs GETAWAY	50,7118	0
Hy	Facteur hydrophobique	46,1662	0
TPSA(NO)	Propriétés moléculaires	3,9769	$4,0813 \cdot 10^{-6}$
MLOGP	Propriétés moléculaires	33,2775	0

Chapitre IV. Résultats et discussions

Tableau IV.4. Caractéristiques des descripteurs sélectionnés à l'aide de l'analyse S-MLR pour Vc

Nom de descripteurs	Classe	Std, Err	P-values
Sv	Descripteurs constitutionnels	0,8229	0
Ncic	Descripteurs constitutionnels	4,4300	4,8966. 10 ⁻⁹
RBN	Descripteurs constitutionnels	1,1587	1,6701. 10 ⁻⁴
nO	Descripteurs Topologique	1,1587	1,6701. 10 ⁻⁴
Wap	Descripteurs topologiques	0,00290	9,8334. 10 ⁻⁹
TI1	Descripteurs topologiques	0,1663	0
RDF045u	Descripteurs RDF	0,2842	1,7068. 10 ⁻⁶
RDF040m	Descripteurs RDF	0,3993	4,6657. 10 ⁻⁶
EEig06d	Indices d'adjacence des arêtes	1,1246	7,3075. 10 ⁻⁶
EEig08d	Indices d'adjacence des arêtes	1,1757	1,2748. 10 ⁻⁵
Mor25u	Descripteurs 3D-MoRSE	3,0970	9,1091.10 ⁻⁷
GATS4m	Autocorrélations 2D	0,9275	1,3397. 10 ⁻³
ESpm01d	Indices d'adjacence des arêtes	1,0492	1,35302. 10 ⁻⁷
H1m	Autocorrélations 2D	3,3361	2,431188 10 ⁻¹¹
J3D	Autocorrélations 2D	1,1060	0
H0v	Descripteurs GETAWAY	2,1016	6,0935. 10 ⁻⁹
nCp	Propriétés moléculaires	1,1113	300. 10 ⁻⁸
MLOGP	Propriétés moléculaires	1,1059	1,0274. 10 ⁻⁵

Chapitre IV. Résultats et discussions

IV.3. Architectures des meilleurs modèles RQSP-RNA obtenus

Une fois les données collectées, les valeurs calculées et les descripteurs optimaux sélectionnés, l'accent est mis sur l'optimisation de l'efficacité de la structure de la couche cachée du réseau, du nombre optimal de neurones de ladite couche et du type de fonction d'activation jouant un rôle crucial dans l'obtention de la meilleure architecture pour les modèles MLP-ANN. L'évaluation s'est principalement appuyée sur le facteur d'ajustement R^2 , visant à obtenir un $R^2 \approx 1$. Différentes configurations de neurones dans la couche cachée ont été testées et l'architecture présentant la plus grande précision prédictive a été identifiée,

Comme indiqué dans le Tableau IV.8 ci-après, les architectures optimales retenues sont les suivantes : (25-17-1) pour la prédiction de T_b , (25-14-1) pour T_c , (24-16-1) pour P_c et (18-10-1) pour V_c .

Le modèle de réseau neuronal élaboré pour la prédiction de T_b est constitué de 25 nœuds d'entrée ($X_i = 1, \dots, 25$) et 17 nœuds dans la couche cachée. De manière analogue, le modèle destiné à la prédiction de T_c comporte 25 nœuds d'entrée et 14 nœuds cachés. Le modèle de P_c est composé de 24 nœuds d'entrée, 16 nœuds cachés, tandis que celui de V_c comprend 18 nœuds d'entrée, 10 nœuds cachés. Dans l'ensemble des cas, l'architecture inclut un nœud de sortie unique Y .

À la suite d'une phase d'optimisation rigoureuse, les fonctions de transfert les plus performantes ont été identifiées pour chaque modèle :

- **Pour T_b** : la fonction **tangente hyperbolique (tanh)** dans la couche cachée et la fonction **identité** dans la couche de sortie ;
- **Pour T_c** : la fonction **tangente hyperbolique (tanh)** dans la couche cachée et la fonction **logistique** dans la couche de sortie ;
- **Pour P_c** : la fonction **exponentielle** dans la couche cachée et la fonction **identité** dans la couche de sortie ;
- **Pour V_c** : la fonction **tangente hyperbolique (tanh)** dans la couche cachée et la fonction **logistique** dans la couche de sortie

Tableau IV.5. Structures des meilleurs modèles QSPR-RNA obtenus pour chaque paramètre.

Paramètres	Entrée	Couche cachée	Fonction d'activation pour la couche cachée	Fonction d'activation pour la couche de sortie	Valeurs d'ajustement R^2
T_b	25	17	Tanh	Identité	0,9974
T_c	25	14	Tanh	Logistique	0,9935
P_c	24	16	Exponentiel	Identité	0,9907
V_c	18	10	Tanh	Logistique	0,9982

IV.4. Application des expressions mathématiques des modèles RQSP-RNA obtenus

Comme illustré dans la Figure IV.1, les neurones d'entrée (X_i) transmettent leurs signaux à l'ensemble des neurones de la couche cachée. Chaque neurone de cette couche applique une fonction de transfert aux signaux reçus avant de transmettre le résultat. Le neurone de la couche de sortie agrège ensuite les contributions de la couche cachée afin de produire la réponse globale du réseau (Y).

L'équation (IV.1) définit le signal de sortie de chaque neurone caché (Z_i) pour le modèle de la température d'ébullition (T_b), tandis que les équations (IV.3), (IV.5) et (IV.7) correspondent respectivement aux modèles de la température critique (T_c), de la pression critique (P_c) et du volume critique (V_c). Dans ces équations, j varie de 1 à 17 pour le modèle T_b , de 1 à 14 pour le modèle T_c , de 1 à 16 pour le modèle P_c et de 1 à 10 pour le modèle V_c . La réponse du réseau (Y) est donnée par les équations (IV.2) pour T_b , (IV.4) pour T_c , (IV.6) pour P_c et (IV.8) pour V_c .

$$Z_j = f^H \left[\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h \right] = \frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right)} \quad (\text{IV.1})$$

$$Y = f^H \left[\sum_{i=1}^{17} w_{ij} Z_j + b_1^0 \right] = \frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{17} w_{ij} Z_j + b_1^0\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{17} w_{ij} Z_j + b_1^0\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{17} w_{ij} Z_j + b_1^0\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{17} w_{ij} Z_j + b_1^0\right)} \quad (\text{IV.2})$$

$$Z_j = f^H \left[\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h \right] = \frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right)} \quad (\text{IV.2})$$

$$Y = f^H \left[\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0 \right] = \frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0\right)} \quad (\text{IV.4})$$

$$Z_j = f^H \left[\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h \right] = \frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right)} \quad (\text{IV.5})$$

$$Y = f^H \left[\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0 \right] = \frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0\right)} \quad (\text{IV.6})$$

$$Z_j = f^H \left[\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h \right] = \frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{25} w_{ij} X_i + b_j^h\right)} \quad (\text{IV.7})$$

$$Y = f^H \left[\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0 \right] = \frac{\exp\left(\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0\right) - \exp\left(-\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0\right)}{\exp\left(\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0\right) + \exp\left(-\sum_{i=1}^{21} w_{ij} Z_j + b_1^0\right)} \quad (\text{IV.8})$$

Chapitre IV. Résultats et discussions

La fonction d'activation de la couche de sortie, notée F , assure la connexion entre la couche cachée et la couche de sortie. La sortie du réseau Y regroupe les propriétés prédites : température d'ébullition (T_b), température critique (T_c), pression critique (P_c) et volume critique (V_c). Les signaux de sortie des neurones de la couche cachée sont notés Z_j . Les poids reliant la couche d'entrée à la couche cachée sont désignés w_{ij} , tandis que ceux reliant la couche cachée à la couche de sortie sont notés w_i . Les neurones d'entrée sont représentés par X_i , et les biais appliqués aux neurones de la couche cachée sont notés b_j^h , tandis que le biais de la couche de sortie est b_1^0 .

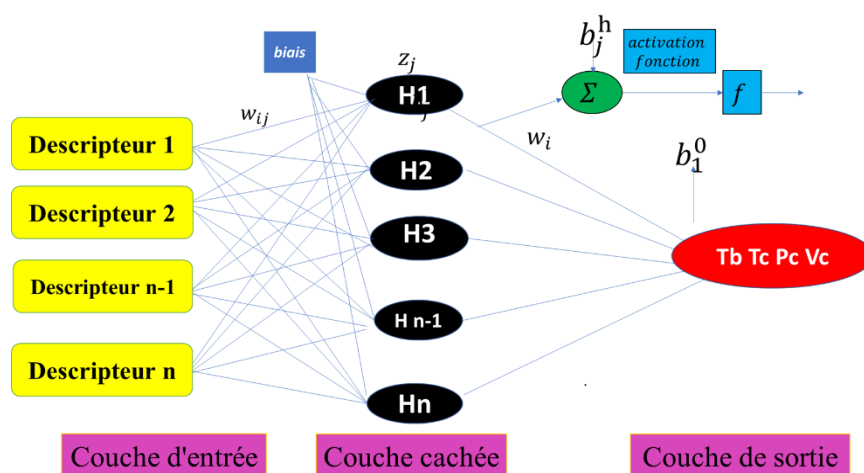


Figure IV.1. Représentation schématique d'un réseau du modèle de type RQSP-RNA,

Dans cette étude, les modèles de réseaux neuronaux artificiels de relations quantitatives structure-propriété (RQSP-ANN) ont été développés afin d'estimer les paramètres thermodynamiques des composés organiques, à savoir la température d'ébullition (T_b), la température critique (T_c), la pression critique (P_c) et le volume critique (V_c). Les équations (IV.2), (IV.4), (IV.6), (IV.8) sont utilisées pour calculer T_b , T_c , P_c et V_c , respectivement. Les descripteurs d'entrée idéaux sont introduits dans le modèle correspondant de RQSP en suivant l'ordre présenté dans les tableaux A1, A2, A3 et A4. Les résultats obtenus pour T_b , T_c , P_c et V_c dans l'annexe A. En outre, les valeurs de poids et de biais pour les connexions dans les couches cachées et de sortie de chaque modèle sont consignées dans les tableaux Annexes C1, C2, C3, C4 pour les modèles T_b , T_c , P_c et V_c .

IV.5. Construction modèles RQSP-SVR obtenus

Les performances des modèles **PMC-ANN** sont rigoureusement évaluées par rapport à la méthode de régression vectorielle de support (**SVR**). La **SVR** a été choisie pour la comparaison en raison de son efficacité reconnue dans la prédiction de variables continues et de sa capacité à traiter des données linéaires et non linéaires.

Dans la démarche d'apprentissage, une validation croisée à cinq itérations (**CV=5**) a été employée pour évaluer les performances du modèle, en utilisant des plages d'hyperparamètres

Chapitre IV. Résultats et discussions

prédéfinies. La procédure d'optimisation a été conçue pour améliorer la détermination du facteur R^2 .

Le modèle SVR utilise un noyau de fonction à base radiale (RBF) pour la prédiction de Tb. Comme le montre le **tableau IV.5**, les hyperparamètres clés du modèle comprennent : une constante de régularisation ($C = 100$), un paramètre de largeur du noyau gaussien ($\gamma = 0,6$) et une fonction d'insensibilité ($\nu = 0,6$). Cette configuration a été utilisée pour prédire les valeurs de Tb de 417 composés.

Pour le modèle Tc, le noyau RBF a également été appliqué, mais avec des hyperparamètres légèrement ajustés : $C = 10$, $\gamma = 0,5$ et $\nu = 0,5$. Ce modèle a servi à prédire les valeurs de Tc de 412 composés.

Concernant le modèle Pc, le noyau RBF a aussi été utilisé, avec les paramètres suivants : $C = 500$, $\gamma = 0,6$ et $\nu = 0,6$. Ce modèle a permis de prédire les valeurs de Pc de 411 composés.

Enfin, pour le modèle Vc, le noyau RBF a également été appliqué avec des paramètres ajustés : $C = 100$, $\gamma = 0,6$ et $\nu = 0,3$. Ce modèle a été utilisé pour prédire les valeurs de Vc de 418 composés.

Les modèles SVR, pour leur part, s'appuient sur le noyau RBF pour identifier une fonction de régression $f(\mathbf{x})$ qui permet de décrire de manière adéquate la connexion entre l'ensemble de données d'entrée donné, $f(\mathbf{x})$ représente la sortie \mathbf{Y} , où \mathbf{w} désigne le vecteur de poids de la fonction, \mathbf{b} correspond au facteur de décalage et ϕ est le mappage non linéaire,

$$\mathbf{Y} = \mathbf{w}\phi(\mathbf{x}_i) + \mathbf{b} \quad (\text{IV.9})$$

\mathbf{w} : Il s'agit du vecteur de poids dans le modèle SVR. Dans les modèles linéaires traditionnels, le calcul des poids est direct. Dans le SVR utilisant le noyau RBF, le calcul est plus complexe et est influencé par les multiplicateurs de Lagrange, qui indiquent l'impact des vecteurs de support dans le modèle,

Φ : est la fonction de transformation qui mappe les données d'entrée dans un espace de dimension supérieure à l'aide du noyau RBF,

\mathbf{B} : Il s'agit du biais ou de l'intercept ajouté à la prédiction. Il est essentiel d'ajuster le modèle pour obtenir des prédictions précises basées sur les données d'entrée.

Les modèles RQSP-SVR produisent des résultats médians pour toutes les phases (formation, test et ensemble de données). Le **Tableau IV.8** présente les valeurs de régression, Les données supplémentaires présentent toutes les valeurs prédites sur les tableaux **Annexe C (C5, C6, C7 et C8)** documentent les valeurs de poids, de biais et de vecteur de support de chaque modèle.

IV.6. Prédiction des propriétés physicochimiques des composés organiques par les modèles RQSP-RNA

Afin d'estimer les propriétés physicochimiques des composés organiques Tb, Tc, Pc et Vc pour RQSP-RNA, il convient d'appliquer les équations (**Eq(IV.2)**, **Eq(IV.4)**, **Eq(IV.6)** et **Eq(IV.8)**) en introduisant les valeurs des entrées \mathbf{X}_i . Ces dernières correspondent aux valeurs des descripteurs pertinents choisis pour chaque paramètre. Veuillez-vous référer aux tableaux A1 à A4 de l'annexe A pour le classement de ces descripteurs, du premier au dernier.

Chapitre IV. Résultats et discussions

Afin d'estimer les propriétés physicochimiques des composés organiques Tb, Tc, Pc et Vc pour **RQSP-SVR**, il convient d'appliquer les équations (**Eq (IV,9)**) en introduisant les valeurs des entrées **X_i**. Ces dernières correspondent aux valeurs des descripteurs pertinents choisis pour chaque paramètre. Veuillez-vous référer aux **tableaux A5 à A8** de l'**annexe A** pour le classement de ces descripteurs, du premier au dernier.

- **Pour le modèle de Tb** : Sv, ncic, no, SMTIV, Qindex, Jhetv, Jhete, IC1, TIC1, ATS1m, ATS2m, ATSm3m, MATS1m, MATS4m, MATS6m, GG14, RDF080, Mor15m, Mor9m, Mor20m, E1s, R5u, R2e, HY, TPSA(NO).
- **Pour le modèle de Tc** : NCIC, SMTIV, Jhetv, Jhete, BLI, X3sol, IC1, TIC1, ATS1m, ATSm4m, MATS4m, GATS4m, EEig01x, EEig05x, EEig05D, Mor11u, Mor15m, Mor18m, Mor19m, Mor20m, E1s, R4u, R2e, TPSA(NO), H-047.
- **Pour le modèle de Pc** : RBN, nO, TI1, Lop, X3sol, IDDE, Vindex, ATS1m, ATS2m, ATS5m, ESpm03u, ESpm01d, EEig07d, BELm2, RDF055v, Mor09u, E1s, HATS0u, HATS3m, R2e, Hy, TPSA(NO), MLOGP.
- **Pour le modèle de Vc** : Sv, nCIC, RBN, nO, Wap, TI1, RDF045u, RDF040m, EEig06d, EEig08d, Mor25u, GATS4m, ESpm01d, H1m, J3D, H0v, nCp, MLOGP.

En plus de l'utilisation des **pooids** et des **biais** associés aux connexions entre la couche cachée et la couche de sortie, les valeurs correspondantes sont présentées dans **les tableaux C1 à C4** de l'**annexe C** pour les modèles **RQSP-ANN**, et dans **les tableaux C5 à C8** de la même annexe pour les modèles **RQSP-SVR**.

Tableau IV.6. Paramètres des meilleurs modèles SVR.

Paramètres	Entrée	Fonction d'insensibilité (v)	Facteur de régularisation (C)	Paramètre de largeur du noyau (γ)	Valeurs d'ajustement R ²
Tb	25	0,6	100	0,6	0,9922
Tc	25	0,5	10	0,5	0,9834
Pc	24	0,6	500	0,6	0,9806
Vc	18	0,3	100	0,6	0,9964

IV.6.1. Comparaison graphique entre les valeurs expérimentales et les valeurs calculées à partir des modèles RQSP-RNA Les écarts entre les valeurs observées et calculées de Tb, Tc, Pc et Vc, obtenus à partir des modèles PMC-ANN développés pour les ensembles de données d'apprentissage et de test, sont présentés dans les Figures IV.2, IV.3, IV.4 et IV.5 pour Tb, Tc, Pc et Vc, respectivement.

Chapitre IV. Résultats et discussions

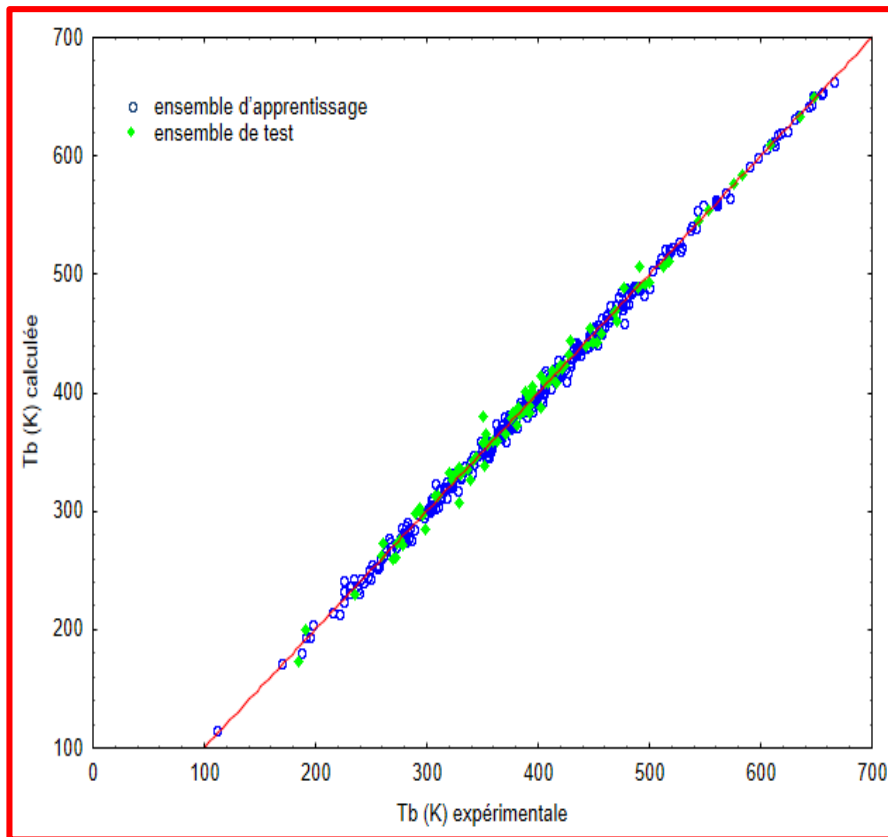


Figure IV.2. Comparaison entre la température critique observée et prédite (T_b) pour les ensembles de données de formation et de test.

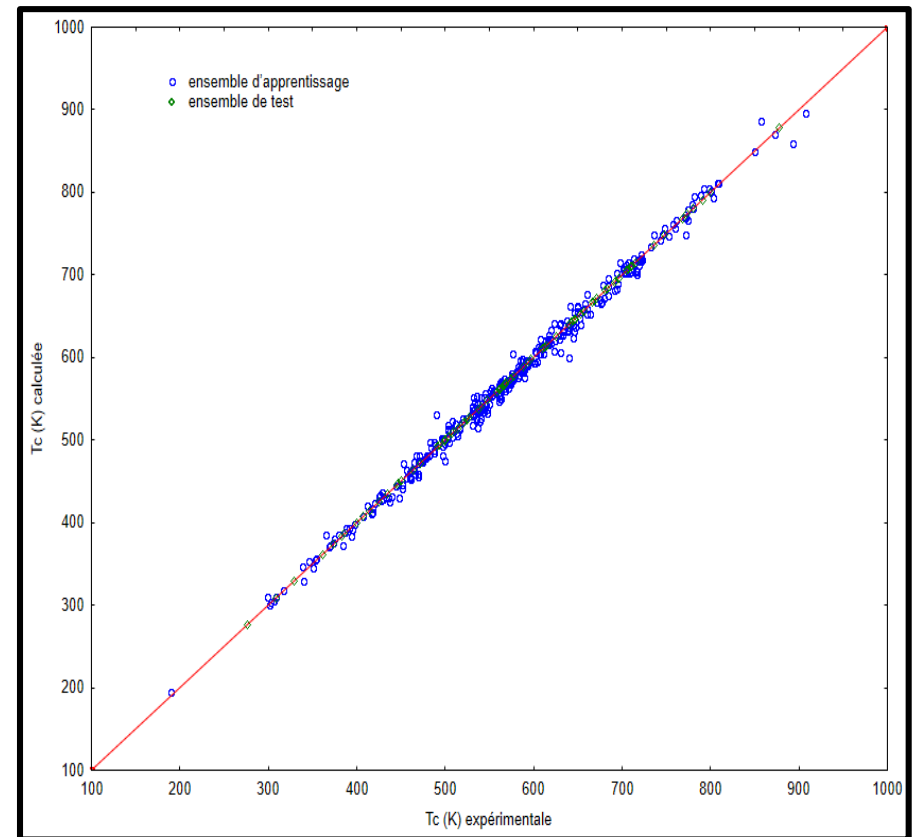


Figure IV.3. Comparaison entre la température critique observée et prédite (T_c) pour les ensembles de données de formation et de test.

Chapitre IV. Résultats et discussions

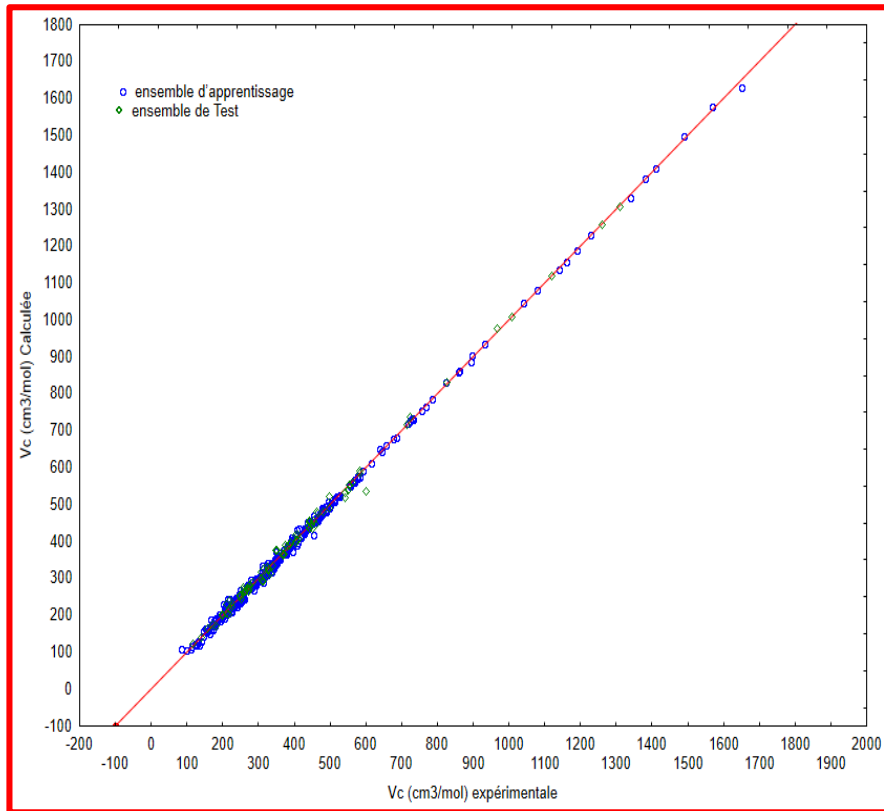


Figure IV.4. Comparaison entre la température critique observée et prédite (P_c) pour les ensembles de données de formation et de test.

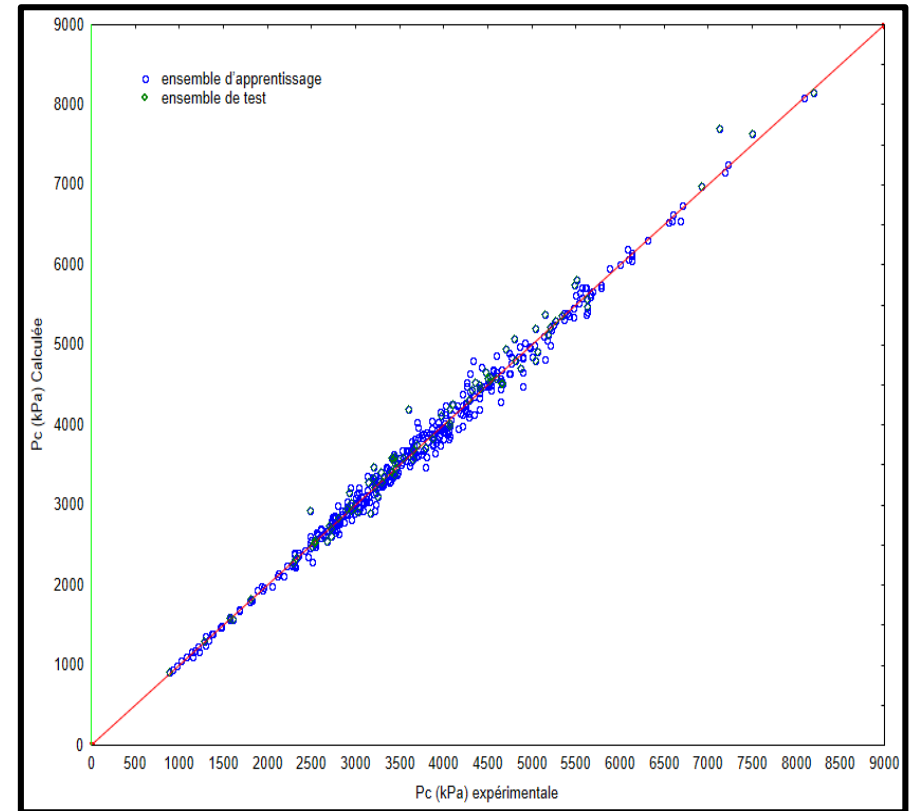


Figure IV.5. Comparaison entre la température critique observée et prédite (V_c) pour les ensembles de données de formation et de test.

Les modèles RQSP-ANN-PMC donnent des résultats optimaux, confirmés par la régression relative élevée avec une pente et un coefficient de détermination $R^2 \approx 1$ proches de l'unité pour toutes les phases. Tous les résultats sont présentés dans le Tableau IV.7.

IV.6.2. Calculs des paramètres de performance et analyse statistique des modèles de type RQSP-RNA obtenus

Cette étude a utilisé des paramètres statistiques pour évaluer l'efficacité des meilleurs modèles RQSP. Quatre types ont été analysés : le coefficient de corrélation (R^2), l'indice d'accord (IOA), l'erreur absolue moyenne (MAE), l'erreur quadratique moyenne (RMSE) et l'erreur absolue moyenne en pourcentage (MAPE), des types d'erreurs et du nombre d'ensembles de données (N) pour la formation et le test de chaque modèle.

Les principaux paramètres statistiques et les résultats des tests de validation du modèle sont présentés dans le Tableau IV.7 pour RQSP-ANN, et dans le Tableau IV.8 pour RQSP-SVR.

Le coefficient de détermination (R^2) a dépassé 0,9974 pour Tb, 0,9935 pour Tc, 0,9907 pour Pc et 0,9982 pour Vc. Ces valeurs de régression élevées indiquent que le modèle explique 99,74% de la variabilité de Tb, 99,35% de Tc et de Pc 99,07%, et 99,82% de Vc, ce qui démontre une forte concordance entre les valeurs observées et prédites. Cette constatation est encore corroborée par l'indice de concordance (IOA), qui a atteint des valeurs de 0,9992 pour Tb, 0,9982 pour Tc, 0,9996 pour Pc et 0,9998 pour Vc. Les faibles taux d'erreur renforcent encore la fiabilité et la précision prédictive du modèle. Plus précisément, les valeurs RMSE étaient de 4,9321 K pour Tb, 9,5482 K pour Tc, 122,5690 pour Pc et 9,4734 pour Vc. Les valeurs MAE étaient de 3,6331 K pour Tb, 7,0545 K pour Tc, 87,5193 pour Pc et 6,3173 pour Vc.

En outre, le MAPE souligne la précision du modèle en termes relatifs, avec des valeurs de 1,0165%, 1,0436%, 2,4352% et 2,3525% pour Tb, Tc, Pc et Vc, respectivement. Les valeurs de MAPE soulignent la grande précision prédictive du modèle, un MAPE inférieur à 3% étant généralement considéré comme excellent. En outre, comme le montre le Tableau IV.8, les résultats s'alignent étroitement sur ceux obtenus dans les deux autres phases (ensembles d'apprentissages et de test). Cette cohérence confirme l'existence d'un compromis équilibré entre l'ajustement insuffisant et l'ajustement excessif, ce qui démontre la stabilité et la généralisation du modèle (Hawkins, 2004). Ces résultats valident en outre l'efficacité et la précision des modèles PMC-ANN développés.

En comparaison, le modèle SVR pour la température d'ébullition a donné les résultats suivants : $R^2 = 0,9922$, IOA = 0,9980, RMSE = 8,6960 K, MAE = 5,5594 K et MAPE = 1,6244 %. Le modèle pour la température critique a atteint $R^2 = 0,9834$, IOA = 0,9945, RMSE = 16,0576 K, MAE = 10,6222 K et MAPE = 2,0501 %. Concernant la pression critique le modèle SVR a produit $R^2 = 0,9797$, IOA = 0,9941, RMSE = 183,9519mPa, MAE = 137,1681mPa et MAPE = 4,0200%. Le modèle pour le volume critique a également montré de bonnes performances avec $R^2 = 0,9958$, IOA = 0,9998, RMSE = 15,2015cm³/mol, MAE = 12,0043cm³/mol et MAPE = 4,0082%.

Malgré la régression acceptable indiquée par les valeurs R^2 et IOA, où les résultats R^2 étaient presque comparables à ceux obtenus en utilisant l'approche PMC-ANN, comme le montre le graphique de la figure de Taylor Figure IV.6 et Figure IV.7, Figure IV.8, et la Figure IV.9, en particulier dans le modèle Tb, mais les coefficients d'erreur relativement élevés soulèvent des

Chapitre IV. Résultats et discussions

inquiétudes quant à la capacité prédictive des modèles SVR, en outre, les différences considérables dans les métriques de performance entre les ensembles de formation et de test indiquent des limites potentielles dans la capacité de généralisation des modèles développés.

Pour le modèle de la température d'ébullition T_b , l'ensemble d'entraînement a atteint une grande précision, avec $R^2 = 0,9968$, IOA = 0,9991, RMSE = 5,6970 K, MAE = 4,7412 K, et MAPE=1,2814%. Cependant, la performance prédictive du modèle sur l'ensemble de test a diminué à $R^2 = 0,9678$, IOA = 0,9936, RMSE = 15,7080 K, MAE = 8,8026 K, et MAPE = 3,0784%.

L'ensemble d'entraînement pour le modèle de la température critique T_c a donné $R^2 = 0,9924$, IOA = 0,9978, RMSE = 10,9810 K, MAE = 8,6456 K, et MAPE = 1,5554 %. En revanche, la performance sur l'ensemble de tests a diminué à $R^2 = 0,9451$, IOA = 0,9815, RMSE = 28,3168 K, MAE = 18,4590 K, et MAPE = 4,0108%.

En ce qui concerne le modèle de la pression critique P_c , les résultats de l'ensemble d'apprentissage étaient les suivants : $R^2 = 0,9858$, IOA = 0,9962, RMSE = 154,8739 kPa, MAE = 120,2609 kPa et MAPE = 3,6237 %. L'ensemble de test, cependant, a montré une performance plus faible, avec $R^2 = 0,9576$, IOA = 0,9890, RMSE = 269,7646 kPa, MAE = 203,9822 kPa et MAPE = 5,6055%

Enfin, le modèle du volume critique V_c a montré de bonnes performances sur l'ensemble d'entraînement, avec $R^2 = 0,9966$, IOA = 0,9999, RMSE = 14,1758 cm³/mol, MAE = 11,5257 cm³/mol, et MAPE = 3,9091 %. Sur l'ensemble de tests, ces mesures sont passées à $R^2 = 0,9916$, IOA = 0,9980, RMSE = 18,7321 cm³/mol, MAE = 13,9071 cm³/mol, et MAPE = 4,4046%.

Cet écart entre les performances de formation et de test souligne que les modèles sont moins généralisés et moins stables.

Les paramètres statistiques R^2 , IOA, RMSE, MAE et MAPE pour toutes les phases indiquent que les prédictions PMC-ANN pour T_b , T_c , P_c , V_c font preuve d'une précision, d'une stabilité et d'une généralisation nettement supérieures à celles des modèles SVR. Cela montre la puissance de l'utilisation de PMC-ANN lorsque l'ensemble des données est diversifié, vaste et complexe. Ainsi, les modèles PMC-ANN présentent un pouvoir prédictif et une précision élevée grâce à la méthodologie adoptée.

Chapitre IV. Résultats et discussions

Tableau IV.7. Paramètres statistiques des meilleurs modèles RQSP-RNA pour les quatre propriétés.

		PMC-ANN			
	Variables	Tb	Tc	Pc	Vc
L'ensemble d'apprentissage	R ²	0,9984	0,9942	0,9914	0,9986
	MAE	3,1029	6,7514	81,8619	6,3573
	RMSE	3,9366	8,9257	113,3322	8,7253
	MAPE	0,8634	1,1771	2,3001	2,2133
	IOA	0,9994	0,9983	0,9978	0,9999
L'ensemble Test	R ²	0,9934	0,9908	0,9876	0,9970
	MAE	5,7665	8,9955	110,1494	8,6573
	RMSE	7,7365	11,7239	159,4945	12,4660
	MAPE	1,6328	1,6672	2,8524	2,4961
	IOA	0,9981	0,9977	0,9965	0,9998
L'ensemble complète des données	R ²	0,9974	0,9935	0,9907	0,9982
	MAE	3,6331	7,0545	87,5193	6,8173
	RMSE	4,9321	9,5482	122,5629	9,4734
	MAPE	1,0165	1,2747	2,4352	2,3525
	IOA	0,9992	0,9982	0	0,9998

Tableau IV.8. Paramètres statistiques des meilleurs modèles RQSP-SVR pour les quatre propriétés.

		SVR			
	Variables	Tb	Tc	Pc	Vc
Ensemble d'apprentissage	R ²	0,9968	0,9924	0,9858	0,9966
	MAE	4,7411	8,6465	120,2609	11,5257
	RMSE	5,6970	10,9810	154,8739	14,1758
	MAPE	1,2814	1,5554	3,6237	3,9091
	IOA	0,9991	0,9978	0,9962	0,9999
Ensemble Test	R ²	0,9678	0,9451	0,9537	0,9916
	MAE	8,8026	18,4590	203,9822	13,9071
	RMSE	15,7080	28,3186	269,7646	18,7321
	MAPE	3,0784	4,0108	5,6055	4,4046
	IOA	0,9936	0,9815	0,9861	0,9980
Ensemble complet des données	R ²	0,9921	0,9834	0,9797	0,9958
	MAE	5,5593	10,6227	137,1681	12,0043
	RMSE	8,6960	16,0576	183,9519	15,2015
	MAPE	1,6244	2,0501	4,0200	4,0082
	IOA	0,9980	0,9945	0,9941	0,9998

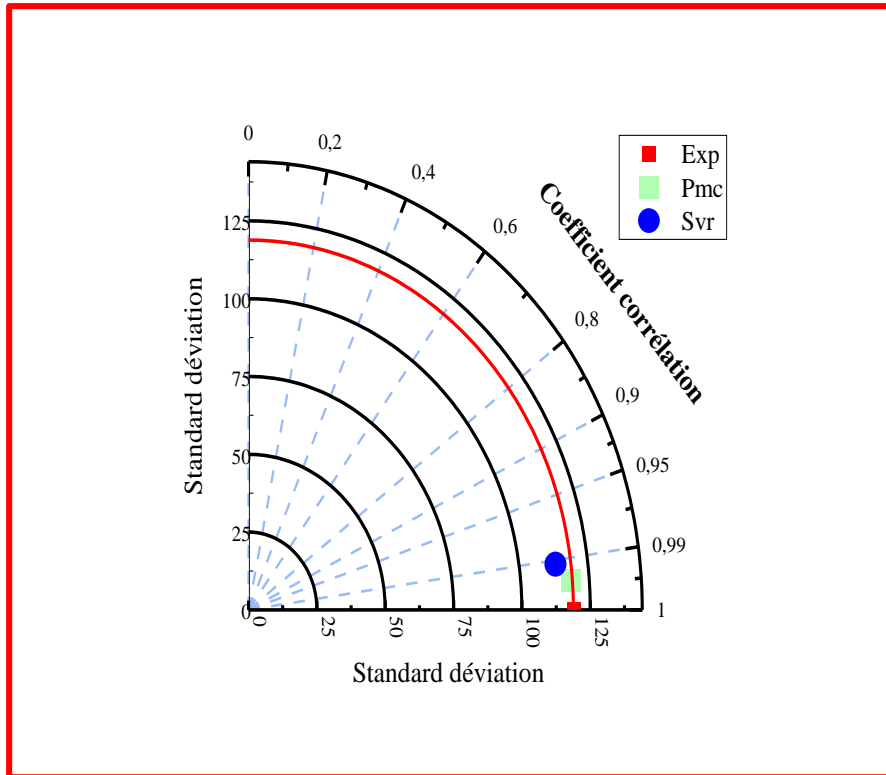


Figure IV.6. Diagrammes de Taylor des modèles SVR et MLP-ANN développés pour la prédiction de Tb.

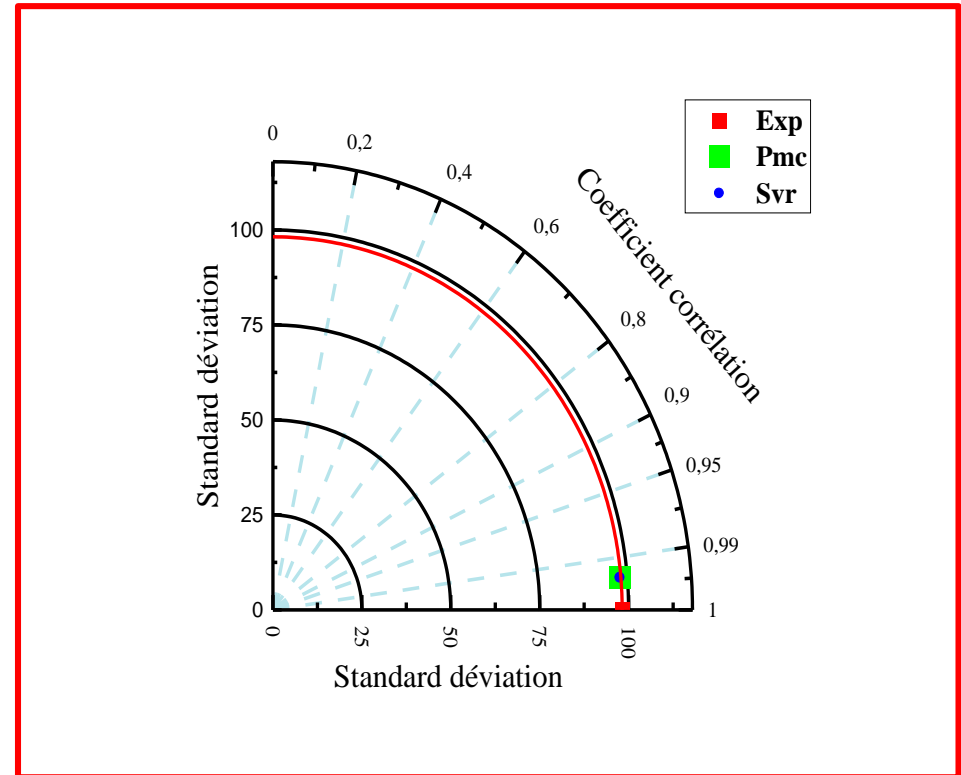


Figure IV.7. Diagrammes de Taylor des modèles SVR et MLP-ANN développés pour la prédiction de Tc.

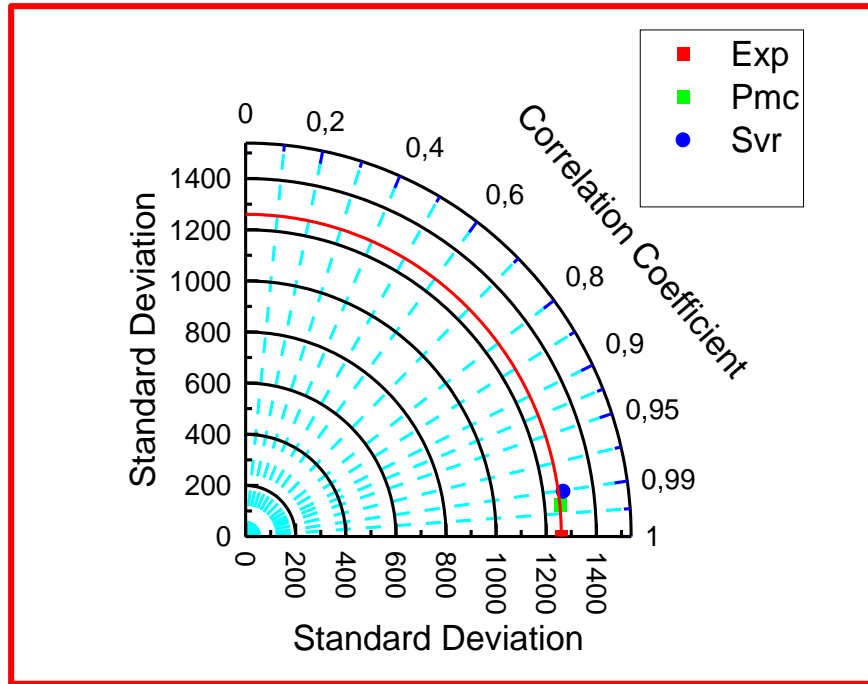


Figure IV.8. Diagrammes de Taylor des modèles SVR et PMC-ANN développés pour la prédiction de P_c .

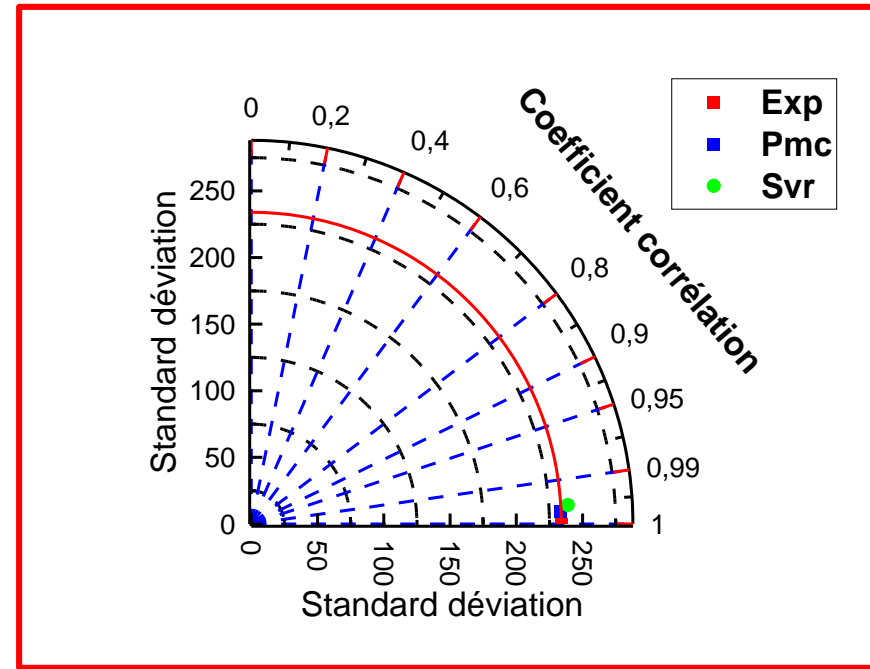


Figure IV.9. Diagrammes de Taylor des modèles SVR et PMC-ANN développés pour la prédiction de V_c .

IV.6.3. Analyse de sensibilité des descripteurs dans chaque modèle RQSP-RNA par la méthode de poids

Comme indiqué précédemment, la méthode d'analyse de sensibilité par les poids a été utilisée pour évaluer la contribution des descripteurs d'entrée pour chaque modèle de RQSP-RNA, permettant de déterminer l'impact de chaque descripteur individuel sur la sortie des modèles pour l'ensemble des paramètres. Les contributions des descripteurs pertinents aux modèles de RQSP-RNA ont été établies et sont illustrées dans les figures suivantes : Figure IV.10, Figure IV.11, Figure IV.12 et Figure IV.13, correspondant respectivement aux modèles de Tb, Tc, Pc et Vc.

IV.6.3.1. Interprétation et classification des contributions selon la (VCM) et selon chaque groupe.

L'analyse de sensibilité montre la contribution des différentes familles de descripteurs qui ont influencé le modèle Tb (Figure IV.10). Les descripteurs constitutionnels sont les plus importants, représentant 50,29% du modèle avec trois descripteurs, dont le descripteur Sv contribue à lui seul à hauteur de 34,22 %, ce qui en fait le plus important dans ce modèle. Les descripteurs topologiques représentent 12,07% avec quatre descripteurs, tandis que les indices d'information contribuent à hauteur de 3,30% avec deux descripteurs. Les autocorrélations 2D représentent 10,1 % avec six descripteurs. En outre, les descripteurs 3D-MoRSE contribuent à hauteur de 2,42% avec trois descripteurs, et les descripteurs GETAWAY ajoutent 0,83% avec deux descripteurs. Les descripteurs RDF (0,22%), les facteurs hydrophiles (0,24%) et les descripteurs WHIM (0,54% et 0,74%, respectivement), représentés chacun par un seul descripteur, apportent des contributions plus modestes, Les propriétés moléculaires jouent un rôle important, contribuant à hauteur de 19,27% avec un seul descripteur, TPSA(NO), le deuxième descripteur le plus important dans la prédiction de Tb.

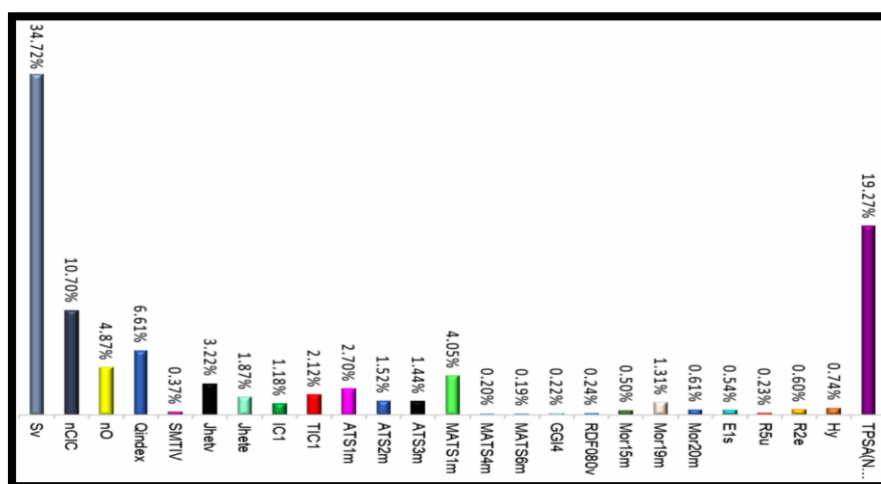


Figure IV.10. Analyse des contributions relatives des descripteurs D'entrée Significatifs dans le modèle QSPR-RNA de Prédiction de la température d'ébullition normale (Tb).

En ce qui concerne la contribution des différentes familles de descripteurs qui ont influencé le modèle Tc Figure IV.11, les descripteurs topologiques représentent 13,19%, représentés par

Chapitre IV. Résultats et discussions

quatre descripteurs. Les indices d'information contribuent à hauteur de 7,91 % avec deux descripteurs, et les indices de contiguïté des bords ajoutent 3,94 % avec trois descripteurs. Les descripteurs d'autocorrélation 2D, qui représentent 29,49 % avec quatre descripteurs, sont ceux qui contribuent le plus au modèle Tc, Parmi ceux-ci, le descripteur ASTM1 contribue à lui seul à hauteur de (22,64 %), ce qui en fait le descripteur le plus important du modèle Tc. En outre, les descripteurs 3D-MoRSE représentent 9,12 % avec cinq descripteurs, et les descripteurs GETAWAY ajoutent (4,88 %) avec deux descripteurs. Les descripteurs WHIM (1,28 %), les descripteurs centrés sur les atomes (0,68 %), les descripteurs constitutionnels (2,33 %) et les indices de connectivité (4,80 %), chacun représenté par un seul descripteur, apportent des contributions plus modestes. Les propriétés moléculaires contribuent de manière significative, le descripteur TPSA(NO) représentant 22,39 %, ce qui en fait le deuxième descripteur le plus influent dans la prédiction de Tc.

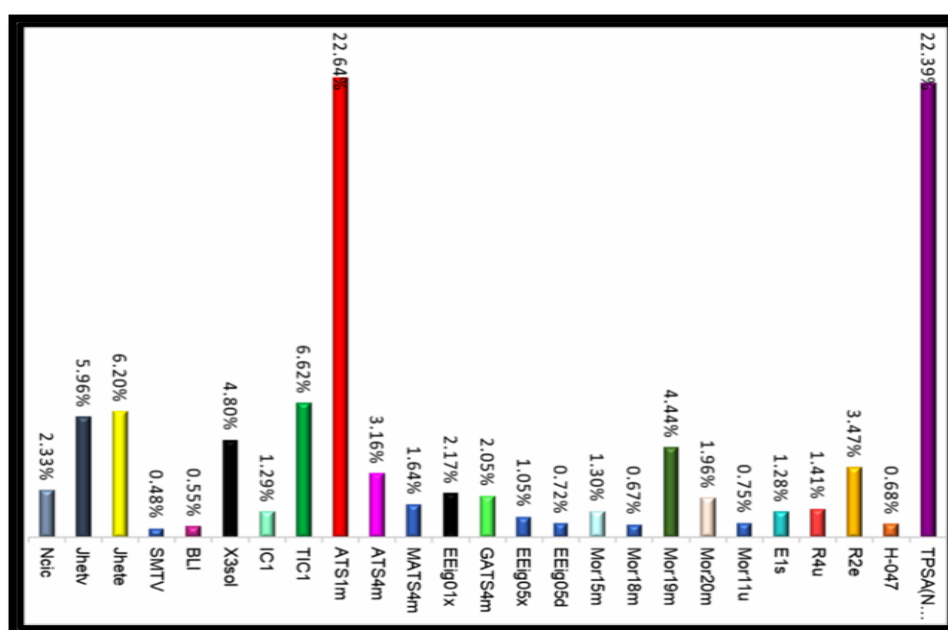


Figure IV.11. Analyse des contributions relatives des descripteurs d'entrée Significatifs dans le modèle QSPR-RNA de prédiction de la Température critique (Tc).

Pour Pc :(Figure IV.12) L'analyse des contributions des différentes familles de descripteurs au modèle de prédiction de la pression critique (**Pc**) révèle que certaines classes jouent un rôle prépondérant. Les descripteurs de propriétés moléculaires sont les plus influents, représentant 25,2 % de la contribution totale avec seulement deux descripteurs (**MLOGP**) plus (**TPSNO**). Ils sont suivis par les descripteurs constitutionnels, qui contribuent à 20,7 %, également avec deux descripteurs (**Sv**) et (**Ncic**).

Les descripteurs d'autocorrélation 2D participent à 12,46 % avec quatre descripteurs, tandis que les indices de connectivité et le facteur hydrophile contribuent respectivement à 11,26 % et 11,67 %. La famille des descripteurs **BCUT** apporte 11 % avec un seul descripteur.

Les descripteurs topologiques interviennent avec 3,01 % de contribution, avec deux descripteurs, et les descripteurs **GETAWAY** ajoutent 4,86 % avec trois descripteurs. Les indices d'adjacence des arêtes participent à 4,23 % avec trois descripteurs. Ces familles

Chapitre IV. Résultats et discussions

apportent des contributions plus modérées que celles des autres familles intégrées au modèle. Les indices d'information présentent une contribution de 0,96 % avec deux descripteurs. Les descripteurs **RDF** apportent 0,925 % avec un seul descripteur, tandis que les descripteurs **3D-MORSE** contribuent chacun à 0,44 %, également avec un seul descripteur. Ces familles de descripteurs ont des contributions plus modestes comparées à celles des autres familles.

Cette répartition met en évidence le rôle prépondérant des descripteurs constitutionnels et topologiques dans le modèle de *Tb*, ce qui traduit une forte dépendance de la température d'ébullition à la composition moléculaire de base et à la structure. Dans le modèle de *Tc*, les descripteurs **d'autocorrélation 2D** et les descripteurs constitutionnels présentent une contribution importante, ce qui souligne l'influence des relations spatiales entre atomes ainsi que des aspects compositionnels. Pour le modèle de *Vc*, les descripteurs constitutionnels sont largement prédominants, mettant en lumière leur impact direct sur le volume occupé par les molécules dans des conditions critiques. Dans le cas du modèle de *Pc*, les propriétés moléculaires, en particulier la surface polaire topologique **TPSA(NO)**, s'avèrent les plus influentes, ce qui suggère un rôle clé de la polarité moléculaire dans la détermination de la pression critique. Les autres familles de descripteurs, bien que moins influentes, apportent une diversité complémentaire et améliorent la performance globale des modèles en capturant des caractéristiques structurales et physicochimiques plus subtiles.

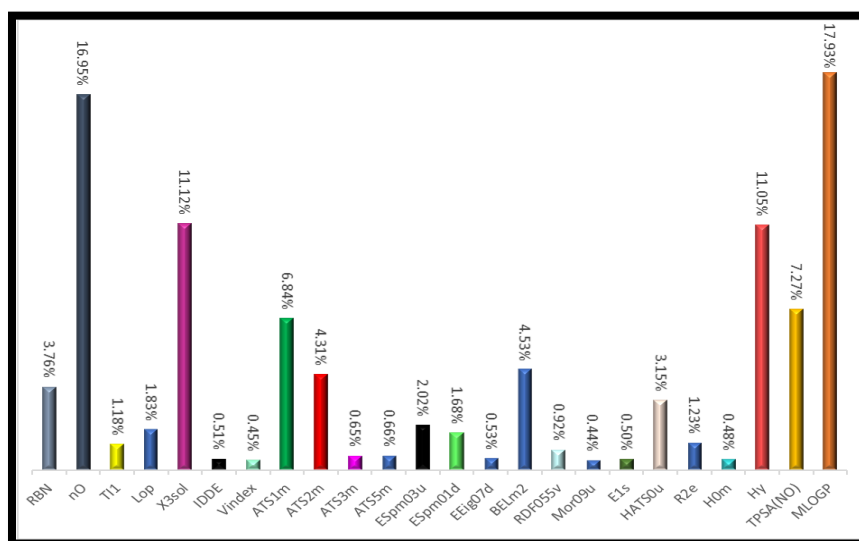


Figure IV.12. Analyse des contributions relatives des descripteurs d'entrée Significatifs

Dans le modèle QSPR-RNA de prédiction de la pression critique (*Pc*).

Dans l'estimation de *Vc*, **Figure V.13** les contributions des différentes familles de descripteurs varient considérablement, La famille des descripteurs constitutionnels est de loin la plus influente, représentant 80,66 % de la contribution totale, Parmi ses descripteurs, **Sv** joue un rôle prépondérant avec 80,39 %, tandis que **No** contribue de manière marginale avec 0,27 % La famille des indices de topologie 3D suit avec une contribution de 5,16 %, assurée par un unique descripteur (*J3D*), Ensuite, la famille des indices de connectivité représente 3,18 %, portée par un seul descripteur, Les descripteurs topologiques affichent une contribution de 1,66 %, légèrement supérieure à celle des indices d'adjacence des arêtes, qui totalisent 1,64 % et sont répartis sur trois descripteurs, Les descripteurs de flexibilité (nombre de liaisons rotatives)

Chapitre IV. Résultats et discussions

contribuent à hauteur de 1,56 %, Les descripteurs **3D-MoRSE** représentent 1,14 %, avec trois descripteurs, tandis que les descripteurs RDF affichent une contribution plus modeste de 0,73 %, reposant sur deux descripteurs, Enfin, les descripteurs de poids atomique pondéré, les indices d'hydrogène pondéré, les **autocorrélations 2D** et les descripteurs de lipophile comptent respectivement pour 0,54 % et 0,74 %, chacun étant représenté par un seul descripteur.

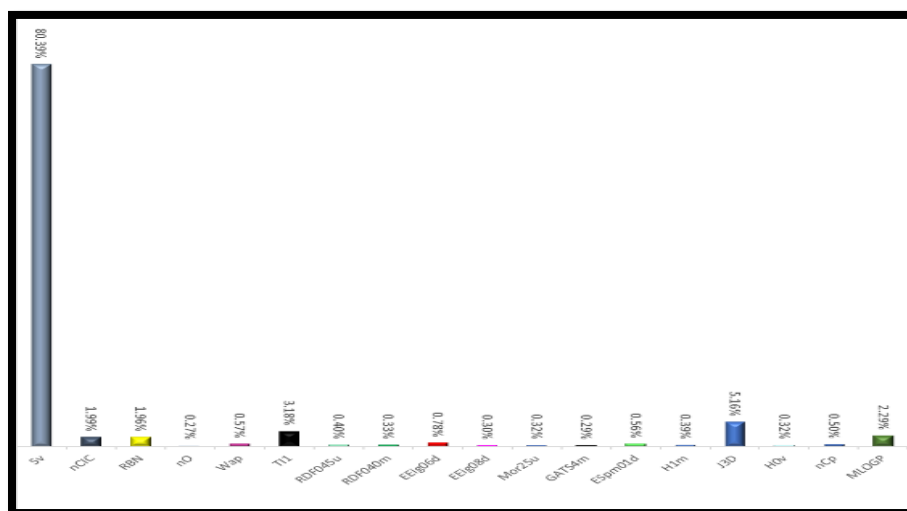


Figure IV.13. Analyse des contributions relatives des descripteurs d'entrée Significatifs dans le modèle QSPR-RNA de prédiction de la Volume critique (Vc).

IV.6.3.2. Domain Applicabilité

Les résultats du domaine d'applicabilité (AD) des modèles RQSP-PMC générés sont visibles dans le diagramme de Williams, notamment dans la Figure IV.14, la Figure IV.15, la Figure IV.16, la Figure IV.17 pour les modèles de Tb, Tc, Vc et Pc. L'effet de levier du seuil déterminé, représenté par h^* , est de 0,1870 pour Tb, $h^*=0,1893$ pour Tc, $h^*=0,1363$ pour Vc et pour Pc $h^*=0,1893$ la valeur résiduelle standardisée est de ± 2 . Dans le cas spécifique de Tb (Figure IV.14), l'existence de 356 composés a été discernée dans l'ensemble d'entraînement et l'ensemble de test dans le domaine désigné, avec 61 composés délimités comme aberrants. Parmi ceux-ci, un sous-ensemble de 28 composés dépasse le seuil du domaine d'applicabilité ($h > h^*$), tandis que 33 autres composés transgressent les limites de \pm unité d'écart-type, la valeur résiduelle normalisée, environ 85,37% se situent dans la zone AD

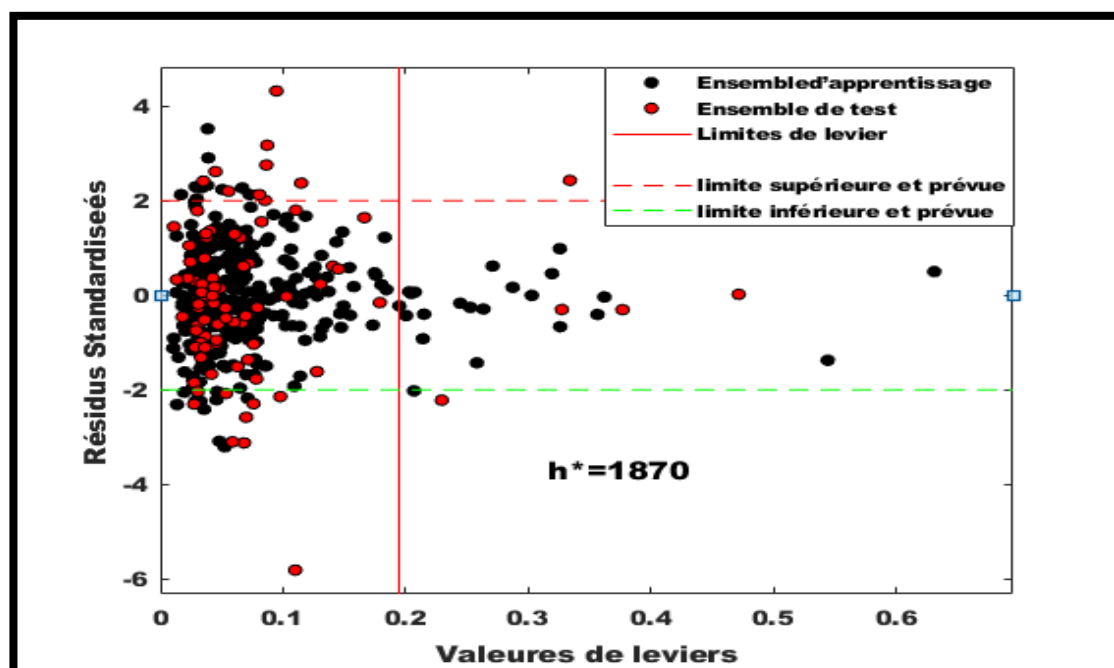


Figure IV.14. Diagramme de Williams pour le modèle QSPR-RNA de

La température d'ébullition normale (T_b).

Pour T_c , (Figure IV.15), il existe 365 composés dans les ensembles d'entraînement et de test dans le domaine spécifié, avec 47 composés en tant que valeurs aberrantes. Dans cette cohorte, 25 composés dépassent le seuil du domaine ($h > h^*$), tandis que 22 composés dépassent la portée de \pm unité d'écart-type, la valeur résiduelle normalisée, environ 88,59% situent dans la zone AD.

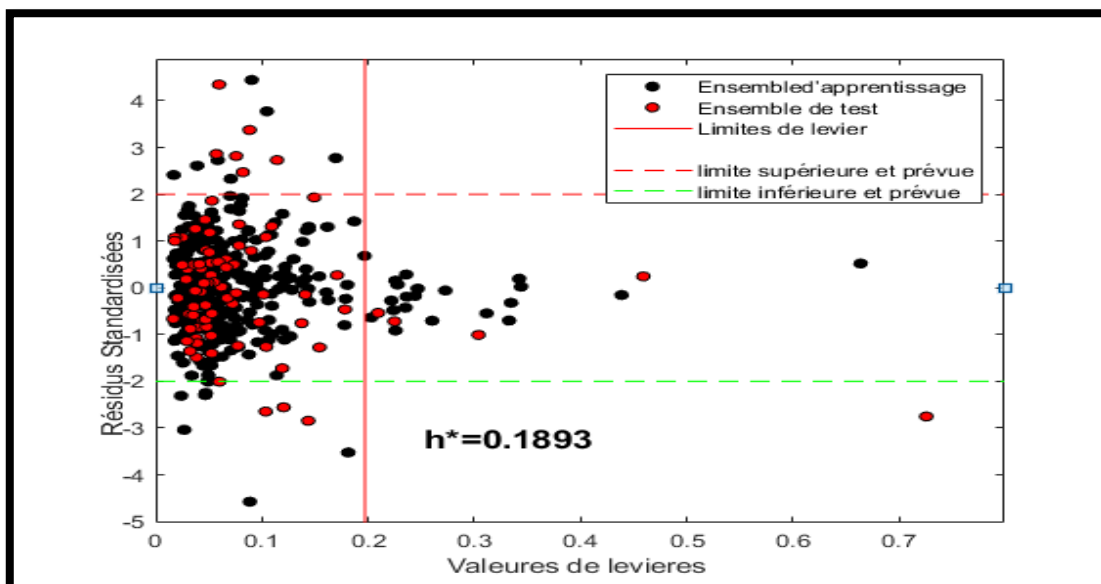


Figure IV.15. Représentation du domaine d'applicabilité (DA) à l'aide du diagramme de Williams pour le modèle QSPR-RNA de la température critique (T_c).

Chapitre IV. Résultats et discussions

Pour P_c (Figure IV.16), il existe 366 composés dans les ensembles d'entraînement et de test dans le domaine spécifié, avec 45 composés en tant que valeurs aberrantes. Dans cette cohorte, 19 composés dépassent le seuil du domaine ($h > h^*$), tandis que 27 composés dépassent la portée de \pm unité d'écart-type pour P_c , la valeur résiduelle normalisée, environ 89,05% se situent dans la zone

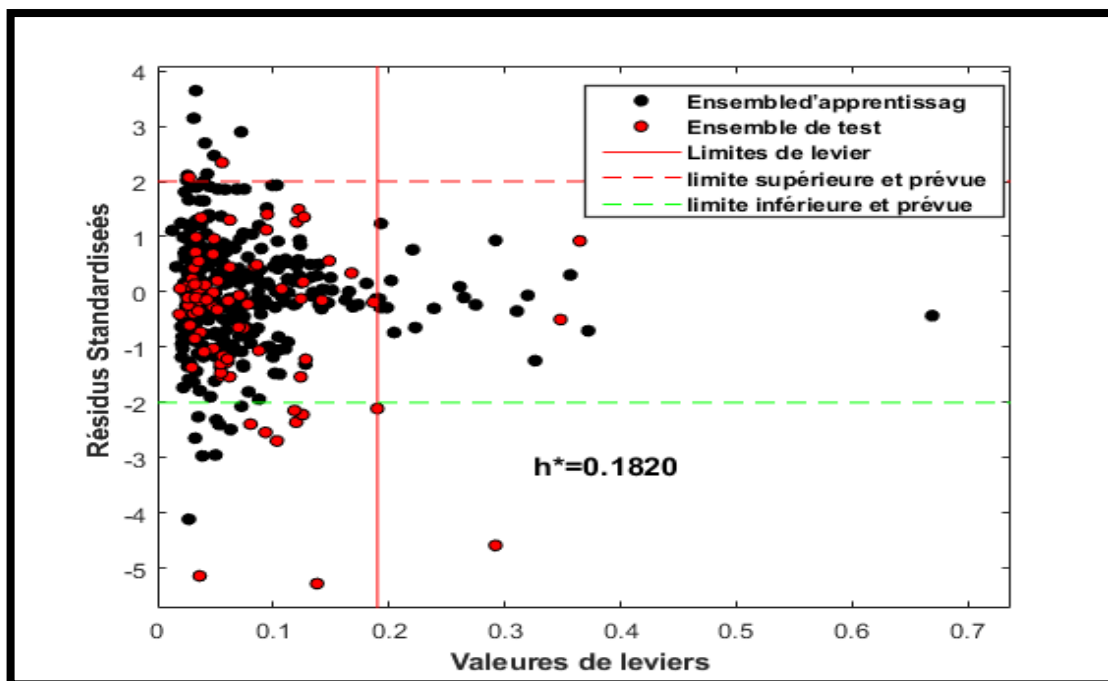


Figure IV.16. Représentation du domaine d'applicabilité (DA) à l'aide du Diagramme de Williams pour le modèle QSPR-RNA de la température d'ébullition normale (P_c).

Pour le V_c , (voir la **Figure IV.17**) il existe 363 composés dans les ensembles d'entraînement et de test dans le domaine spécifié, avec 55 composés en tant que valeurs aberrantes, Dans cette cohorte, **26** composés dépassent le seuil du domaine ($h > h^*$), tandis que **29** composés dépassent la portée de \pm unité d'écart-type pour le V_c . la valeur résiduelle normalisée, environ **86,84%** situent dans la zone AD.

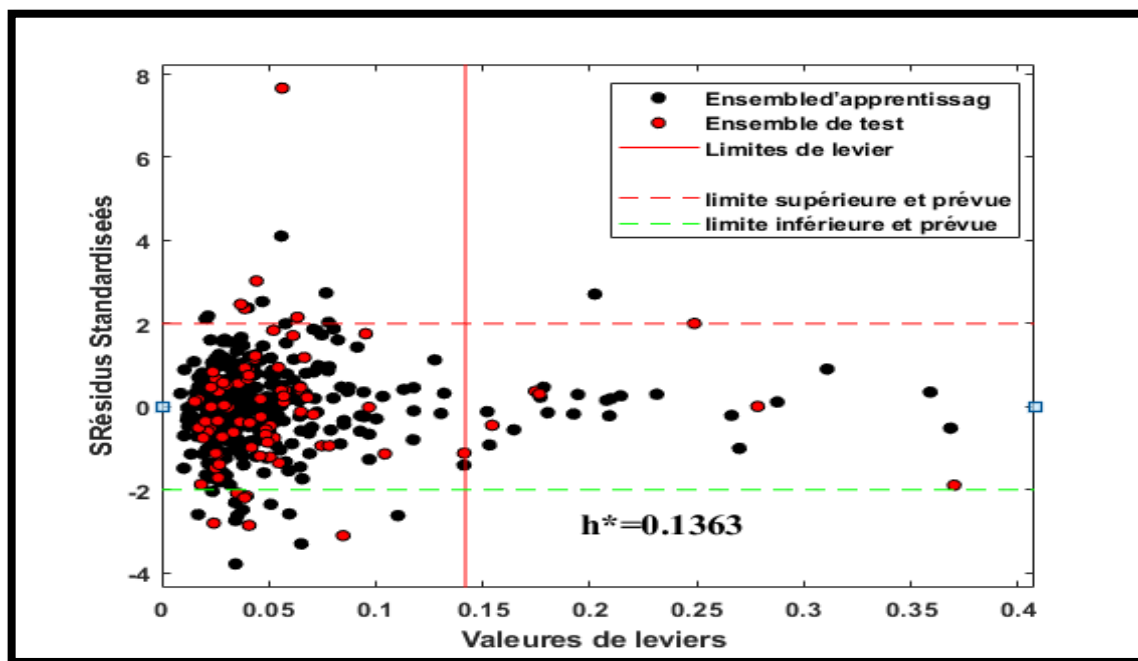


Figure IV.17. Représentation du domaine d'applicabilité (DA) à l'aide du diagramme de Williams pour le modèle QSPR-RNA de la Température critique (V_c).

Bien que la valeur résiduelle normalisée soit de ± 2 au lieu de ± 3 , environ 85,37 %, 88,59 % et 86,84 % des valeurs de T_b , T_c , P_c et V_c se situent dans la zone AD. Ces résultats confirment l'efficacité des modèles QSPR-ANN développés dans cette étude pour prédire avec précision les propriétés T_b , T_c , V_c et P_c d'une large gamme de composés organiques, démontrant ainsi leur capacité de généralisation et leur exhaustivité

IV.6.4. Comparaison avec différents modèles

Pour valider davantage nos modèles, nous avons comparé leurs performances en matière de prédiction de la T_b , T_c , P_c et V_c à celles de certains modèles publiés antérieurement. Cependant, il est difficile d'obtenir une comparaison parfaite en raison des différences entre les ensembles de données et les paramètres statistiques utilisés dans les études. Les résultats de la comparaison entre nos modèles QSPR et ceux de la littérature sont résumés dans les **tableaux IV.12, IV.13, IV.14 et IV.15**. Nous avons basé cette comparaison sur trois paramètres : (1) RMSE, (2) MAE, et (3) R^2 ainsi que sur le nombre de composés (N) utilisés dans chaque étude pour donner un aperçu de la taille des données pour chaque modèle.

Pour T_b : Notre modèle de prévision du T_b est comparé à des travaux antérieurs, et les paramètres sont énumérés dans le **Tableau IV.12**.

Espinosa et ses co-auteurs (Espinosa et al., 2001) ont utilisé les méthodes Fuzzy ARTMAP et Back-Propagation Neural Network pour estimer le T_b des composés organiques. En utilisant un ensemble de données comprenant 1168 composés organiques, ils ont rapporté des valeurs d'erreur absolue moyenne (MAE) de 2 entre 27,70. Bien que ces résultats soient encourageants,

Chapitre IV. Résultats et discussions

les modèles ont fait preuve d'instabilité, comme en témoignent les variations notables de performance entre les trois phases de données, ce modèle souffre de sur ajustement et de généralisation, ce qui rend notre modèle supérieur à tous égards, **Sola et ses co-auteurs**, (Sola et al., 2008) ont développé un modèle MLR pour la prédiction du Tb, obtenant un R^2 de 0,9864 et des valeurs RMSE de 9,10 et 7,33 pour les ensembles d'apprentissage et de test, respectivement, nos résultats étaient meilleurs, démontrant l'efficacité et la supériorité de notre modèle Bien que nous ayons utilisé la petite base de données de Sola et al, Un autre inconvénient de ce modèle est qu'il utilise une petite quantité de données lors de la vérification.

Farhad Gharagheizi et ses co-auteurs (Gharagheizi et al., 2011) ont estimé les valeurs **Tb** à l'aide d'un réseau neuronal artificiel feedforward à trois couches sur un grand ensemble de données de 14 216 composés chimiques, obtenant un R^2 de 0,943 et un **RMSE** de 22, Leurs résultats étaient quelque peu limités, En utilisant également une petite quantité de données lors de la vérification, notre modèle a démontré une performance supérieure à la leur bien qu'utilisant une méthode d'apprentissage similaire, La recherche de **Jin et Bai et ses co-auteurs** (**Jin et Bai, 2016**) impliquant des modèles MLR et des réseaux de base radiaux non linéaires (**RBN**) a été menée en utilisant 432 molécules organiques contenant de l'oxygène pour prédire leurs températures d'ébullition (**Tb**), Les modèles ont atteint des valeurs R^2 de 0,951 et 0,972, avec des valeurs RMSE de 9,41-9,45 et 13,25, respectivement, Bien que les modèles aient démontré une adéquation acceptable entre les données d'entraînement et de validation, leur précision, bien qu'ils soient appliqués à une seule famille de composés, reste relativement faible par rapport à notre modèle.

Varamesh et ses co-auteurs (**Varamesh et al., 2017b**) ont développé des modèles MLP, RBFNN, LSSVM et GMDH pour estimer les températures d'ébullition (Tb) de 563 composés chimiques purs, Conçus avec une portée similaire à la nôtre, ses modèles ont atteint une précision relativement faible, avec des valeurs RMSE comprises entre 18,54 et 24,7, En revanche, notre modèle s'est avéré nettement plus performant, avec une RMSE de 4,9321, malgré la similitude de la base de données, **Haoren Niu et ses co-auteurs** (**Niu et al., 2024**) ont créé un modèle QSPR pour les composés organiques en utilisant un grand ensemble de données de 4 768 composés, Ce modèle a utilisé l'indice de normalité comme donnée d'entrée, Ils ont obtenu des résultats avec un R^2 de 0,969, un MAE de 7,70 et un RMSE de 12, Ces résultats sont acceptables - il a une bonne généralisation - mais notre modèle les surpasse en termes de précision et de résultats statistiques, Il a surpassé la plupart des modèles de cette comparaison, Il a également surpassé les modèles qui utilisaient une gamme plus faible et une famille unique,

Chapitre IV. Résultats et discussions

Tableau IV.12. Comparaison de la température d'ébullition de quelques modèles établis dans la littérature et dans cette étude.

Modèles	L'ensemble d'apprentissage				L'ensemble de test				L'ensemble e global			
	N	RMSE	MAE	R ²	N	RMSE	MAE	R ²	N	RMSE	MAE	R ²
(Espinosa et al., 2001)	1115	(-)	0,26- 28,7	(-)	153	(-)	13,4 7- 20,8	(-)	1168	(-)	2 - 27,7	(-)
(Sola et al., 2008)	135	9,10	(-)	0,985	20	7,33	(-)	(-)	155	(-)	(-)	0,986
(Gharagheizi et al., 2011)	14216	22	(-)	0,943	1776	22	(-)	0,947	17768	22	(-)	0,943
(Jin and Bai., 2016)	345	9,41, 13,25	(-)	0,95, 0,972	87	9,45, 13,25	(-)	0,95,0,9 72	432	(-)	(-)	(-)
(Varamesh et al., 2017a)	450	17,922 5,59	(-)	(-)	113	18,54- 24,7	(-)	(-)	563	18,78- 25,27	(-)	(-)
(Niu et al., 2024)	4762	12,87	8,86	0,969	1190	12,98	8,86	0,969	5952	12,89	8,86	0,969
Ce travail	384	3,93	3,10	0,9984	83	7,73	5,76	0,9934	417	4,93	3,63	0,9974

Pour le Tc, le modèle de prédiction est également comparé à huit autres modèles, et les paramètres sont enregistrés dans le **Tableau IV.13, Xiaojun Yao et ses co-auteurs** (Yao et al., 2002) ont développé des modèles de réseaux neuronaux à fonction de base radiale (RBFNN) et un MLR pour prédire le Tc en utilisant un ensemble de données de 856 composés organiques, obtenant un RMSE de 12,32 et 16,29 pour l'entraînement et de 14,23,16,44 pour le test, Bien que ce résultat indique une généralisation acceptable, l'absence de mesures supplémentaires, telles que le coefficient de corrélation R^2 , et les détails statistiques limités pour l'entraînement, le test et la performance globale, affaiblissent la robustesse et la généralisation de leur modèle par rapport au nôtre, **Espinosa et ses co-auteurs** (**Espinosa et al., 2001**) ont estimé la température critique (Tc) Des composés organiques ont été étudiés en utilisant les méthodes Fuzzy ARTMAP et Back-Propagation Neural Network, similaires aux modèles développés pour l'estimation de Tb, En utilisant un ensemble de données de 530 composés organiques, ils ont obtenu des valeurs d'erreur absolue moyenne (MAE) de 1,37 entre 30,20, similaire au modèle Tb, bien que les résultats semblent prometteurs, leurs modèles ont fait preuve d'instabilité en raison de différences de performance significatives entre les trois phases de données, comme le montre le tableau 8, De même, Godavarthy et ses co-auteurs (**Godavarthy et al., 2008**), ont développé un modèle avec un ensemble de données de 1 260 composés organiques, obtenant un bon coefficient de corrélation de $R^2 = 0,995$ en utilisant l'erreur quadratique moyenne pondérée (WMSE) et les réseaux neuronaux de rétro propagation (**BBNN**), Toutefois, ce modèle souffre d'un manque de validation, Les travaux de **Varamesh et ses co-auteurs** (Varamesh et al., 2017b) pour la prédiction de Tc utilisé les mêmes méthodes avec modèles tb, en utilisant les mêmes composés, ont obtenu des valeurs RMSE entre 19,91 et 21,23, Les résultats de Varamesh et ses co-auteurs confirment la grande efficacité de notre modèle pour la convergence à travers la gamme de données et les méthodes utilisées, Notre modèle les a nettement surpassés dans toutes les mesures statistiques disponibles pour la comparaison, atteignant $R^2 = 0,9935$, MAE = 7,0545, et RMSE = 9,5482, **Bouhdjar et ses co-auteurs**, (**Bouhdjar et al., 2019**) ont proposé un modèle pour prédire le Tc en utilisant un ensemble de données de 165 composés organiques divers, Leur modèle a obtenu $R^2 = 0,98$ pour l'ensemble d'apprentissage et $R^2 = 0,95$ pour l'ensemble de test, Bien que ces résultats de régression semblent acceptables, le modèle a fait preuve d'instabilité en raison des différences significatives entre les résultats de l'ensemble d'apprentissage et de l'ensemble de test, En revanche, notre modèle fait preuve d'une précision, d'une stabilité et d'une généralisable supérieures, bien que Bouhdjar et al, aient également utilisé une petite base de données, Le modèle développé par **Haoren Niu et ses co-auteurs**, (**Niu et al., 2024**) a obtenu $R^2 = 0,969$, MAE = 7,70, et RMSE = 12 pour 886 composés organiques, Ce modèle, comme le modèle Tb de Haoren Niu et ses co-auteurs, a utilisé l'indice de normalité en entrée et la méthode **MLR**, mais notre modèle a obtenu de meilleurs résultats que lui, ce qui le rend plus précis, **Mauro Banchemo et ses co-auteurs**, (**Banchemo et Manna, 2018**) ont développé des modèles MLR et RBFNN, obtenant des RMSE de 8,8 et 27,5, respectivement, en utilisant 306 composés organiques, Bien que les modèles linéaires et non linéaires aient donné des résultats acceptables, notre modèle non linéaire a donné de meilleurs résultats, même si Mauro Banchemo et ses co-auteurs, ont également utilisé une petite base de données.

Chapitre IV. Résultats et discussions

Tableau IV.13. Comparaison de la température critique de quelques modèles établis dans la littérature et de cette étude

Modèles	L'ensemble d'apprentissage				L'ensemble de test				L'ensemble e global			
	N	RMSE	MAE	R ²	N	RMSE	MAE	R ²	N	RMSE	MAE	R ²
(Espinosa et al., 2001)	461	(-)	0,27-31,4	(-)	69	(-)	8,51-21,6	(-)	530	(-)	1,37 - 30,20	(-)
(Sola et al., 2008)	133	12,6	(-)	0,984	20	9,62	(-)	(-)	155	(-)	(-)	0,985
(Godavarthy et al., 2008)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	1230	(-)	(-)	0,995
(Jin and Bai, 2016)	733	12,32,16,29	(-)	(-)	123	14,23,16,44	(-)	(-)	856	13,97	(-)	(-)
(Varamesh et al., 2017b)	450	19,90-21,45	(-)	(-)	113	18,29-23,13	(-)	(-)	563	19,91-21,23	(-)	(-)
(Bancharo et Manna, 2018)	215	7,2-22	(-)	0,943	91	11,7-37,4	(-)	(-)	306	8,8-27,5	(-)	(-)
(Bouhedjar et al., 2019)	115	(-)	7,2	0,98	50	(-)	(-)	0,945	165	(-)	(-)	(-)
(Niu et al., 2024)	709	12	7,66	0,98	177	12,02	7,86	0,982	886	12,00	7,70	0,980
Ce travail	330	8,92	6,75	0,9942	82	11,72	8,99	0,9908	412	9,54	7,05	0,9935

Pour P_c le modèle de prédiction est également comparé à ces autres modèles. **Espinosa et ses co-auteurs (Espinosa et al., 2001)** ont estimé la pression critique (P_c) de composés organiques à l'aide des mêmes méthodes que celles utilisées dans leurs travaux sur la prédiction de T_b et T_c . En utilisant une base de données comprenant 409 composés, ils ont obtenu des valeurs d'erreur absolue moyenne (MAE) comprises entre 200 et 310. Comme pour leurs modèles de T_b et T_c , bien que les résultats soient prometteurs, les performances ont souffert d'instabilité, avec des écarts significatifs entre les phases d'apprentissage, de validation et de test, comme le montre le **tableau IV.14**.

De même **Godavarthy et ses co-auteurs (Godavarthy et al., 2008)** Ils ont développé un modèle basé sur les réseaux neuronaux à rétro propagation pondérée (BPNN), en utilisant un ensemble de données contenant 1 230 composés organiques. Leur modèle a atteint un excellent coefficient de corrélation ($R^2 = 0,992$) en s'appuyant sur l'erreur quadratique moyenne pondérée (WMSE). Toutefois, l'absence de validation rigoureuse constitue une faiblesse importante de leur approche. **Sola et ses co-auteurs (Sola et al., 2008)** Ils ont également proposé un modèle de prédiction de P_c , en utilisant les mêmes méthodes appliquées dans leurs travaux sur T_b et T_c . Ils ont obtenu un R^2 de 0,9293, avec des RMSE de 250 pour l'ensemble d'apprentissage et de 280 pour l'ensemble de test. Bien que nous ayons utilisé la même base de données restreinte, nos résultats se sont révélés supérieurs, ce qui met en évidence la robustesse et la performance de notre modèle. Il convient également de noter que le faible nombre de composés utilisés dans leur phase La validation limitée restreint la généralisation de leurs résultats. Par ailleurs, **Varamesh et ses co-auteurs (Varamesh et al., 2017b)** En travaillant sur un ensemble de composés très similaire à celui utilisé dans notre étude pour la prédiction de P_c , on a rapporté des RMSE allant de 347 à 439. Ces résultats confirment indirectement l'efficacité de notre modèle, qui a démontré une excellente convergence sur l'ensemble des données. Notre modèle surpasse nettement les leurs sur tous les indicateurs statistiques, atteignant un R^2 de 0,9907, un MAE de 87,51 et un RMSE de 122,56.

Moussaoui et ses co-auteurs (Moussaoui et al., 2019) a proposé un modèle basé sur un large ensemble de données contenant 6 700 composés organiques variés, avec un R^2 de 0,9676 pour l'ensemble global. Cependant, son modèle présente également un manque de validation rigoureuse, ce qui réduit la confiance quant à sa capacité de généralisation.

Le modèle proposé par **Haoren Niu et ses co-auteurs (Niu et al., 2024)**, fondé sur un jeu de 643 composés organiques, a atteint un R^2 de 0,974, un MAE de 101 et un RMSE de 154. Bien qu'il repose sur l'indice de normalité comme variable d'entrée à l'instar de leur modèle pour la prédiction de T_b , notre modèle a obtenu de meilleures performances, démontrant une précision accrue.

Enfin, **Banchero et Manna et ses co-auteurs (Banchero et Manna, 2018)** ont développé des modèles pour la prédiction de P_c , obtenant des RMSE de 130 et 420 respectivement, à partir d'un jeu de données de 306 composés organiques. Utilisant les mêmes méthodes que dans leurs travaux sur T_c , leurs résultats restent acceptables, mais notre modèle non linéaire les surpasse également, et ce malgré l'utilisation d'un ensemble de données de taille comparable.

Chapitre IV. Résultats et discussions

Tableau IV.14. Comparaison de la Pression e critique de quelques modèles établis dans la littérature et de cette étude

Modèles	L'ensemble d'apprentissage				L'ensemble de test				L'ensemble global			
	N	RMSE	MAE	R ²	N	RMSE	MAE	R ²	N	RMSE	MAE	R ²
(Espinosa et al., 2001)	409	(-)	0,0-330	(-)	54	(-)	130-190	(-)	463	(-)	0200-310	(-)
(Sola et al., 2008)	133	250	(-)	0,9209	20	280	(-)	(-)	155	(-)	(-)	0,9293
(Godavarthy et al., 2008)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	1230	(-)	(-)	0,992
(Varamesh et al, 2017b)	450	328-412	(-)	(-)	113	309-437	(-)	(-)	563	347-439	(-)	(-)
(Banchemo et Manna, 2018)	215	110-400	(-)	0,943	91	180-470	(-)	(-)	306	130-420	(-)	(-)
(MOUSSAOUI et al, 2019)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	6700	(-)	(-)	0,9676
(Niu et al, 2024)	514	155	101	0,974	129	153	103	0,975	643	154	101	0,974
Ce travail	326	113,33	81,86	0,9946	82	159,49	110,14	0,9876	412	122,56	87,51	0,9907

Chapitre IV. Résultats et discussions

Pour la prédiction du volume critique (V_c) le modèle de prédiction est également comparé à quatre autres modèles, **Godavarthy et ses co-auteurs (Godavarthy et al., 2008)** ont développé un modèle en utilisant les mêmes méthodes que dans leurs travaux précédents sur T_c et P_c , à partir d'un ensemble de 1 230 composés organiques. Leur approche a abouti à un très bon coefficient de corrélation ($R^2 = 0,999$) basé sur l'erreur quadratique moyenne pondérée (WMSE). Toutefois, L'absence de validation rigoureuse constitue une limite majeure à la fiabilité et à la généralisation de leur modèle.

De manière similaire, **Moussaoui et ses co-auteurs (MOUSSAOUI et al, 2019)** ont proposé un modèle reposant sur les mêmes méthodes que celles employées dans leurs travaux sur P_c , utilisant cette fois un vaste ensemble de données composé de 6 700 composés organiques. Leur modèle a atteint un R^2 de 0,9876, également basé sur le WMSE. Néanmoins, comme pour les travaux de Godavarthy et al., l'absence de validation rigoureuse réduit la solidité des conclusions.

Varamesh et ses co-auteurs (Varamesh et al., 2017) En utilisant un ensemble de composés très proche de celui utilisé dans notre étude pour la prédiction de P_c , on a rapporté des RMSE compris entre 347 et 439. Ces résultats confirment indirectement la qualité de notre modèle, qui a montré une excellente convergence sur l'ensemble des données étudiées. Notre modèle les surpasse nettement selon tous les critères statistiques, atteignant un R^2 de 0,9907, un MAE de 87,51 et un RMSE de 122,56.

Enfin, le modèle proposé par **Haoren Niu et ses co-auteurs (Niu et al., 2024)** Basé sur un jeu de 643 composés organiques et utilisant l'indice de normalité comme variable d'entrée, **il** a atteint un R^2 de 0,974, un MAE de 101 et un RMSE de 154. Bien que leurs résultats soient satisfaisants, notre modèle a démontré une meilleure performance globale, illustrant ainsi une précision accrue et une plus grande capacité de généralisation.

Dans l'ensemble, nos modèles développés pour la prédiction de **T_b , T_c , P_c et V_c** couvrent toutes les familles de composés organiques et surpassent l'ensemble des modèles examinés dans cette comparaison. Ils se sont montrés plus performants que les modèles ciblant des plages limitées ou des familles spécifiques, et leurs performances sont compétitives, voire supérieures, à celles des approches de référence de la littérature.

Ces comparaisons mettent en évidence l'efficacité, la créativité et l'excellence des prédictions les plus précises pour les modèles **T_b , T_c , P_c et V_c** . Elles soulignent également les performances supérieures de la méthode d'apprentissage automatique MLP-ANN par rapport à d'autres techniques, telles que MLR, RBF-ANN, GMDH, ARTMAP et LSSVM.

Cela confirme l'efficacité de la méthodologie employée dans cette étude, soutenue par un ensemble de données complet, mis à jour et fiable, Outre l'utilisation de techniques d'optimisation de la structure moléculaire pour garantir une plus grande précision grâce à la DFT, cette recherche se distingue par la sélection minutieuse des descripteurs moléculaires les plus influents grâce à une analyse statistique précise et à l'application optimale de l'apprentissage automatique, qui améliorent collectivement la précision et la fiabilité des modèles.

Chapitre IV. Résultats et discussions

Tableau IV.15. Comparaison de la Pression e critique de quelques modèles établis dans la littérature et de cette étude

Modèles	L'ensemble d'apprentissage				L'ensemble de test				L'ensemble global			
	N	RMS E	MAE	R ²	N	RMS E	MAE	R ²	N	RMS E	MAE	R ²
(Godavarthy et al., 2008)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	1230	(-)	(-)	
(Varamesh et al., 2017b)	450	19,88 -	(-)	(-)	113	15,99- 34,68	(-)	(-)	563	19,38- 35,91	(-)	0,999
(Moussaoui et al., 2019)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	(-)	6700	(-)	(-)	(-)
(Niu et al., 2024)	709	1,10 ×10-	7,77 ×10-3	0,98	177	12,02	7,86	0,982	886	12,00	7,70	0,9876
Ce travail	330	8,72	6,35	0,9986	82	12,46	8,65	0,9970	412	9,47	6,81	0,980

IV.7. Conclusion

Ce chapitre a permis de présenter et d'analyser les principaux résultats obtenus dans le cadre de la modélisation des propriétés physico-chimiques étudiées. L'étude de l'évolution des descripteurs sélectionnés et l'optimisation des architectures des réseaux de neurones artificiels ont conduit à l'élaboration de modèles présentant de bonnes performances prédictives. L'évaluation statistique réalisée à l'aide de différents indicateurs d'erreur et de coefficients de corrélation a permis d'apprécier la précision et la fiabilité des modèles développés pour l'estimation des propriétés considérées.

Par ailleurs, l'application de la méthode de régression par vecteurs de support a permis d'établir une comparaison pertinente avec les modèles RNA. Cette analyse comparative a mis en évidence les performances et les spécificités de chaque approche dans le cadre de la modélisation QSPR. L'étude de sensibilité réalisée a également permis d'identifier l'importance relative des descripteurs moléculaires et de mieux comprendre leur contribution dans les modèles. Enfin, l'analyse du domaine d'applicabilité ainsi que la comparaison critique avec les modèles rapportés dans la littérature ont permis de situer les résultats obtenus et de confirmer l'intérêt des approches proposées pour la prédiction des propriétés physico-chimiques des composés organiques.

Conclusion générale

Conclusion générale

Conclusion générale

Dans cette étude, j'ai abordé une problématique portant sur un sujet très important dans le domaine scientifique de la recherche appliquée à l'industrie. J'ai construit des modèles QSPR afin de prédire la température d'ébullition normale (T_b), la température critique (T_c), la pression critique (P_c) et le volume critique (V_c) des composés organiques, en utilisant une base de données moderne et précise. Ces modèles ne se limitent pas à une seule classe de composés organiques, tels que les hydrocarbures ou les alcools, mais s'appliquent à l'ensemble des composés organiques purs, ce qui les rend hautement adaptables à diverses applications chimiques.

Dans ce travail de thèse, le MLP-ANN (Multi-Layer Perceptron – Artificial Neural Network) a été retenu comme principale méthode d'apprentissage automatique en raison de sa capacité à capturer les relations complexes présentes dans les données. Une analyse comparative avec le SVR (Support Vector Regression) a confirmé la performance supérieure du MLP-ANN, démontrant sa capacité à fournir des prédictions très précises et soulignant sa pertinence pour les tâches nécessitant un haut degré de fiabilité.

La procédure de construction des modèles QSPR comporte plusieurs étapes. La base de données initiale regroupait 419 composés organiques purs appartenant à différentes classes, notamment les hydrocarbures, aldéhydes, alcools, acides carboxyliques, amines, amides, esters, éthers et halogénures organiques. L'ensemble final a été constitué à partir de valeurs récentes et fiables issues de l'ouvrage (*The Properties of Gases and Liquids*, 6^e édition). La base a été divisée en deux sous-ensembles : un pour l'apprentissage et l'autre pour le test. Un grand nombre de descripteurs moléculaires a été calculé en ligne à l'aide du logiciel E-Dragon. Plusieurs étapes fondées sur des méthodes statistiques, y compris la régression linéaire multiple (RLM), ont permis de réduire ce nombre et de ne conserver que les descripteurs les plus pertinents.

Après la collecte des données, le calcul des valeurs et la sélection des descripteurs optimaux, l'étape suivante a consisté à optimiser les architectures idéales, soit (25-17-1) pour la prédiction de T_b et (25-14-1) pour celle de T_c . L'analyse des performances statistiques a mis en évidence l'efficacité des modèles MLP-ANN selon divers critères (R^2 , IOA, MAE, MAPE et RMSE). Pour le modèle T_b , les résultats obtenus sont : $R^2 = 0,9974$, IOA = 0,9992, MAE = 3,6331, MAPE = 1,0165 et RMSE = 4,9321. Pour le modèle T_c , les résultats sont : $R^2 = 0,9935$, IOA = 0,9982, MAE = 7,0545, MAPE = 1,0436 et RMSE = 9,5482, pour le modèle (P_c), les résultats sont : $R^2 = 0,9907$, IOA = 0,9982, MAE = 87,5193, MAPE = 1,0436 et RMSE = 122,5629 et pour le modèle (V_c), les résultats sont : $R^2 = 0,9982$, IOA = 0,9998, MAE = 6,8173, MAPE = 2,3525 et RMSE = 9,4734. Les modèles PMC-ANN ont ainsi constamment surpassé les modèles SVR, démontrant une supériorité en termes de précision, de stabilité et de capacité de généralisation.

L'analyse du domaine d'applicabilité (AD) a confirmé la fiabilité et la généralisable des modèles : 85,37 % des données de T_b et 88,59 % de celles de T_c , 89,05 % pour P_c , 86,84 % pour (V_c) se situent dans le domaine défini. Cette couverture élevée atteste de la robustesse des modèles et de leur potentiel d'application à une grande variété de composés organiques. De plus, une comparaison avec des modèles antérieurs a montré que ceux proposés dans cette thèse les surpassent en termes de précision et de robustesse, mettant en évidence la forte capacité des

Conclusion générale

PMC-ANN à fournir des prédictions fiables.

Une analyse comparative avec les études précédentes confirme la supériorité de nos modèles, tant en précision qu'en généralisation. Cet avantage leur confère une large applicabilité dans différents domaines scientifiques et industriels. En génie chimique, ils peuvent être exploités pour optimiser les conditions de réaction, réduire la consommation énergétique et améliorer l'efficacité des procédés. Dans l'industrie pétrolière, ils constituent des outils puissants pour le raffinage des hydrocarbures, la prédiction fiable des propriétés thermodynamiques et l'accompagnement de décisions stratégiques en lien avec le développement de technologies plus sûres et plus performantes.

En science des matériaux, ces modèles apportent une contribution précieuse à la conception et à la synthèse de matériaux thermiquement stables et mécaniquement résistants, ouvrant la voie à la création de solutions innovantes, durables et performantes. Au-delà de ces applications spécifiques, leur pouvoir prédictif permet de réduire le recours à des mesures expérimentales coûteuses et chronophages, accélérant ainsi le rythme de la recherche et facilitant la découverte scientifique.

En répondant efficacement à des problématiques concrètes tout en reposant sur des bases théoriques solides, ces modèles ne se limitent pas à renforcer la compréhension scientifique, ils s'imposent également comme des outils stratégiques indispensables pour l'innovation, la durabilité et la compétitivité industrielle à long terme.

Références bibliographiques

Références bibliographiques

RDKit: Open-source cheminformatics. <https://www.rdkit.org>

Abdi-Khanghah, M., Bemani, A., Naserzadeh, Z., & Zhang, Z. (2018). Prediction of solubility of N-alkanes in supercritical CO₂ using RBF-ANN and MLP-ANN. *Journal of CO₂ Utilization*, 25, 108–119. <https://doi.org/10.1016/J.JCOU.2018.03.008>

Ahmed, M. H., Koparde, V. N., Safo, M. K., Neel Scarsdale, J., & Kellogg, G. E. (2015). 3D interaction homology: The structurally known rotamers of tyrosine derive from a surprisingly limited set of information-rich hydrophobic interaction environments described by maps. *Proteins: Structure, Function and Bioinformatics*, 83(6), 1118–1136. <https://doi.org/10.1002/PROT.24813;PAGE=STRING:ARTICLE/CHAPTER>

Atkins, P., & Paula, J. de. (2012). Physical Chemistry, Eighth Edition. *W. H. Freeman and Company*, 41(2), 761–790. <http://xlink.rsc.org/?DOI=C1CS15191F>

Bahia, M. S., Kaspi, O., Touitou, M., Binayev, I., Dhail, S., Spiegel, J., Khazanov, N., Yosipof, A., & Senderowitz, H. (2023). A comparison between 2D and 3D descriptors in QSAR modeling based on bio-active conformations. *Molecular Informatics*, 42(4). <https://doi.org/10.1002/MINF.202200186>

Balaban, A. T. (1982). Highly discriminating distance-based topological index. *Chemical Physics Letters*, 89(5), 399–404. [https://doi.org/10.1016/0009-2614\(82\)80009-2](https://doi.org/10.1016/0009-2614(82)80009-2)

Banchero, M., & Manna, L. (2018). Comparison between multi-linear- and radial-basis-function-neural-network-based QSPR Models for the prediction of the critical temperature, critical pressure and acentric factor of organic compounds. *Molecules*, 23(6). <https://doi.org/10.3390/MOLECULES23061379>

Beghour, Y., & Lahiouel, Y. (2025). Using machine learning in QSPR to estimate the boiling and critical temperatures of pure organic compounds. *Chemical Engineering Science*, 309, 121228. <https://doi.org/10.1016/J.CES.2025.121228>

Belghit, C., Lahiouel, Y., & Albahri, T. A. (2018). New empirical correlation for estimation of vaporization enthalpy of Algerian saharan blend petroleum fractions. *Petroleum Science and Technology*, 36(15), 1181-1186

Bergman, T. (1777). Tal om chemiens nyaste framsteg: hållet i Kongl. Maj:ts Höga Nävaro för dess vetenskaps-academie vid præsidiij nedläggande den 12 Nov. 1777. Uppsala. Retrieved from Google Books.

Bishop, C. M. (1995). Neural networks for pattern recognition. Oxford university press, New York, USA.

Bisong, E. (2019). Google Colaboratory. *Building Machine Learning and Deep Learning Models on Google Cloud Platform*, 59–64. https://doi.org/10.1007/978-1-4842-4470-8_7

Bonnet, C. de. (1762). Considérations sur les Corps Organisés (Vol. 1). Amsterdam : Marc-Michel Rey.

Bouarra, N. (2018). Études QSPR des propriétés contrôlant l'évolution de quelques HAP dans l'environnement (Thèse de doctorat). Université Badji Mokhtar Annaba.

Références bibliographiques

- Bouhedjar, K., Nacereddine, A. K., Ghorab, H., & Djerourou, A. (2019). QSPR Modeling For Critical Temperatures Of Organic Compounds Using Hybrid Optimal Descriptors. *International Journal of Quantitative Structure-Property Relationships*, 4(4), 15–26. <https://doi.org/10.4018/IJQSPR.2019100102>
- Buffon, G. L. L. (1749). Histoire naturelle, générale et particulière, avec la description du cabinet du roi (Vol. 2, p. 42 f.). Paris: L’Imprimerie Royale.
- Brown, A. C. C., & Fraser, T. R. (1868). *Earth and Environmental Science Transactions of the Royal Society of Edinburgh*, 25, 151–203
- Castanheiro, T., Schoenfelder, A., Suffert, J., Donnard, M., & Gulea, M. (2017). Étude comparative de la réactivité des thioéthers propargyliques et acétyléniques dans les réactions domino pallado-catalysées. *Comptes Rendus Chimie*, 20(6), 624–633. <https://doi.org/10.1016/J.CRCL.2016.12.007/>
- Chai, T., & Draxler, R. R. (2014). Root mean square error (RMSE) or mean absolute error (MAE)? -Arguments against avoiding RMSE in the literature. *Geoscientific Model Development*, 7(3), 1247–1250. <https://doi.org/10.5194/GMD-7-1247-2014>
- Charleton, W. (1654). *Physiologia Epicuro-Gassendo-Charltoniana: or, a Fabrick of Science Natural upon the Hypothesis of Atoms*. London.
- Cheng, B. T. D. M. (1994). *Neural Networks A Review from a Statistical Perspective*. *Statistical Science*. Scientific Research Publishing. <https://www.scirp.org/reference/referencespapers?referenceid=1353051>
- Chtita, S. (2017). Modélisation de molécules organiques hétérocycliques biologiquement actives par des méthodes QSAR/QSPR. Recherche de nouveaux médicaments. <https://doi.org/10.34894/VQ1DJA>
- Cortes, C., & Vapnik, V. (1995). Support-vector networks. *Machine Learning*, 20(3), 273–297. <https://doi.org/10.1007/BF00994018>
- Cros, A. F. A. (1865). Action de l’alcool amylique sur l’organisme (Doctoral thesis). Faculté de Médecine, Université de Strasbourg, Strasbourg.
- Cybenkot, G. (1989). Mathematics of Control, Signals, and Systems Approximation by Superpositions of a Sigmoidal Function*. *Math. Control Signals Systems*, 2, 303–314.
- David, Garson G. (1991). Interpreting neural-network connection weights. *AI Expert*. <https://doi.org/10.5555/129449.129452>
- Demirci, S., Adiguzel, V., Karabulut, M. A., & Akdeniz, F. (2022). Estimation of Biomass Fuels’ HHVs Based on Ultimate and Proximate Analysis and Their Combination Data Using MLP-ANN Models. *Solid Fuel Chemistry*, 56, S74–S82. <https://doi.org/10.3103/S0361521923010123>
- Devotta, S., & Chelani, A. (2022). Unified artificial neural network-group contribution method for predictions of normal boiling point and critical temperature of refrigerants and related compounds. *International Journal of Refrigeration*, 140, 112–124. <https://doi.org/10.1016/J.IJREFRIG.2022.04.020>
- Daub

Références bibliographiques

- ert, T. E., & Danner, R. P. (1997). API Technical Data Book Petroleum Refining: American Petroleum Institute (API): Washington, DC.
- Djelloul Mokrani, K. (2021). Étude QSRR et QSTR de dérivés benzéniques (Thèse de doctorat en Chimie). Université Badji Mokhtar – Annaba, Faculté des Sciences, Département de Chimie.
- Elliott, J. Richard. (2023). Properties of Gases and Liquids, Sixth Edition.
- Espinosa, G., Yaffe, D., Arenas, A., Cohen, Y., & Giralt, F. (2001). A fuzzy ARTMAP-based Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR) for predicting physical properties of organic compounds. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 40(12), 2757–2766. <https://doi.org/10.1021/IE0008068>
- Free, S. M., & Wilson, J. W. (1964). *Journal of Medicinal Chemistry*, 7, 395–399.
- Friedrich, C., & Reichardt, C. (2015). Historische Stätte der Chemie (Historical Site of Chemistry) in Marburg – Johannes Hartmann und sein Marburger “Laboratorium chymicum publicum”. Frankfurt: Gesellschaft Deutscher Chemiker.
- Geladi, P., & Kowalski, B. R. (1986). Partial least-squares regression: a tutorial. *Analytica Chimica Acta*, 185(C), 1–17. [https://doi.org/10.1016/0003-2670\(86\)80028-9](https://doi.org/10.1016/0003-2670(86)80028-9)
- Gevrey, M., Dimopoulos, I., & Lek, S. (2003). Review and comparison of methods to study the contribution of variables in artificial neural network models. *Ecological Modelling*, 160(3), 249–264. [https://doi.org/10.1016/S0304-3800\(02\)00257-0](https://doi.org/10.1016/S0304-3800(02)00257-0)
- Ghabi, W., Landolsi, K., Echouchene, F., Bajahzar, A., Msaddek, M., & Belmabrouk, H. (2024). Taguchi method and neural network for efficient β -ketoenamine synthesis in deionized water. *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 102(8), 2840–2856. <https://doi.org/10.1002/CJCE.25237>
- Gharagheizi, F., Eslamimanesh, A., Mohammadi, A. H., & Richon, D. (2011). Use of artificial neural network-group contribution method to determine surface tension of pure compounds. *Journal of Chemical and Engineering Data*, 56(5), 2587–2601. <https://doi.org/10.1021/JE2001045>
- Godavarthy, S. S., Robinson, R. L., & Gasem, K. A. M. (2008a). Improved structure–property relationship models for prediction of critical properties. *Fluid Phase Equilibria*, 264(1–2), 122–136. <https://doi.org/10.1016/J.FLUID.2007.11.003>
- Goh, A. T. C. (1995). Back-propagation neural networks for modeling complex systems. *Artificial Intelligence in Engineering*, 9(3), 143–151. [https://doi.org/10.1016/0954-1810\(94\)00011-S](https://doi.org/10.1016/0954-1810(94)00011-S)
- Golmohammadi, H., & Dashtbozorgi, Z. (2010). Quantitative structure-property relationship studies of gas-to-wet butyl acetate partition coefficient of some organic compounds using genetic algorithm and artificial neural network. *Structural Chemistry*, 21(6), 1241–1252. <https://doi.org/10.1007/S11224-010-9669-8>
- Goodarzi, M., Chen, T., & Freitas, M. P. (2010). QSPR predictions of heat of fusion of organic compounds using Bayesian regularized artificial neural networks. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 104(2), 260–264. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOLAB.2010.08.018>

Références bibliographiques

- Gramatica, P. (2007). Principles of QSAR models validation: Internal and external. *QSAR and Combinatorial Science*, 26(5), 694–701. <https://doi.org/10.1002/QSAR.200610151>
- Gramatica, P., Chirico, N., Papa, E., Cassani, S., & Kovarich, S. (2013). QSARINS: A new software for the development, analysis, and validation of QSAR MLR models. *Journal of Computational Chemistry*, 34(24), 2121–2132. <https://doi.org/10.1002/JCC.23361>
- Gassendi, P. (1658). Opera Omnia (Vol. 1). Lyon.
- Groniewsky, A., & Hégyel, L. (2024). Extension of the Constantinou and Gani group contribution method with the Tochigi method through an automatic conversion procedure. *Fluid Phase Equilibria*, 584, 114148. <https://doi.org/10.1016/J.FLUID.2024.114148>
- Goh, A. T. (1995). Back-propagation neural networks for modeling complex systems. *Artificial Intelligence in Engineering*, 9(3), 143-151.
- GUENDOUZI, A. (2016a). Élaboration des modèles QSPR prédictifs des propriétés physico-chimiques à l'aide des descripteurs moléculaires. <http://dspace1.univ-tlemcen.dz/handle/112/8569>
- Gaussian 16, Revision C.01, M. J. Frisch, G. W. Trucks, H. B. Schlegel, G. E. Scuseria, M. A. Robb, J. R. Cheeseman, G. Scalmani, V. Barone, G. A. Petersson, H. Nakatsuji, X. Li, M. Caricato, A. V. Marenich, J. Bloino, B. G. Janesko, R. Gomperts, B. Mennucci, H. P. Hratchian, J. V. Ortiz, A. F. Izmaylov, J. L. Sonnenberg, D. Williams-Young, F. Ding, F. Lipparini, F. Egidi, J. Goings, B. Peng, A. Petrone, T. Henderson, D. Ranasinghe, V. G. Zakrzewski, J. Gao, N. Rega, G. Zheng, W. Liang, M. Hada, M. Ehara, K. Toyota, R. Fukuda, J. Hasegawa, M. Ishida, T. Nakajima, Y. Honda, O. Kitao, H. Nakai, T. Vreven, K. Throssell, J. A. Montgomery, Jr., J. E. Peralta, F. Ogliaro, M. J. Bearpark, J. J. Heyd, E. N. Brothers, K. N. Kudin, V. N. Staroverov, T. A. Keith, R. Kobayashi, J. Normand, K. Raghavachari, A. P. Rendell, J. C. Burant, S. S. Iyengar, J. Tomasi, M. Cossi, J. M. Millam, M. Klene, C. Adamo, R. Cammi, J. W. Ochterski, R. L. Martin, K. Morokuma, O. Farkas, J. B. Foresman, and D. J. Fox, Gaussian, Inc., Wallingford CT, 2016.
- Hadaji, E. (2018). Corrélation (structure–activité anticancéreuse) par les méthodes QSAR des molécules hétérocycliques précurseurs de médicaments (Thèse de doctorat en Chimie Physique et Modélisation). Université Sidi Mohammed Ben Abdellah, Faculté des Sciences Dhar El Mahraz, Fès.
- Hamadache. (2014). Modélisation en vue de la prédiction ou de la corrélation de l'activité toxicologique à partir de la structure moléculaire". thèse de doctorat en génie des procédés, laboratoire de biomatériaux et phénomènes de transport (lbmpt), département de génie des procédés et environnement, université yahia fares de médéa. médéa, algérie.
- Hamadache, M., Hanini, S., Benkortbi, O., Amrane, A., Khaouane, L., & Moussa, C. S. (2016). Artificial neural network-based equation to predict the toxicity of herbicides on rats. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 154, 7–15. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOLAB.2016.03.007>
- Hansch, C., & Fujita, T. (1964). *Journal of the American Chemical Society*, 86, 1616–1626.
- Hawkins, D. M. (2004). The Problem of Overfitting. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 44(1), 1–12. <https://doi.org/10.1021/CI0342472>

Références bibliographiques

Hansen, O. R. (1962). *Acta Chemica Scandinavica*, 16, 1593–1600.

J. Richard Elliott, Vladimir Diky, Thomas A. Knotts IV, & W. Vincent Wilding. (2023). *Properties of Gases and Liquids*. McGraw-Hill Education.

Jaworska, J., Nikolova-Jeliazkova, N., & Aldenberg, T. (2005a). QSAR applicability domain estimation by projection of the training set in descriptor space: A review. *ATLA Alternatives to Laboratory Animals*, 33(5), 445–459. <https://doi.org/10.1177/026119290503300508>

Jemmali, A., Kaziz, S., Echouchene, F., & Gazzah, M. H. (2024). Optimization of Lab-On-a-CD by Experimental Design and Machine Learning Models for Microfluidic Biosensor Application. *IEEE Sensors Journal*, 24(7), 9299–9307. <https://doi.org/10.1109/JSEN.2023.3343908>

Jin, L., & Bai, P. (2016). Prediction of the normal boiling point of oxygen containing organic compounds using quantitative structure–property relationship strategy. *Fluid Phase Equilibria*, 427, 194–201. <https://doi.org/10.1016/J.FLUID.2016.07.015>

Kang, H. (2013). The prevention and handling of the missing data. *Korean Journal of Anesthesiology*, 64(5), 402–406. <https://doi.org/10.4097/KJAE.2013.64.5.402>

Kaziz, S., ben Romdhane, I., Echouchene, F., & Gazzah, M. H. (2023). Numerical simulation and optimization of AC electrothermal microfluidic biosensor for COVID-19 detection through Taguchi method and artificial network. *European Physical Journal Plus*, 138(1). <https://doi.org/10.1140/EPJP/S13360-023-03712-Z>

Kellogg, G. E., Marabotti, A., Spyrakis, F., & Mozzarelli, A. (2023). HINT, a code for understanding the interaction between biomolecules: a tribute to Donald J. Abraham. *Frontiers in Molecular Biosciences*, 10, 1194962. <https://doi.org/10.3389/FMOLB.2023.1194962/BIBTEX>

Kim, S., Chen, J., Cheng, T., Gindulyte, A., He, J., He, S., Li, Q., Shoemaker, B. A., Thiessen, P. A., Yu, B., Zaslavsky, L., Zhang, J., & Bolton, E. E. (2023). PubChem 2023 update. *Nucleic Acids Research*, 51(D1), D1373–D1380. <https://doi.org/10.1093/NAR/GKAC956>

Kode, V. and R. T. (2013). *Dragon (Version 7.0): Software for Molecular Descriptor Calculations*. Chemometrics and QSAR Research Group.

Kraim, K. (2009). "Etudes de QSAR sur des activités biologiques utilisant des produits d'origines naturels". Thèse de doctorat en génie des procédés, Option : Chimie industrielle, Département de génie des procédés, Université 08 mai 1945 Guelma. Guelma, Algérie.

Kryshtafovych, A., Schwede, T., Topf, M., Fidelis, K., & Mout, J. (2021). Critical assessment of methods of protein structure prediction (CASP)—Round XIV. *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics*, 89(12), 1607–1617. <https://doi.org/10.1002/PROT.26237>

Kwon, S., Bae, H., Jo, J., & Yoon, S. (2019). Comprehensive ensemble in QSAR prediction for drug discovery. *BMC Bioinformatics*, 20(1). <https://doi.org/10.1186/S12859-019-3135-4>

Lu, W., Lu, Y., Li, J., Sigov, A., Ratkin, L., Industrial, L. I.-J. of, & 2024, undefined. (n.d.). Quantum Machine Learning: Classifications, Challenges, and Solutions. *Elsevier*. Retrieved

Références bibliographiques

- December 12, 2024, from <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2452414X24001791>
- Lu, W., Lu, Y., Li, J., Sigov, A., Ratkin, L., & Ivanov, L. A. (2024). Quantum machine learning: Classifications, challenges, and solutions. *Journal of Industrial Information Integration*, 42, 100736. <https://doi.org/10.1016/J.JII.2024.100736>
- Martin, T. M., Harten, P., Young, D. M., Muratov, E. N., Golbraikh, A., Zhu, H., & Tropsha, A. (2012). Does rational selection of training and test sets improve the outcome of QSAR modeling? *Journal of Chemical Information and Modeling*, 52(10), 2570–2578. <https://doi.org/10.1021/CI300338W>
- Massaoudi, A., Echouchene, F., ben Ayed, M., Berguiga, A., Harchay, A., Al-Ghamdi, S., & Belmabrouk, H. (2024). Machine learning models for modeling the biosorption of Fe (III) ions by activated carbon from olive stone. *Neural Computing and Applications*, 36(21), 13357–13372. <https://doi.org/10.1007/S00521-024-09826-4>
- Meyer, H. (1899). *Archiv für experimentelle Pathologie und Pharmakologie*, 42, 109–118.
- Moosavi, S. R., Wood, D. A., Ahmadi, M. A., & Choubineh, A. (2019). ANN-Based Prediction of Laboratory-Scale Performance of CO₂-Foam Flooding for Improving Oil Recovery. *Natural Resources Research*, 28(4), 1619–1637. <https://doi.org/10.1007/S11053-019-09459-8>
- Zine, M. (2020). Modèles QSPR de différentes caractéristiques de polluants environnementaux (Thèse de doctorat en Chimie). Université Badji Mokhtar – Annaba, Faculté des Sciences, Département de Chimie.
- Navratilova, I., Skladal, P., Viklicky, V., Clayden, J., Warren, S., Franta, D., Nečas, D., Zajickova, L., Zajíčková, L., Farré, M., Kantiani, L., & Barceló, D. (2012). Organic Chemistry 2nd Edition. *Chemical Analysis of Food: Techniques and Applications*, 55(24), 831–839.
- Niu, H., Zhang, Y., Jia, Q., Wang, Q., & Yan, F. (2024). Property estimation of organic compounds based on QSPR models with norm indices. *Chemical Engineering Science*, 288. <https://doi.org/10.1016/J.CES.2024.119835>
- Nobile, E., Doche, F., Castanheiro, T., Musaev, D. G., & Besset, T. (2024). Copper-Catalyzed C–H (Phenylsulfonyl)difluoromethylation of Acrylamides: Scope, Mechanism, and Critical Role of Additives. *Chemistry - A European Journal*, 30(8). <https://doi.org/10.1002/CHEM.202303362>
- Nourani, V., & Sayyah Fard, M. (2012). Sensitivity analysis of the artificial neural network outputs in simulation of the evaporation process at different climatologic regimes. *Advances in Engineering Software*, 47(1), 127–146. <https://doi.org/10.1016/J.ADVENGSOFT.2011.12.014>
- Overton, E. (1901). *Studien über die Narkose zugleich ein Beitrag zur allgemeinen Pharmakologie*. Jena: Gustav Fischer.
- Plumb, J. C., Stewart, I., Dahl, J. A., & Lundgren, T. (2009). In search of meaning: Values in modern clinical behavior analysis. *Behavior Analyst*, 32(1), 85–103. <https://doi.org/10.1007/BF03392177>

Références bibliographiques

- Rafieezade, M. R., & Fazeli, A. (2024). Predicting the amino group pKa of amino acids using machine learning-QSPR methods. *Journal of Molecular Liquids*, 408, 125355. <https://doi.org/10.1016/J.MOLLIQ.2024.125355>
- Randić, M. (1975). On Characterization of Molecular Branching. *Journal of the American Chemical Society*, 97(23), 6609–6615. <https://doi.org/10.1021/JA00856A001>
- Raschka, S., & Kaufman, B. (2020). Machine learning and AI-based approaches for bioactive ligand discovery and GPCR-ligand recognition. *Methods*, 180, 89–110. <https://doi.org/10.1016/j.ymeth.2020.06.016>
- Razavi, S., Jakeman, A., Saltelli, A., Priour, C., Iooss, B., Borgonovo, E., Plischke, E., lo Piano, S., Iwanaga, T., Becker, W., Tarantola, S., Guillaume, J. H. A., Jakeman, J., Gupta, H., Melillo, N., Rabitti, G., Chabridon, V., Duan, Q., Sun, X., ... Maier, H. R. (2021). The Future of Sensitivity Analysis: An essential discipline for systems modeling and policy support. *Environmental Modelling and Software*, 137. <https://doi.org/10.1016/J.ENVSOF.2020.104954>
- Rebas, O. (2016). Évaluation des propriétés des pétroles bruts et des fractions pétrolières par les méthodes de contribution de groupes avec interactions moléculaires. <http://repository.enp.edu.dz/jspui/handle/123456789/1562>
- Riazi, M. (2005). Characterization and Properties of Petroleum Fractions. In *Characterization and Properties of Petroleum Fractions, First Edition* (First Edition). ASTM International. https://doi.org/10.1520/MNL50_1ST-EB
- Richet, M. C. (1893). Comptes rendus des séances de la Société de biologie et de ses filiales, 45, 775–776. Paris.
- Roy, P. P., Leonard, J. T., & Roy, K. (2008). Exploring the impact of size of training sets for the development of predictive QSAR models. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 90(1), 31–42. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOLAB.2007.07.004>
- Rybińska-Fryca, A., Sosnowska, A., & Puzyn, T. (2020). Representation of the Structure—A Key Point of Building QSAR/QSPR Models for Ionic Liquids. *Materials 2020, Vol. 13, Page 2500*, 13(11), 2500. <https://doi.org/10.3390/MA13112500>
- Sahigara, F., Ballabio, D., Todeschini, R., & Consonni, V. (2014). Assessing the Validity of QSARs for Ready Biodegradability of Chemicals: An Applicability Domain Perspective. *Current Computer Aided-Drug Design*, 10(2), 137–147. <https://doi.org/10.2174/1573409910666140410110241>
- Sahigara, F., Mansouri, K., Ballabio, D., Mauri, A., Consonni, V., & Todeschini, R. (2012). Comparison of Different Approaches to Define the Applicability Domain of QSAR Models. *Molecules 2012, Vol. 17, Pages 4791-4810*, 17(5), 4791–4810. <https://doi.org/10.3390/MOLECULES17054791>
- Sarkar, A., & Kellogg, G. E. (2010). Hydrophobicity – Shake Flasks, Protein Folding and Drug Discovery. *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 10(1), 67. <https://doi.org/10.2174/156802610790232233>

Références bibliographiques

Si-Moussa, C. (2010). "Modélisation des équilibres de phases à pressions élevées par les réseaux de neurones artificiels". Thèse de doctorat. École nationale supérieure polytechnique. Alger. Algérie.

.Sildir, H., Sarrafi, S., & Aydin, E. (2022). Optimal artificial neural network architecture design for modeling an industrial ethylene oxide plant. In *Computers and Chemical Engineering* (Vol. 163). Elsevier Ltd. <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2022.107850>

Singh, A., Sharma, J., Paichha, M., & Chakrabarti, R. (2020). Achyranthes aspera (Prickly chaff flower) leaves- and seeds-supplemented diets regulate growth, innate immunity, and oxidative stress in *Aeromonas hydrophila*-challenged *Labeo rohita*. *Journal of Applied Aquaculture*, 32(3), 250–267. <https://doi.org/10.1080/10454438.2019.1615594>

Sola, D., Ferri, A., Banchemo, M., Manna, L., & Sicardi, S. (2008). QSPR prediction of N-boiling point and critical properties of organic compounds and comparison with a group-contribution method. *Fluid Phase Equilibria*, 263(1), 33–42. <https://doi.org/10.1016/J.FLUID.2007.09.022>

Souahi, F., & Kaabeche, H. (2008). Developing correlations for prediction of petroleum fraction properties using genetic algorithms. *Oil and Gas Science and Technology*, 63(2), 229–237. <https://doi.org/10.2516/OGST:2007087>

STATISTICA. (2013). *STATISTICA* (12). StatSoft, Inc. (now part of TIBCO Software).

Suzuki, K. (2011). Artificial Neural Networks - Methodological Advances and Biomedical Applications. *Artificial Neural Networks - Methodological Advances and Biomedical Applications*. <https://doi.org/10.5772/644>

Tahami, S., Movagharnejad, K., & Ghasemitabar, H. (2019). Estimation of the critical constants of organic compounds via a new group contribution method. *Fluid Phase Equilibria*, 494, 45–60. <https://doi.org/10.1016/J.FLUID.2019.04.022>

Tenza-Abril, A. J., Villacampa, Y., Solak, A. M., & Baeza-Brotons, F. (2018). Prediction and sensitivity analysis of compressive strength in segregated lightweight concrete based on artificial neural network using ultrasonic pulse velocity. *Construction and Building Materials*, 189, 1173–1183. <https://doi.org/10.1016/J.CONBUILDMAT.2018.09.096>

Tetko, I. V., Gasteiger, J., Todeschini, R., Mauri, A., Livingstone, D., Ertl, P., ... & Tanchuk, V. Y. (2005). Virtual computational chemistry laboratory—design and description. *Journal of computer-aided molecular design*, 19(6), 453-463.

Thorndike, E. L. (2012). Animal intelligence; experimental studies. *Animal Intelligence; Experimental Studies*. <https://doi.org/10.5962/BHL.TITLE.55072>

Tropsha, A., & Golbraikh, A. (2007). Predictive QSAR Modeling Workflow, Model Applicability Domains, and Virtual Screening. *Current Pharmaceutical Design*, 13(34), 3494–3504. <https://doi.org/10.2174/138161207782794257>

Tropsha, A., Gramatica, P., & Gombar, V. K. (2003). The Importance of Being Earnest: Validation is the Absolute Essential for Successful Application and Interpretation of QSPR Models. *QSAR & Combinatorial Science*, 22(1), 69–77. <https://doi.org/10.1002/QSAR.200390007>

Références bibliographiques

- Tu, J. v. (1996). Advantages and disadvantages of using artificial neural networks versus logistic regression for predicting medical outcomes. *Journal of Clinical Epidemiology*, 49(11), 1225–1231. [https://doi.org/10.1016/S0895-4356\(96\)00002-9](https://doi.org/10.1016/S0895-4356(96)00002-9)
- Turner, B. E., Costello, C. L., & Jurs, P. C. (1998). Prediction of critical temperatures and pressures of industrially important organic compounds from molecular structure. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 38(4), 639–645. <https://doi.org/10.1021/CI9800054>
- Urbani, D. (1995). Méthodes statistiques de sélection d'architectures neuronales : application à la conception de modèles de processus dynamiques.
- Varamesh, A., Hemmati-Sarapardeh, A., Dabir, B., & Mohammadi, A. H. (2017). Development of robust generalized models for estimating the normal boiling points of pure chemical compounds. *Journal of Molecular Liquids*, 242, 59–69. <https://doi.org/10.1016/J.MOLLIQ.2017.06.039>
- Varamesh, A., Hemmati-Sarapardeh, A., Moraveji, M. K., & Mohammadi, A. H. (2017). Generalized models for predicting the critical properties of pure chemical compounds. *Journal of Molecular Liquids*, 240, 777–793. <https://doi.org/10.1016/J.MOLLIQ.2017.05.023>
- Wang, D., Yuan, Y., Duan, S., Liu, R., Gu, S., Zhao, S., Liu, L., & Xu, J. (2015). QSPR study on melting point of carbocyclic nitroaromatic compounds by multiple linear regression and artificial neural network. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 143, 7–15. <https://doi.org/10.1016/J.CHEMOLAB.2015.02.009>
- Wen, X., & Qiang, Y. (2002). Group vector space method for estimating melting and boiling points of organic compounds. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 41(22), 5534–5537. <https://doi.org/10.1021/IE010989D>
- Wiener, H. (1947). Structural Determination of Paraffin Boiling Points. *Journal of the American Chemical Society*, 69(1), 17–20. <https://doi.org/10.1021/JA01193A005>
- Williams, P. T., & Onwudili, J. (2005). Composition of products from the supercritical water gasification of glucose: A model biomass compound. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 44(23), 8739–8749. <https://doi.org/10.1021/IE050733Y>
- Yao, X., Wang, Y., Zhang, X., Zhang, R., Liu, M., Hu, Z., & Fan, B. (2002). Radial basis function neural network-based QSPR for the prediction of critical temperature. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 62(2), 217–225. [https://doi.org/10.1016/S0169-7439\(02\)00017-5](https://doi.org/10.1016/S0169-7439(02)00017-5)
- Zhou, L., Wang, B., Jiang, J., Pan, Y., & Wang, Q. (2017). Quantitative structure-property relationship (QSPR) study for predicting gas-liquid critical temperatures of organic compounds. *Thermochimica Acta*, 655, 112–116. <https://doi.org/10.1016/J.TCA.2017.06.021>

Références bibliographiques

Zhen, W., Wenying, W., Wen, X., 2005. Composite group vector space method for estimating critical properties of pure organic compound. *Fluid Phase Equilib* 238, 58–64.
<https://doi.org/10.1016/J.FLUID.2005.09.016>

Annexes

Annexes

Tableau A.1. Valeurs des descripteurs pertinentes utilisées pour l'élaboration du modèle de RQSP pour Tb

ID	RSu	Sv	nCIC	nO	Qindex	SMTIV	Jhetv	Jhete	R2e	GGI4	IC1	TIC1	ATS1m	ATS2m	ATS3m	MATS1m	MATS4m	MATS6m	RDF080v	Mor15m	Mor19m	Mor20m	E1s	Hy	TPSA(NO)
1	0	4.79	0	0	3	144	2.38	3.88	2.68	0	1.92	9.61	2.72	4.23	0	-0.3	0	0	0	-0.8	-0.6	0.51	0.44	-0.2	0
2	0	3.61	0	0	3	328	1.52	4.15	3.6	0	1.37	6.86	2.52	3.69	0	-0.1	0	0	0	0.17	-0.7	0.48	0.22	-0.2	0
3	0	4.59	0	0	3	232	1.95	3.93	2.93	0	1.52	7.61	2.86	4.5	0	-0.2	0	0	0	1.29	-0.4	-0.2	0.24	-0.2	0
4	0	3.23	0	0	3	332	1.46	4.24	3.81	0	1.37	6.86	2.16	3.11	0	-0.3	0	0	0	-0.7	0.31	-0.3	0.29	-0.2	0
5	0	3.82	0	0	3	240	1.78	4.09	3.3	0	1.52	7.61	2.31	3.43	0	-0.4	0	0	0	-0.7	0.46	-0.3	0.33	-0.2	0
6	0	4.41	0	0	3	148	2.25	3.96	2.85	0	1.37	6.86	2.44	3.72	0	-0.6	0	0	0	-0.6	0.65	-0.4	0.41	-0.2	0
7	0	5	0	0	3	56.2	3.02	3.83	2.46	0	0.72	3.61	2.55	3.98	0	-1	0	0	0	-0.2	0.94	-0.6	0.67	-0.2	0
8	0	3.5	0	0	1	187	1.26	3.13	3.01	0	1.92	9.61	2.38	3.2	0	-0.2	0	0	0	0.33	-0.6	0.36	0.5	-0.2	0
9	0	3.12	0	0	1	190	1.2	3.22	3.2	0	1.92	9.61	1.96	2.55	0	-0.4	0	0	0	-0.3	0.16	-0.1	0.61	-0.2	0
10	0	3.71	0	0	1	111	1.59	3.08	2.75	0	1.92	9.61	2.14	2.95	0	-0.6	0	0	0	-0.4	0.22	-0.1	0.62	-0.2	0
11	0	4.3	0	0	1	31.5	2.32	2.94	2.36	0	1.37	6.86	2.29	3.3	0	-1	0	0	0	-0.3	0.3	-0	0.8	-0.2	0
12	0	2.53	0	0	1	270	0.95	3.38	3.73	0	1.37	6.86	1.75	2.14	0	-1	0	0	0	-0.2	0.02	-0	0.98	-0.2	0
13	0	1.99	0	0	0	42	2.09	3.48	0.25	0	1.59	4.76	0.77	0	0	-1	0	0	0	-0	0.06	0.01	0.5	-0.3	23.79
14	0	3.6	0	0	0	13.9	1.63	2.07	2.28	0	1.52	7.61	1.93	2.27	0	-1	0	0	0	-0.2	0.05	0.16	1.47	-0.3	0
15	0	2.42	0	0	0	148	0.67	2.38	3.14	0	1.52	7.61	1.43	1.25	0	-1	0	0	0	0.02	-0	0.04	1.87	-0.3	0
16	0	2.11	0	1	0	48	1.02	2.66	1.14	0	1.5	6	0.85	0	0	-1	0	0	0	-0.1	0.03	-0	1.39	-0.3	17.07
17	0	2.62	0	2	0	109	1.12	2.9	1.02	0	2.32	11.6	1.3	1.02	0	-1	0	0	0	-0	-0	-0.1	1.44	0.9	37.3
18	0	3.28	0	0	0	2.33	1.38	1.17	2.09	0	1.37	6.86	2.04	0	0	-1	0	0	0	0.15	-0.1	-0.1	1.4	-0.3	0
19	0	2.9	0	0	0	3.38	1	1.27	2.24	0	1.37	6.86	1.37	0	0	-1	0	0	0	0.05	0.08	0.05	1.66	-0.3	0
20	0	2.31	0	0	0	58	0.41	1.46	2.64	0	1.37	6.86	0.95	0	0	-1	0	0	0	0.05	-0	0.08	2.3	-0.3	0
22	0	3.62	0	0	0	2.18	1.73	1.01	1.91	0	1.37	6.86	2.45	0	0	-1	0	0	0	-0.2	-0.2	0.25	1.27	-0.3	0
23	0	3.62	0	2	1	178	1.64	4.68	1.85	0	1.84	12.9	1.66	1.69	0	-0	0	0	0	-0.1	0.05	-0.1	1.44	-0.2	45.82
24	0	2.2	0	0	0	0	0	0	2.24	0	0.72	3.61	0	0	0	0	0	0	0	0.01	0.01	0.02	0	0	0
25	0	2.71	0	1	0	32	0.51	1.33	2.01	0	1.79	10.8	0.85	0	0	-1	0	0	0	0.07	0.02	0.06	0.76	1.26	20.23
26	0	3.28	0	0	0	2.86	1.09	1.08	1.71	0	1.79	10.8	1.3	0	0	-1	0	0	0	0.07	0.08	0.01	0.86	1.26	0
27	0	5.05	0	0	6	930	2.25	5	3.11	0	1.55	12.4	2.55	3.44	3.4	-0.2	0	0	0	-0.5	-0.2	0.23	1.18	-0.2	0

Annexes

28	0	6.41	0	0	6	764	2.59	4.85	2.68	0	1.5	12	3.07	4.22	4.58	-0.1	0	0	0	0.85	-1	0.93	1.26	-0.2	0
29	0	5.64	0	0	6	782	2.48	4.93	2.83	0	1.75	14	2.66	3.66	3.6	-0.2	0	0	0	-0.9	-0.1	0.28	1.16	-0.2	0
30	0	5.64	0	0	6	782	2.48	4.93	2.82	0	1.5	12	2.66	3.61	3.65	-0.2	0	0	0	-0.9	-0.1	0.19	1.09	-0.2	0
31	0	6.23	0	0	6	634	2.75	4.86	2.56	0	1.81	14.5	2.75	3.8	3.85	-0.2	0	0	0	-1	0.04	0.22	1.03	-0.2	0
32	0	6	0	0	2	125	3.68	4.39	0.79	0	0.92	5.51	2.63	3.41	3.58	-0.4	0	0	0	-0.3	0.27	0.16	0.98	-0.3	0
33	0	3.64	0	0	2	592	1.74	4.84	1.3	0	0.92	5.51	2.12	2.51	2.4	-0.4	0	0	0	0.02	-0.3	-0.1	1.23	-0.3	0
34	0	5.91	0	0	4	519	2.33	4.27	2.5	0	2.41	19.2	2.79	3.75	3.84	-0.1	0	0	0	-0	-0.3	0.23	1.1	-0.3	0
35	0	4.94	0	0	4	662	2.03	4.39	2.85	0	2	16	2.42	3.11	3.11	-0.2	0	0	0	-0.3	-0.2	0.27	1.17	-0.3	0
36	0	5.53	0	0	4	527	2.27	4.32	2.6	0	2.16	17.2	2.54	3.33	3.37	-0.2	0	0	0	-0.6	-0.1	0.35	1.14	-0.3	0
37	0	5.53	0	0	4	533	2.28	4.31	2.58	0	2.16	17.2	2.54	3.34	3.36	-0.2	0	0	0	-0.5	-0	0.18	0.98	-0.3	0
38	0	4.35	0	0	4	798	1.82	4.46	3.13	0	1.55	12.4	2.29	2.94	2.77	-0.4	0	0	0	0.13	-0.3	0.2	1.29	-0.3	0
39	0	4.86	0	1	4	1126	1.56	4.69	3.7	0	1.88	16.9	2.45	3.12	2.19	-0.7	0.51	0	0	-0.2	-0.1	0.06	1.13	-0.2	9.23
40	0	4.6	0	0	0	52.5	2.55	2.99	0.76	0	1.59	9.51	2.07	1.93	2.27	-0.3	0	0	0	-0.3	-0.1	0.33	1.12	-0.4	0
42	0	6.6	0	0	2	96.6	2.99	3.45	1.9	0	1.5	12	2.63	3.41	3.58	-0.4	0	0	0	-0.3	-0.2	0.72	0.86	-0.3	0
43	0	3.42	0	0	1	210	1.32	3.72	1.08	0	1.92	11.5	1.64	1.9	0	-0.3	0	0	0	-0.1	-0.2	-0	0.98	-0.4	0
44	0	4.24	0	0	3	550	1.61	4.02	2.91	0	1.75	14	2.12	2.7	2.14	-0.4	0	0	0	0.13	-0.1	0.13	1.17	-0.3	0
45	0	4.24	0	0	2	564	1.57	3.73	2.81	0	1.5	12	2.12	2.51	2.4	-0.4	0	0	0	0.27	-0.1	0.1	1.19	-0.3	0
46	0	3.9	0	0	0	27.9	2.19	2.54	0.76	0	1.79	10.8	1.6	1.37	0	-0.3	0	0	0	-0	-0.1	0.16	0.8	-0.5	0
47	0	4.72	0	0	3	242	1.78	3.83	2.47	0	2.16	17.2	2.09	2.94	0	-0.2	0	0	0	-0.1	0.15	-0	1.06	-0.4	0
48	0	5.31	0	0	3	150	2.25	3.71	2.21	0	2.16	17.2	2.25	3.28	0	-0.3	0	0	0	-0.1	0.27	-0.1	1	-0.4	0
49	0	5.9	0	0	3	58.1	3.02	3.59	1.98	0	1.81	14.5	2.39	3.58	0	-0.4	0	0	0	0.02	0.38	-0.1	0.94	-0.4	0
50	0	5.9	0	0	1	61.3	2.54	2.92	1.89	0	1.81	14.5	2.39	2.92	2.91	-0.4	0	0	0	0.17	-0	0.42	1.14	-0.4	0
51	0	4.13	0	0	3	334	1.46	3.96	2.76	0	1.81	14.5	1.91	2.58	0	-0.4	0	0	0	0	-0	0.05	1.08	-0.4	0
52	0	4.13	0	0	1	362	1.35	3.15	2.57	0	1.81	14.5	1.91	2.11	1.79	-0.4	0	0	0	0.34	-0.1	0.23	1.19	-0.4	0
53	0	3.59	0	0	0	68	2.22	2.57	1.6	0	1.79	10.8	1.15	0.77	0	-0.3	0	0	0	-0	0.1	0.02	1.47	-0.5	23.79
54	0	3.2	0	0	0	12	2	2	0.76	0	0.92	5.51	0.69	0	0	1	0	0	0	-0	-0	0.03	0.12	-0.6	0
55	0	5.96	0	0	0	27.2	2.33	2.15	1.75	0	1.5	12	2.73	2.66	3.81	-0.3	0	0	0	-0.3	-0.4	0.36	1.32	-0.4	0
56	0	5.2	0	0	1	33	2.32	2.7	1.93	0	1.75	14	2.07	2.75	0	-0.3	0	0	0	0.05	0.16	0.09	1.15	-0.4	0
57	0	5.2	0	0	0	34.5	1.98	2.23	1.87	0	1.5	12	2.07	1.93	2.27	-0.3	0	0	0	0.08	0.14	0.09	1.43	-0.4	0

Annexes

58	0	4.02	0	0	1	192	1.2	2.94	2.4	0	1.75	14	1.64	1.9	0	-0.3	0	0	0	0.15	-0	0.1	1.32	-0.4	0
59	0	3.71	0	1	0	73	1.65	2.39	1.68	0	2.13	14.9	1.2	0.85	0	-0.3	0	0	0	-0	0.05	-0	1.61	-0.5	17.07
60	0	3.71	1	1	3	64	1.39	2.7	2.33	0	1.38	9.65	1.54	0	0	-0.5	0	0	0	0.16	0.12	0.11	1.22	-0.5	12.53
61	0	4.22	0	2	1	150	1.79	3.3	1.55	0	2.41	19.2	1.54	1.69	0	-0.3	0	0	0	0.05	0	-0	0.61	0.54	37.3
62	0	4.22	0	2	0	160	1.18	3.05	2.09	0	2.41	19.2	1.61	1.33	0.85	-1	0	0	0	0.04	-0	0.04	0.61	-0.4	26.3
63	0	4.88	0	0	0	12.8	1.9	1.76	1.8	0	1.55	12.4	2.16	2.04	0	-0.3	0	0	0	0.11	0	-0.1	1.04	-0.5	0
64	0	4.49	0	0	0	14.9	1.63	1.83	1.89	0	1.55	12.4	1.6	1.37	0	-0.3	0	0	0	0.15	0.1	0.04	1.24	-0.5	0
65	0	3.9	0	0	0	82	0.96	1.94	2.11	0	1.55	12.4	1.28	0.95	0	-0.3	0	0	0	0.13	0.02	0.1	1.6	-0.5	0
66	0	3.79	0	0	0	4	1	1	1.9	0	0.81	6.49	0.69	0	0	1	0	0	0	0.02	0.06	-0	0.24	-0.6	0
67	0	4.31	0	1	0	52	1.11	1.86	1.81	0	1.88	16.9	1.2	0.85	0	-0.3	0	0	0	0.1	0.07	0.06	0.79	0.64	20.23
68	0	4.31	0	1	0	56	0.84	2.17	2.45	0	1.22	11	1.3	0.69	0	-1	0	0	0	0.13	0.02	0.15	0.13	-0.5	9.23
69	0.15	4.82	0	2	0	134	1.3	2.29	1.75	0	1.92	19.2	1.54	1.3	1.02	-0.3	0	0	0	0.25	0.06	0.14	1.13	1.77	40.46
70	0	4.88	0	0	0	14	1.7	1.69	1.59	0	1.88	16.9	1.54	1.3	0	-0.3	0	0	0	0.16	0.09	0.01	0.33	0.64	0
71	0	4.88	0	0	0	9.78	1.78	1.76	2.24	0	1.22	11	1.85	0.69	0	-1	0	0	0	0.14	0.16	0.04	0.2	-0.5	0
72	0	4.79	0	0	0	30	1.34	1.75	1.79	0	1.96	19.6	1.15	0.77	0	-0.3	0	0	0	0.06	0.11	-0	0.49	2.09	26.02
73	0	4.79	0	0	0	32	1.14	1.89	1.99	0	1.57	15.7	1.2	0.69	0	-1	0	0	0	0.13	0.08	0.11	0.17	0.64	12.03
74	0.12	5.3	0	1	0	106	1.43	2.21	1.67	0	2.55	28.1	1.5	1.25	0.94	-0.3	0	0	0	0.22	0.07	0.13	0.51	3.2	46.25
75	0.26	5.78	0	0	0	78	1.59	2.14	1.65	0	1.92	23	1.47	1.2	0.86	-0.3	0	0	0	0.19	0.08	0.12	0.42	4.79	52.04
76	0	6.28	0	0	9	2182	2.73	5.67	3.23	0	1.1	12.1	2.75	3.57	3.7	-0.3	0.38	0	0	0.08	-0.7	0.39	0.72	-0.3	0
77	0	6.17	0	0	7	1776	2.48	5.01	3.1	0	1.49	16.4	2.64	3.39	3.24	-0.3	0.43	0	0	0.11	-0.3	0.22	0.91	-0.3	0
78	0	6.06	0	0	5	1374	2.28	4.58	2.88	0	1.87	20.5	2.53	3.14	3.06	-0.3	0.5	0	0	0.39	-0.1	0.25	1.05	-0.3	0
79	0	6.06	0	0	6	1402	2.24	4.4	3.04	0	1.69	18.5	2.53	3.28	2.35	-0.3	0.5	0	0	-0	0	0.06	1.2	-0.3	0
80	0	5.95	0	0	6	934	2.25	4.86	2.75	0	1.97	21.7	2.39	3.14	3.03	-0.2	0	0	0	0.19	-0.3	0.26	0.62	-0.4	0
81	0	5.95	0	0	4	1046	2.04	3.96	2.8	0	1.97	21.7	2.39	2.99	2.19	-0.2	0.6	0	0	0.14	0.02	0.12	1.38	-0.4	0
82	0	5.95	0	0	4	994	2.15	4.41	2.62	0	1.97	21.7	2.39	2.9	3.03	-0.2	0.6	0	0	0.56	-0.3	0.28	0.93	-0.4	0
83	0.68	6.46	0	1	4	1454	1.73	4.16	2.93	0.48	2.22	26.7	2.53	3.11	2.44	-0.4	-1.1	0	0	0.27	-0.1	0.27	1.23	-0.3	9.23
84	0	4.59	0	0	0	124	2.75	2.98	0.61	0	2.13	14.9	1.43	1.15	0.77	-0.1	0	0	0	-0	0.06	0.05	0.93	-0.6	23.79

Annexes

85	0	5.1	1	1	3	208	1.95	3.68	1.07	0	2.41	19.2	1.95	1.95	0	0.06	0	0	0	0	0.01	0.04	0.38	-0.5	26.03
86	0	4.2	0	0	0	46	2.48	2.48	1.37	0	2.13	14.9	1.1	0.69	0	1	0	0	0	-0	0.06	0.01	0.2	-0.8	0
87	0	4.2	0	0	0	44	3.27	3.27	0.71	0	1.38	9.65	1.1	0.69	0	1	0	0	0	-0.1	-0.1	-0	0.18	-0.8	0
88	0	5.19	0	0	0	106	2.31	2.47	1.57	0	1.88	16.9	1.43	1.15	0.77	-0.1	0	0	0	-0	0.16	-0	1.39	-0.6	23.79
89	0	4.79	0	0	0	29	2.19	2.19	1.48	0	2.11	19	1.1	0.69	0	1	0	0	0	0.01	0.05	0.01	0.2	-0.8	0
90	0	4.79	1	0	3	24	2.25	2.25	1.74	0	0.92	8.27	1.39	0	0	1	0	0	0	0.12	0.13	-0	0.12	-0.8	0
91	0	6.79	0	0	1	63.4	2.54	2.78	1.83	0	1.87	20.5	2.19	2.39	2.54	-0.2	0	0	0	0.22	0.22	0.02	0.85	-0.5	0
92	0.23	5.31	0	1	0	104	1.77	2.49	1.38	0	2.65	26.5	1.47	1.2	0.85	-0.1	0	0	0	0.07	0.06	0.06	0.65	0.32	20.23
93	0	5.31	0	1	1	106	2.34	2.96	1.77	0	1.57	15.7	1.47	1.54	0	-0.1	0	0	0	0.02	0.07	-0	1.57	-0.6	17.07
94	0	5.31	0	1	0	112	1.99	2.4	1.71	0	2.16	21.6	1.47	1.2	0.85	-0.1	0	0	0	0.01	0.14	-0.1	1.07	-0.6	17.07
95	0	5.31	1	1	4	96	1.59	2.41	2.08	0	1.77	17.7	1.73	1.2	0	-0.3	0	0	0	0.16	0.2	0.08	0.36	-0.6	12.53
96	0.21	5.82	0	2	1	211	2.14	3.13	1.63	0	2.4	26.4	1.73	1.86	1.3	-0.2	0	0	0	0.09	0.08	-0.1	0.39	0.31	37.3
97	0.75	5.82	0	2	1	211	1.65	3.52	1.85	0	2.05	22.5	1.79	1.86	1.2	-0.6	0	0	0	0.13	-0	0.09	0.13	-0.5	26.3
98	0.46	5.82	0	2	0	227	1.35	3.01	1.78	0	2.4	26.4	1.79	1.63	1.2	-0.6	-1	0	0	0.13	0	0.04	0.75	-0.5	26.3
99	0.23	6.33	0	3	1	354	1.53	3.97	2.34	0	1.96	23.5	2.04	2.12	1.85	-1	1	0	0	0.01	-0	0.06	0.11	-0.5	35.53
100	0	6.09	0	0	0	36.3	1.98	2.1	1.89	0	1.67	18.4	1.78	1.6	1.37	-0.1	0	0	0	0.2	0.18	-0	1.08	-0.6	0
101	0	6.3	0	1	1	185	1.89	3.33	1.41	0	2.13	25.5	1.76	1.72	1.3	-0.6	0	0	0	0.13	0.12	0.07	1.19	-0.5	20.31
102	0	5.39	0	0	0	16	1.63	1.63	1.89	0	1.1	12.1	1.1	0.69	0	1	0	0	0	0.02	0.12	-0.1	0.22	-0.8	0
103	0.2	5.9	0	1	0	86	1.57	2.12	1.79	0	1.95	23.4	1.47	1.2	0.85	-0.1	0	0	0	0.08	0.16	-0	0.78	0.32	20.23
104	0	5.9	0	1	1	80	1.78	2.53	1.79	0	1.78	21.4	1.47	1.54	0	-0.1	0	0	0	0.12	0.12	0.04	0.71	0.32	20.23
105	0.65	5.9	0	1	0	86	1.17	2.41	2.02	0	1.59	19	1.54	1.2	0.69	-0.6	0	0	0	0.21	0.04	0.18	0.21	-0.6	9.23
106	0.28	6.41	0	2	0	194	1.12	2.91	2.58	0	1.55	20.1	1.85	1.56	1.3	-1	0.67	0	0	0.35	0.08	0.27	0.24	-0.5	18.46
107	0.36	6.41	0	2	0	202	1.65	2.4	1.71	0	2.05	26.6	1.73	1.54	1.3	-0.2	1.5	0	0	0.19	0.07	0.09	0.87	1.41	40.46
108	0.5	6.93	0	3	1	334	1.96	3.08	1.65	0	2.16	30.2	1.95	1.99	1.98	-0.2	1	0	0	0.39	0.04	0.22	0.63	2.49	60.69
109	0.57	6.48	0	0	0	29.1	2.1	2.08	1.98	0	1.59	19	1.99	1.54	0.69	-0.6	0	0	0	0.24	0.19	0.02	0.27	-0.6	0
110	0.37	6.39	0	0	0	58	1.76	2.05	1.78	0	2.04	26.5	1.43	1.15	0.77	-0.1	0	0	0	0.04	0.18	-0.1	0.5	1.55	26.02
111	0	6.39	0	0	1	54	2.03	2.44	1.75	0	1.88	24.5	1.43	1.47	0	-0.1	0	0	0	0.08	0.15	-0	0.32	1.55	26.02
112	0	6.39	0	0	1	58	1.62	2.7	1.99	0	1.14	14.8	1.5	1.39	0	-1	0	0	0	0.23	0.09	0.2	0.13	-0.6	3.24

Annexes

113	0.62	6.9	0	1	0	164	1.58	2.47	1.79	0	2.4	33.7	1.73	1.5	1.27	-0.4	-1.3	0	0	0.28	0.09	0.19	0.5	1.41	32.26
114	0	7.28	1	0	15	2456	1.91	3.7	2.88	0	0.92	11	2.87	3.65	3.98	0	0.5	0	0	-0.5	-0.7	0.61	0.66	-0.3	0
115	0	5.71	1	1	3	180	2.3	3.48	1.04	0	1.84	16.5	1.9	1.9	0	-0.3	0	0	0	0.07	0.02	0.03	0.29	-0.7	13.14
116	0	6.28	1	0	3	112	3.23	3.22	0.93	0	1.84	16.5	2.23	2.23	0	-0.3	0	0	0	-0.2	0.03	0.16	0.32	-0.7	0
117	0	6.19	1	0	3	148	2.67	3.31	0.94	0	2.12	21.2	1.85	1.85	0	-0.3	0	0	0	0.14	0.05	0.06	0.1	0.13	15.79
118	0.26	5.79	0	0	0	78	2.43	2.43	1.47	0	2.16	21.6	1.39	1.1	0.69	1	0	0	0	-0	0.12	-0	0.31	-0.9	0
119	0.55	5.79	0	0	0	76	3.11	3.11	1.37	0	2.37	23.7	1.39	1.1	0.69	1	0	0	0	-0	-0	-0	0.24	-0.9	0
120	0.24	5.79	0	0	0	74	2.73	2.73	0.74	0	1.37	13.7	1.39	1.1	0.69	1	0	0	0	0.07	-0	0.12	0.25	-0.9	0
121	0.57	6.82	0	2	1	324	1.77	3.76	1.42	0	2.79	33.5	1.95	2.05	1.47	-0.4	-0.3	0	0	0.16	-0.1	0.16	0.21	-0.6	26.3
122	0.68	7.33	0	3	2	514	1.93	4.09	1.58	0	2.05	26.6	2.12	2.39	1.73	-0.4	0.02	0	0	0.15	-0	0.12	0.15	-0.5	43.37
123	0.18	6.79	0	0	0	164	2.41	2.51	1.65	0	1.95	23.4	1.64	1.43	1.15	-0.1	-1	0	0	-0	0.24	-0.1	1.4	-0.7	23.79
124	0	6.39	1	0	3	48	2	2	1.88	0	0.92	11	1.61	1.1	0	1	0	0	0	0	0.12	-0.1	0.21	-0.9	0
125	0.42	6.39	0	0	0	56	2.3	2.3	1.61	0	2.22	26.7	1.39	1.1	0.69	1	0	0	0	0	0.12	-0	0.29	-0.9	0
126	0.66	6.39	0	0	0	56	2.55	2.55	1.6	0	1.79	21.5	1.39	1.1	0.69	1	0	0	0	0.02	0.13	-0	0.23	-0.9	0
127	0.78	6.39	0	0	0	56	2.55	2.55	1.72	0	1.79	21.5	1.39	1.1	0.69	1	0	0	0	0.03	0.13	-0	0.22	-0.9	0
128	0	6.39	0	0	1	54	2.8	2.8	1.39	0	1.96	23.5	1.39	1.39	0	1	0	0	0	0.03	0.13	-0	0.16	-0.9	0
129	0.35	6.9	0	1	0	171	2.2	2.46	1.72	0	2.19	28.5	1.67	1.47	1.2	-0.1	-1	0	0	-0	0.2	-0.1	0.93	-0.7	17.07
130	0.55	6.9	0	1	1	155	2.55	2.94	1.77	0	1.85	24.1	1.67	1.73	1.2	-0.1	0	0	0	0.04	0.15	-0.1	0.21	-0.7	17.07
131	0	6.9	1	1	3	136	1.53	2.32	2.24	0	1.55	20.1	1.9	1.9	0	-0.3	0	0	0	0.4	0.08	0.15	0.59	-0.7	9.23
132	0.45	7.41	0	2	1	300	2.33	3	1.66	0	2.4	33.7	1.9	2.01	1.54	-0.1	-1	0	0	0.04	0.15	-0.1	0.59	0.16	37.3
133	0.39	7.41	0	2	2	280	2.62	3.48	1.65	0	2.26	31.7	1.9	2.13	1.85	-0.1	0	0	0	0.04	0.12	-0.1	0.55	0.16	37.3
134	0.28	7.41	1	2	3	268	1.29	2.45	2.47	0	1.81	25.3	2.12	2.13	1.54	-0.5	0	0	0	0.51	0.07	0.28	0.26	-0.6	18.46
135	0.56	7.41	1	2	3	268	1.22	2.39	2.55	0	1.38	19.3	2.12	2.12	1.56	-0.5	0	0	0	0.54	0.11	0.32	0.9	-0.6	18.46
136	0.64	7.41	0	2	1	286	1.98	3.46	1.87	0	2.09	29.3	1.95	2.01	1.79	-0.4	0.5	0	0	0.17	0.06	0.04	0.15	-0.6	26.3
137	0.8	7.41	0	2	1	292	1.69	3.44	1.69	0	2.09	29.3	1.95	2.05	1.47	-0.4	-0.3	0	0	0.21	-0	0.11	0.27	-0.6	26.3
138	0.45	7.41	0	2	0	322	1.56	2.94	1.82	0.08	2.4	33.7	1.95	1.81	1.54	-0.4	-0.3	0	0	0.13	0.03	-0	0.75	-0.6	26.3

Annexes

139	0.47	7.69	0	0	1	65.8	2.54	2.66	1.82	0	1.63	22.8	1.94	2.19	1.6	-0.1	0	0	0	0.28	0.23	-0.1	0.32	-0.7	0
140	0	7.39	1	0	3	104	1.78	2.21	2.04	0	1.81	25.3	1.85	1.85	0	-0.3	0	0	0	0.27	0.12	0.02	0.19	0.13	12.03
141	0.5	6.99	0	0	0	38	1.98	1.98	1.86	0	1.15	16.1	1.39	1.1	0.69	1	0	0	0	-0	0.19	-0.1	0.3	-0.9	0
142	0	6.99	0	0	1	36	2.32	2.32	1.84	0	1.1	15.3	1.39	1.39	0	1	0	0	0	0.01	0.19	-0.1	0.16	-0.9	0
143	0.53	8.38	1	0	3	192	1.55	2.2	2.1	0	1.75	28	2.04	2.04	1.47	-0.5	0	0	0	0.44	0.25	0.18	0.22	1.16	24.06
144	0.62	7.5	0	1	0	138	1.89	2.29	1.76	0	1.87	28.1	1.67	1.47	1.2	-0.1	-1	0	0	0.09	0.21	-0	0.8	0.13	20.23
145	0.37	7.5	0	1	1	128	2.14	2.67	1.76	0	1.87	28.1	1.67	1.67	1.3	-0.1	0	0	0	0.13	0.18	-0	0.46	0.13	20.23
146	0	7.5	0	1	3	116	2.46	3.23	1.59	0	1.69	25.3	1.67	2.08	0	-0.1	0	0	0	0.16	0.15	0.01	0.46	0.13	20.23
147	0.67	7.5	0	1	1	124	2.13	2.68	1.71	0	1.87	28.1	1.67	1.73	1.2	-0.1	0	0	0	0.13	0.19	-0	0.19	0.13	20.23
148	0.92	7.5	0	1	0	130	1.35	2.61	1.8	0	1.43	21.4	1.73	1.54	1.1	-0.4	0.25	0	0	0.27	0.05	0.21	0.25	-0.7	9.23
149	0.89	8.01	0	2	0	280	1.39	2.84	2.14	0.08	1.55	24.8	1.99	1.73	1.56	-0.7	-1	0	0	0.38	0.04	0.34	0.29	-0.6	18.46
150	0.86	8.01	0	2	1	258	2.17	2.97	1.63	0	2.25	36	1.9	1.95	1.86	-0.1	-1	0	0	0.28	0.16	0.09	0.48	1.16	40.46
151	0.81	8.01	0	2	1	270	2.1	2.82	1.68	0	2.25	36	1.9	1.95	1.54	-0.1	0.5	0	0	0.16	0.18	0.08	0.65	1.16	40.46
152	0.8	8.52	0	3	0	500	1.52	2.91	1.78	0.08	1.97	33.5	2.12	1.99	1.88	-0.4	-0.4	1.33	0	0.45	0.04	0.36	0.91	1.12	49.69
153	0.82	8.08	0	0	0	62.4	2.31	2.3	1.89	0	1.43	21.4	2.12	1.99	1.1	-0.4	0.25	0	0	0.35	0.22	0	0.32	-0.7	0
154	0.69	7.98	0	0	0	102	2.04	2.24	1.75	0	1.97	31.5	1.64	1.43	1.15	-0.1	-1	0	0	0.08	0.23	-0.1	0.43	1.23	26.02
155	0.85	7.98	0	0	0	98	1.7	2.41	1.78	0	1.67	26.8	1.67	1.47	1.1	-0.4	0.25	0	0	0.19	0.17	0.08	0.29	0.13	12.03
156	0.72	7.98	0	0	1	94	2.34	2.61	1.78	0	1.97	31.5	1.64	1.64	1.2	-0.1	0	0	0	0.02	0.23	-0.1	0.46	1.23	26.02
157	0	7.98	0	0	3	86	2.73	3.13	1.53	0	1.8	28.7	1.64	2.02	0	-0.1	0	0	0	0.1	0.19	-0	0.23	1.23	26.02
158	0.83	9.01	0	2	0	456	1.79	2.74	1.73	0.08	2.39	43.1	2.08	1.95	1.81	-0.3	-0.6	2.13	0.12	0.38	0.1	0.23	0.85	2.21	52.49
159	0.85	9.92	0	0	15	6172	3.75	6.5	3.31	1.2	1.16	19.7	3.18	4.01	4.32	-0.2	-0	0.42	0	0.52	-1.3	0.55	0.68	-0.3	0
160	0.23	7.22	1	2	4	475	2.24	3.25	0.94	0.13	2.55	28.1	2.2	2.34	1.81	-0.2	-1	0	0	0.03	0.04	0.04	0.6	-0.7	30.21
161	0.12	7.19	1	0	3	250	2.7	3.18	1.01	0	1.79	19.7	1.99	1.99	1.43	-0.2	0	0	0	0.29	-0.2	0.35	0.26	-0.8	12.89
162	0.31	7.39	0	0	0	128	2.48	2.48	1.56	0	2.19	28.5	1.61	1.39	1.1	1	1	0	0	-0	0.2	-0.1	0.42	-0.9	0
163	0	7.39	1	0	3	102	2.32	2.32	1.77	0	2.05	26.6	1.79	1.79	0	1	0	0	0	0.18	0.02	0.02	0.15	-0.9	0
164	0	7.9	1	1	4	230	2.19	2.42	1.94	0	1.81	25.3	1.99	2.16	1.3	0	0	0	0	0.11	0.21	-0.1	1.3	-0.8	17.07

Annexes

165	0.59	8.39	0	0	0	246	2.5	2.56	1.62	0.08	1.87	28.1	1.82	1.64	1.43	-0	-0.4	0	0	-0	0.32	-0.1	1.35	-0.8	23.79
166	0.64	8.9	1	1	5	337	1.91	2.73	1.8	0	2.22	35.5	2.18	2.42	1.95	-0.2	0	0	0	0.31	0.14	0.03	0.83	-0.7	20.31
167	0	7.99	1	0	3	80	2.08	2.08	2.03	0	0.92	13.8	1.79	1.79	0	1	0	0	0	0.11	0.15	-0.1	0.17	-0.9	0
168	0.58	7.99	0	0	0	99	2.4	2.4	1.66	0	2.28	34.2	1.61	1.39	1.1	1	1	0	0	-0	0.2	-0.1	0.37	-0.9	0
169	0.79	7.99	0	0	0	97	2.62	2.62	1.81	0	2.04	30.6	1.61	1.39	1.1	1	1	0	0	0.03	0.21	-0.1	0.28	-0.9	0
170	0.72	7.99	0	0	0	97	2.62	2.62	1.73	0	2.04	30.6	1.61	1.39	1.1	1	1	0	0	0	0.2	-0.1	0.28	-0.9	0
171	0.93	7.99	0	0	1	91	2.85	2.85	1.65	0	2.17	32.6	1.61	1.61	1.1	1	0	0	0	0.01	0.2	-0.1	0.24	-0.9	0
172	1.13	7.99	0	0	1	91	3.14	3.14	1.6	0	1.69	25.3	1.61	1.61	1.1	1	0	0	0	0.02	0.21	-0.1	0.21	-0.9	0
173	0.73	7.99	0	0	1	91	2.83	2.83	1.55	0	2.15	32.2	1.61	1.61	1.1	1	0	0	0	-0	0.2	-0.1	0.26	-0.9	0
174	0.27	8.5	1	1	4	194	1.92	2.27	1.96	0	1.72	27.5	1.99	2.16	1.3	0	0	0	0	0.24	0.18	-0	0.41	0	20.23
175	0.66	8.5	0	1	1	228	2.64	2.89	1.75	0	1.92	30.8	1.85	1.9	1.47	-0	-0.4	0	0	0	0.22	-0.1	0.34	-0.8	17.07
176	0.82	8.5	0	1	1	218	2.76	3.06	1.75	0	1.67	26.8	1.85	1.9	1.73	-0	0.2	0	0	0.06	0.21	-0.1	0.17	-0.8	17.07
177	0.96	8.5	0	1	2	212	3	3.33	1.76	0	1.8	28.8	1.85	2.04	1.73	-0	0	0	0	0.05	0.22	-0.1	0.41	-0.8	17.07
178	0.63	8.5	1	1	4	190	1.64	2.41	2.12	0	1.8	28.8	2.04	2.2	1.1	-0.2	0	0	0	0.39	0.09	0.14	0.17	-0.8	9.23
179	0.72	9.01	0	2	1	421	2.46	2.94	1.68	0.16	2.29	39	2.04	2.13	1.73	-0.1	-0.5	0	0.02	0.01	0.23	-0.1	0.69	0.05	37.3
180	0.75	9.01	0	2	2	397	2.69	3.27	1.71	0	2.29	39	2.04	2.25	1.73	-0.1	-1	0	0	-0.1	0.15	-0.1	0.82	0.05	37.3
181	0.68	9.01	0	2	1	393	2.2	3.33	1.89	0.08	2.13	36.3	2.08	2.13	1.95	-0.3	-0.5	0	0.01	0.11	0.12	-0	0.23	-0.7	26.3
182	0.66	9.01	0	2	1	385	1.95	3.5	1.8	0.08	2.02	34.3	2.08	2.17	1.95	-0.3	-0.1	0	0.01	0.26	0.07	0.07	0.18	-0.7	26.3
183	0.57	9.01	0	2	2	369	2.39	3.75	1.89	0	2.02	34.3	2.08	2.25	2.16	-0.3	0.4	0	0	0.11	0.1	0.02	0.18	-0.7	26.3
184	0.68	9.01	0	2	1	405	1.8	3.31	1.79	0.16	2.13	36.3	2.08	2.17	1.73	-0.3	-0.1	0	0.01	0.22	0.02	0.06	0.33	-0.7	26.3
185	0.48	9.01	0	2	1	425	1.88	3.23	1.82	0.16	2.29	39	2.08	2.09	1.79	-0.3	-0.1	0	0	0.12	0.16	-0.1	0.88	-0.7	26.3
186	0.93	9.01	0	2	2	381	1.92	3.74	1.79	0	2.02	34.3	2.08	2.31	1.67	-0.3	-0.3	0	0	0.29	0.07	0.09	0.28	-0.7	26.3
187	0.75	9.29	0	0	0	124	2.34	2.4	1.83	0.08	1.57	26.7	2.07	1.94	1.78	-0	-0.4	0	0	0.12	0.32	-0	0.73	-0.8	0
188	0.77	8.59	0	0	0	74	2.19	2.19	1.82	0	1.16	19.7	1.61	1.39	1.1	1	1	0	0	-0	0.26	-0.1	0.35	-0.9	0
189	1.04	8.59	0	0	1	68	2.54	2.54	1.97	0	1.28	21.7	1.61	1.61	1.1	1	0	0	0	-0	0.24	-0.2	0.23	-0.9	0
190	0	8.59	0	0	3	64	3.02	3.02	1.55	0	1.09	18.5	1.61	1.95	0	1	0	0	0	-0	0.25	-0.1	0.16	-0.9	0
191	0.81	9.1	0	1	0	212	2.11	2.41	1.79	0.08	1.79	32.3	1.85	1.67	1.47	-0	-0.4	0	0	0.09	0.28	-0.1	0.77	0	20.23
192	0.88	9.1	0	1	1	190	2.33	2.72	1.76	0	1.83	33	1.85	1.9	1.47	-0	-0.4	0	0	0.04	0.25	-0	0.33	0	20.23

Annexes

193	1.2	9.1	0	1	1	190	2.44	2.85	1.75	0	1.95	35	1.85	1.85	1.73	-0	-1	0	0	0.02	0.27	-0.1	0.66	0	20.23
194	1.05	9.1	0	1	3	170	2.74	3.31	1.68	0	1.79	32.3	1.85	2.2	1.47	-0	0	0	0	0.12	0.22	-0.1	0.15	0	20.23
195	1.06	9.1	0	1	1	198	2.34	2.72	1.93	0	1.95	35	1.85	1.85	1.47	-0	-1	0	0	0.05	0.24	-0.1	0.79	0	20.23
196	1.25	9.1	0	1	2	176	2.61	3.12	1.74	0	1.79	32.3	1.85	2.04	1.73	-0	0	0	0	0.09	0.28	-0.1	0.22	0	20.23
197	0.76	9.1	0	1	0	196	1.56	2.69	1.88	0.08	1.56	28	1.9	1.73	1.47	-0.3	0.2	0	0.03	0.27	0.08	0.17	0.29	-0.8	9.23
198	1.43	9.1	0	1	3	170	2.18	3.6	1.83	0	1.52	27.3	1.9	2.2	1.39	-0.3	0	0	0	0.18	0.2	0.09	0.16	-0.8	9.23
199	1.1	9.1	0	1	1	182	2.42	2.86	1.73	0	1.83	33	1.85	1.9	1.73	-0	0.2	0	0	0.02	0.26	-0.1	0.21	0	20.23
200	0.15	8.46	1	0	9	2394	2.33	4.1	1.17	0.91	1	12	2.8	3.26	3.64	0	0	0	0	1.41	-1.2	1.22	0.91	-0.5	0
201	0.85	11.7	0	0	18	9274	4.14	6.79	3.2	1.68	1.16	23.1	3.34	4.17	4.53	-0.1	-0	-0	0	-0.6	0.26	0.51	0.64	-0.3	0
202	0.14	9.2	1	0	5	377	3.08	3.24	0.9	0.22	1.92	23	2.56	2.93	2.76	0	0.33	0	0	0.15	-0.3	0.86	0.72	-0.7	0
203	0.15	9.2	1	0	5	373	3.14	3.31	0.9	0.22	1.92	23	2.56	2.93	3.2	0	-1	0	0	0.56	-0.1	0.69	0.67	-0.7	0
204	0.15	8.49	1	0	4	290	3.02	3.12	0.92	0.11	1.65	19.8	2.3	2.56	2.29	0	-1	0	0	0.38	-0.2	0.61	0.55	-0.8	0
205	0.15	9.22	1	0	4	280	3.23	3.03	0.86	0.11	1.65	19.8	2.87	3.34	3.22	0	-1	0	0	-0.6	-0.2	0.83	0.39	-0.8	0
206	0.35	9.21	1	2	5	878	2.41	3.38	0.97	0.19	2.01	28.1	2.42	2.62	2.46	0.47	-1	0	0	0.33	-0.1	0.33	0.87	-0.6	45.82
207	0.15	7.79	1	0	3	216	3	3	0.95	0	1	12	1.95	1.95	1.39	1	0	0	0	0.36	-0.1	0.4	0.12	-0.9	0
208	0.27	8.31	1	1	4	378	2.65	3.14	0.89	0.11	1.91	24.9	2.12	2.27	1.9	0	-1	0	0	0.51	-0.1	0.48	0.37	-0.1	20.23
209	0.51	8.79	1	0	4	332	2.84	3.09	1.37	0.11	2.01	28.1	2.1	2.23	1.85	0	-1	0	0	0.49	-0.1	0.49	0.22	0.85	26.02
210	0.64	8.79	1	0	4	332	2.74	3.19	1.5	0.11	2.56	35.8	2.12	2.25	1.82	-0.2	0.17	0	0	0.36	-0.1	0.35	0.15	-0.8	12.89
211	0.42	8.79	1	0	4	334	2.8	3.16	1.47	0.11	2.61	36.5	2.12	2.23	1.85	-0.2	0.17	0	0	0.3	-0.1	0.29	0.21	-0.8	12.89
212	0.67	8.79	1	0	4	336	2.81	3.14	1.47	0.11	2.61	36.5	2.12	2.23	1.82	-0.2	-1	0	0	0.26	-0.1	0.3	0.34	-0.8	12.89
213	0.35	8.9	1	1	4	353	2.37	2.56	1.8	0.11	2.61	39.1	2.12	2.27	1.9	0	-1	0	0	0.09	0.29	-0.2	1	-0.8	17.07
214	0.45	8.99	1	0	3	160	2.26	2.26	1.9	0	2	32	1.95	1.95	1.39	1	0	0	0	-0	0.32	-0.2	0.18	-0.9	0
215	0.53	9.5	1	1	4	320	2.13	2.28	2.03	0.11	1.74	29.5	2.12	2.27	1.9	0	-1	0	0	-0.1	0.32	-0.3	1.11	-0.8	17.07

Annexes

216	0.68	9.5	0	1	2	342	3.46	3.74	1.67	0	2.13	36.2	1.99	2.16	1.67	-0	-0.4	0	0	0	0.21	-0.1	0.31	-0.8	17.07
217	0.59	9.59	1	0	3	132	2	2	2.11	0	0.92	16.5	1.95	1.95	1.39	1	0	0	0	-0.1	0.35	-0.3	0.19	-0.9	0
218	0.52	9.59	1	0	4	126	2.18	2.18	1.97	0	1.34	24	1.95	2.08	1.1	1	0	0	0	0.07	0.22	-0.1	0.23	-0.9	0
219	0.78	9.59	0	0	0	162	2.49	2.49	1.64	0.08	2.21	39.8	1.79	1.61	1.39	1	1	0	0.08	-0	0.27	-0.1	0.43	-0.9	0
220	0.78	9.59	0	0	1	150	2.81	2.81	1.68	0	2.21	39.8	1.79	1.79	1.39	1	1	0	0	-0	0.24	-0.1	0.34	-0.9	0
221	0.76	10.1	1	1	4	277	1.93	2.18	2	0.11	1.63	31	2.12	2.27	1.9	0	-1	0	0	0.05	0.33	-0.2	0.56	-0.1	20.23
222	0.81	10.1	0	1	1	329	2.68	2.86	1.79	0.16	1.88	35.7	1.99	2.04	1.67	-0	-0.2	0	0.01	-0	0.29	-0.2	0.38	-0.8	17.07
223	0.8	10.1	0	1	1	309	2.84	3.05	1.8	0.08	1.77	33.7	1.99	2.04	1.9	-0	-0.2	0	0	0.01	0.27	-0.2	0.23	-0.8	17.07
224	0.82	10.1	0	1	2	309	2.96	3.17	1.82	0	1.88	35.7	1.99	2.16	1.67	-0	-0.4	0	0	0.02	0.32	-0.2	0.34	-0.8	17.07
225	0.78	10.1	0	1	0	333	1.82	2.87	1.64	0.08	2.39	45.4	2.04	1.9	1.67	-0.2	-0.2	0.17	0	0.18	0.07	0.09	0.39	-0.8	9.23
226	0.85	10.6	0	2	1	578	2.55	2.91	1.72	0.16	2.18	43.6	2.16	2.25	1.9	-0	-0.3	-1	0	0.03	0.26	-0.2	0.76	-0	37.3
227	0.64	10.6	0	2	1	514	2.15	3.44	1.82	0.08	2.07	41.4	2.2	2.28	2.08	-0.2	-0.5	0.33	0	0.21	0.13	0.01	0.2	-0.7	26.3
228	0.54	10.6	0	2	1	520	2	3.43	1.85	0.16	2.07	41.4	2.2	2.28	2.12	-0.2	0	0.33	0.01	0.26	0.09	0.02	0.23	-0.7	26.3
229	0.57	10.6	0	2	2	486	2.29	3.78	1.86	0.16	1.93	38.7	2.2	2.38	2.27	-0.2	0	0	0.01	0.21	0.12	0.04	0.18	-0.7	26.3
230	0.82	10.6	0	2	1	554	1.93	3.21	1.79	0.16	2.07	41.4	2.2	2.28	1.9	-0.2	-0.3	-0.3	0	0.2	0.08	-0	0.42	-0.7	26.3
231	0.6	10.6	0	2	2	526	2.03	3.51	1.85	0.32	2.07	41.4	2.2	2.38	1.95	-0.2	0	0	0.01	0.22	0.1	0.01	0.42	-0.7	26.3
232	0.86	10.6	0	2	0	612	1.94	2.89	1.83	0.08	2.18	43.6	2.2	2.09	1.9	-0.2	-0.3	-0.3	0	0.1	0.19	-0.1	0.84	-0.7	26.3
233	1.03	11.1	0	3	1	867	1.71	3.41	1.84	0.16	2.12	44.5	2.37	2.44	2.09	-0.4	-0.4	0	0.55	0.49	0.05	0.33	0.39	-0.6	35.53
234	0.88	10.2	0	0	0	128	2.34	2.34	1.86	0.08	1.16	23.1	1.79	1.61	1.39	1	1	0	0.04	0.06	0.33	-0.1	0.38	-0.9	0
235	1.01	10.2	0	0	1	118	2.63	2.63	1.86	0	1.32	26.4	1.79	1.79	1.39	1	1	0	0	-0	0.33	-0.2	0.33	-0.9	0
236	1.54	10.2	0	0	1	114	2.75	2.75	1.85	0	1.32	26.4	1.79	1.79	1.61	1	1	0	0	-0	0.31	-0.2	0.27	-0.9	0
237	1.25	10.2	0	0	3	106	3.17	3.17	1.77	0	1.26	25.1	1.79	2.08	1.39	1	0	0	0	-0	0.29	-0.2	0.2	-0.9	0
238	1.74	10.2	0	0	2	108	2.99	2.99	1.89	0	1.16	23.1	1.79	1.95	1.61	1	0	0	0	-0.1	0.3	-0.2	0.25	-0.9	0
239	0.89	10.7	0	1	0	312	2.27	2.5	1.81	0.08	1.72	36.1	1.99	1.85	1.67	-0	-0.2	-1	0	0.07	0.33	-0.1	0.76	-0.1	20.23
240	0.95	10.7	0	1	1	282	2.45	2.75	1.83	0.16	1.78	37.4	1.99	2.04	1.67	-0	-0.2	0	0	0.14	0.32	-0.1	0.62	-0.1	20.23
241	1.14	10.7	0	1	1	266	2.57	2.91	1.8	0.08	1.78	37.4	1.99	2.04	1.9	-0	-0.2	0	0	0.12	0.34	-0.2	0.25	-0.1	20.23
242	1.19	10.7	0	1	1	278	2.59	2.9	1.81	0.08	1.91	40.1	1.99	1.99	1.9	-0	-0.2	0	0	0.05	0.34	-0.2	0.59	-0.1	20.23
243	1.06	10.7	0	1	2	264	2.69	3.04	1.87	0	1.88	39.4	1.99	2.16	1.67	-0	-0.4	0	0	-0	0.19	-0	0.27	-0.1	20.23

Annexes

244	1.2	10.7	0	1	2	248	1.92	3.44	1.9	0	1.38	28.9	2.04	2.23	1.61	-0.2	0.17	0	0	0.37	0.22	0.11	0.29	-0.8	9.23
245	0.62	10.7	0	1	0	284	1.69	2.77	1.92	0.08	1.57	32.9	2.04	1.9	1.73	-0.2	0.17	0.17	0.02	0.27	0.12	0.13	0.32	-0.8	9.23
246	1.28	11.2	0	2	1	456	1.69	3.6	1.96	0.08	1.64	36.1	2.23	2.31	2.04	-0.4	-0.2	0.33	0.01	0.56	0.13	0.29	0.24	-0.7	18.46
247	1.95	11.2	0	0	1	208	2.31	3.3	1.79	0	1.36	30	2.02	2.02	1.95	-0.4	0.17	0	0	0.28	0.36	0.04	0.21	-0.8	3.24
248	0.77	11.2	0	0	0	240	2.03	2.62	1.86	0.08	1.76	38.8	1.99	1.85	1.67	-0.2	0.17	0.17	0.06	0.19	0.31	-0	0.36	-0.1	12.03
249	1.59	12.7	0	3	1	1054	2.41	3.7	1.73	0.24	2.16	54.1	2.44	2.44	2.46	-0.3	-0.5	2.09	0	0.74	0.14	0.33	0.63	1.79	63.93
250	0.98	13.6	0	0	21	####	4.49	7.03	3.2	2.16	1.15	26.4	3.48	4.31	4.7	-0.1	-0	-0	0.02	-0.9	0.1	0.84	0.63	-0.3	0
251	0.45	10.5	1	2	6	966	2.84	3.31	0.86	0.3	2.84	42.6	2.61	2.96	3.01	0	-0.1	0	0	0.41	-0.1	0.42	0.44	-0.1	37.3
252	0.26	9.19	1	0	4	558	3	3.07	0.81	0.15	1.91	24.9	2.22	2.32	2.12	0	-0.6	0	0	0.31	0.03	0.42	0.74	-0.8	23.79
253	0.35	9.31	1	1	4	568	2.84	3.03	0.91	0.15	1.87	26.2	2.23	2.34	2.16	0	-0.6	0	0	0.38	0.04	0.35	0.64	-0.8	17.07
254	0.61	10.1	1	0	5	385	3.03	3.11	1.45	0.3	2.52	37.8	2.39	2.7	2.48	0	-0.4	0	0	0.37	-0	0.58	0.56	-0.8	0
255	0.63	9.39	1	0	4	294	3.02	3.02	1.46	0.11	2.04	30.6	2.08	2.2	1.79	1	1	0	0	0.33	0.03	0.36	0.18	-0.9	0
256	0.93	9.9	1	1	4	498	2.17	3.09	1.68	0.15	2.25	36	2.27	2.37	2.16	-0.1	-0.2	0	0	0.62	-0.1	0.54	0.21	-0.8	9.23
257	0.81	9.9	1	1	4	514	2.58	2.91	1.33	0.15	2.42	38.8	2.23	2.34	2.16	0	-0.6	0	0	0.43	0.06	0.39	0.46	-0.2	20.23
258	1.02	9.9	1	1	5	478	2.82	3.23	1.42	0.22	2.7	43.2	2.23	2.46	2.3	0	-0.4	0	0	0.5	-0	0.39	0.28	-0.2	20.23
259	0.67	9.9	1	1	5	486	2.77	3.17	1.44	0.22	2.7	43.2	2.23	2.46	2.16	0	-0.6	0	0	0.49	-0.1	0.44	0.33	-0.2	20.23
260	0.65	9.9	1	1	5	494	2.74	3.12	1.44	0.3	2.7	43.2	2.23	2.46	2.16	0	-0.4	0	0	0.47	-0	0.43	0.39	-0.2	20.23
261	0.77	10.4	1	0	5	428	2.78	3.25	1.62	0.22	2.38	40.5	2.23	2.46	2.1	-0.1	0.14	0	0	0.44	-0.1	0.36	0.15	-0.8	12.89
262	0.68	11.6	0	2	1	758	2.12	3.47	1.62	0.16	2.71	57	2.3	2.38	2.23	-0.2	-0.2	-0.1	0.04	0.24	0.1	-0	0.36	-0.7	26.3
263	1.18	11.2	1	0	3	196	2.04	2.04	2.17	0	0.92	19.3	2.08	2.08	2.08	1	0	0	0	-0.1	0.21	-0.2	0.22	-0.9	0
264	1.02	11.2	1	0	4	193	2.12	2.12	2.03	0.11	1.3	27.3	2.08	2.2	1.79	1	1	0	0	-0.2	0.44	-0.3	0.24	-0.9	0
265	1.08	11.2	1	0	4	194	2.14	2.14	1.95	0.13	1.3	27.3	2.08	2.2	1.61	1	1	0	0	0.08	0.31	-0.2	0.29	-0.9	0
266	0.86	11.2	1	0	5	186	2.26	2.26	1.97	0	1.44	30.2	2.08	2.3	1.61	1	1	0	0	0.09	0.23	-0.2	0.25	-0.9	0
267	0.86	11.2	1	0	5	186	2.26	2.26	1.97	0	1.44	30.2	2.08	2.3	1.61	1	1	0	0	0.09	0.23	-0.2	0.25	-0.9	0
268	0.89	11.2	0	0	0	249	2.56	2.56	1.69	0.08	2.13	44.7	1.95	1.79	1.61	1	1	1	0	-0.1	0.34	-0.2	0.46	-0.9	0
269	0.68	12.2	0	2	1	695	2.08	3.35	1.83	0.16	2.03	46.7	2.3	2.38	2.23	-0.2	-0.2	-0.1	0.03	0.24	0.2	-0.1	0.29	-0.7	26.3
270	0.93	12.2	0	2	1	775	2.61	2.89	1.76	0.16	2.08	47.9	2.27	2.35	2.04	-0	-0.2	-0.6	0.06	-0	0.38	-0.3	0.81	-0.1	37.3
271	0.81	12.2	0	2	2	651	2.43	3.6	2.04	0.16	2	46	2.3	2.47	2.2	-0.2	-0.6	0.29	0.08	0.18	0.14	-0.1	0.2	-0.7	26.3

Annexes

272	0.55	12.2	0	2	1	675	2.17	3.44	1.85	0.16	2.03	46.7	2.3	2.38	2.23	-0.2	-0.4	0.29	0.01	0.22	0.15	-0	0.22	-0.7	26.3
273	0.46	12.2	0	2	2	643	2.28	3.7	1.89	0.24	2	46	2.3	2.47	2.4	-0.2	0.03	0.29	0.06	0.22	0.15	-0	0.22	-0.7	26.3
274	0.94	12.2	0	2	2	711	2.15	3.36	1.96	0.16	2.12	48.7	2.3	2.47	2.04	-0.2	-0.5	-0.4	0.06	0.15	0.13	-0	0.42	-0.7	26.3
275	0.93	11.8	0	0	0	204	2.45	2.45	1.86	0.08	1.15	26.4	1.95	1.79	1.61	1	1	1	0.2	-0	0.38	-0.2	0.4	-0.9	0
276	0.99	11.8	0	0	1	190	2.68	2.68	1.96	0.16	1.33	30.5	1.95	1.95	1.61	1	1	0	0	-0	0.39	-0.3	0.38	-0.9	0
277	1.5	11.8	0	0	1	182	2.83	2.83	2.01	0.08	1.33	30.5	1.95	1.95	1.79	1	1	0	0	-0	0.38	-0.3	0.29	-0.9	0
278	1.99	11.8	0	0	1	174	2.99	2.99	1.97	0	1.33	30.5	1.95	1.95	1.95	1	1	0	0	-0.1	0.32	-0.3	0.24	-0.9	0
279	1.15	11.8	0	0	3	170	3.15	3.15	1.84	0	1.31	30	1.95	2.2	1.61	1	1	0	0	-0	0.37	-0.2	0.28	-0.9	0
280	2.06	11.8	0	0	2	168	3.14	3.14	1.9	0	1.31	30	1.95	2.08	1.95	1	1	0	0	-0.1	0.34	-0.3	0.26	-0.9	0
281	1.12	11.8	0	0	2	176	2.95	2.95	1.97	0	1.31	30	1.95	2.08	1.61	1	1	0	0	-0.1	0.25	-0.2	0.33	-0.9	0
282	2.09	11.8	0	0	3	162	3.36	3.36	1.87	0	1.31	30	1.95	2.2	1.95	1	1	0	0	-0.1	0.32	-0.2	0.23	-0.9	0
283	2.19	11.8	0	0	4	156	3.54	3.54	1.81	0	1.24	28.4	1.95	2.3	1.95	1	0	0	0	-0.2	0.31	-0.2	0.25	-0.9	0
284	0.95	12.3	0	1	0	442	2.39	2.57	1.84	0.08	1.66	39.8	2.12	1.99	1.85	-0	-0.1	-0.4	0.15	0.06	0.39	-0.2	0.74	-0.2	20.23
285	0.96	12.3	0	1	1	404	2.54	2.77	1.82	0.16	1.73	41.4	2.12	2.16	1.85	-0	-0.1	-0.4	0.16	0.02	0.39	-0.1	0.43	-0.2	20.23
286	0.97	15.4	0	0	24	####	4.78	7.23	3.16	2.64	1.14	29.6	3.6	4.44	4.85	-0.1	-0	-0	0.55	-0.8	0.34	0.82	0.62	-0.3	0
287	0.56	10.4	1	0	4	448	2.99	2.99	0.88	0.15	1.77	28.4	2.2	2.3	2.08	1	1	0	0	0.35	-0	0.42	0.24	-0.9	0
288	0.94	10.9	1	1	5	697	2.85	3.02	1.53	0.19	2.44	41.5	2.34	2.54	2.37	0	-0.3	0	0	0.39	0.02	0.35	0.38	-0.8	17.07
289	0.74	11.4	1	2	6	1016	2.72	3.09	1.47	0.38	3.02	54.3	2.46	2.74	2.59	0	-0.6	-1	0.1	0.51	0.01	0.35	0.5	-0.2	37.3
290	1.01	11	1	0	4	402	2.83	2.83	1.7	0.15	2.24	40.2	2.2	2.3	2.08	1	1	0	0	0.35	0.07	0.34	0.26	-0.9	0
291	1.63	11	1	0	5	382	3.14	3.14	1.57	0.22	2.2	39.5	2.2	2.4	2.2	1	1	0	0	0.32	0.14	0.29	0.23	-0.9	0
292	0.76	11	1	0	5	386	3.08	3.08	1.6	0.22	2.2	39.5	2.2	2.4	2.08	1	1	0	0	0.33	0.11	0.33	0.17	-0.9	0
293	0.74	11	1	0	5	390	3.03	3.03	1.59	0.3	2.2	39.5	2.2	2.4	2.08	1	1	0	0	0.4	0.08	0.41	0.17	-0.9	0
294	1.19	11.5	1	1	5	616	2.76	3.08	1.64	0.26	2.8	53.1	2.34	2.54	2.49	0	-0.3	0	0	0.56	0.04	0.36	0.21	-0.2	20.23
295	1.02	11.5	1	1	5	632	2.71	3.01	1.66	0.34	2.8	53.1	2.34	2.54	2.37	0	-0.3	0	0	0.53	-0	0.4	0.36	-0.2	20.23
296	1.03	11.5	1	1	5	648	2.66	2.95	1.67	0.34	2.8	53.1	2.34	2.54	2.37	0	-0.2	-1	0.04	0.49	0.01	0.42	0.48	-0.2	20.23
297	1.79	11.5	1	1	6	596	2.97	3.33	1.51	0.33	2.72	51.7	2.34	2.62	2.57	0	-0.4	0	0	0.53	0.07	0.37	0.3	-0.2	20.23
298	0.94	11.5	1	1	6	608	2.91	3.25	1.56	0.41	2.72	51.7	2.34	2.62	2.49	0	-0.2	0	0	0.52	0.06	0.4	0.31	-0.2	20.23
299	1.02	11.5	1	1	6	604	2.91	3.25	1.55	0.41	2.72	51.7	2.34	2.62	2.49	0	-0.4	0	0	0.47	0.06	0.34	0.2	-0.2	20.23
300	1.19	11.5	1	1	6	592	2.97	3.33	1.54	0.33	2.72	51.7	2.34	2.62	2.59	0	-0.2	0	0	0.55	0.08	0.37	0.14	-0.2	20.23

Annexes

301	1.6	11.5	1	1	6	612	2.91	3.25	1.55	0.41	2.72	51.7	2.34	2.62	2.46	0	-0.4	0	0	0.44	0.06	0.36	0.43	-0.2	20.23
302	0.73	11.5	1	1	6	608	2.9	3.25	1.57	0.33	2.72	51.7	2.34	2.62	2.37	0	-0.4	0	0	0.5	0.04	0.39	0.44	-0.2	20.23
303	1.57	12.8	1	0	3	288	2	2	2.24	0	0.92	22	2.2	2.2	2.2	1	1	0	0	0.01	0.28	-0.3	0.25	-0.9	0
304	1.27	12.8	1	0	5	272	2.19	2.19	2.01	0.3	1.42	34	2.2	2.4	2.08	1	1	0	0	-0.2	0.52	-0.4	0.26	-0.9	0
305	0.94	12.8	0	0	0	364	2.62	2.62	1.71	0.08	2.05	49.2	2.08	1.95	1.79	1	1	1	0.13	-0.1	0.39	-0.2	0.5	-0.9	0
306	0.99	13.8	0	2	1	1016	2.66	2.89	1.79	0.16	2	52	2.37	2.44	2.16	-0	-0.2	-0.4	0.2	-0	0.43	-0.3	0.84	-0.2	37.3
307	1.34	13.8	0	2	2	842	3.23	3.58	1.75	0.24	2.06	53.6	2.37	2.52	2.51	-0	-0.4	-0.6	0.58	-0.1	0.27	-0.3	0.29	-0.2	37.3
308	0.67	13.8	0	2	1	880	2.21	3.39	1.81	0.16	1.98	51.5	2.4	2.47	2.34	-0.2	-0.5	-0.1	0.01	0.2	0.21	-0.1	0.26	-0.8	26.3
309	0.42	13.8	0	2	3	808	2.39	3.83	1.87	0.32	1.93	50.2	2.4	2.62	2.51	-0.2	0.04	0.25	0.14	0.2	0.2	-0.1	0.28	-0.8	26.3
310	0.99	13.4	0	0	0	306	2.53	2.53	1.88	0.08	1.14	29.6	2.08	1.95	1.79	1	1	1	0.29	-0	0.44	-0.3	0.42	-0.9	0
311	0.99	13.4	0	0	1	288	2.72	2.72	1.96	0.16	1.32	34.4	2.08	2.08	1.79	1	1	1	0.54	-0	0.45	-0.3	0.41	-0.9	0
312	1.43	13.4	0	0	1	276	2.86	2.86	1.88	0.16	1.32	34.4	2.08	2.08	1.95	1	1	1	0.55	-0	0.44	-0.3	0.37	-0.9	0
313	1.44	13.4	0	0	1	272	2.92	2.92	1.86	0.08	1.32	34.4	2.08	2.08	1.95	1	1	1	0.01	-0	0.44	-0.3	0.35	-0.9	0
314	1.83	13.4	0	0	1	260	3.07	3.07	1.99	0.16	1.32	34.4	2.08	2.08	2.08	1	1	0	0.01	-0	0.41	-0.3	0.29	-0.9	0
315	1.03	13.4	0	0	3	260	3.11	3.11	1.89	0.24	1.32	34.4	2.08	2.3	1.79	1	1	0	0	-0	0.42	-0.3	0.35	-0.9	0
316	1.89	13.4	0	0	2	254	3.17	3.17	1.93	0.16	1.35	35.2	2.08	2.2	2.08	1	1	0	0	-0.1	0.44	-0.3	0.29	-0.9	0
317	1.51	13.4	0	0	2	258	3.1	3.1	1.98	0.16	1.35	35.2	2.08	2.2	1.95	1	1	0	0	-0.1	0.31	-0.3	0.33	-0.9	0
318	1.11	13.4	0	0	2	270	2.93	2.93	1.97	0.32	1.35	35.2	2.08	2.2	1.79	1	1	0	0	0.02	0.44	-0.3	0.44	-0.9	0
319	1.88	13.4	0	0	3	244	3.37	3.37	1.92	0.08	1.32	34.4	2.08	2.3	2.08	1	1	0	0	-0	0.39	-0.3	0.25	-0.9	0
320	2.28	13.4	0	0	2	246	3.29	3.29	1.93	0.08	1.35	35.2	2.08	2.2	2.2	1	1	0	0	-0.1	0.34	-0.3	0.27	-0.9	0
321	2.15	13.4	0	0	2	242	3.36	3.36	1.89	0	1.35	35.2	2.08	2.2	2.2	1	1	0	0	-0.1	0.41	-0.4	0.28	-0.9	0
322	2.68	13.4	0	0	3	232	3.58	3.58	1.89	0	1.32	34.4	2.08	2.3	2.3	1	1	0	0	-0.1	0.32	-0.3	0.2	-0.9	0
323	2.38	13.4	0	0	4	230	3.62	3.62	1.84	0	1.37	35.5	2.08	2.4	2.2	1	1	0	0	-0.1	0.42	-0.3	0.26	-0.9	0
324	1.19	13.4	0	0	4	242	3.39	3.39	1.89	0	1.37	35.5	2.08	2.4	1.79	1	1	0	0	-0.1	0.26	-0.2	0.34	-0.9	0
325	2.78	13.4	0	0	4	226	3.71	3.71	1.87	0	1.37	35.5	2.08	2.4	2.3	1	1	0	0	-0.2	0.32	-0.3	0.23	-0.9	0
326	2.35	13.4	0	0	3	236	3.46	3.46	1.88	0	1.18	30.8	2.08	2.3	2.2	1	1	0	0	-0.2	0.35	-0.3	0.3	-0.9	0
327	2.88	13.4	0	0	6	214	4.02	4.02	1.81	0	1.14	29.6	2.08	2.57	2.3	1	0	0	0	-0.3	0.23	-0.2	0.26	-0.9	0
328	1	13.9	0	1	0	606	2.48	2.63	1.85	0.08	1.61	43.4	2.23	2.12	1.99	-0	-0.1	-0.3	0.24	0.05	0.46	-0.2	0.72	-0.2	20.23
329	1.02	13.9	0	1	1	560	2.61	2.79	1.83	0.16	1.68	45.3	2.23	2.27	1.99	-0	-0.1	-0.3	0.59	0.07	0.38	-0.2	0.48	-0.2	20.23

Annexes

330	1.56	13.9	0	1	1	512	2.92	3.14	1.97	0.16	1.81	48.9	2.23	2.23	2.27	-0	-0.3	-0.4	0.04	0.1	0.47	-0.2	0.57	-0.2	20.23
331	0.81	13.9	0	1	0	550	1.92	2.86	1.86	0.08	1.53	41.3	2.27	2.16	2.04	-0.2	-0.3	0.13	0	0.25	0.28	0.01	0.37	-0.8	9.23
332	1.02	14.4	0	0	0	518	2.54	2.61	1.84	0.08	1.7	47.6	2.22	2.1	1.97	-0	-0.1	-0.3	0.22	0.04	0.48	-0.3	0.52	0.63	26.02
333	0.91	14.4	0	0	0	490	2.24	2.73	1.86	0.08	1.7	47.5	2.23	2.12	1.99	-0.2	-0.3	0.13	0.01	0.16	0.47	-0.1	0.4	-0.2	12.03
334	1.1	17.2	0	0	27	876	5.05	7.4	3.23	3.12	1.13	32.8	3.71	4.55	4.97	-0.1	-0	-0	1.6	-0.8	-0.1	1.15	0.64	-0.3	0
335	0.49	11.8	2	0	8	850	2.73	2.99	1	0.28	2.02	34.3	2.51	2.74	2.6	-0.1	-0.1	0	0	0.77	-0.1	0.63	0.22	-0.9	12.89
336	0.54	11.8	2	0	8	858	2.78	2.95	0.99	0.28	2.01	34.2	2.51	2.73	2.59	-0.1	-0.3	0	0	0.73	-0.1	0.63	0.32	-0.9	12.89
337	0.91	12	2	0	8	526	2.54	2.54	1.61	0.1	2.38	45.2	2.4	2.64	2.3	1	1	0	0	0.53	-0	0.42	0.25	-1	0
338	0.94	12.6	1	0	4	548	2.62	2.62	1.74	0.15	2.35	49.4	2.3	2.4	2.2	1	1	1	0.16	0.32	0.14	0.32	0.33	-1	0
339	1.28	12.6	1	0	5	518	2.85	2.85	1.61	0.19	2.26	47.4	2.3	2.49	2.3	1	1	0	0	0.27	0.12	0.23	0.32	-1	0
340	1.08	12.6	1	0	5	520	2.88	2.88	1.74	0.34	2.39	50.2	2.3	2.49	2.3	1	1	1	0.05	0.47	0.13	0.38	0.21	-1	0
341	2.07	12.6	1	0	6	484	3.25	3.25	1.62	0.33	2.13	44.7	2.3	2.57	2.49	1	1	0	0	0.28	0.25	0.23	0.16	-1	0
342	1.44	12.6	1	0	6	492	3.17	3.17	1.69	0.41	2.13	44.7	2.3	2.57	2.4	1	1	0	0	0.31	0.23	0.24	0.19	-1	0
343	0.74	12.6	1	0	6	492	3.17	3.17	1.73	0.33	2.13	44.7	2.3	2.57	2.3	1	1	0	0	0.36	0.2	0.3	0.16	-1	0
344	1.01	14.4	0	0	0	511	2.66	2.66	1.72	0.08	1.98	53.4	2.2	2.08	1.95	1	1	1	0.24	-0	0.42	-0.3	0.5	-1	0
345	1.03	15.4	0	2	1	1305	2.71	2.89	1.8	0.16	1.93	55.9	2.46	2.52	2.27	-0	-0.1	-0.3	0.26	-0	0.48	-0.3	0.85	-0.2	37.3
346	0.8	15.4	0	2	2	1093	2.34	3.5	1.98	0.16	2.04	59.1	2.49	2.62	2.43	-0.1	-0.5	-0.2	0.83	0.03	0.35	-0	0.29	-0.8	26.3
347	1.02	15	0	0	0	438	2.6	2.6	1.89	0.08	1.13	32.8	2.2	2.08	1.95	1	1	1	0.35	-0	0.51	-0.3	0.44	-1	0
348	1.01	15	0	0	1	416	2.75	2.75	1.92	0.16	1.31	38.1	2.2	2.2	1.95	1	1	1	1.34	-0	0.51	-0.3	0.44	-1	0
349	1	15	0	0	3	380	3.07	3.07	1.91	0.24	1.33	38.4	2.2	2.4	1.95	1	1	1	0.62	-0	0.47	-0.4	0.39	-1	0
350	1.18	15	0	0	4	358	3.28	3.28	1.96	0.48	1.41	40.8	2.2	2.49	1.95	1	1	0	0	0.03	0.49	-0.4	0.44	-1	0
351	3.4	15	0	0	6	298	4.15	4.15	1.8	0	1.27	36.9	2.2	2.64	2.57	1	1	0	0	0.04	0.65	-0.4	0.24	-1	0
352	2.65	15	0	0	5	312	3.88	3.88	1.87	0	1.27	36.9	2.2	2.57	2.4	1	1	0	0	-0.1	0.53	-0.2	0.29	-1	0
353	1.23	15	0	0	6	322	3.75	3.75	1.91	0	1.27	36.9	2.2	2.64	1.95	1	1	0	0	-0	0.4	-0.2	0.36	-1	0
354	3.16	15	0	0	5	304	4.01	4.01	1.9	0	1.27	36.9	2.2	2.57	2.57	1	1	0	0	-0.1	0.46	-0.2	0.23	-1	0
355	1.04	15.5	0	1	0	808	2.55	2.68	1.87	0.08	1.56	46.8	2.34	2.23	2.12	-0	-0.1	-0.2	0.31	0.04	0.52	-0.3	0.71	-0.3	20.23
356	1.01	15.5	0	1	1	754	2.66	2.81	1.83	0.16	1.63	49	2.34	2.37	2.12	-0	-0.1	-0.2	0.48	0.07	0.56	-0.2	0.47	-0.3	20.23
357	1.12	19	0	0	30	#####	5.28	7.54	3.18	3.6	1.12	35.9	3.8	4.65	5.09	-0.1	-0	-0	1.17	-0.6	0.73	0.84	0.61	-0.3	0

Annexes

358	0.64	15	1	4	7	2756	2.31	3.09	1.74	0.46	2.86	68.5	2.83	3.09	3.15	-0.2	-0.4	-0.5	0.19	0.75	0.06	0.55	0.32	-0.7	52.6
359	0.57	12.4	2	0	8	792	2.89	2.89	0.97	0.28	1.39	25.1	2.49	2.71	2.57	1	1	0	0	0.76	0.04	0.64	0.24	-1	0
360	1.13	13.6	2	0	8	680	2.41	2.41	1.73	0.28	2.37	52.1	2.49	2.71	2.57	1	1	0	0	0.24	0.35	0.09	0.29	-1	0
361	1.35	13.6	2	0	9	658	2.51	2.51	1.77	0.14	2.55	56.1	2.49	2.77	2.57	1	1	0	0	0.54	0.05	0.37	0.28	-1	0
362	0.89	13.6	2	0	9	664	2.52	2.52	1.72	0.37	2.42	53.3	2.49	2.77	2.49	1	1	0	0.02	0.5	0.05	0.36	0.21	-1	0
363	1.12	14.2	1	0	4	736	2.43	2.43	1.83	0.15	2.35	56.3	2.4	2.49	2.3	1	1	1	0.13	0.44	0.27	0.3	0.38	-1	0
364	0.9	14.2	1	0	5	702	2.59	2.59	1.74	0.31	2.35	56.3	2.4	2.57	2.3	1	1	1	0.07	0.46	0.19	0.31	0.38	-1	0
365	1.26	14.2	1	0	5	676	2.8	2.8	1.76	0.38	2.28	54.8	2.4	2.57	2.49	1	1	1	0.14	0.39	0.27	0.3	0.23	-1	0
366	1.28	14.2	1	0	6	658	2.89	2.89	1.7	0.38	2.37	56.8	2.4	2.64	2.49	1	1	1	0.15	0.22	0.18	0.17	0.24	-1	0
367	1.85	14.2	1	0	7	612	3.28	3.28	1.75	0.6	1.96	47	2.4	2.71	2.64	1	1	0	0	0.27	0.33	0.19	0.23	-1	0
368	1.61	14.2	1	0	5	674	2.75	2.75	1.68	0.19	2.35	56.3	2.4	2.57	2.49	1	1	1	0.07	0.45	0.25	0.29	0.35	-1	0
369	1.77	15.4	2	0	8	520	1.93	1.93	2.21	0.28	1.2	33.5	2.49	2.71	2.57	1	1	0	0	-0.3	0.58	-0.5	0.3	-1	0
370	1.67	15.4	2	0	8	520	1.93	1.93	2.1	0.28	1.2	33.5	2.49	2.71	2.57	1	1	0	0	-0.4	0.73	-0.5	0.32	-1	0
371	1.03	16	0	0	0	694	2.7	2.7	1.77	0.08	1.92	57.5	2.3	2.2	2.08	1	1	1	0.2	-0	0.52	-0.3	0.53	-1	0
372	1.09	17	0	2	1	1646	2.74	2.9	1.81	0.16	1.86	59.6	2.54	2.6	2.37	-0	-0.1	-0.2	0.01	0.16	0.6	-0.2	0.86	-0.2	37.3
373	1.06	16.6	0	0	0	604	2.65	2.65	1.9	0.08	1.12	35.9	2.3	2.2	2.08	1	1	1	0.42	-0	0.57	-0.4	0.45	-1	0
374	2.11	16.6	0	0	4	456	3.64	3.64	1.95	0.32	1.42	45.5	2.3	2.57	2.4	1	1	1	0.29	-0.1	0.5	-0.4	0.35	-1	0
375	2.95	16.6	0	0	6	416	4.1	4.1	1.88	0.24	1.32	42.4	2.3	2.71	2.64	1	1	0	0	-0.2	0.46	-0.5	0.27	-1	0
376	1.1	16.6	0	0	6	464	3.56	3.56	1.94	0.72	1.32	42.4	2.3	2.71	2.08	1	1	0	0	0	0.51	-0.4	0.45	-1	0
377	1.08	17.1	0	1	0	1052	2.61	2.71	1.89	0.08	1.52	50.2	2.43	2.34	2.23	-0	-0.1	-0.1	0.36	0.07	0.56	-0.3	0.65	-0.3	20.23
378	1.15	14	2	0	9	951	2.91	2.91	1.51	0.44	2.2	46.2	2.57	2.83	2.77	1	1	0	0	0.68	0.17	0.57	0.25	-1	0
379	0.75	14	2	0	9	973	2.83	2.83	1.53	0.56	2.2	46.2	2.57	2.83	2.71	1	1	1	0.09	0.73	0.12	0.59	0.24	-1	0
380	1.09	18.2	0	0	0	808	2.69	2.69	1.91	0.08	1.11	39	2.4	2.3	2.2	1	1	1	0.49	-0.1	0.64	-0.4	0.46	-1	0
381	1.11	18.7	0	1	0	1342	2.66	2.75	1.89	0.08	1.49	53.5	2.51	2.43	2.34	-0	-0	-0.1	0.44	0.03	0.65	-0.4	0.69	-0.3	20.23
382	1.01	15	2	0	8	1358	2.46	2.46	1.35	0.06	1.35	29.7	2.64	2.83	2.71	1	1	1	0.01	0.81	-0	0.77	0.35	-1	0
383	0.78	15.6	2	0	10	1176	2.8	2.8	1.65	0.75	2.4	57.5	2.64	2.94	2.83	1	1	1	0.27	0.7	0.21	0.54	0.22	-1	0

Annexes

384	1.12	17.4	1	0	6	990	3.01	3.01	2.05	0.69	2.16	64.8	2.57	2.77	2.77	1	1	1	0.15	0.63	0.51	0.43	0.21	-1	0
385	1.55	18	3	0	17	772	1.98	1.98	2.21	0.67	1.63	52.1	2.71	3.22	2.94	1	1	0	0	-0.6	1.02	-0.8	0.19	-1	0
386	1.1	19.2	0	0	0	1184	2.77	2.77	1.79	0.08	1.81	65.1	2.49	2.4	2.3	1	1	1	0.47	-0.1	0.65	-0.4	0.55	-1	0
387	1.14	20.2	0	2	1	2500	2.8	2.91	1.86	0.16	1.76	66.9	2.69	2.74	2.54	-0	-0.1	-0.1	0.47	-0	0.68	-0.5	0.85	-0.3	37.3
388	1.13	19.8	0	0	0	1054	2.73	2.73	1.92	0.08	1.11	42	2.49	2.4	2.3	1	1	1	0.56	-0.1	0.7	-0.5	0.46	-1	0
389	1.15	20.3	0	1	0	1682	2.7	2.78	1.91	0.08	1.46	56.8	2.59	2.51	2.43	-0	-0	-0.1	0.49	0.05	0.69	-0.4	0.64	-0.4	20.23
390	0.94	16.6	2	0	8	1742	2.16	2.16	1.63	0.3	1.83	45.7	2.71	2.89	2.71	1	1	1	0.18	0.71	0.02	0.79	0.45	-1	0
391	1.16	21.4	0	0	0	1346	2.76	2.76	1.92	0.08	1.1	45	2.57	2.49	2.4	1	1	1	0.62	-0.1	0.76	-0.5	0.47	-1	0
392	1.17	21.9	0	1	0	2076	2.73	2.8	1.92	0.08	1.43	60	2.66	2.59	2.51	-0	-0	-0.1	0.56	0.03	0.75	-0.4	0.64	-0.4	20.23
393	0.75	17	3	0	13	1904	2.61	2.61	1.02	0.65	1.48	35.6	2.83	3.14	3.14	1	1	1	0.18	0.94	0.14	0.8	0.29	-1	0
394	0.63	17	3	0	13	1960	2.52	2.52	1.04	0.89	1.48	35.6	2.83	3.14	3.09	1	1	1	0.36	1.09	0.17	0.81	0.32	-1	0
395	1.58	20.6	1	0	11	1452	3.02	3.02	1.88	0.54	2.1	75.5	2.71	3.14	3	1	1	1	1.41	-0	0.46	-0	0.35	-1	0
396	1.19	23	0	0	0	1688	2.79	2.79	1.93	0.08	1.09	48	2.64	2.57	2.49	1	1	1	0.7	-0.1	0.83	-0.6	0.48	-1	0
397	1.2	23.5	0	1	0	2528	2.76	2.82	1.93	0.08	1.41	63.2	2.73	2.66	2.59	-0	-0	-0	0.63	0.03	0.81	-0.5	0.64	-0.4	20.23
398	1.78	20.8	2	2	13	3696	2.3	2.45	1.6	0.84	2.82	93	2.98	3.34	3.34	0.01	0.02	-0.4	0.76	0.59	0.08	0.64	0.72	0.3	40.46
399	1.21	24.6	0	0	0	2084	2.81	2.81	1.94	0.08	1.08	51	2.71	2.64	2.57	1	1	1	0.76	-0.1	0.89	-0.6	0.48	-1	0
400	1.22	25.1	0	1	0	3042	2.79	2.84	1.93	0.08	1.38	66.4	2.79	2.73	2.66	-0	-0	-0	0.7	0.02	0.87	-0.5	0.63	-0.4	20.23
401	1.23	26.2	0	0	0	2538	2.83	2.83	1.94	0.08	1.08	53.9	2.77	2.71	2.64	1	1	1	0.83	-0.1	0.96	-0.7	0.49	-1	0
402	1.54	26.2	0	0	10	1710	4.26	4.26	2.02	0.4	1.42	71.2	2.77	3.22	2.83	1	1	1	1.32	-0	0.96	-0.4	0.44	-1	0
403	1.25	26.7	0	1	0	3622	2.81	2.86	1.94	0.08	1.36	69.5	2.85	2.79	2.73	-0	-0	-0	0.77	0.02	0.94	-0.6	0.63	-0.4	20.23
404	1.25	27.8	0	0	0	3054	2.85	2.85	1.95	0.08	1.07	56.9	2.83	2.77	2.71	1	1	1	0.9	-0.1	1.02	-0.7	0.49	-1	0
405	1.27	28.3	0	1	0	4272	2.83	2.87	1.94	0.08	1.35	72.6	2.91	2.85	2.79	-0	-0	-0	0.84	0.01	1.01	-0.6	0.63	-0.4	20.23
406	1.05	22.2	3	0	13	3892	2.18	2.18	1.59	0.44	1.42	45.4	3.05	3.3	3.3	1	1	1	0.07	1.57	0.16	1.16	0.43	-1	0
407	0.95	22.2	3	0	13	4132	2.05	2.05	1.54	0.28	1.42	45.4	3.05	3.3	3.26	1	1	1	2.54	1.54	0.06	1.16	0.42	-1	0
408	1.35	22.2	3	0	13	4372	1.95	1.95	1.39	0.2	1.42	45.4	3.05	3.3	3.26	1	1	1	3.41	1.48	-0.1	1.11	0.42	-1	0
409	1.3	29.8	0	2	1	6726	2.9	2.95	1.89	0.16	1.56	87.1	3.03	3.07	2.93	-0	-0	-0	0	0.32	1.15	-0.3	0.84	-0.4	37.3
410	1.28	29.4	0	0	0	3636	2.86	2.86	1.95	0.08	1.07	59.8	2.89	2.83	2.77	1	1	1	0.97	-0.1	1.08	-0.7	0.49	-1	0
411	1.31	29.9	0	1	0	4996	2.85	2.89	1.93	0.08	1.33	75.7	2.96	2.91	2.85	-0	-0	-0	0.02	0.49	1.07	-0.3	0.62	-0.5	20.23
412	1.29	31	0	0	0	4288	2.88	2.88	1.95	0.08	1.06	62.7	2.94	2.89	2.83	1	1	1	1.02	-0.1	1.15	-0.8	0.5	-1	0

Annexes

413	1.33	31.5	0	1	0	5798	2.86	2.9	1.93	0.08	1.31	78.8	3.01	2.96	2.91	-0	-0	-0	0.02	0.51	1.13	-0.3	0.62	-0.5	20.23
414	1.31	32.6	0	0	0	5014	2.89	2.89	1.96	0.08	1.06	65.6	3	2.94	2.89	1	1	1	1.09	-0.1	1.21	-0.8	0.5	-1	0
415	1.34	33.1	0	1	0	6682	2.88	2.91	1.94	0.08	1.3	81.9	3.06	3.01	2.96	-0	-0	-0	0.02	0.54	1.19	-0.3	0.62	-0.5	20.23
416	1.33	34.2	0	0	0	5818	2.9	2.9	1.96	0.08	1.05	68.5	3.05	3	2.94	1	1	1	1.17	-0.1	1.28	-0.9	0.5	-1	0
417	1.34	35.8	0	0	0	6704	2.91	2.91	1.96	0.08	1.05	71.4	3.09	3.05	3	1	1	1	1.23	-0.1	1.34	-0.9	0.51	-1	0
418	1.35	37.4	0	0	0	7676	2.92	2.92	1.97	0.08	1.05	74.3	3.14	3.09	3.05	1	1	1	1.31	-0.2	1.41	-1	0.51	-1	0
419	1.37	39	0	0	0	8738	2.93	2.93	1.97	0.08	1.04	77.2	3.18	3.14	3.09	1	1	1	1.36	-0.2	1.47	-1	0.51	-1	0

Tableau A.2. Valeurs des descripteurs pertinentes utilisées pour l'élaboration du modèle de RQSP pour Tc

ID	Ncic	Jhetv	Jhete	BLI	X3sol	IC1	TIC1	ATS1m	MATS4m	EEig01x	GATS4m	EEig05x	EEig05d	Mor15m	Mor18m	SMTIV	Mor19m	Mor20m	E1s	R4u	R2e	H-047	TPSA(NO)	Mor11u	ATS4m
1	0	2.38	3.88	1.73	0	1.92	9.61	2.72	0	4	0	0	0	-0.8	0.56	144	-0.6	0.51	0.44	0	2.68	0	0	-0	0
2	0	1.52	4.15	1.16	0	1.37	6.86	2.52	0	4	0	0	0	0.17	0.47	328	-0.7	0.48	0.22	0	3.6	0	0	0.33	0
3	0	1.95	3.93	1.76	0	1.52	7.61	2.86	0	4	0	0	0	1.29	0.33	232	-0.4	-0.2	0.24	0	2.93	0	0	0.35	0
4	0	1.46	4.24	0.85	0	1.37	6.86	2.16	0	4	0	0	0	-0.7	-0.5	332	0.31	-0.3	0.29	0	3.81	0	0	0.21	0
5	0	1.78	4.09	1.13	0	1.52	7.61	2.31	0	4	0	0	0	-0.7	-0.5	240	0.46	-0.3	0.33	0	3.3	0	0	0.05	0
6	0	2.25	3.96	1.42	0	1.37	6.86	2.44	0	4	0	0	0	-0.6	-0.6	148	0.65	-0.4	0.41	0	2.85	0	0	-0.1	0
7	0	3.02	3.83	1.7	0	0.72	3.61	2.55	0	4	0	0	0	-0.2	-0.8	56.2	0.94	-0.6	0.67	0	2.46	0	0	-0.4	0
8	0	1.26	3.13	1.57	0	1.92	9.61	2.38	0	3	0	0	0	0.33	0.34	187	-0.6	0.36	0.67	0	3.01	0	0	0.23	0
9	0	1.2	3.22	1.09	0	1.92	9.61	1.96	0	3	0	0	0	-0.3	-0.3	190	0.16	-0.1	0.67	0	3.2	0	0	0.08	0
10	0	1.59	3.08	1.53	0	1.92	9.61	2.14	0	3	0	0	0	-0.4	-0.2	111	0.22	-0.1	0.67	0	2.75	0	0	-0.2	0
11	0	2.32	2.94	1.96	0	1.37	6.86	2.29	0	3	0	0	0	-0.3	-0.3	31.5	0.3	-0	0.67	0	2.36	0	0	-0.5	0
12	0	0.95	3.38	0.66	0	1.37	6.86	1.75	0	3	0	0	0	-0.2	-0.3	270	0.02	-0	0.67	0	3.73	0	0	0.24	0
13	0	2.09	3.48	0.78	0	1.59	4.76	0.77	0	3	0	0	0	-0	0.04	42	0.06	0.01	0.67	0	0.25	0	23.8	-0.2	0
14	0	1.63	2.07	2.41	0	1.52	7.61	1.93	0	2	0	0	0	-0.2	-0.1	13.9	0.05	0.16	0.67	0	2.28	0	0	-0.5	0
15	0	0.67	2.38	0.8	0	1.52	7.61	1.43	0	2	0	0	0	0.02	-0.1	148	-0	0.04	0.67	0	3.14	0	0	0.09	0
16	0	1.02	2.66	0.87	0	1.5	6	0.85	0	2	0	0	0	-0.1	0.07	48	0.03	-0	0.67	0	1.14	0	17.1	-0.1	0
17	0	1.12	2.9	0.74	0	2.32	11.6	1.3	0	2.62	0	0	0	-0	0.05	109	-0	-0.1	0.67	0	1.02	0	37.3	-0.1	0
18	0	1.38	1.17	5.89	0	1.37	6.86	2.04	0	1	0	0	0	0.15	0.14	2.33	-0.1	-0.1	0.67	0	2.09	3	0	-0.4	0

Annexes

19	0	1	1.27	3.4	0	1.37	6.86	1.37	0	1	0	0	0	0.05	-0.1	3.38	0.08	0.05	0.67	0	2.24	3	0	-0.6	0
20	0	0.41	1.46	1.13	0	1.37	6.86	0.95	0	1	0	0	0	0.05	-0.1	58	-0	0.08	0.67	0	2.64	3	0	-0.2	0
21	0	1.73	1.01	7.61	0	1.37	6.86	2.45	0	1	0	0	0	-0.2	-0	2.18	-0.2	0.25	0.67	0	1.91	3	0	-0.2	0
23	0	1.64	4.68	0.81	0	1.84	12.9	1.66	0	3.73	0	0	0	-0.1	0.17	178	0.05	-0.1	0.67	0	1.85	3	45.8	-0.4	0
24	0	0	0	0	0	0.72	3.61	0	0	0	0	0	0	0.01	-0	0	0.01	0.02	0.67	0	2.24	0	0	-0.7	0
25	0	0.51	1.33	1.34	0	1.79	10.8	0.85	0	1	0	0	0	0.07	-0.1	32	0.02	0.06	0.67	0	2.01	3	20.2	-0.3	0
26	0	1.09	1.08	4.03	0	1.79	10.8	1.3	0	1	0	0	0	0.07	-0	2.86	0.08	0.01	0.67	0	1.71	3	0	-0.4	0
27	0	2.25	5	0.76	0	1.55	12.4	2.55	0	4.65	0	0	0.51	-0.5	-0.2	930	-0.2	0.23	0.67	0	3.11	0	0	0.19	0
28	0	2.59	4.85	1.27	2	1.5	12	3.07	0	4.65	0	0	0.49	0.85	0.14	764	-1	0.93	0.67	0	2.68	0	0	0.26	0
29	0	2.48	4.93	0.92	0	1.75	14	2.66	0	4.65	0	0	0.4	-0.9	-0.2	782	-0.1	0.28	0.67	0	2.83	0	0	0.06	0
30	0	2.48	4.93	0.92	1.13	1.5	12	2.66	0	4.65	0	0	0.51	-0.9	-0.2	782	-0.1	0.19	0.67	0	2.82	0	0	0.18	0
31	0	2.75	4.86	1.08	1.84	1.81	14.5	2.75	0	4.65	0	0	0.4	-1	-0.3	634	0.04	0.22	0.67	0	2.56	0	0	0.13	0
32	0	3.68	4.39	1.51	3	0.92	5.51	2.63	0	4	0	0	-1.2	-0.3	-0.9	125	0.27	0.16	0.67	0	0.79	0	0	-0.1	0
33	0	1.74	4.84	0.6	0	0.92	5.51	2.12	0	4	0	0	-1.1	0.02	-0.1	592	-0.3	-0.1	0.67	0	1.3	0	0	0.05	0
34	0	2.33	4.27	1.32	0	2.41	19.2	2.79	0	4.26	0	0	0.51	-0	0.05	519	-0.3	0.23	0.67	0	2.5	0	0	0.05	0
35	0	2.03	4.39	0.86	0	2	16	2.42	0	4.26	0	0	0.51	-0.3	-0.1	662	-0.2	0.27	0.67	0	2.85	0	0	0.17	0
36	0	2.27	4.32	1.08	0	2.16	17.2	2.54	0	4.26	0	0	0.2	-0.6	-0.1	527	-0.1	0.35	0.67	0	2.6	0	0	-0.1	0
37	0	2.28	4.31	1.05	1.13	2.16	17.2	2.54	0	4.26	0	0	0.51	-0.5	-0.2	533	-0	0.18	0.67	0	2.58	0	0	0.16	0
38	0	1.82	4.46	0.65	0	1.55	12.4	2.29	0	4.26	0	0	0.51	0.13	-0.2	798	-0.3	0.2	0.67	0	3.13	0	0	0.3	0
39	0	1.56	4.69	0.62	0	1.88	16.9	2.45	0.51	4.13	0	0	0.51	-0.2	-0.4	1126	-0.1	0.06	0.67	1.17	3.7	0	9.23	0.32	2.77
40	0	3	3	1	0	1	4	0.69	0	3	0	0	0	-0	0.05	24	0.02	-0	0.67	0	0.13	0	0	-0.2	0
41	0	2.55	2.99	1.64	1.13	1.59	9.51	2.07	0	3	0	0	0	-0.3	-0.2	52.5	-0.1	0.33	0.67	0	0.76	0	0	-0.3	0
42	0	2.99	3.45	1.77	3	1.5	12	2.63	0	3.56	0	-0.6	-1.2	-0.3	0.09	96.6	-0.2	0.72	0.67	0	1.9	0	0	-0.4	0
43	0	1.32	3.72	0.73	0	1.92	11.5	1.64	0	3.41	0	0	0	-0.1	-0	210	-0.2	-0	0.67	0	1.08	2	0	0.06	0
44	0	1.61	4.02	0.71	0	1.75	14	2.12	0	4.09	0	-0.5	-1	0.13	-0.3	550	-0.1	0.13	0.67	0	2.91	2	0	0.25	0
45	0	1.57	3.73	0.72	0	1.5	12	2.12	0	3.56	0	-0.6	-1.1	0.27	-0.2	564	-0.1	0.1	0.67	0	2.81	0	0	0.27	0
46	0	2.19	2.54	1.59	0	1.79	10.8	1.6	0	2.62	0	0	0	-0	-0.1	27.9	-0.1	0.16	0.67	0	0.76	2	0	-0.3	0
47	0	1.78	3.83	1.08	0	2.16	17.2	2.09	0	4	0	0	0	-0.1	-0.2	242	0.15	-0	0.67	0	2.47	0	0	-0.1	0

Annexes

48	0	2.25	3.71	1.37	0	2.16	17.2	2.25	0	4	0	0	0	-0.1	-0.2	150	0.27	-0.1	0.67	0	2.21	0	0	-0.4	0
49	0	3.02	3.59	1.65	0	1.81	14.5	2.39	0	4	0	0	0	0.02	-0.2	58.1	0.38	-0.1	0.67	0	1.98	0	0	-0.6	0
50	0	2.54	2.92	1.89	1.84	1.81	14.5	2.39	0	3.17	0	0	0	0.17	-0.1	61.3	-0	0.42	0.67	0	1.89	2	0	-0.6	0
51	0	1.46	3.96	0.8	0	1.81	14.5	1.91	0	4	0	0	0	0	-0.2	334	-0	0.05	0.67	0	2.76	0	0	0.06	0
52	0	1.35	3.15	0.83	0	1.81	14.5	1.91	0	3.17	0	0	0	0.34	-0.2	362	-0.1	0.23	0.67	0	2.57	2	0	0.22	0
53	0	2.22	2.57	1.09	0	1.79	10.8	1.15	0	3.41	0	0	0	-0	0.03	68	0.1	0.02	0.67	0	1.6	0	23.8	-0.3	0
54	0	2	2	1.5	0	0.92	5.51	0.69	0	2	0	0	0	-0	-0	12	-0	0.03	0.67	0	0.76	4	0	-0.3	0
55	0	2.33	2.15	3.28	2	1.5	12	2.73	0	2.41	0	0	0	-0.3	-0.7	27.2	-0.4	0.36	0.67	0	1.75	4	0	-0.4	0
56	0	2.32	2.7	1.89	0	1.75	14	2.07	0	3	0	0	0	0.05	-0.2	33	0.16	0.09	0.67	0	1.93	0	0	-0.7	0
57	0	1.98	2.23	2.1	1.13	1.5	12	2.07	0	2.41	0	0	0	0.08	-0	34.5	0.14	0.09	0.67	0	1.87	4	0	-0.7	0
58	0	1.2	2.94	1.01	0	1.75	14	1.64	0	3	0	0	0	0.15	-0.1	192	-0	0.1	0.67	0	2.4	0	0	-0.1	0
59	0	1.65	2.39	1.22	0	2.13	14.9	1.2	0	2.62	0	0	0	-0	0.07	73	0.05	-0	0.67	0	1.68	0	17.1	-0.4	0
60	1	1.39	2.7	1.08	0	1.38	9.65	1.54	0	3	0	0	0	0.16	-0.1	64	0.12	0.11	0.67	0	2.33	4	12.5	-0.1	0
61	0	1.79	3.3	0.93	0	2.41	19.2	1.54	0	3.41	0	0	0	0.05	0.05	150	0	-0	0.67	0.39	1.55	0	37.3	-0.3	0
62	0	1.18	3.05	0.88	0.5	2.41	19.2	1.61	0	2.8	0	0	0	0.04	0.07	160	-0	0.04	0.67	0.94	2.09	3	26.3	-0.1	0
63	0	1.9	1.76	3.14	0	1.55	12.4	2.16	0	2	0	0	0	0.11	0.04	12.8	0	-0.1	0.67	0	1.8	2	0	-0.6	0
64	0	1.63	1.83	2.26	0	1.55	12.4	1.6	0	2	0	0	0	0.15	-0	14.9	0.1	0.04	0.67	0	1.89	2	0	-0.7	0
65	0	0.96	1.94	1.46	0	1.55	12.4	1.28	0	2	0	0	0	0.13	-0	82	0.02	0.1	0.67	0	2.11	2	0	-0.3	0
66	0	1	1	3	0	0.81	6.49	0.69	0	1	0	0	0	0.02	0.01	4	0.06	-0	0.67	0	1.9	0	0	-0.8	0
67	0	1.11	1.86	1.54	0	1.88	16.9	1.2	0	2	0	0	0	0.1	-0.1	52	0.07	0.06	0.67	0.42	1.81	2	20.2	-0.4	0
68	0	0.84	2.17	1.23	0	1.22	11	1.3	0	2	0	0	0	0.13	-0.1	56	0.02	0.15	0.67	1.24	2.45	6	9.23	-0.4	0
69	0	1.3	2.29	1.13	0.5	1.92	19.2	1.54	0	2.41	0	0	0	0.25	-0.1	134	0.06	0.14	0.67	0.76	1.75	4	40.5	-0	0
70	0	1.7	1.69	2.48	0	1.88	16.9	1.54	0	2	0	0	0	0.16	0.01	14	0.09	0.01	0.67	0.29	1.59	2	0	-0.6	0
71	0	1.78	1.76	3.67	0	1.22	11	1.85	0	2	0	0	0	0.14	-0.1	9.78	0.16	0.04	0.67	1.05	2.24	6	0	-1	0
72	0	1.34	1.75	1.67	0	1.96	19.6	1.15	0	2	0	0	0	0.06	-0	30	0.11	-0	0.67	0.72	1.79	2	26	-0.6	0
73	0	1.14	1.89	1.5	0	1.57	15.7	1.2	0	2	0	0	0	0.13	-0.1	32	0.08	0.11	0.67	1.07	1.99	6	12	-0.6	0
74	0	1.43	2.21	1.22	0.5	2.55	28.1	1.5	0	2.41	0	0	0	0.22	-0.1	106	0.07	0.13	0.67	0.81	1.67	4	46.3	-0.3	0
75	0	1.59	2.14	1.32	0.5	1.92	23	1.47	0	2.41	0	0	0	0.19	-0.1	78	0.08	0.12	0.67	1.03	1.65	4	52	-0.5	0

Annexes

76	0	2.73	5.67	0.6	0	1.1	12.1	2.75	0.38	4.93	0	0	0.51	0.08	0.05	2182	-0.7	0.39	0.67	0.84	3.23	0	0	0.09	3.16
77	0	2.48	5.01	0.64	0	1.49	16.4	2.64	0.43	4.53	0	0	0.51	0.11	-0.2	1776	-0.3	0.22	0.67	0.87	3.1	1	0	0.23	3.16
78	0	2.28	4.58	0.69	0	1.87	20.5	2.53	0.5	4.33	0	0	0.51	0.39	-0.4	1374	-0.1	0.25	0.67	0.87	2.88	1	0	0.32	2.77
79	0	2.24	4.4	0.69	0	1.69	18.5	2.53	0.5	4.3	0	0	0.51	-0	-0.4	1402	0	0.06	0.67	0.89	3.04	0	0	0.24	3.16
80	0	2.25	4.86	0.73	0	1.97	21.7	2.39	0	4.65	0	0	0.51	0.19	-0.1	934	-0.3	0.26	0.67	0.84	2.75	0	0	0.2	0
81	0	2.04	3.96	0.76	0	1.97	21.7	2.39	0.6	4.13	0	0	0.51	0.14	-0.4	1046	0.02	0.12	0.67	0.9	2.8	0	0	0.27	2.77
82	0	2.15	4.41	0.74	0	1.97	21.7	2.39	0.6	4.32	0	0	0.51	0.56	-0.2	994	-0.3	0.28	0.67	0.84	2.62	2	0	0.25	1.79
83	0	1.73	4.16	0.71	0.5	2.22	26.7	2.53	-1.1	4.1	2.13	0	0.51	0.27	-0.4	1454	-0.1	0.27	0.67	0.87	2.93	2	9.23	0.47	2.19
84	0	2.75	2.98	0.92	0.5	2.13	14.9	1.43	0	3.53	0	0	0	-0	-0	124	0.06	0.05	0.67	0.21	0.61	3	23.8	-0.1	0
85	1	1.95	3.68	0.81	1.25	2.41	19.2	1.95	0	3.5	0	-0.1	-1.6	0	-0.2	208	0.01	0.04	0.67	0.09	1.07	1	26	0.2	0
86	0	2.48	2.48	1.18	0	2.13	14.9	1.1	0	3.41	0	0	0	-0	0.04	46	0.06	0.01	0.67	0.42	1.37	0	0	-0.4	0
87	0	3.27	3.27	1.06	0	1.38	9.65	1.1	0	3	0	0	0	-0.1	-0	44	-0.1	-0	0.67	0.71	0.71	4	0	0.09	0
88	0	2.31	2.47	1.28	0.5	1.88	16.9	1.43	0	3.48	0	0	0	-0	0.04	106	0.16	-0	0.67	0.36	1.57	0	23.8	-0.5	0
89	0	2.19	2.19	1.48	0	2.11	19	1.1	0	2.62	0	0	0	0.01	-0.1	29	0.05	0.01	0.67	0.73	1.48	3	0	-0.5	0
90	1	2.25	2.25	1.5	0	0.92	8.27	1.39	0	3	0	0	0	0.12	0.05	24	0.13	-0	0.67	0	1.74	0	0	-0.7	0
91	0	2.54	2.78	1.83	1.53	1.87	20.5	2.19	0	3.17	0	0	0	0.22	-0	63.4	0.22	0.02	0.67	0.81	1.83	3	0	-0.9	0
92	0	1.77	2.49	1.13	0.5	2.65	26.5	1.47	0	2.8	0	0	0	0.07	-0.1	104	0.06	0.06	0.67	0.84	1.38	5	20.2	-0.2	0
93	0	2.34	2.96	1.2	0	1.57	15.7	1.47	0	3.41	0	0	0	0.02	0.1	106	0.07	-0	0.67	1.02	1.77	0	17.1	-0.7	0
94	0	1.99	2.4	1.35	0.5	2.16	21.6	1.47	0	2.8	0	0	0	0.01	0.05	112	0.14	-0.1	0.67	0.64	1.71	0	17.1	-0.6	0
95	1	1.59	2.41	1.13	0.58	1.77	17.7	1.73	0	3.56	0	0	0	0.16	-0.1	96	0.2	0.08	0.67	0.63	2.08	3	12.5	-0.2	0
96	0	2.14	3.13	1.12	0.82	2.4	26.4	1.73	0	3.52	0	0	0	0.09	0.03	211	0.08	-0.1	0.67	0.78	1.63	0	37.3	-0.5	0
97	0	1.65	3.52	0.99	0.82	2.05	22.5	1.79	0	3.52	0	0	0	0.13	0.07	211	-0	0.09	0.67	0.68	1.85	3	26.3	-0.2	0
98	0	1.35	3.01	1.1	0.71	2.4	26.4	1.79	-1	2.88	1.67	0	0	0.13	0.1	227	0	0.04	0.67	0.74	1.78	2	26.3	-0.2	0.85
99	0	1.53	3.97	0.86	1.39	1.96	23.5	2.04	1	3.62	0	-0.6	-0.8	0.01	0.06	354	-0	0.06	0.67	1.02	2.34	6	35.5	-0.1	0.69
100	0	1.98	2.1	2.01	0.75	1.67	18.4	1.78	0	2.41	0	0	0	0.2	-0	36.3	0.18	-0	0.67	0.87	1.89	2	0	-0.9	0
101	0	1.89	3.33	1.04	0.82	2.13	25.5	1.76	0	3.3	0	0	0	0.13	-0.1	185	0.12	0.07	0.67	2.05	1.41	6	20.3	-0.4	0
102	0	1.63	1.63	2.12	0	1.1	12.1	1.1	0	2	0	0	0	0.02	0.02	16	0.12	-0.1	0.67	0.89	1.89	0	0	-0.9	0

Annexes

103	0	1.57	2.12	1.52	0.5	1.95	23.4	1.47	0	2.41	0	0	0	0.08	-0	86	0.16	-0	0.67	1.08	1.79	2	20.2	-0.5	0
104	0	1.78	2.53	1.41	0	1.78	21.4	1.47	0	3	0	0	0	0.12	-0.1	80	0.12	0.04	0.67	1.44	1.79	1	20.2	-0.5	0
105	0	1.17	2.41	1.4	0.5	1.59	19	1.54	0	2.41	0	0	0	0.21	-0.1	86	0.04	0.18	0.67	0.95	2.02	5	9.23	-0.5	0
106	0	1.12	2.91	1.05	0.71	1.55	20.1	1.85	0.67	2.62	0	0	0	0.35	-0.2	194	0.08	0.27	0.67	1.54	2.58	6	18.5	-0.5	0.69
107	0	1.65	2.4	1.22	0.71	2.05	26.6	1.73	1.5	2.62	0	0	0	0.19	-0	202	0.07	0.09	0.67	1.18	1.71	4	40.5	-0.2	1.02
108	0	1.96	3.08	1.02	1.39	2.16	30.2	1.95	1	3.3	0	-0.6	-1.4	0.39	-0.1	334	0.04	0.22	0.67	1.63	1.65	5	60.7	0.08	1.02
109	0	2.1	2.08	2.8	0.75	1.59	19	1.99	0	2.41	0	0	0	0.24	-0	29.1	0.19	0.02	0.67	0.83	1.98	5	0	-1.2	0
110	0	1.76	2.05	1.62	0.5	2.04	26.5	1.43	0	2.41	0	0	0	0.04	-0	58	0.18	-0.1	0.67	1.22	1.78	2	26	-0.8	0
111	0	2.03	2.44	1.49	0	1.88	24.5	1.43	0	3	0	0	0	0.08	-0	54	0.15	-0	0.67	1.83	1.75	1	26	-0.7	0
112	0	1.62	2.7	1.34	0	1.14	14.8	1.5	0	3	0	0	0	0.23	-0.1	58	0.09	0.2	0.67	2.46	1.99	9	3.24	-0.7	0
113	0	1.58	2.47	1.25	0.71	2.4	33.7	1.73	-1.3	2.62	2.5	0	0	0.28	-0.1	164	0.09	0.19	0.67	1.22	1.79	7	32.3	-0.3	0.85
114	1	1.91	3.7	0.63	1	0.92	11	2.87	0.5	5.37	0	0	0.51	-0.5	-0.1	2456	-0.7	0.61	0.67	0.68	2.88	0	0	0.32	3.05
115	1	2.3	3.48	0.88	1.25	1.84	16.5	1.9	0	3.5	0	-0.1	-1.6	0.07	-0.2	180	0.02	0.03	0.67	0.26	1.04	2	13.1	0.18	0
116	1	3.23	3.22	1.45	1.75	1.84	16.5	2.23	0	3.5	0	-0.1	-1.6	-0.2	-0.3	112	0.03	0.16	0.67	0.23	0.93	2	0	-0.3	0
117	1	2.67	3.31	0.95	1.25	2.12	21.2	1.85	0	3.5	0	-0.1	-1.6	0.14	-0.2	148	0.05	0.06	0.67	0.37	0.94	2	15.8	0.16	0
118	0	2.43	2.43	1.35	0.5	2.16	21.6	1.39	0	3.48	0	0	0	-0	0.04	78	0.12	-0	0.67	0.48	1.47	0	0	-0.6	0
119	0	3.11	3.11	1.22	0.5	2.37	23.7	1.39	0	3.25	0	0	0	-0	-0	76	-0	-0	0.67	0.53	1.37	3	0	-0.3	0
120	0	2.73	2.73	1.15	0.5	1.37	13.7	1.39	0	3	0	0	0	0.07	-0.1	74	-0	0.12	0.67	0.55	0.74	6	0	-0.2	0
121	0	1.77	3.76	0.93	0.87	2.79	33.5	1.95	-0.3	3.56	0.94	-0.6	-1	0.16	-0	324	-0.1	0.16	0.67	0.4	1.42	2	26.3	-0.3	1.2
122	0	1.93	4.09	0.91	0.94	2.05	26.6	2.12	0.02	3.73	0.88	0.27	0.02	0.15	0.05	514	-0	0.12	0.67	0.47	1.58	0	43.4	-0.3	1.86
123	0	2.41	2.51	1.34	0.71	1.95	23.4	1.64	-1	3.5	2.5	0	0	-0	0.06	164	0.24	-0.1	0.67	1.02	1.65	0	23.8	-0.6	0.77
124	1	2	2	1.5	1	0.92	11	1.61	0	3	0	0	0	0	0.11	48	0.12	-0.1	0.67	0.76	1.88	0	0	-1.2	0
125	0	2.3	2.3	1.52	0.5	2.22	26.7	1.39	0	2.8	0	0	0	0	-0.1	56	0.12	-0	0.67	0.95	1.61	3	0	-0.6	0
126	0	2.55	2.55	1.49	0.5	1.79	21.5	1.39	0	3	0	0	0	0.02	-0.1	56	0.13	-0	0.67	0.87	1.6	2	0	-0.4	0
127	0	2.55	2.55	1.49	0.5	1.79	21.5	1.39	0	3	0	0	0	0.03	-0.1	56	0.13	-0	0.67	0.77	1.72	2	0	-0.5	0
128	0	2.8	2.8	1.35	0	1.96	23.5	1.39	0	3.41	0	0	0	0.03	-0.1	54	0.13	-0	0.67	2.01	1.39	2	0	-0.6	0
129	0	2.2	2.46	1.39	0.71	2.19	28.5	1.67	-1	2.88	2.5	0	0	-0	0.03	171	0.2	-0.1	0.67	1.16	1.72	0	17.1	-0.8	0.85

Annexes

130	0	2.55	2.94	1.32	0.82	1.85	24.1	1.67	0	3.52	0	0	0	0.04	0.08	155	0.15	-0.1	0.67	1.13	1.77	0	17.1	-1	0
131	1	1.53	2.32	1.25	1.25	1.55	20.1	1.9	0	3	0	-0.6	-1.6	0.4	0.05	136	0.08	0.15	0.67	1.05	2.24	4	9.23	-0.5	0
132	0	2.33	3	1.19	0.87	2.4	33.7	1.9	-1	3.54	1.88	-0.6	-1.4	0.04	0.03	300	0.15	-0.1	0.67	1.22	1.66	0	37.3	-0.6	1.3
133	0	2.62	3.48	1.12	1.33	2.26	31.7	1.9	0	3.78	0	-0.5	-1	0.04	0.04	280	0.12	-0.1	0.67	1.74	1.65	0	37.3	-0.5	0
134	1	1.29	2.45	1.08	1.5	1.81	25.3	2.12	0	3	0	0	-0.5	0.51	-0.2	268	0.07	0.28	0.67	1.49	2.47	4	18.5	0.07	0
135	1	1.22	2.39	1.08	1.5	1.38	19.3	2.12	0	3	0	0	-0.8	0.54	-0.2	268	0.11	0.32	0.67	1.06	2.55	8	18.5	0.18	0
136	0	1.98	3.46	1.13	1.39	2.09	29.3	1.95	0.5	3.62	0	-0.6	-1	0.17	0.05	286	0.06	0.04	0.67	0.81	1.87	3	26.3	-0.4	0.69
137	0	1.69	3.44	1.14	0.87	2.09	29.3	1.95	-0.3	3.54	0.94	-0.6	-1	0.21	0.1	292	-0	0.11	0.67	0.55	1.69	2	26.3	-0.4	1.2
138	0	1.56	2.94	1.18	0.96	2.4	33.7	1.95	-0.3	2.92	0.94	-0.7	-1.3	0.13	0.12	322	0.03	-0	0.67	1.17	1.82	2	26.3	-0.2	1.2
139	0	2.54	2.66	1.76	1.02	1.63	22.8	1.94	0	3.17	0	0	0	0.28	0.01	65.8	0.23	-0.1	0.67	1.25	1.82	1	0	-1.2	0
140	1	1.78	2.21	1.32	1.25	1.81	25.3	1.85	0	3	0	-0.6	-1.6	0.27	0.07	104	0.12	0.02	0.67	1.21	2.04	4	12	-0.8	0
141	0	1.98	1.98	1.91	0.5	1.15	16.1	1.39	0	2.41	0	0	0	-0	0.02	38	0.19	-0.1	0.67	1.28	1.86	0	0	-1.1	0
142	0	2.32	2.32	1.73	0	1.1	15.3	1.39	0	3	0	0	0	0.01	0	36	0.19	-0.1	0.67	2.11	1.84	0	0	-0.9	0
143	1	1.55	2.2	1.21	1.5	1.75	28	2.04	0	3	0	0	-0.9	0.44	-0.2	192	0.25	0.18	0.67	1.5	2.1	8	24.1	-0.2	0
144	0	1.89	2.29	1.52	0.71	1.87	28.1	1.67	-1	2.62	2.5	0	0	0.09	-0	138	0.21	-0	0.67	1.36	1.76	2	20.2	-0.7	0.85
145	0	2.14	2.67	1.41	0.82	1.87	28.1	1.67	0	3.17	0	0	0	0.13	-0	128	0.18	-0	0.67	2.06	1.76	2	20.2	-0.6	0
146	0	2.46	3.23	1.29	0	1.69	25.3	1.67	0	4	0	0	0	0.16	-0	116	0.15	0.01	0.67	2.71	1.59	0	20.2	-0.7	0
147	0	2.13	2.68	1.46	0.82	1.87	28.1	1.67	0	3.17	0	0	0	0.13	-0	124	0.19	-0	0.67	1.63	1.71	1	20.2	-0.9	0
148	0	1.35	2.61	1.49	0.71	1.43	21.4	1.73	0.25	2.62	0	0	0	0.27	-0.1	130	0.05	0.21	0.67	0.74	1.8	4	9.23	-0.6	0.69
149	0	1.39	2.84	1.14	0.96	1.55	24.8	1.99	-1	2.73	1.88	-0.7	-1.2	0.38	-0.2	280	0.04	0.34	0.67	1.35	2.14	10	18.5	-0.5	1.3
150	0	2.17	2.97	1.26	1.39	2.25	36	1.9	-1	3.3	1.88	-0.6	-1.5	0.28	-0.1	258	0.16	0.09	0.67	1.69	1.63	3	40.5	-0.3	0.85
151	0	2.1	2.82	1.24	0.87	2.25	36	1.9	0.5	3.21	0.94	-0.7	-1.6	0.16	-0.1	270	0.18	0.08	0.67	1.62	1.68	3	40.5	-0.4	1.41
152	0	1.52	2.91	1.11	1.21	1.97	33.5	2.12	-0.4	2.8	1.17	-0.2	-0.9	0.45	-0.2	500	0.04	0.36	0.67	0.93	1.78	8	49.7	-0.2	1.54
153	0	2.31	2.3	2.36	1.06	1.43	21.4	2.12	0.25	2.62	0	0	0	0.35	0	62.4	0.22	0	0.67	0.65	1.89	4	0	-1.5	0.69
154	0	2.04	2.24	1.59	0.71	1.97	31.5	1.64	-1	2.62	2.5	0	0	0.08	-0	102	0.23	-0.1	0.67	1.4	1.75	2	26	-0.9	0.77
155	0	1.7	2.41	1.59	0.71	1.67	26.8	1.67	0.25	2.62	0	0	0	0.19	-0	98	0.17	0.08	0.67	1.09	1.78	4	12	-1	0.69

Annexes

157	0	2.73	3.13	1.34	0	1.8	28.7	1.64	0	4	0	0	0	0.1	-0	86	0.19	-0	0.67	3.16	1.53	0	26	-0.9	0
158	0	1.79	2.74	1.17	1.21	2.39	43.1	2.08	-0.6	2.8	1.47	-0.2	-1	0.38	-0.1	456	0.1	0.23	0.67	1.25	1.73	8	52.5	-0.3	1.54
159	0	3.75	6.5	0.61	0.71	1.16	19.7	3.18	-0	5.16	0.84	2.23	2.69	0.52	0.35	6172	-1.3	0.55	0.67	1.26	3.31	0	0	0.62	4.06
160	1	2.24	3.25	0.82	2.05	2.55	28.1	2.2	-1	3.94	2.1	0.18	-1	0.03	-0.1	475	0.04	0.04	0.67	0.49	0.94	2	30.2	0.06	1.3
161	1	2.7	3.18	0.93	1.5	1.79	19.7	1.99	0	3.5	0	0.5	-1	0.29	-0.2	250	-0.2	0.35	0.67	0.49	1.01	3	12.9	0.17	0
162	0	2.48	2.48	1.39	0.71	2.19	28.5	1.61	1	3.5	0	0	0	-0	0.05	128	0.2	-0.1	0.67	1.08	1.56	0	0	-0.7	0.69
163	1	2.32	2.32	1.29	1.25	2.05	26.6	1.79	0	3.3	0	-0.6	-1.5	0.18	0.09	102	0.02	0.02	0.67	0.96	1.77	2	0	-0.9	0
164	1	2.19	2.42	1.21	1.64	1.81	25.3	1.99	0	3.69	0	-0.6	-1.2	0.11	0.04	230	0.21	-0.1	0.67	1.21	1.94	0	17.1	-1	0
165	0	2.5	2.56	1.37	0.96	1.87	28.1	1.82	-0.4	3.5	1.5	-0.7	-1.5	-0	0.06	246	0.32	-0.1	0.67	1.31	1.62	0	23.8	-0.8	1.15
166	1	1.91	2.73	1.09	2.29	2.22	35.5	2.18	0	3.93	0	0	-0.6	0.31	0	337	0.14	0.03	0.67	1.59	1.8	5	20.3	-1.1	0
167	1	2.08	2.08	1.5	1.25	0.92	13.8	1.79	0	3	0	-0.6	-1.6	0.11	0.07	80	0.15	-0.1	0.67	1.41	2.03	0	0	-1.3	0
168	0	2.4	2.4	1.52	0.71	2.28	34.2	1.61	1	2.88	0	0	0	-0	-0.1	99	0.2	-0.1	0.67	1.29	1.66	3	0	-0.8	0.69
169	0	2.62	2.62	1.52	0.71	2.04	30.6	1.61	1	3.1	0	0	0	0.03	-0.1	97	0.21	-0.1	0.67	0.94	1.81	2	0	-0.6	0.69
170	0	2.62	2.62	1.52	0.71	2.04	30.6	1.61	1	3.1	0	0	0	0	-0.1	97	0.2	-0.1	0.67	0.97	1.73	2	0	-0.6	0.69
171	0	2.85	2.85	1.44	0.82	2.17	32.6	1.61	0	3.52	0	0	0	0.01	-0.1	91	0.2	-0.1	0.67	1.72	1.65	2	0	-1.1	0
172	0	3.14	3.14	1.4	0.82	1.69	25.3	1.61	0	3.62	0	0	0	0.02	-0.1	91	0.21	-0.1	0.67	1.63	1.6	1	0	-0.4	0
173	0	2.83	2.83	1.42	0.82	2.15	32.2	1.61	0	3.3	0	0	0	-0	-0.1	91	0.2	-0.1	0.67	1.79	1.55	3	0	-0.7	0
174	1	1.92	2.27	1.29	1.64	1.72	27.5	1.99	0	3.44	0	-0.6	-1.6	0.24	-0	194	0.18	-0	0.67	1.66	1.96	1	20.2	-1	0
175	0	2.64	2.89	1.36	0.87	1.92	30.8	1.85	-0.4	3.54	1.5	-0.6	-1.4	0	0.06	228	0.22	-0.1	0.67	1.34	1.75	0	17.1	-1.1	1.2
176	0	2.76	3.06	1.4	1.39	1.67	26.8	1.85	0.2	3.62	0	-0.6	-1.2	0.06	0.06	218	0.21	-0.1	0.67	1.09	1.75	0	17.1	-1.2	0.69
177	0	3	3.33	1.29	1.33	1.8	28.8	1.85	0	3.78	0	-0.5	-1	0.05	0.07	212	0.22	-0.1	0.67	1.82	1.76	0	17.1	-1	0
178	1	1.64	2.41	1.26	1.64	1.8	28.8	2.04	0	3.44	0	-0.6	-1.1	0.39	0.07	190	0.09	0.14	0.67	1.42	2.12	3	9.23	-0.9	0
179	0	2.46	2.94	1.24	1.14	2.29	39	2.04	-0.5	3.55	1.4	0	-0.6	0.01	0.03	421	0.23	-0.1	0.67	1.43	1.68	0	37.3	-0.7	1.54
180	0	2.69	3.27	1.17	0.94	2.29	39	2.04	-1	3.63	2.1	0	-1	-0.1	0.07	397	0.15	-0.1	0.67	1.99	1.71	0	37.3	-0.8	1.85
181	0	2.2	3.33	1.19	1.48	2.13	36.3	2.08	-0.5	3.64	1.4	-0.2	-0.5	0.11	0.05	393	0.12	-0	0.67	1.14	1.89	3	26.3	-0.5	1.54
182	0	1.95	3.5	1.23	1.48	2.02	34.3	2.08	-0.1	3.64	0.7	-0.2	-0.8	0.26	0.08	385	0.07	0.07	0.67	0.63	1.8	2	26.3	-0.5	1.47

Annexes

183	0	2.39	3.75	1.13	1.78	2.02	34.3	2.08	0.4	3.85	0	0	-1	0.11	0.06	369	0.1	0.02	0.67	1.57	1.89	3	26.3	-0.6	1.1
184	0	1.8	3.31	1.2	1.14	2.13	36.3	2.08	-0.1	3.55	0.7	0	-0.5	0.22	0.11	405	0.02	0.06	0.67	0.89	1.79	2	26.3	-0.4	1.47
185	0	1.88	3.23	1.16	1.14	2.29	39	2.08	-0.1	3.25	0.7	0	-1	0.12	0.09	425	0.16	-0.1	0.67	1.94	1.82	2	26.3	-0.4	1.47
186	0	1.92	3.74	1.15	0.94	2.02	34.3	2.08	-0.3	3.63	1.05	0	-1	0.29	0.06	381	0.07	0.09	0.67	1.14	1.79	1	26.3	-0.9	1.73
187	0	2.34	2.4	1.81	1.13	1.57	26.7	2.07	-0.4	2.73	1.5	-0.7	-1.7	0.12	-0	124	0.32	-0	0.67	1.36	1.83	2	0	-1.3	1.6
188	0	2.19	2.19	1.81	0.71	1.16	19.7	1.61	1	2.62	0	0	0	-0	0.01	74	0.26	-0.1	0.67	1.43	1.82	0	0	-1.3	0.69
189	0	2.54	2.54	1.7	0.82	1.28	21.7	1.61	0	3.17	0	0	0	-0	0.04	68	0.24	-0.2	0.67	2.01	1.97	0	0	-1.6	0
190	0	3.02	3.02	1.5	0	1.09	18.5	1.61	0	4	0	0	0	-0	-0	64	0.25	-0.1	0.67	3.49	1.55	0	0	-1	0
191	0	2.11	2.41	1.51	0.96	1.79	32.3	1.85	-0.4	2.73	1.5	-0.7	-1.7	0.09	-0	212	0.28	-0.1	0.67	1.49	1.79	2	20.2	-0.8	1.2
192	0	2.33	2.72	1.47	0.87	1.83	33	1.85	-0.4	3.21	1.5	-0.7	-1.6	0.04	-0.1	190	0.25	-0	0.67	1.69	1.76	1	20.2	-0.8	1.2
193	0	2.44	2.85	1.45	1.39	1.95	35	1.85	-1	3.3	3	-0.6	-1.5	0.02	-0	190	0.27	-0.1	0.67	2.02	1.75	2	20.2	-1	0.85
194	0	2.74	3.31	1.37	1.06	1.79	32.3	1.85	0	4.09	0	-0.5	-1.5	0.12	-0	170	0.22	-0.1	0.67	2.54	1.68	0	20.2	-1.2	0
195	0	2.34	2.72	1.43	0.87	1.95	35	1.85	-1	3.21	3	-0.7	-1.6	0.05	-0	198	0.24	-0.1	0.67	2.03	1.93	2	20.2	-1.1	1.3
196	0	2.61	3.12	1.39	1.33	1.79	32.3	1.85	0	3.56	0	-0.6	-1.5	0.09	-0.1	176	0.28	-0.1	0.67	2.26	1.74	1	20.2	-1.2	0
197	0	1.56	2.69	1.5	0.96	1.56	28	1.9	0.2	2.73	0	-0.7	-1.4	0.27	-0	196	0.08	0.17	0.67	0.99	1.88	4	9.23	-0.7	1.1
198	0	2.18	3.6	1.27	1.06	1.52	27.3	1.9	0	4.09	0	-0.5	-1	0.18	-0.1	170	0.2	0.09	0.67	2.45	1.83	3	9.23	-0.8	0
199	0	2.42	2.86	1.49	1.39	1.83	33	1.85	0.2	3.3	0	-0.6	-1.6	0.02	-0	182	0.26	-0.1	0.67	1.74	1.73	1	20.2	-0.9	0.69
200	1	2.33	4.1	0.66	1.5	1	12	2.8	0	4.61	0.92	1.78	1.86	1.41	-0.4	2394	-1.2	1.22	0.67	0.53	1.17	0	0	-0.2	3.24
201	0	4.14	6.79	0.62	0.96	1.16	23.1	3.34	-0	5.21	0.88	2.63	3.01	-0.6	-2.2	9274	0.26	0.51	0.67	1.43	3.2	0	0	0.49	4.32
202	1	3.08	3.24	1.11	2.72	1.92	23	2.56	0.33	4.01	1.56	0.79	0.17	0.15	-0.4	377	-0.3	0.86	0.67	0.53	0.9	4	0	0.18	2.75
203	1	3.14	3.31	1.11	3.48	1.92	23	2.56	-1	4.12	2.33	0.67	-0.2	0.56	-0.5	373	-0.1	0.69	0.67	0.53	0.9	4	0	0.25	1.93
204	1	3.02	3.12	1.06	2.18	1.65	19.8	2.3	-1	3.84	3.5	0.5	-1	0.38	-0.3	290	-0.2	0.61	0.67	0.55	0.92	5	0	0.12	1.37
205	1	3.23	3.03	1.36	2.76	1.65	19.8	2.87	-1	3.84	3.5	0.5	-1	-0.6	-0.3	280	-0.2	0.83	0.67	0.54	0.86	5	0	0.12	2.45
207	1	3	3	1	1.5	1	12	1.95	0	3.5	0	0.5	-1	0.36	-0.3	216	-0.1	0.4	0.67	0.58	0.95	6	0	0.05	0
208	1	2.65	3.14	0.92	1.89	1.91	24.9	2.12	-1	3.84	3.5	0.5	-1	0.51	-0.4	378	-0.1	0.48	0.67	0.73	0.89	5	20.2	0.15	0.85
209	1	2.84	3.09	0.94	1.89	2.01	28.1	2.1	-1	3.84	3.5	0.5	-1	0.49	-0.4	332	-0.1	0.49	0.67	1.23	1.37	5	26	0.21	0.77
210	1	2.74	3.19	0.97	1.89	2.56	35.8	2.12	0.17	3.84	0	0.5	-1	0.36	-0.2	332	-0.1	0.35	0.67	0.95	1.5	3	12.9	-0.1	0.69

Annexes

211	1	2.8	3.16	0.97	1.89	2.61	36.5	2.12	0.17	3.84	0	0.5	-1	0.3	-0.2	334	-0.1	0.29	0.67	1.31	1.47	2	12.9	-0	0.69
212	1	2.81	3.14	0.97	1.89	2.61	36.5	2.12	-1	3.84	3.5	0.5	-1	0.26	-0.2	336	-0.1	0.3	0.67	1.26	1.47	2	12.9	-0.1	0.77
213	1	2.37	2.56	1.11	1.89	2.61	39.1	2.12	-1	3.77	3.5	0	-0.6	0.09	-0.1	353	0.29	-0.2	0.67	1.29	1.8	2	17.1	-0.6	0.85
214	1	2.26	2.26	1.33	1.5	2	32	1.95	0	3.28	0	0	-0.9	-0	-0.1	160	0.32	-0.2	0.67	1.46	1.9	2	0	-0.8	0
215	1	2.13	2.28	1.25	1.89	1.74	29.5	2.12	-1	3.68	3.5	0	-0.6	-0.1	0.1	320	0.32	-0.3	0.67	1.69	2.03	0	17.1	-1	0.85
217	1	2	2	1.5	1.5	0.92	16.5	1.95	0	3	0	0	-1	-0.1	0.04	132	0.35	-0.3	0.67	1.88	2.11	0	0	-1	0
218	1	2.18	2.18	1.45	1.64	1.34	24	1.95	0	3.44	0	-0.6	-1.6	0.07	0.1	126	0.22	-0.1	0.67	2.07	1.97	0	0	-1.5	0
219	0	2.49	2.49	1.51	0.96	2.21	39.8	1.79	1	2.92	0	-0.7	-1.6	-0	-0.1	162	0.27	-0.1	0.67	1.43	1.64	3	0	-1	1.1
220	0	2.81	2.81	1.43	0.87	2.21	39.8	1.79	1	3.26	0	-0.6	-1.5	-0	-0	150	0.24	-0.1	0.67	1.98	1.68	3	0	-0.9	1.1
221	1	1.93	2.18	1.32	1.89	1.63	31	2.12	-1	3.41	3.5	0	-1	0.05	0.01	277	0.33	-0.2	0.67	2.06	2	1	20.2	-0.5	0.85
222	0	2.68	2.86	1.38	1.14	1.88	35.7	1.99	-0.2	3.55	1.17	0	-0.7	-0	0.07	329	0.29	-0.2	0.67	1.49	1.79	0	17.1	-1.3	1.47
223	0	2.84	3.05	1.41	1.48	1.77	33.7	1.99	-0.2	3.64	1.17	-0.2	-0.9	0.01	-0	309	0.27	-0.2	0.67	1.27	1.8	0	17.1	-1.3	1.47
224	0	2.96	3.17	1.31	0.94	1.88	35.7	1.99	-0.4	3.63	1.75	0	-1	0.02	0.02	309	0.32	-0.2	0.67	1.95	1.82	0	17.1	-1.1	1.73
225	0	1.82	2.87	1.32	1.21	2.39	45.4	2.04	-0.2	2.94	1.17	-0.1	-0.9	0.18	-0.1	333	0.07	0.09	0.67	1.25	1.64	4	9.23	-0.7	1.47
226	0	2.55	2.91	1.28	1.39	2.18	43.6	2.16	-0.3	3.55	1.17	0.38	-0.1	0.03	0.05	578	0.26	-0.2	0.67	1.55	1.72	0	37.3	-0.8	1.73
227	0	2.15	3.44	1.27	1.56	2.07	41.4	2.2	-0.5	3.65	1.4	0.56	-0.1	0.21	0.07	514	0.13	0.01	0.67	0.93	1.82	2	26.3	-0.6	1.95
228	0	2	3.43	1.27	1.75	2.07	41.4	2.2	0	3.64	0.58	0.23	-0.2	0.26	0.09	520	0.09	0.02	0.67	0.91	1.85	2	26.3	-0.6	1.67
229	0	2.29	3.78	1.22	1.88	1.93	38.7	2.2	0	3.85	0.58	0	-0.7	0.21	0.08	486	0.12	0.04	0.67	1.3	1.86	2	26.3	-0.9	1.67
230	0	1.93	3.21	1.25	1.39	2.07	41.4	2.2	-0.3	3.55	1.17	0.38	-0.1	0.2	0.09	554	0.08	-0	0.67	1.14	1.79	2	26.3	-0.6	1.73
231	0	2.03	3.51	1.18	1.32	2.07	41.4	2.2	0	3.57	0.58	0	-0.5	0.22	0.1	526	0.1	0.01	0.67	1.61	1.85	2	26.3	-0.6	1.67
232	0	1.94	2.89	1.27	1.46	2.18	43.6	2.2	-0.3	2.96	1.17	0.38	-0.2	0.1	0.11	612	0.19	-0.1	0.67	1.56	1.83	2	26.3	-0.5	1.73
233	0	1.71	3.41	1.12	1.64	2.12	44.5	2.37	-0.4	3.55	1.2	0.52	0.36	0.49	0.03	867	0.05	0.33	0.67	0.84	1.84	6	35.5	-0.6	1.95
234	0	2.34	2.34	1.75	0.96	1.16	23.1	1.79	1	2.73	0	-0.7	-1.7	0.06	0	128	0.33	-0.1	0.67	1.55	1.86	0	0	-1.4	1.1
235	0	2.63	2.63	1.66	0.87	1.32	26.4	1.79	1	3.21	0	-0.7	-1.7	-0	0.01	118	0.33	-0.2	0.67	2	1.86	0	0	-1.6	1.1
236	0	2.75	2.75	1.69	1.39	1.32	26.4	1.79	1	3.3	0	-0.6	-1.6	-0	0.04	114	0.31	-0.2	0.67	1.95	1.85	0	0	-1.8	0.69
237	0	3.17	3.17	1.54	1.06	1.26	25.1	1.79	0	4.09	0	-0.5	-1.5	-0	0.02	106	0.29	-0.2	0.67	3.12	1.77	0	0	-1.8	0

Annexes

238	0	2.99	2.99	1.59	1.33	1.16	23.1	1.79	0	3.56	0	-0.6	-1.6	-0.1	0.04	108	0.3	-0.2	0.67	2.49	1.89	0	0	-2	0
239	0	2.27	2.5	1.51	1.21	1.72	36.1	1.99	-0.2	2.8	1.17	-0.2	-1.1	0.07	-0	312	0.33	-0.1	0.67	1.58	1.81	2	20.2	-0.9	1.47
240	0	2.45	2.75	1.48	1.14	1.78	37.4	1.99	-0.2	3.23	1.17	0	-1	0.14	0.01	282	0.32	-0.1	0.67	1.65	1.83	1	20.2	-1.2	1.47
241	0	2.57	2.91	1.49	1.48	1.78	37.4	1.99	-0.2	3.33	1.17	-0.4	-1.2	0.12	-0	266	0.34	-0.2	0.67	1.6	1.8	1	20.2	-1.1	1.47
242	0	2.59	2.9	1.46	1.48	1.91	40.1	1.99	-0.2	3.33	1.17	-0.4	-1.3	0.05	-0	278	0.34	-0.2	0.67	1.97	1.81	2	20.2	-1.1	1.47
243	0	2.69	3.04	1.4	0.94	1.88	39.4	1.99	-0.4	3.41	1.75	0	-1	-0	0.07	264	0.19	-0	0.67	2.19	1.87	1	20.2	-1.3	1.73
244	0	1.92	3.44	1.39	0.94	1.38	28.9	2.04	0.17	3.41	0	0	-1	0.37	-0.1	248	0.22	0.11	0.67	1.49	1.9	2	9.23	-1.2	1.61
245	0	1.69	2.77	1.5	1.21	1.57	32.9	2.04	0.17	2.8	0	-0.2	-1.2	0.27	-0	284	0.12	0.13	0.67	1.17	1.92	4	9.23	-0.8	1.39
246	0	1.69	3.6	1.3	1.56	1.64	36.1	2.23	-0.2	3.36	0.93	0.32	-0.5	0.56	-0.1	456	0.13	0.29	0.67	0.82	1.96	4	18.5	-0.7	1.9
247	0	2.31	3.3	1.54	1.73	1.36	30	2.02	0.17	3.41	0	-0.6	-1.3	0.28	-0.1	208	0.36	0.04	0.67	1.44	1.79	6	3.24	-1.2	1.39
248	0	2.03	2.62	1.56	1.21	1.76	38.8	1.99	0.17	2.8	0	-0.2	-1.2	0.19	0.01	240	0.31	-0	0.67	1.4	1.86	4	12	-0.9	1.39
249	0	2.41	3.7	1.13	2.09	2.16	54.1	2.44	-0.5	3.48	1.48	0.56	0.1	0.74	-0.3	1054	0.14	0.33	0.67	1.44	1.73	12	63.9	-0.4	2.48
250	0	4.49	7.03	0.62	1.21	1.15	26.4	3.48	-0	5.25	0.9	3.03	3.32	-0.9	-2.3	####	0.1	0.84	0.67	1.45	3.2	0	0	0.52	4.53
251	1	2.84	3.31	0.92	3.39	2.84	42.6	2.61	-0.1	4.29	1.6	1.09	0.51	0.41	-0.4	966	-0.1	0.42	0.67	0.74	0.86	4	37.3	0.18	2.9
252	1	3	3.07	0.89	2.3	1.91	24.9	2.22	-0.6	4.02	2.67	0.8	-0.1	0.31	-0.3	558	0.03	0.42	0.67	0.69	0.81	5	23.8	0.1	1.47
253	1	2.84	3.03	0.91	2.3	1.87	26.2	2.23	-0.6	3.92	2.67	0.75	-0.5	0.38	-0.3	568	0.04	0.35	0.67	0.82	0.91	5	17.1	0.1	1.54
254	1	3.03	3.11	1.08	2.59	2.52	37.8	2.39	-0.4	3.98	2	0.5	-0.4	0.37	-0.3	385	-0	0.58	0.67	1.25	1.45	4	0	-0.1	1.6
255	1	3.02	3.02	1.03	1.89	2.04	30.6	2.08	1	3.84	0	0.5	-1	0.33	-0.3	294	0.03	0.36	0.67	1.27	1.46	5	0	-0.2	0.69
256	1	2.17	3.09	0.95	2.3	2.25	36	2.27	-0.2	3.89	1.33	0.61	-0.4	0.62	-0.5	498	-0.1	0.54	0.67	0.77	1.68	8	9.23	-0.1	1.47
257	1	2.58	2.91	0.97	2.3	2.42	38.8	2.23	-0.6	3.89	2.67	0.61	-0.4	0.43	-0.4	514	0.06	0.39	0.67	1.17	1.33	7	20.2	0.03	1.54
258	1	2.82	3.23	0.96	2.54	2.7	43.2	2.23	-0.4	4.12	2	0.67	-0.5	0.5	-0.4	478	-0	0.39	0.67	1.32	1.42	4	20.2	-0.3	1.2
259	1	2.77	3.17	0.95	2.2	2.7	43.2	2.23	-0.6	4.01	2.67	0.79	-0.1	0.49	-0.3	486	-0.1	0.44	0.67	1.32	1.44	4	20.2	-0.1	1.54
260	1	2.74	3.12	0.95	2.31	2.7	43.2	2.23	-0.4	3.98	2	0.5	-0.5	0.47	-0.4	494	-0	0.43	0.67	1.39	1.44	4	20.2	-0.2	1.2
261	1	2.78	3.25	1.01	2.2	2.38	40.5	2.23	0.14	4.01	0	0.79	-0.2	0.44	-0.2	428	-0.1	0.36	0.67	1.01	1.62	3	12.9	-0.8	1.39
262	0	2.12	3.47	1.16	2	2.71	57	2.3	-0.2	3.7	1.03	0.76	0.14	0.24	0.01	758	0.1	-0	0.67	1.25	1.62	5	26.3	-0.5	1.9
263	1	2.04	2.04	1.5	1.75	0.92	19.3	2.08	0	3	0	0.56	-0.4	-0.1	0.28	196	0.21	-0.2	0.67	2.25	2.17	0	0	-1.6	0
264	1	2.12	2.12	1.46	1.89	1.3	27.3	2.08	1	3.41	0	0	-1	-0.2	0.01	193	0.44	-0.3	0.67	2.35	2.03	0	0	-1.2	0.69
265	1	2.14	2.14	1.47	2.05	1.3	27.3	2.08	1	3.52	0	-0.2	-1.2	0.08	0.09	194	0.31	-0.2	0.67	1.97	1.95	0	0	-1.7	1.1

Annexes

295	1	2.71	3.01	1.04	2.62	2.8	53.1	2.34	-0.3	4.04	1.8	0.92	-0.1	0.53	-0.3	632	-0	0.4	0.67	1.28	1.66	4	20.2	-0.3	1.9
296	1	2.66	2.95	1.04	2.71	2.8	53.1	2.34	-0.2	4.01	1.13	0.94	-0	0.49	-0.3	648	0.01	0.42	0.67	1.34	1.67	4	20.2	-0.3	1.67
297	1	2.97	3.33	0.99	3.11	2.72	51.7	2.34	-0.4	4.29	2.25	1	-0.1	0.53	-0.4	596	0.07	0.37	0.67	1.46	1.51	3	20.2	-0.4	1.73
298	1	2.91	3.25	0.99	2.86	2.72	51.7	2.34	-0.2	4.2	1.13	0.8	-0.2	0.52	-0.4	608	0.06	0.4	0.67	1.43	1.56	3	20.2	-0.3	1.67
299	1	2.91	3.25	0.99	2.86	2.72	51.7	2.34	-0.4	4.2	2.25	0.8	-0.1	0.47	-0.4	604	0.06	0.34	0.67	1.58	1.55	3	20.2	-0.5	1.73
300	1	2.97	3.33	0.99	3.11	2.72	51.7	2.34	-0.2	4.29	1.13	1	-0.1	0.55	-0.4	592	0.08	0.37	0.67	1.43	1.54	3	20.2	-0.4	1.67
301	1	2.91	3.25	0.99	2.86	2.72	51.7	2.34	-0.4	4.2	2.25	0.8	-0.1	0.44	-0.4	612	0.06	0.36	0.67	1.47	1.55	3	20.2	-0.7	1.73
302	1	2.9	3.25	0.99	2.41	2.72	51.7	2.34	-0.4	4.14	2.25	1	-0.1	0.5	-0.4	608	0.04	0.39	0.67	1.35	1.57	3	20.2	-0.2	2.08
303	1	2	2	1.5	2	0.92	22	2.2	1	3	0	1	0	0.01	0.23	288	0.28	-0.3	0.67	2.3	2.24	0	0	-2.1	1.61
304	1	2.19	2.19	1.42	2.31	1.42	34	2.2	1	3.56	0	0	-1	-0.2	-0	272	0.52	-0.4	0.67	2.76	2.01	0	0	-1.2	1.1
305	0	2.62	2.62	1.51	1.46	2.05	49.2	2.08	1	2.96	0	0.38	-0.7	-0.1	-0.1	364	0.39	-0.2	0.67	1.61	1.71	3	0	-1.2	1.61
306	0	2.66	2.89	1.33	1.89	2	52	2.37	-0.2	3.55	0.94	0.82	0.4	-0	0.05	1016	0.43	-0.3	0.67	1.71	1.79	0	37.3	-0.8	2.04
307	0	3.23	3.58	1.32	2.4	2.06	53.6	2.37	-0.4	3.87	1.41	0.84	0.43	-0.1	0.02	842	0.27	-0.3	0.67	1.71	1.75	0	37.3	-1.7	2.34
308	0	2.21	3.39	1.32	2.08	1.98	51.5	2.4	-0.5	3.66	1.61	0.78	0.34	0.2	0.06	880	0.21	-0.1	0.67	1.31	1.81	2	26.3	-0.9	2.23
309	0	2.39	3.83	1.23	2.34	1.93	50.2	2.4	0.04	3.86	0.47	0.27	-0	0.2	0.07	808	0.2	-0.1	0.67	1.81	1.87	2	26.3	-0.9	1.99
310	0	2.53	2.53	1.68	1.46	1.14	29.6	2.08	1	2.85	0	0.24	-0.8	-0	-0	306	0.44	-0.3	0.67	1.69	1.88	0	0	-1.8	1.61
311	0	2.72	2.72	1.62	1.39	1.32	34.4	2.08	1	3.23	0	0	-1	-0	0.02	288	0.45	-0.3	0.67	1.95	1.96	0	0	-1.8	1.61
312	0	2.86	2.86	1.63	1.75	1.32	34.4	2.08	1	3.34	0	0	-1	-0	0.03	276	0.44	-0.3	0.67	1.94	1.88	0	0	-2	1.61
313	0	2.92	2.92	1.63	1.56	1.32	34.4	2.08	1	3.36	0	0.32	-0.7	-0	0.03	272	0.44	-0.3	0.67	1.86	1.86	0	0	-2	1.79
314	0	3.07	3.07	1.65	1.85	1.32	34.4	2.08	1	3.44	0	0.18	-0.8	-0	0.1	260	0.41	-0.3	0.67	1.75	1.99	0	0	-2	1.79
315	0	3.11	3.11	1.53	1.28	1.32	34.4	2.08	1	4.1	0	0	-1	-0	0.02	260	0.42	-0.3	0.67	2.75	1.89	0	0	-2	1.61
316	0	3.17	3.17	1.58	1.88	1.35	35.2	2.08	1	3.64	0	0	-1	-0.1	0.06	254	0.44	-0.3	0.67	2.21	1.93	0	0	-2	1.61
317	0	3.1	3.1	1.57	1.57	1.35	35.2	2.08	1	3.48	0	0	-1	-0.1	0.17	258	0.31	-0.3	0.67	2.22	1.98	0	0	-2.1	1.79
318	0	2.93	2.93	1.55	1.32	1.35	35.2	2.08	1	3.34	0	0	-1	0.02	0.02	270	0.44	-0.3	0.67	2.24	1.97	0	0	-2.1	1.61
319	0	3.37	3.37	1.55	1.88	1.32	34.4	2.08	1	4.17	0	0	-1	-0	0.05	244	0.39	-0.3	0.67	2.56	1.92	0	0	-2.5	1.61
320	0	3.29	3.29	1.59	2.26	1.35	35.2	2.08	1	3.69	0	-0.3	-1.3	-0.1	0.16	246	0.34	-0.3	0.67	2.04	1.93	0	0	-2.1	1.61
321	0	3.36	3.36	1.59	1.99	1.35	35.2	2.08	1	3.69	0	0	-1	-0.1	0.05	242	0.41	-0.4	0.67	2	1.89	0	0	-2.5	1.79

Annexes

322	0	3.58	3.58	1.58	2.56	1.32	34.4	2.08	1	4.24	0	-0.2	-1.2	-0.1	0.12	232	0.32	-0.3	0.67	2.56	1.89	0	0	-2.6	1.39
323	0	3.62	3.62	1.49	2.09	1.37	35.5	2.08	1	4.28	0	0	-1	-0.1	0.03	230	0.42	-0.3	0.67	2.99	1.84	0	0	-2.3	1.39
324	0	3.39	3.39	1.46	1.02	1.37	35.5	2.08	1	4.13	0	0	-1	-0.1	0.12	242	0.26	-0.2	0.67	3.06	1.89	0	0	-2	1.95
325	0	3.71	3.71	1.5	2.47	1.37	35.5	2.08	1	4.32	0	0	-1	-0.2	0.11	226	0.32	-0.3	0.67	2.95	1.87	0	0	-2.8	1.1
326	0	3.46	3.46	1.52	2.1	1.18	30.8	2.08	1	3.81	0	0	-1	-0.2	0.07	236	0.35	-0.3	0.67	2.56	1.88	0	0	-2.3	1.61
327	0	4.02	4.02	1.39	2.25	1.14	29.6	2.08	0	4.65	0	0	-1	-0.3	0.15	214	0.23	-0.2	0.67	3.85	1.81	0	0	-3.2	0
328	0	2.48	2.63	1.51	1.71	1.61	43.4	2.23	-0.1	2.88	0.9	0.65	-0.2	0.05	-0.1	606	0.46	-0.2	0.67	1.72	1.85	2	20.2	-1	1.85
329	0	2.61	2.79	1.48	1.64	1.68	45.3	2.23	-0.1	3.24	0.9	0.26	-0.5	0.07	-0	560	0.38	-0.2	0.67	1.78	1.83	1	20.2	-1.4	1.85
330	0	2.92	3.14	1.48	2.12	1.81	48.9	2.23	-0.3	3.44	1.5	0.68	-0.2	0.1	-0	512	0.47	-0.2	0.67	1.8	1.97	2	20.2	-1.5	2.04
331	0	1.92	2.86	1.5	1.71	1.53	41.3	2.27	-0.3	2.88	1.8	0.65	-0.2	0.25	-0	550	0.28	0.01	0.67	1.49	1.86	4	9.23	-1.2	1.9
332	0	2.54	2.61	1.54	1.71	1.7	47.6	2.22	-0.1	2.88	0.9	0.65	-0.3	0.04	-0	518	0.48	-0.3	0.67	1.75	1.84	2	26	-1.3	1.82
333	0	2.24	2.73	1.55	1.71	1.7	47.5	2.23	-0.3	2.88	1.8	0.65	-0.3	0.16	0.02	490	0.47	-0.1	0.67	1.62	1.86	4	12	-1.1	1.85
334	0	5.05	7.4	0.62	1.71	1.13	32.8	3.71	-0	5.29	0.93	3.66	3.8	-0.8	-2.3	####	-0.1	1.15	0.67	1.51	3.23	0	0	0.84	4.85
335	2	2.73	2.99	0.89	3.47	2.02	34.3	2.51	-0.1	4.36	0.83	2.12	0.62	0.77	-0.5	850	-0.1	0.63	0.67	0.74	1	6	12.9	0.33	1.97
336	2	2.78	2.95	0.89	3.47	2.01	34.2	2.51	-0.3	4.36	1.67	2.12	0.62	0.73	-0.5	858	-0.1	0.63	0.67	0.86	0.99	5	12.9	0.28	1.99
337	2	2.54	2.54	1.06	3.22	2.38	45.2	2.4	1	4.22	0	1.57	0.55	0.53	-0.2	526	-0	0.42	0.67	1.39	1.61	4	0	-0.9	1.61
338	1	2.62	2.62	1.16	2.42	2.35	49.4	2.3	1	3.9	0	0.93	-0.1	0.32	-0.3	548	0.14	0.32	0.67	1.47	1.74	5	0	-0.5	1.79
339	1	2.85	2.85	1.12	2.59	2.26	47.4	2.3	1	4.02	0	0.67	-0.6	0.27	-0.4	518	0.12	0.23	0.67	1.63	1.61	5	0	-0.6	1.79
340	1	2.88	2.88	1.13	2.71	2.39	50.2	2.3	1	4.01	0	0.94	-0.1	0.47	-0.4	520	0.13	0.38	0.67	1.52	1.74	4	0	-0.5	1.61
341	1	3.25	3.25	1.08	3.11	2.13	44.7	2.3	1	4.29	0	1	-0.1	0.28	-0.4	484	0.25	0.23	0.67	1.51	1.62	3	0	-0.7	1.61
342	1	3.17	3.17	1.08	2.86	2.13	44.7	2.3	1	4.2	0	0.8	-0.2	0.31	-0.4	492	0.23	0.24	0.67	1.53	1.69	3	0	-0.7	1.61
343	1	3.17	3.17	1.08	2.41	2.13	44.7	2.3	1	4.14	0	1	-0.1	0.36	-0.4	492	0.2	0.3	0.67	1.34	1.73	3	0	-0.5	1.95
344	0	2.66	2.66	1.51	1.71	1.98	53.4	2.2	1	2.97	0	0.82	-0.3	-0	-0.1	511	0.42	-0.3	0.67	1.75	1.72	3	0	-1.2	1.79
345	0	2.71	2.89	1.35	2.14	1.93	55.9	2.46	-0.1	3.55	0.87	1.17	0.55	-0	0.03	1305	0.48	-0.3	0.67	1.77	1.8	0	37.3	-0.9	2.16
346	0	2.34	3.5	1.3	2.26	2.04	59.1	2.49	-0.5	3.66	1.91	0.89	0.45	0.03	0.02	1093	0.35	-0	0.67	1.74	1.98	2	26.3	-1.1	2.37
347	0	2.6	2.6	1.66	1.71	1.13	32.8	2.2	1	2.88	0	0.65	-0.3	-0	-0	438	0.51	-0.3	0.67	1.75	1.89	0	0	-1.9	1.79
348	0	2.75	2.75	1.6	1.64	1.31	38.1	2.2	1	3.24	0	0.26	-0.7	-0	-0	416	0.51	-0.3	0.67	2.01	1.92	0	0	-2	1.79

Annexes

349	0	3.07	3.07	1.52	1.53	1.33	38.4	2.2	1	4.1	0	0	-1	-0	-0	380	0.47	-0.4	0.67	2.7	1.91	0	0	-2	1.79
350	0	3.28	3.28	1.47	1.47	1.41	40.8	2.2	1	4.1	0	0	-1	0.03	0.05	358	0.49	-0.4	0.67	2.86	1.96	0	0	-2.3	1.79
351	0	4.15	4.15	1.43	2.91	1.27	36.9	2.2	1	4.68	0	0	-1	0.04	-0.1	298	0.65	-0.4	0.67	3.52	1.8	0	0	-1.8	1.39
352	0	3.88	3.88	1.45	2.37	1.27	36.9	2.2	1	4.33	0	0	-1	-0.1	0	312	0.53	-0.2	0.67	3.19	1.87	0	0	-1.7	1.95
353	0	3.75	3.75	1.39	1.06	1.27	36.9	2.2	1	4.3	0	0	-1	-0	0.03	322	0.4	-0.2	0.67	3.56	1.91	0	0	-2.6	2.3
354	0	4.01	4.01	1.46	2.98	1.27	36.9	2.2	1	4.45	0	0	-1	-0.1	0.09	304	0.46	-0.2	0.67	3.15	1.9	0	0	-2.6	1.61
355	0	2.55	2.68	1.51	1.96	1.56	46.8	2.34	-0.1	2.9	0.83	1	0.15	0.04	-0.1	808	0.52	-0.3	0.67	1.78	1.87	2	20.2	-1.1	1.99
356	0	2.66	2.81	1.48	1.89	1.63	49	2.34	-0.1	3.24	0.83	0.73	-0.2	0.07	-0.1	754	0.56	-0.2	0.67	1.87	1.83	1	20.2	-1.5	1.99
357	0	5.28	7.54	0.62	1.96	1.12	35.9	3.8	-0	5.3	0.94	3.89	3.98	-0.6	-3.2	####	0.73	0.84	0.67	1.6	3.18	0	0	0.03	4.97
358	2	2.89	2.89	0.93	3.47	1.39	25.1	2.49	1	4.36	0	2.12	0.62	0.76	-0.6	792	0.04	0.64	0.67	0.86	0.97	8	0	0.19	1.95
360	2	2.41	2.41	1.1	3.47	2.37	52.1	2.49	1	4.21	0	1.83	0.7	0.24	-0.3	680	0.35	0.09	0.67	1.67	1.73	4	0	-0.5	1.95
361	2	2.51	2.51	1.08	3.69	2.55	56.1	2.49	1	4.32	0	1.8	0.69	0.54	-0.2	658	0.05	0.37	0.67	1.69	1.77	4	0	-1	1.95
362	2	2.52	2.52	1.08	3.55	2.42	53.3	2.49	1	4.28	0	1.69	0.68	0.5	-0.2	664	0.05	0.36	0.67	1.51	1.72	3	0	-1.2	1.95
363	1	2.43	2.43	1.19	2.69	2.35	56.3	2.4	1	3.9	0	1.38	0.35	0.44	-0.4	736	0.27	0.3	0.67	1.55	1.83	5	0	-0.3	1.95
364	1	2.59	2.59	1.15	2.53	2.35	56.3	2.4	1	3.92	0	1.07	0.06	0.46	-0.3	702	0.19	0.31	0.67	2.02	1.74	5	0	-0.2	2.08
365	1	2.8	2.8	1.18	3.12	2.28	54.8	2.4	1	4.03	0	1.43	0.36	0.39	-0.4	676	0.27	0.3	0.67	1.38	1.76	4	0	-0.5	1.95
366	1	2.89	2.89	1.13	3	2.37	56.8	2.4	1	4.09	0	1.05	0.04	0.22	-0.4	658	0.18	0.17	0.67	1.86	1.7	4	0	-0.6	1.95
367	1	3.28	3.28	1.1	3.43	1.96	47	2.4	1	4.32	0	0.87	-0.2	0.27	-0.4	612	0.33	0.19	0.67	1.55	1.75	2	0	-1.2	1.95
368	1	2.75	2.75	1.17	3.1	2.35	56.3	2.4	1	4.04	0	1.24	0.23	0.45	-0.4	674	0.25	0.29	0.67	1.62	1.68	5	0	-0.5	2.08
369	2	1.93	1.93	1.35	3.47	1.2	33.5	2.49	1	3.86	0	1.62	0.62	-0.3	0.08	520	0.58	-0.5	0.67	2.62	2.21	0	0	-1.5	1.95
370	2	1.93	1.93	1.35	3.47	1.2	33.5	2.49	1	3.86	0	1.62	0.62	-0.4	-0	520	0.73	-0.5	0.67	2.66	2.1	0	0	-1.1	1.95
371	0	2.7	2.7	1.51	1.96	1.92	57.5	2.3	1	2.97	0	1.17	0	-0	-0.1	694	0.52	-0.3	0.67	1.74	1.77	3	0	-1.4	1.95
372	0	2.74	2.9	1.36	2.39	1.86	59.6	2.54	-0.1	3.55	0.83	1.46	0.71	0.16	0.02	1646	0.6	-0.2	0.67	1.85	1.81	0	37.3	-0.5	2.27
373	0	2.65	2.65	1.64	1.96	1.12	35.9	2.3	1	2.9	0	1	0	-0	-0	604	0.57	-0.4	0.67	1.8	1.9	0	0	-2	1.95
374	0	3.64	3.64	1.51	2.56	1.42	45.5	2.3	1	4.2	0	0.51	-0.5	-0.1	0.08	456	0.5	-0.4	0.67	2.62	1.95	0	0	-3.2	2.2
375	0	4.1	4.1	1.44	2.91	1.32	42.4	2.3	1	4.68	0	0	-1	-0.2	0.04	416	0.46	-0.5	0.67	3.17	1.88	0	0	-2.6	1.95

Annexes

376	0	3.56	3.56	1.4	1.63	1.32	42.4	2.3	1	4.18	0	0	-1	0	0.05	464	0.51	-0.4	0.67	3.34	1.94	0	0	-2.6	1.95
377	0	2.61	2.71	1.51	2.21	1.52	50.2	2.43	-0.1	2.92	0.79	1.29	0.43	0.07	-0	1052	0.56	-0.3	0.67	1.83	1.89	2	20.2	-1.2	2.12
378	2	2.91	2.91	0.96	3.93	2.2	46.2	2.57	1	4.48	0	2.33	0.96	0.68	-0.6	951	0.17	0.57	0.67	1.17	1.51	7	0	-0.3	2.3
379	2	2.83	2.83	0.95	3.8	2.2	46.2	2.57	1	4.4	0	2.18	0.72	0.73	-0.7	973	0.12	0.59	0.67	1.29	1.53	7	0	0.04	2.2
380	0	2.69	2.69	1.62	2.21	1.11	39	2.4	1	2.92	0	1.29	0.29	-0.1	-0.1	808	0.64	-0.4	0.67	1.85	1.91	0	0	-2.1	2.08
381	0	2.66	2.75	1.51	2.46	1.49	53.5	2.51	-0	2.93	0.75	1.52	0.65	0.03	-0.1	1342	0.65	-0.4	0.67	1.88	1.89	2	20.2	-1.2	2.23
382	2	2.46	2.46	0.94	3.97	1.35	29.7	2.64	1	4.21	0	2.5	1	0.81	-0.6	1358	-0	0.77	0.67	1.14	1.35	10	0	0.7	2.4
383	2	2.8	2.8	0.98	4.14	2.4	57.5	2.64	1	4.43	0	2.26	0.84	0.7	-0.7	1176	0.21	0.54	0.67	1.39	1.65	6	0	-0.2	2.4
384	1	3.01	3.01	1.23	3.73	2.16	64.8	2.57	1	4.19	0	1.58	0.46	0.63	-0.3	990	0.51	0.43	0.67	1.15	2.05	3	0	-0.7	2.57
385	3	1.98	1.98	1.19	4.65	1.63	52.1	2.71	1	4.56	0	1	0	-0.6	-0.2	772	1.02	-0.8	0.67	3.88	2.21	0	0	-1.2	2.4
386	0	2.77	2.77	1.51	2.46	1.81	65.1	2.49	1	2.98	0	1.67	0.54	-0.1	-0.1	1184	0.65	-0.4	0.67	1.84	1.79	3	0	-1.6	2.2
387	0	2.8	2.91	1.38	2.89	1.76	66.9	2.69	-0.1	3.55	0.76	1.88	1.01	-0	-0	2500	0.68	-0.5	0.67	1.91	1.86	0	37.3	-1.1	2.46
388	0	2.73	2.73	1.61	2.46	1.11	42	2.49	1	2.93	0	1.52	0.52	-0.1	-0.1	1054	0.7	-0.5	0.67	1.9	1.92	0	0	-2.3	2.2
389	0	2.7	2.78	1.51	2.71	1.46	56.8	2.59	-0	2.94	0.72	1.71	0.84	0.05	-0.1	1682	0.69	-0.4	0.67	1.92	1.91	2	20.2	-1.4	2.34
390	2	2.16	2.16	0.97	4.12	1.83	45.7	2.71	1	4.02	0	2.5	1	0.71	-0.5	1742	0.02	0.79	0.67	1.53	1.63	10	0	0.5	2.4
391	0	2.76	2.76	1.6	2.71	1.1	45	2.57	1	2.94	0	1.71	0.71	-0.1	-0.1	1346	0.76	-0.5	0.67	1.94	1.92	0	0	-2.4	2.3
392	0	2.73	2.8	1.51	2.96	1.43	60	2.66	-0	2.95	0.7	1.87	0.98	0.03	-0.1	2076	0.75	-0.4	0.67	1.96	1.92	2	20.2	-1.5	2.43
393	3	2.61	2.61	0.9	5.39	1.48	35.6	2.83	1	4.64	0	2.91	1.41	0.94	-0.9	1904	0.14	0.8	0.67	0.88	1.02	10	0	0.59	2.83
394	3	2.52	2.52	0.9	5.34	1.48	35.6	2.83	1	4.55	0	2.85	1.35	1.09	-1	1960	0.17	0.81	0.67	0.95	1.04	10	0	0.39	2.71
395	1	3.02	3.02	1.14	4.18	2.1	75.5	2.71	1	4.5	0	2.5	1	-0	-0.5	1452	0.46	-0	0.67	2.9	1.88	4	0	-1.6	2.71
396	0	2.79	2.79	1.6	2.96	1.09	48	2.64	1	2.95	0	1.87	0.87	-0.1	-0.1	1688	0.83	-0.6	0.67	1.98	1.93	0	0	-2.6	2.4
397	0	2.76	2.82	1.51	3.21	1.41	63.2	2.73	-0	2.96	0.68	2	1.11	0.03	-0.1	2528	0.81	-0.5	0.67	1.99	1.93	2	20.2	-1.7	2.51
399	0	2.81	2.81	1.59	3.21	1.08	51	2.71	1	2.96	0	2	1	-0.1	-0.1	2084	0.89	-0.6	0.67	2.01	1.94	0	0	-2.8	2.49
400	0	2.79	2.84	1.51	3.46	1.38	66.4	2.79	-0	2.96	0.67	2.11	1.21	0.02	-0.1	3042	0.87	-0.5	0.67	2.02	1.93	2	20.2	-1.9	2.59
401	0	2.83	2.83	1.58	3.46	1.08	53.9	2.77	1	2.96	0	2.11	1.11	-0.1	-0.1	2538	0.96	-0.7	0.67	2.04	1.94	0	0	-3.1	2.57
402	0	4.26	4.26	1.36	2.87	1.42	71.2	2.77	1	4.36	0	0.89	-0.1	-0	0.07	1710	0.96	-0.4	0.67	3.4	2.02	0	0	-2.8	3.18
403	0	2.81	2.86	1.5	3.71	1.36	69.5	2.85	-0	2.97	0.65	2.21	1.3	0.02	-0.1	3622	0.94	-0.6	0.67	2.05	1.94	2	20.2	-2.2	2.66

Annexes

404	0	2.85	2.85	1.58	3.71	1.07	56.9	2.83	1	2.97	0	2.21	1.21	-0.1	-0.1	3054	1.02	-0.7	0.67	2.06	1.95	0	0	-3.4	2.64
405	0	2.83	2.87	1.5	3.96	1.35	72.6	2.91	-0	2.97	0.64	2.29	1.37	0.01	-0.1	4272	1.01	-0.6	0.67	2.08	1.94	2	20.2	-2.5	2.73
406	3	2.18	2.18	0.92	6.39	1.42	45.4	3.05	1	4.47	0	2.96	1.48	1.57	-1	3892	0.16	1.16	0.67	1.13	1.59	14	0	1.31	3.22
407	3	2.05	2.05	0.92	6.39	1.42	45.4	3.05	1	4.34	0	2.83	1.35	1.54	-0.9	4132	0.06	1.16	0.67	1.06	1.54	14	0	1.36	3.09
408	3	1.95	1.95	0.92	6.45	1.42	45.4	3.05	1	4.3	0	2.75	1.28	1.48	-1	4372	-0.1	1.11	0.67	1.38	1.39	14	0	1.04	3.05
409	0	2.9	2.95	1.42	4.39	1.56	87.1	3.03	-0	3.55	0.66	2.48	1.52	0.32	0.05	6726	1.15	-0.3	0.67	2.14	1.89	0	37.3	-0.2	2.87
410	0	2.86	2.86	1.57	3.96	1.07	59.8	2.89	1	2.97	0	2.29	1.29	-0.1	-0.2	3636	1.08	-0.7	0.67	2.09	1.95	0	0	-3.7	2.71
411	0	2.85	2.89	1.5	4.21	1.33	75.7	2.96	-0	2.97	0.63	2.36	1.43	0.49	0.14	4996	1.07	-0.3	0.67	2.14	1.93	2	20.2	-0.1	2.79
412	0	2.88	2.88	1.57	4.21	1.06	62.7	2.94	1	2.97	0	2.36	1.36	-0.1	-0.2	4288	1.15	-0.8	0.67	2.11	1.95	0	0	-4	2.77
413	0	2.86	2.9	1.5	4.46	1.31	78.8	3.01	-0	2.98	0.63	2.41	1.48	0.51	0.15	5798	1.13	-0.3	0.67	2.16	1.93	2	20.2	-0.1	2.85
414	0	2.89	2.89	1.57	4.46	1.06	65.6	3	1	2.98	0	2.41	1.41	-0.1	-0.2	5014	1.21	-0.8	0.67	2.13	1.96	0	0	-4.3	2.83
415	0	2.88	2.91	1.5	4.71	1.3	81.9	3.06	-0	2.98	0.62	2.47	1.53	0.54	0.16	6682	1.19	-0.3	0.67	2.18	1.94	2	20.2	-0.1	2.91
416	0	2.9	2.9	1.56	4.71	1.05	68.5	3.05	1	2.98	0	2.47	1.47	-0.1	-0.2	5818	1.28	-0.9	0.67	2.15	1.96	0	0	-4.7	2.89
417	0	2.91	2.91	1.56	4.96	1.05	71.4	3.09	1	2.98	0	2.51	1.51	-0.1	-0.2	6704	1.34	-0.9	0.67	2.17	1.96	0	0	-5.1	2.94
418	0	2.92	2.92	1.56	5.21	1.05	74.3	3.14	1	2.98	0	2.55	1.55	-0.2	-0.2	7676	1.41	-1	0.67	2.18	1.97	0	0	-5.5	3
419	0	2.93	2.93	1.55	5.46	1.04	77.2	3.18	1	2.98	0	2.59	1.59	-0.2	-0.2	8738	1.47	-1	0.67	2.2	1.97	0	0	-5.9	3.05

Annexes

Tableau A.3. Valeurs des descripteurs pertinentes utilisées pour l'élaboration du modèle de RQSP pour Pc

ID	RBN	nO	TI1	Lop	X3sol	IDDE	Vindex	ATS1m	ATS3m	ATS2m	ATS5m	ESpm03u	ESpm01d	EEig07d	BELm2	RDF055v	Mor09u	E1s	HATS0u	R2e	H0m	Hy	TPSA(NO)	MLOGP
1	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	2.717	0	4.232	0	3.219	1.855	0	0	0	0.089	0.437	2.247	2.68	48.7	-0.18	0	2.226
2	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	2.518	0	3.691	0	3.219	1.947	0	0	0	-0.4	0.221	2.246	3.6	39.72	-0.18	0	1.817
3	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	2.86	0	4.498	0	3.219	1.943	0	0	0	-0.13	0.241	2.244	2.931	71.45	-0.18	0	2.226
5	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	2.163	0	3.114	0	3.219	1.959	0	0	0	-0.22	0.289	2.248	3.811	12.27	-0.18	0	1.597
6	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	2.309	0	3.431	0	3.219	1.859	0	0	0	0.058	0.329	2.247	3.296	16.96	-0.18	0	1.817
7	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	2.437	0	3.717	0	3.219	1.609	0	0	0	0.137	0.406	2.248	2.847	21.59	-0.18	0	2.026
8	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	2.55	0	3.975	0	3.219	1.463	0	0	0	0.02	0.672	2.25	2.463	26.14	-0.18	0	2.226
9	0	0	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	2.381	0	3.201	0	1.946	1.705	0	0	0	-0.13	0.497	2.241	3.01	38.13	-0.22	0	1.597
10	0	0	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	1.962	0	2.553	0	1.946	1.719	0	0	0	-0.02	0.608	2.244	3.2	10.5	-0.22	0	1.364
11	0	0	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	2.138	0	2.947	0	1.946	1.591	0	0	0	0.169	0.623	2.242	2.745	15.23	-0.22	0	1.597
12	0	0	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	2.288	0	3.301	0	1.946	1.25	0	0	0	0.153	0.803	2.243	2.358	19.89	-0.22	0	1.817
13	0	0	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	1.749	0	2.141	0	1.946	1.71	0	0	0	-0.42	0.977	2.247	3.728	5.688	-0.22	0	1.115
14	0	0	-0.6	0	0	0	0	0.773	0	0	0	0	1.526	0	0	0	0.066	0.499	0.5	0.246	0.701	-0.32	23.79	-0.96
15	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.932	0	2.273	0	0	1.224	0	0	0	0.331	1.466	2.239	2.279	13.46	-0.26	0	1.364
16	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.426	0	1.254	0	0	1.391	0	0	0	-0.1	1.865	2.246	3.137	3.833	-0.26	0	0.845
17	0	1	-0.6	0	0	0	0	0.847	0	0	0	0	1.224	0	0	0	0.084	1.391	1.333	1.139	1.195	-0.32	17.07	-0.96
19	0	0	-0.6	0	0	0	0	2.035	0	0	0	0	0.908	0	0	0	0.58	1.402	2.238	2.09	34.71	-0.32	0	1.115
20	0	0	-0.6	0	0	0	0	1.374	0	0	0	0	0.94	0	0	0	0.535	1.656	2.241	2.236	6.82	-0.32	0	0.845
21	0	0	-0.6	0	0	0	0	0.949	0	0	0	0	0.92	0	0	0	0.24	2.298	2.248	2.636	1.936	-0.32	0	0.546
22	0	0	-0.6	0	0	0	0	2.448	0	0	0	0	0.829	0	0	0	0.447	1.271	2.239	1.905	87.33	-0.32	0	1.364
24	0	2	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	1.663	0	1.694	0	1.946	1.686	0	0.581	0	0.122	1.436	1.707	1.849	2.102	-0.22	45.82	-0.43
25	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0.713	0	2.25	2.241	0.021	0	0	1.115
26	0	1	-0.6	0	0	0	0	0.847	0	0	0	0	0.621	0	0.421	0	0.313	0.758	1.905	2.006	0.645	1.262	20.23	-0.81

Annexes

27	0	0	-0.6	0	0	0	0	1.3	0	0	0	0	1.374	0	0.244	0	0.576	0.86	1.826	1.711	3.322	1.262	0	0.203
28	0	0	-6.73	0.811	0	0.811	1.201	2.554	3.402	3.441	0	3.892	2.314	-1.26	0	0	-0.52	1.181	1.412	3.113	10.91	-0.24	0	2.419
29	0	0	-6.73	0.811	2	0.811	1.201	3.074	4.579	4.216	0	3.892	2.303	-1.26	0	0	-0.48	1.256	1.397	2.675	48.21	-0.24	0	2.957
30	0	0	-6.73	0.811	0	0.811	1.201	2.655	3.598	3.658	0	3.892	2.245	-1.28	0	0	-0.4	1.156	1.435	2.831	14.54	-0.24	0	2.604
31	0	0	-6.73	0.811	1.125	0.811	1.201	2.655	3.648	3.609	0	3.892	2.318	-1.26	0	0	-0.13	1.092	1.429	2.824	14.46	-0.24	0	2.604
32	0	0	-6.73	0.811	1.837	0.811	1.201	2.747	3.845	3.795	0	3.892	2.25	-1.28	0	0	0.066	1.03	1.45	2.564	18.02	-0.24	0	2.783
33	0	0	-4.59	0.918	3	0.918	1.088	2.625	3.579	3.409	0	2.565	1.758	0	0	0	0.204	0.983	0.924	0.787	16.8	-0.31	0	2.459
34	0	0	-4.59	0.918	0	0.918	1.088	2.12	2.399	2.512	0	2.565	1.952	0	0	0	-0.61	1.233	0.906	1.298	4.852	-0.31	0	1.672
35	0	0	-5.62	0.863	0	1.842	1.159	2.794	3.841	3.749	0	3.434	2.148	0	0.232	0	-0.23	1.103	1.448	2.502	35.03	-0.27	0	2.604
36	0	0	-5.62	0.863	0	1.842	1.159	2.423	3.114	3.112	0	3.434	2.152	0	0.25	0	-0.34	1.167	1.414	2.851	9.833	-0.27	0	2.226
37	0	0	-5.62	0.863	0	1.842	1.159	2.538	3.368	3.328	0	3.434	2.071	0	0.24	0	-0.29	1.14	1.436	2.601	13.44	-0.27	0	2.419
38	0	0	-5.62	0.863	1.125	1.842	1.159	2.538	3.358	3.338	0	3.434	2.158	0	0.175	0	-0	0.983	1.433	2.575	13.43	-0.27	0	2.419
39	0	0	-5.62	0.863	0	1.842	1.159	2.294	2.774	2.94	0	3.434	2.146	0	0.26	0	-0.61	1.288	1.396	3.128	6.276	-0.27	0	2.026
40	0	1	-7.66	1.299	0	1.906	0.932	2.449	2.187	3.116	0	3.434	2.329	-0.79	0.636	0	-1.14	1.132	1.266	3.695	6.293	-0.24	9.23	1.009
41	0	0	-0.6	0	0	0	0	0.693	0	0	0	0	0	0	0.251	0	0.13	0.033	0.398	0.133	0.121	-0.63	0	0.7
42	0	0	-2.5	1	1.125	1	1.089	2.067	2.273	1.932	0	0	1.416	0	0.326	0	0.087	1.119	0.901	0.762	8.578	-0.43	0	1.672
43	0	0	-4.59	0.918	3	0.918	1.088	2.625	3.579	3.409	0	2.565	1.758	0	0.451	0	0.211	0.863	1.491	1.898	19.67	-0.31	0	2.604
44	0	0	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	1.642	0	1.897	0	1.946	1.391	0	0.06	0	-0.03	0.983	0.904	1.084	2.706	-0.43	0	1.219
45	0	0	-4.43	0.918	0	1.792	1.203	2.12	2.141	2.697	0	3.219	1.952	0	0.325	0	-0.31	1.168	1.406	2.905	5.259	-0.31	0	1.817
46	0	0	-4.59	0.918	0	0.918	1.088	2.12	2.399	2.512	0	2.565	1.952	0	0.54	0	-0.36	1.192	1.4	2.813	5.219	-0.31	0	1.817
47	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.6	0	1.374	0	0	0.94	0	0.429	0	0.087	0.8	0.921	0.759	5.287	-0.53	0	1.219
48	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	2.094	0	2.942	0	3.219	1.719	0	0.26	0	0.255	1.055	1.463	2.471	8.463	-0.36	0	1.817
49	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	2.25	0	3.279	0	3.219	1.591	0	0.142	0	0.209	1.003	1.509	2.208	12.69	-0.36	0	2.026
50	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	2.385	0	3.583	0	3.219	1.25	0	0	0	-0.02	0.943	1.555	1.976	16.94	-0.36	0	2.226
51	0	0	-3.49	0.971	1.837	1.922	1.106	2.385	2.914	2.921	0	1.946	1.601	0	0.562	0	0.203	1.139	1.507	1.889	16.22	-0.36	0	2.226
52	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	1.909	0	2.584	0	3.219	1.71	0	0.358	0	0.087	1.075	1.421	2.763	4.268	-0.36	0	1.597
53	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.153	0	0.773	0	0	1.805	0	0.509	0	0.286	1.47	2.077	1.603	0.935	-0.53	23.79	-0.32
54	0	0	-0.6	0	0	0	0	0.693	0	0	0	0	0	0	0.582	0	0.159	0.12	0.886	0.757	0.139	-0.63	0	0.7

Annexes

56	0	0	-2.5	1	2	1	1.089	2.728	3.812	2.661	0	0	1.376	0	0.696	0	0.254	1.323	1.388	1.746	43.88	-0.43	0	2.226
57	0	0	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	2.067	0	2.748	0	1.946	1.224	0	0.614	0	0.194	1.145	1.482	1.933	11.18	-0.43	0	1.817
58	0	0	-2.5	1	1.125	1	1.089	2.067	2.273	1.932	0	0	1.416	0	0.728	0	0.261	1.43	1.467	1.866	11.05	-0.43	0	1.817
59	0	0	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	1.642	0	1.897	0	1.946	1.391	0	0.694	0	0.281	1.316	1.406	2.4	2.883	-0.43	0	1.364
60	0	1	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.204	0	0.847	0	0	1.406	0	0.719	0	0.304	1.607	1.702	1.678	1.104	-0.53	17.07	-0.32
61	0	1	0	0	0	0	4.5	1.54	0	0	0	1.946	1.001	0	0.907	0	-0.14	1.216	1.72	2.331	1.622	-0.53	12.53	-0.56
62	0	2	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	1.54	0	1.694	0	1.946	1.597	0	0.719	0	0.418	0.609	1.587	1.552	1.491	0.538	37.3	-0.39
63	1	2	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.609	0.847	1.328	0	0	1.633	0	1.02	0	0.221	0.607	1.524	2.094	1.339	-0.43	26.3	-0.39
64	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	2.158	0	2.035	0	0	0.908	0	0.793	0	0.488	1.039	1.444	1.801	29.11	-0.53	0	1.597
65	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.6	0	1.374	0	0	0.94	0	0.816	0	0.427	1.24	1.429	1.888	5.643	-0.53	0	1.364
66	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.276	0	0.949	0	0	0.92	0	0.843	0	0.433	1.598	1.395	2.106	1.524	-0.53	0	1.115
67	0	0	-0.6	0	0	0	0	0.693	0	0	0	0	0	0	0.935	0	0.737	0.235	1.385	1.895	0.146	-0.63	0	1.757
68	0	1	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.204	0	0.847	0	0	0.621	0	0.91	0	0.521	0.785	1.218	1.805	0.656	0.638	20.23	-0.17
69	0	1	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.299	0	0.693	0	0	1.001	0	1.249	0	0.555	0.134	1.207	2.454	0.566	-0.53	9.23	-0.17
70	1	2	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.54	1.021	1.299	0	0	1.001	0	0.889	0	0.421	1.125	1.071	1.748	1.081	1.769	40.46	-1.05
71	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.541	0	1.3	0	0	1.374	0	0.843	0	0.464	0.33	1.239	1.585	2.533	0.638	0	0.845
72	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.847	0	0.693	0	0	1.932	0	1.249	0	0.992	0.196	1.168	2.236	2.962	-0.53	0	0.845
73	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.153	0	0.773	0	0	0.336	0	1.059	0	0.47	0.485	1.087	1.787	0.381	2.085	26.02	-0.17
74	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.204	0	0.693	0	0	0.588	0	1.249	0	0.533	0.171	1.109	1.989	0.337	0.638	12.03	-0.17
75	1	1	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.504	0.938	1.252	0	0	0.815	0	1.03	0	0.367	0.507	1.04	1.667	0.66	3.201	46.25	-1.05
76	1	0	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.466	0.859	1.204	0	0	0.588	0	1.137	0.003	0.334	0.418	0.947	1.65	0.474	4.785	52.04	-1.05
77	0	0	-11.3	1.096	0	1.686	1.127	2.751	3.702	3.565	0	4.29	2.571	0.51	0.465	0	-1.13	0.723	1.001	3.23	7.198	-0.26	0	2.957
78	0	0	-10.2	1.157	0	1.571	1.04	2.644	3.239	3.39	0	4.007	2.448	0.51	0.465	0	-0.89	0.914	1.003	3.102	6.413	-0.29	0	2.783
79	0	0	-8.8	1.224	0	2.419	1.011	2.525	3.064	3.139	0	3.611	2.309	-0.62	0.713	0	-0.63	1.052	1.006	2.881	5.66	-0.32	0	2.604
80	0	0	-9	1.224	0	1.224	0.96	2.525	2.351	3.277	0	3.892	2.309	0.116	0.465	0	-0.58	1.196	1.008	3.035	5.649	-0.32	0	2.604
81	0	0	-6.73	0.811	0	0.811	1.201	2.39	3.033	3.139	0	3.892	2.146	-1.39	0.831	0	-0.15	0.623	1.016	2.752	5.044	-0.36	0	2.419

Annexes

82	0	0	-7.66	1.299	0	1.906	0.932	2.39	2.187	2.992	0	3.434	2.146	-1.55	0.737	0	-0.36	1.381	1.005	2.804	4.758	-0.36	0
83	0	0	-7.19	1.299	0	2.5	1.068	2.39	3.033	2.895	0	3.434	2.146	-1.43	0.968	0	-0.32	0.934	1.009	2.615	4.759	-0.36	0
84	1	1	-10	1.436	0.5	2.197	0.798	2.532	2.441	3.105	2.774	3.434	2.329	-0.23	0.999	0.113	-0.49	1.234	0.972	2.928	4.881	-0.32	9.23
85	0	0	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.427	0.773	1.153	0	0	1.749	0	0.777	0	0.052	0.93	0.8	0.614	0.947	-0.65	23.79
86	0	1	0	0	1.25	0	0.92	1.953	0	1.946	0	0	0	0	1.127	0	-0.55	0.377	0.645	1.068	1.133	-0.54	26.03
87	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.099	0	0.693	0	0	0.908	0	0.954	0	0.347	0.2	2.019	1.373	0.257	-0.79	0
88	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.099	0	0.693	0	0	1.194	0	0.944	0	0.274	0.175	1.985	0.708	0.216	-0.79	0
89	0	0	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.427	0.773	1.153	0	0	1.805	0	1.011	0	0.389	1.385	1.306	1.567	1.03	-0.65	23.79
90	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.099	0	0.693	0	0	0.519	0	1.127	0	0.464	0.2	1.437	1.48	0.25	-0.79	0
91	0	0	0	0	0	0	4.5	1.386	0	0	0	1.946	0	0	1.372	0	0.224	0.119	1.243	1.735	0.321	-0.79	0
92	0	0	-3.49	0.971	1.531	1.922	1.106	2.186	2.539	2.385	0	1.946	1.416	0	1.132	0	0.26	0.847	1.086	1.827	9.614	-0.54	0
93	1	1	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.466	0.847	1.204	0	0	0.932	0	1.089	0	0.211	0.647	1.174	1.38	0.702	0.323	20.23
94	0	1	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	1.466	0	1.54	0	1.946	1.56	0	1.249	0	0.43	1.568	1.156	1.773	1.116	-0.65	17.07
95	1	1	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.466	0.847	1.204	0	0	1.406	0	1.085	0	0.257	1.067	1.142	1.707	0.995	-0.65	17.07
96	0	1	0	1	0.577	1.5	1.543	1.734	0	1.204	0	2.565	1.001	0	1.134	0	0.16	0.362	1.14	2.084	1.106	-0.65	12.53
97	1	2	-3.49	0.971	0.816	1.922	1.106	1.734	1.299	1.862	0	1.946	1.597	0	1.042	0.002	0.336	0.386	1.08	1.629	1.14	0.312	37.3
98	1	2	-3.49	0.971	0.816	1.922	1.106	1.791	1.204	1.862	0	1.946	1.758	0	1.366	0.001	0.541	0.127	1.105	1.853	1.061	-0.54	26.3
99	2	2	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.791	1.204	1.631	0	0	1.633	0	1.116	0.005	0.307	0.748	1.097	1.784	0.944	-0.54	26.3
100	2	3	-4.91	1.459	1.394	1.918	0.955	2.036	1.845	2.119	0	1.946	1.923	0	1.394	0.594	0.57	0.11	0.997	2.335	1.176	-0.46	35.53
101	0	0	-2.5	1	0.75	1	1.089	1.784	1.374	1.6	0	0	0.94	0	1.141	0	0.437	1.083	1.034	1.888	4.898	-0.65	0
102	0	1	-3.49	0.971	0.816	1.922	1.106	1.763	1.299	1.715	0	1.946	1.526	0	1.249	0	0.561	1.188	0.997	1.409	0.909	-0.54	20.31
103	0	0	-1.41	0.918	0	0.918	2.042	1.099	0	0.693	0	0	0	0	1.249	0	0.694	0.223	0.996	1.891	0.253	-0.79	0
104	1	1	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.466	0.847	1.204	0	0	0.621	0	1.21	0	0.583	0.776	0.911	1.794	0.58	0.323	20.23
105	0	1	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	1.466	0	1.54	0	1.946	0.621	0	1.249	0	0.775	0.712	0.889	1.794	0.736	0.323	20.23
106	1	1	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.54	0.693	1.204	0	0	1.001	0	1.372	0.008	0.663	0.211	0.951	2.017	0.39	-0.65	9.23
107	2	2	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.845	1.299	1.563	0	0	1.491	0	1.394	0	0.782	0.237	0.807	2.582	0.948	-0.54	18.46
108	2	2	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.734	1.299	1.54	0	0	1.001	0	1.173	0.013	0.529	0.868	0.853	1.705	0.846	1.41	40.46

Annexes

109	2	3	-4.91	1.459	1.394	1.918	0.955	1.945	1.976	1.992	0	1.946	1.275	0	1.173	0.087	0.37	0.625	0.777	1.654	1.21	2.492	60.69	-1.37
110	1	0	-2.5	1	0.75	1	1.089	1.993	0.693	1.541	0	0	1.932	0	1.338	0.001	0.851	0.265	0.906	1.983	1.637	-0.65	0	1.364
111	1	0	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.427	0.773	1.153	0	0	0.336	0	1.295	0	0.65	0.498	0.831	1.784	0.394	1.554	26.02	0.347
112	0	0	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	1.427	0	1.466	0	1.946	0.336	0	1.249	0	0.745	0.322	0.815	1.749	0.466	1.554	26.02	0.347
113	0	0	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	1.504	0	1.386	0	1.946	0.788	0	1.249	0	0.877	0.128	0.831	1.985	0.381	-0.65	3.24	0.347
114	2	1	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.734	1.268	1.504	0	0	0.978	0	1.38	0.062	0.62	0.497	0.807	1.787	0.607	1.41	32.26	-0.53
115	0	0	0	0.689	1	0.918	0.728	2.871	3.983	3.646	0	4.575	2.571	0.51	0.152	0	0.026	0.66	0.934	2.881	7.058	-0.32	0	2.899
116	0	1	0	0	1.25	0	0.92	1.897	0	1.897	0	0	0	0	1.343	0	-0.46	0.291	0.592	1.038	0.696	-0.72	13.14	0.156
117	0	0	0	0	1.75	0	0.92	2.234	0	2.234	0	0	0	0	1.163	0	0.245	0.318	0.571	0.932	2.356	-0.72	0	1.173
118	0	0	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.386	0.693	1.099	0	0	0.908	0	1.205	0.046	0.323	0.307	1.243	1.468	0.431	-0.86	0	1.672
119	0	0	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.386	0.693	1.099	0	0	1.381	0	1.278	0	0.489	0.237	1.238	1.37	0.357	-0.86	0	1.565
120	1	0	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.386	0.693	1.099	0	0	0	0	1.268	0.089	0.062	0.246	0.516	0.738	0.299	-0.86	0	1.565
122	2	2	-5.07	1.459	0.866	1.918	0.882	1.945	1.466	2.05	0	1.946	1.758	0	1.462	0.073	0.35	0.209	1.321	1.42	0.917	-0.61	26.3	0.479
123	2	3	-6.43	1.379	0.943	1.379	0.875	2.12	1.734	2.387	0	2.565	2.184	0	1.48	0.135	0.244	0.148	0.959	1.579	1.73	-0.54	43.37	0.455
124	1	0	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.642	1.153	1.427	0	0	1.805	0	1.287	0.012	0.499	1.399	0.935	1.654	0.848	-0.72	23.79	0.655
125	0	0	0	0	1	0	1.231	1.609	0	1.099	0	0	0	0	0.944	0	-0.04	0.205	0.914	1.878	0.362	-0.86	0	2.337
126	1	0	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.386	0.693	1.099	0	0	0.519	0	1.358	0.076	0.337	0.289	0.952	1.606	0.373	-0.86	0	1.672
127	0	0	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.386	0.693	1.099	0	0	0.859	0	1.374	0.012	0.674	0.233	1.008	1.604	0.26	-0.86	0	1.672
128	0	0	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.386	0.693	1.099	0	0	0.859	0	1.374	0	0.639	0.219	1	1.723	0.34	-0.86	0	1.672
129	0	0	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	1.386	0	1.386	0	1.946	0.859	0	1.249	0	0.825	0.163	0.989	1.391	0.343	-0.86	0	1.672
130	2	1	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.674	1.204	1.466	0	0	1.406	0	1.326	0.005	0.454	0.927	0.857	1.72	0.861	-0.72	17.07	0.655
131	1	1	-3.49	0.971	0.816	1.922	1.106	1.674	1.204	1.734	0	1.946	1.56	0	1.412	0.025	0.659	0.214	0.867	1.765	0.861	-0.72	17.07	0.655
132	0	1	0	0	1.25	0	0.92	1.897	0	1.897	0	0	1.001	0	1.464	0	-0.21	0.587	0.839	2.242	0.657	-0.72	9.23	0.408
133	2	2	-5.07	1.459	0.866	1.918	0.882	1.897	1.54	2.007	0	1.946	1.597	0	1.296	0.003	0.557	0.587	0.813	1.662	1.073	0.158	37.3	0.586
134	1	2	-4.59	0.918	1.333	0.918	1.088	1.897	1.845	2.133	0	2.565	1.597	0	1.249	0.001	0.575	0.549	0.784	1.652	1.186	0.158	37.3	0.586
135	0	2	0	0	1.5	0	0.684	2.12	1.54	2.133	0	0	1.491	0	1.212	0	0.331	0.258	0.777	2.47	0.9	-0.61	18.46	-0.07
136	0	2	0	0	1.5	0	0.684	2.12	1.563	2.12	0	0	1.491	0	1.372	0	0.494	0.897	0.757	2.548	0.969	-0.61	18.46	-0.47

Annexes

137	2	2	-4.91	1.459	1.394	1.918	0.955	1.945	1.791	2.007	0	1.946	1.758	0	1.419	0.015	0.57	0.146	0.859	1.866	0.771	-0.61	26.3	0.586
138	2	2	-5.07	1.459	0.866	1.918	0.882	1.945	1.466	2.05	0	1.946	1.758	0	1.504	0.022	1.001	0.274	0.874	1.692	0.839	-0.61	26.3	0.586
139	3	2	-5.54	1.585	0.957	1.585	0.737	1.945	1.54	1.809	0.847	0	1.633	0	1.259	0.001	0.315	0.754	0.831	1.816	0.967	-0.61	26.3	0.586
140	1	0	-3.49	0.971	1.021	1.922	1.106	1.939	1.6	2.186	0	1.946	0.94	0	1.42	0.021	0.632	0.323	0.822	1.822	4.333	-0.72	0	2.226
141	0	0	0	0	1.25	0	0.92	1.846	0	1.846	0	0	0.588	0	1.569	0	0.184	0.194	0.778	2.035	0.484	0.132	12.03	0.408
142	1	0	-2.5	1	0.5	1	1.089	1.386	0.693	1.099	0	0	0	0	1.438	0.012	0.919	0.296	0.776	1.86	0.28	-0.86	0	2.729
143	0	0	-2.25	0.811	0	0.811	1.592	1.386	0	1.386	0	1.946	0	0	1.249	0	0.747	0.156	0.756	1.835	0.35	-0.86	0	2.729
144	0	0	0	0	1.5	0	0.684	2.037	1.473	2.037	0	0	0.956	0	1.372	0	0.892	0.223	0.681	2.102	0.583	1.164	24.06	-0.47
145	2	1	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.674	1.204	1.466	0	0	0.621	0	1.404	0.005	0.701	0.798	0.735	1.761	0.573	0.132	20.23	0.8
146	1	1	-3.49	0.971	0.816	1.922	1.106	1.674	1.299	1.674	0	1.946	0.621	0	1.249	0.011	0.619	0.459	0.719	1.757	0.615	0.132	20.23	0.8
147	0	1	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	1.674	0	2.079	0	3.219	0.621	0	1.249	0	1.222	0.463	0.698	1.585	0.744	0.132	20.23	0.8
148	1	1	-3.49	0.971	0.816	1.922	1.106	1.674	1.204	1.734	0	1.946	0.621	0	1.43	0.02	1.137	0.19	0.733	1.712	0.628	0.132	20.23	0.8
149	2	1	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.734	1.099	1.54	0	0	1.001	0	1.562	0.005	1.136	0.251	0.782	1.796	0.335	-0.72	9.23	0.8
150	3	2	-5.54	1.585	0.957	1.585	0.737	1.992	1.563	1.734	0.693	0	1.491	0	1.423	0.144	0.605	0.287	0.71	2.136	0.546	-0.61	18.46	-0.08
151	2	2	-4.91	1.459	1.394	1.918	0.955	1.897	1.862	1.945	0	1.946	1.001	0	1.392	0.011	0.984	0.479	0.683	1.632	0.855	1.164	40.46	-0.08
152	2	2	-5.07	1.459	0.866	1.918	0.882	1.897	1.54	1.945	0	1.946	1.001	0	1.399	0.001	0.79	0.645	0.689	1.678	0.922	1.164	40.46	-0.08
153	4	3	-7.5	1.95	1.207	1.95	0.666	2.12	1.879	1.992	1.299	0	1.491	0	1.507	0.001	0.657	0.907	0.685	1.777	0.791	1.118	49.69	-0.92
154	2	0	-3.88	1.522	1.061	1.522	0.853	2.121	1.099	1.993	0	0	1.932	0	1.562	0.985	1.025	0.316	0.765	1.888	0.774	-0.72	0	1.817
155	2	0	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.642	1.153	1.427	0	0	0.336	0	1.458	0.037	0.735	0.429	0.693	1.746	0.403	1.23	26.02	0.8
156	2	0	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.674	1.099	1.466	0	0	0.588	0	1.562	0	1.093	0.294	0.723	1.776	0.323	0.132	12.03	0.8
157	1	0	-3.49	0.971	0.816	1.922	1.106	1.642	1.204	1.642	0	1.946	0.336	0	1.308	0	0.683	0.461	0.662	1.775	0.499	1.23	26.02	0.8
158	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	1.642	0	2.015	0	3.219	0.336	0	1.249	0	1.208	0.233	0.64	1.529	0.545	1.23	26.02	0.8
159	2	0	-23	1.322	0.707	2.352	1.069	3.177	4.32	4.007	3.702	4.796	2.951	0.51	0.989	0.194	-1.76	0.684	0.611	3.308	6.959	-0.29	0	4.203
160	1	2	0	1.203	2.052	2.236	0.655	2.197	1.809	2.335	0	1.946	1.224	-1.79	1.409	0.191	-0.78	0.598	0.491	0.939	1.112	-0.67	30.21	-0.15
161	0	0	0	0	1.5	0	0.684	1.992	1.427	1.992	0	0	0	0	1.082	0	-0.14	0.26	0.466	1.005	0.643	-0.77	12.89	0.468
162	1	0	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.609	1.099	1.386	0	0	0.908	0	1.388	0.039	0.406	0.424	0.888	1.559	0.45	-0.9	0	2.081
164	0	0	0	0	1.25	0	0.92	1.792	0	1.792	0	0	0.859	0	1.653	0	0.238	0.15	0.894	1.768	0.427	-0.9	0	1.689

Annexes

165	0	1	0	0.862	1.644	1.918	0.793	1.992	1.299	2.159	0	1.946	1.56	0	1.616	0	0.037	1.299	0.799	1.943	0.969	-0.77	17.07	0.672
166	2	0	-5.54	1.585	0.957	1.585	0.737	1.819	1.427	1.642	0.773	0	1.805	0	1.459	0.001	0.556	1.35	0.754	1.624	0.839	-0.77	23.79	1.064
167	0	1	0	0.917	2.29	1.95	0.741	2.178	1.945	2.418	0	2.565	1.664	-1.59	1.592	0.003	-0.07	0.833	0.728	1.798	0.872	-0.67	20.31	0.198
168	0	0	0	0	1.25	0	0.92	1.792	0	1.792	0	0	0	0	1.723	0	0.282	0.165	0.719	2.032	0.404	-0.9	0	2.746
169	2	0	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.609	1.099	1.386	0	0	0.519	0	1.502	0.11	0.546	0.365	0.744	1.658	0.391	-0.9	0	2.081
170	1	0	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.609	1.099	1.386	0	0	0.859	0	1.519	0.204	0.58	0.275	0.748	1.811	0.439	-0.9	0	2.081
171	1	0	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.609	1.099	1.386	0	0	0.859	0	1.519	0.081	0.742	0.279	0.765	1.728	0.368	-0.9	0	2.081
172	1	0	-3.49	0.971	0.816	1.922	1.106	1.609	1.099	1.609	0	1.946	0.859	0	1.454	0.048	0.76	0.244	0.733	1.646	0.456	-0.9	0	2.081
173	0	0	-3.49	0.971	0.816	1.922	1.106	1.609	1.099	1.609	0	1.946	1.112	0	1.406	0.009	0.897	0.205	0.799	1.603	0.361	-0.9	0	2.081
174	1	0	-3.49	0.971	0.816	1.922	1.106	1.609	1.099	1.609	0	1.946	0.519	0	1.384	0.109	0.283	0.261	0.719	1.553	0.447	-0.9	0	2.081
175	0	1	0	0.862	1.644	1.918	0.793	1.992	1.299	2.159	0	1.946	0.621	0	1.685	0	0.548	0.413	0.67	1.959	0.753	0.004	20.23	0.817
176	2	1	-5.07	1.459	0.866	1.918	0.882	1.846	1.466	1.897	0	1.946	1.56	0	1.511	0.189	0.535	0.341	0.712	1.753	0.812	-0.77	17.07	1.064
177	2	1	-4.91	1.459	1.394	1.918	0.955	1.846	1.734	1.897	0	1.946	1.56	0	1.562	0.152	0.601	0.172	0.717	1.753	0.616	-0.77	17.07	1.064
178	1	1	-4.59	0.918	1.333	0.918	1.088	1.846	1.734	2.037	0	2.565	1.56	0	1.437	0.041	0.942	0.407	0.673	1.761	0.966	-0.77	17.07	1.064
179	0	1	0	0.862	1.644	1.918	0.793	2.037	1.099	2.197	0	1.946	1.001	0	1.578	0.035	-0.13	0.17	0.684	2.119	0.587	-0.77	9.23	0.817
180	3	2	-6.96	1.557	1.135	2.236	0.758	2.037	1.734	2.133	1.299	1.946	1.597	0	1.463	0.023	0.629	0.689	0.667	1.679	1.004	0.046	37.3	0.996
181	2	2	-6.43	1.379	0.943	1.379	0.875	2.037	1.734	2.245	0	2.565	1.597	0	1.309	0.084	0.6	0.817	0.632	1.713	1.194	0.046	37.3	0.996
182	3	2	-6.7	1.557	1.478	2.807	0.826	2.079	1.945	2.133	0.693	1.946	1.758	0	1.449	0.005	0.862	0.226	0.681	1.885	0.767	-0.67	26.3	0.996
183	3	2	-6.7	1.557	1.478	2.807	0.826	2.079	1.945	2.171	0.693	1.946	1.758	0	1.618	0.01	0.942	0.175	0.701	1.797	0.685	-0.67	26.3	0.996
184	2	2	-6.16	1.379	1.782	2.522	0.966	2.079	2.159	2.245	0	2.565	1.758	0	1.425	0.106	0.863	0.176	0.654	1.892	0.851	-0.67	26.3	0.996
185	3	2	-6.96	1.557	1.135	2.236	0.758	2.079	1.734	2.171	1.204	1.946	1.758	0	1.533	0.013	0.956	0.331	0.693	1.79	0.825	-0.67	26.3	0.996
186	3	2	-6.96	1.557	1.135	2.236	0.758	2.079	1.791	2.093	1.299	1.946	1.633	0	1.261	0.006	0.339	0.876	0.661	1.822	1.016	-0.67	26.3	0.996
187	2	2	-6.43	1.379	0.943	1.379	0.875	2.079	1.674	2.313	0	2.565	1.758	0	1.517	0.59	1.02	0.283	0.658	1.794	0.935	-0.67	26.3	0.996
188	2	0	-5.54	1.585	1.134	1.585	0.737	2.073	1.784	1.939	1.374	0	0.94	0	1.502	0.444	0.589	0.728	0.688	1.825	3.841	-0.77	0	2.604
189	2	0	-3.88	1.522	0.707	1.522	0.853	1.609	1.099	1.386	0	0	0	0	1.562	0.188	0.828	0.345	0.653	1.823	0.311	-0.9	0	3.138
190	1	0	-3.49	0.971	0.816	1.922	1.106	1.609	1.099	1.609	0	1.946	0	0	1.478	0	0.804	0.229	0.596	1.973	0.441	-0.9	0	3.138
191	0	0	-3.1	0.722	0	0.722	1.553	1.609	0	1.946	0	3.219	0	0	1.249	0	0.993	0.157	0.598	1.545	0.444	-0.9	0	3.138

Annexes

192	3	1	-5.54	1.585	0.957	1.585	0.737	1.846	1.466	1.674	0.847	0	0.621	0	1.535	0.176	0.777	0.773	0.615	1.791	0.538	0.004	20.23	1.209
193	2	1	-5.07	1.459	0.866	1.918	0.882	1.846	1.466	1.897	0	1.946	0.621	0	1.546	0.153	0.864	0.33	0.619	1.762	0.678	0.004	20.23	1.209
194	2	1	-4.91	1.459	1.394	1.918	0.955	1.846	1.734	1.846	0	1.946	0.621	0	1.466	0.209	0.831	0.663	0.607	1.752	0.682	0.004	20.23	1.209
195	1	1	-4.43	0.918	1.061	1.792	1.203	1.846	1.466	2.197	0	3.219	0.621	0	1.473	0.025	1.47	0.154	0.593	1.678	0.708	0.004	20.23	1.209
196	2	1	-5.07	1.459	0.866	1.918	0.882	1.846	1.466	1.846	0	1.946	0.621	0	1.438	0.275	0.48	0.786	0.568	1.933	0.729	0.004	20.23	1.209
197	1	1	-4.59	0.918	1.333	0.918	1.088	1.846	1.734	2.037	0	2.565	0.621	0	1.465	0.025	1.221	0.222	0.599	1.743	0.697	0.004	20.23	1.209
198	3	1	-5.54	1.585	0.957	1.585	0.737	1.897	1.466	1.734	0.693	0	1.001	0	1.62	0.013	1.171	0.293	0.639	1.876	0.352	-0.77	9.23	1.209
199	1	1	-4.43	0.918	1.061	1.792	1.203	1.897	1.386	2.197	0	3.219	1.001	0	1.385	0.004	1.025	0.157	0.582	1.829	0.589	-0.77	9.23	1.209
200	2	1	-4.91	1.459	1.394	1.918	0.955	1.846	1.734	1.897	0	1.946	0.621	0	1.562	0.188	1.159	0.205	0.607	1.732	0.621	0.004	20.23	1.209
201	0	0	0	0.799	1.5	1	0.605	2.803	3.638	3.257	2.141	3.611	2.309	-0.26	0.668	0.388	-1.02	0.913	0.448	1.17	4.384	-0.48	0	4.331
202	3	0	-30.1	1.357	0.957	2.171	1.05	3.337	4.528	4.172	4.058	4.977	3.097	0.51	1.129	0.292	-1.39	0.641	0.54	3.196	6.942	-0.3	0	4.756
203	0	0	0	0.875	2.723	1.561	0.612	2.557	2.76	2.934	0	2.565	1.416	-1.24	1.017	0.584	-0.12	0.716	0.46	0.902	6.233	-0.71	0	3.478
204	0	0	0	0.875	3.481	2	0.633	2.557	3.199	2.934	0	2.565	1.416	-1.2	1.031	0.145	0.103	0.672	0.458	0.899	6.156	-0.71	0	3.478
205	0	0	0	0.802	2.183	2.236	0.643	2.298	2.293	2.557	0	1.946	0.94	-2	1.082	0.074	-0.02	0.545	0.443	0.923	3.424	-0.8	0	2.876
206	0	0	0	0.802	2.76	2.236	0.643	2.866	3.224	3.337	0	1.946	0.829	-2	1.082	0.001	-0.28	0.394	0.461	0.856	43.99	-0.8	0	3.21
207	1	2	0	1.187	2.593	2.197	0.558	2.423	2.456	2.623	1.299	2.565	1.686	-1	1.185	0.029	-0.15	0.873	0.367	0.971	1.359	-0.64	45.82	1.887
208	0	0	0	0	1.5	0	0.684	1.946	1.386	1.946	0	0	0	0	1.082	0	0.013	0.121	0.423	0.947	0.491	-0.92	0	2.255
209	0	1	0	0.802	1.894	2.236	0.643	2.12	1.897	2.268	0	1.946	0.621	-2	1.082	0.007	-0.11	0.366	0.393	0.889	0.753	-0.09	20.23	1.506
210	0	0	0	0.802	1.894	2.236	0.643	2.1	1.846	2.234	0	1.946	0.336	-2	1.182	0.057	0.148	0.222	0.906	1.367	1.049	0.85	26.02	1.506
211	0	0	0	0.802	1.894	2.236	0.643	2.12	1.819	2.251	0	1.946	0.519	-2	1.411	0.107	-0.04	0.153	1.161	1.504	0.587	-0.8	12.89	0.846
212	0	0	0	0.802	1.894	2.236	0.643	2.12	1.846	2.234	0	1.946	0.519	-2	1.382	0.096	0.096	0.205	1.149	1.474	0.663	-0.8	12.89	0.846
213	0	0	0	0.802	1.894	2.236	0.643	2.12	1.819	2.234	0	1.946	0.519	-2	1.342	0.178	0.165	0.344	1.181	1.471	0.637	-0.8	12.89	0.846
214	0	1	0	0.802	1.894	2.236	0.643	2.12	1.897	2.268	0	1.946	1.56	-1.81	1.289	0	0.103	0.996	0.796	1.804	0.976	-0.8	17.07	0.943
215	0	0	0	0	1.5	0	0.684	1.946	1.386	1.946	0	0	0.859	0	1.306	0	0.292	0.18	0.702	1.899	0.479	-0.92	0	2.067
216	0	1	0	0.802	1.894	2.236	0.643	2.12	1.897	2.268	0	1.946	1.56	-1.84	1.372	0	0.487	1.111	0.637	2.034	0.962	-0.8	17.07	1.05
217	1	1	-6.43	1.379	0.943	1.379	0.875	1.992	1.674	2.159	0	2.565	1.694	0	1.508	0.198	1.045	0.307	0.732	1.673	0.636	-0.8	17.07	1.335
218	0	0	0	0	1.5	0	0.684	1.946	1.386	1.946	0	0	0	0	1.372	0	0.825	0.189	0.586	2.105	0.447	-0.92	0	3.124

Annexes

219	0	0	0	0.862	1.644	1.918	0.793	1.946	1.099	2.079	0	1.946	0	0	1.723	0.141	0.07	0.229	0.594	1.97	0.422	-0.92	0	3.124
220	3	0	-5.54	1.585	0.957	1.585	0.737	1.792	1.386	1.609	0.693	0	0.519	0	1.6	0.171	0.53	0.428	0.63	1.642	0.416	-0.92	0	2.459
221	2	0	-5.07	1.459	0.866	1.918	0.882	1.792	1.386	1.792	0	1.946	0.519	0	1.544	0.166	0.673	0.342	0.6	1.683	0.476	-0.92	0	2.459
222	0	1	0	0.802	1.894	2.236	0.643	2.12	1.897	2.268	0	1.946	0.621	-2	1.372	0.011	0.876	0.56	0.562	2.003	0.685	-0.09	20.23	1.195
223	3	1	-6.96	1.557	1.135	2.236	0.758	1.992	1.674	2.037	1.204	1.946	1.56	0	1.586	0.193	0.604	0.381	0.592	1.789	0.777	-0.8	17.07	1.442
224	3	1	-6.7	1.557	1.478	2.807	0.826	1.992	1.897	2.037	0.693	1.946	1.56	0	1.637	0.295	0.601	0.228	0.595	1.798	0.629	-0.8	17.07	1.442
225	2	1	-6.43	1.379	0.943	1.379	0.875	1.992	1.674	2.159	0	2.565	1.56	0	1.542	0.523	0.65	0.34	0.577	1.823	0.869	-0.8	17.07	1.442
226	4	1	-7.5	1.95	1.207	1.95	0.666	2.037	1.674	1.897	1.099	0	1.001	0	1.56	0.004	0.977	0.392	0.627	1.64	0.426	-0.8	9.23	1.442
227	4	2	-9.16	1.906	1.385	2.25	0.68	2.159	1.897	2.245	1.54	1.946	1.597	-1.72	1.576	0.216	0.562	0.76	0.561	1.718	0.945	-0.04	37.3	1.373
228	4	2	-8.7	1.906	1.563	1.906	0.756	2.197	2.079	2.279	1.099	1.946	1.758	-1.41	1.642	0.005	1.39	0.202	0.597	1.815	0.694	-0.71	26.3	1.373
229	4	2	-8.82	1.906	1.747	2.5	0.734	2.197	2.12	2.279	1.466	1.946	1.758	-1.37	1.682	0.007	0.654	0.225	0.586	1.845	0.651	-0.71	26.3	1.373
230	3	2	-8.12	1.5	1.882	2.25	0.849	2.197	2.268	2.377	1.099	2.565	1.758	-1.15	1.635	0.554	0.961	0.179	0.562	1.858	0.801	-0.71	26.3	1.373
231	4	2	-9.16	1.906	1.385	2.25	0.68	2.197	1.897	2.279	1.466	1.946	1.758	-1.58	1.552	0.014	1.321	0.422	0.594	1.793	0.754	-0.71	26.3	1.373
232	3	2	-8.58	1.5	1.321	1.5	0.755	2.197	1.945	2.377	1.734	2.565	1.758	-1.42	1.54	0.043	1.034	0.422	0.568	1.854	0.851	-0.71	26.3	1.373
233	5	2	-9.74	2	1.457	2	0.617	2.197	1.897	2.093	1.54	0	1.633	-1.7	1.541	0.18	0.405	0.835	0.567	1.829	0.865	-0.71	26.3	1.373
234	5	3	-11.7	1.975	1.635	2.503	0.626	2.367	2.093	2.437	1.862	1.946	2.018	-0.79	1.584	0.035	1.166	0.385	0.577	1.838	0.83	-0.64	35.53	0.538
235	3	0	-5.54	1.585	0.957	1.585	0.737	1.792	1.386	1.609	0.693	0	0	0	1.646	0.11	1.135	0.375	0.551	1.858	0.326	-0.92	0	3.516
236	2	0	-5.07	1.459	0.866	1.918	0.882	1.792	1.386	1.792	0	1.946	0	0	1.609	0.253	0.812	0.325	0.551	1.862	0.405	-0.92	0	3.516
237	2	0	-4.91	1.459	1.394	1.918	0.955	1.792	1.609	1.792	0	1.946	0	0	1.562	0.231	0.846	0.273	0.549	1.852	0.425	-0.92	0	3.516
238	1	0	-4.43	0.918	1.061	1.792	1.203	1.792	1.386	2.079	0	3.219	0	0	1.498	0.019	1.141	0.2	0.514	1.766	0.477	-0.92	0	3.516
239	1	0	-4.59	0.918	1.333	0.918	1.088	1.792	1.609	1.946	0	2.565	0	0	1.534	0.03	0.974	0.253	0.518	1.888	0.48	-0.92	0	3.516
240	4	1	-7.5	1.95	1.207	1.95	0.666	1.992	1.674	1.846	1.204	0	0.621	0	1.625	0.294	0.676	0.758	0.529	1.809	0.533	-0.09	20.23	1.587
241	3	1	-6.96	1.557	1.135	2.236	0.758	1.992	1.674	2.037	1.204	1.946	0.621	0	1.627	0.862	1.247	0.621	0.537	1.826	0.594	-0.09	20.23	1.587
242	3	1	-6.7	1.557	1.478	2.807	0.826	1.992	1.897	2.037	0.693	1.946	0.621	0	1.643	1.032	0.881	0.248	0.542	1.799	0.653	-0.09	20.23	1.587
243	3	1	-6.7	1.557	1.478	2.807	0.826	1.992	1.897	1.992	0.847	1.946	0.621	0	1.597	0.199	0.793	0.592	0.53	1.805	0.665	-0.09	20.23	1.587
244	2	1	-6.43	1.379	0.943	1.379	0.875	1.992	1.674	2.159	0	2.565	0.621	0	1.587	0.444	0.949	0.265	0.505	1.87	0.648	-0.09	20.23	1.587

Annexes

245	2	1	-6.43	1.379	0.943	1.379	0.875	2.037	1.609	2.233	0	2.565	1.001	0	1.666	0.034	1.47	0.292	0.52	1.902	0.532	-0.8	9.23	1.587
246	4	1	-7.5	1.95	1.207	1.95	0.666	2.037	1.734	1.897	1.099	0	1.001	0	1.707	0.026	0.925	0.316	0.545	1.918	0.361	-0.8	9.23	1.587
247	4	2	-8.7	1.906	1.563	1.906	0.756	2.233	2.037	2.313	1.099	1.946	1.491	-1.1	1.631	0.859	1.305	0.24	0.537	1.961	0.562	-0.71	18.46	1.112
248	3	0	-6.43	1.449	1.732	1.449	0.899	2.015	1.946	2.015	0	1.946	0.788	0	1.562	0.237	0.835	0.206	0.507	1.791	0.501	-0.8	3.24	1.587
249	4	0	-7.5	1.95	1.207	1.95	0.666	1.992	1.674	1.846	1.099	0	0.588	0	1.707	0.131	1.155	0.356	0.517	1.861	0.349	-0.09	12.03	1.587
250	4	0	-38.1	1.48	1.207	2.806	1.034	3.475	4.699	4.313	4.32	5.13	3.225	2.602	1.228	0.854	-1.31	0.627	0.469	3.197	6.917	-0.3	0	5.275
251	1	2	0	1.185	3.393	2.722	0.57	2.611	3.005	2.962	1.299	2.944	1.761	-0.74	1.169	0.271	-0.08	0.444	0.358	0.861	3.439	-0.07	37.3	2.302
252	0	0	0	1.125	2.302	2.156	0.573	2.216	2.12	2.319	0.773	1.946	1.749	-1.22	1.152	0.198	0.015	0.735	0.413	0.811	1.01	-0.83	23.79	1.769
253	1	1	0	1.125	2.302	2.156	0.573	2.233	2.159	2.335	0.847	1.946	1.224	-1.51	1.224	0.094	-0.07	0.643	0.367	0.907	0.931	-0.83	17.07	1.769
254	0	0	0	0.875	2.593	0.811	0.597	2.393	2.477	2.702	1.374	2.565	1.176	-1.34	1.37	0.178	0.309	0.564	1.135	1.453	2.673	-0.83	0	3.21
255	0	0	0	0.802	1.894	2.236	0.643	2.079	1.792	2.197	0	1.946	0.519	-2	1.411	0.308	0.293	0.181	1.137	1.462	0.504	-0.94	0	2.608
256	1	1	0	1.125	2.302	2.156	0.573	2.268	2.159	2.367	0.693	1.946	1.001	-1.31	1.418	0.072	-0.02	0.213	1.057	1.68	0.638	-0.83	9.23	1.859
257	1	1	0	1.125	2.302	2.156	0.573	2.233	2.159	2.335	0.847	1.946	0.932	-1.35	1.357	0.212	0.198	0.457	0.954	1.333	0.821	-0.16	20.23	1.591
258	0	1	0	0.875	2.54	2	0.633	2.233	2.302	2.457	0	2.565	0.932	-1.28	1.411	0.231	0.05	0.275	1.049	1.415	0.751	-0.16	20.23	1.859
259	0	1	0	0.875	2.199	1.561	0.612	2.233	2.159	2.457	0	2.565	0.932	-1.34	1.402	0.239	0.312	0.33	1.119	1.436	0.77	-0.16	20.23	1.859
260	0	1	0	0.875	2.305	0.811	0.597	2.233	2.159	2.457	0.847	2.565	0.932	-1.38	1.393	0.136	0.163	0.389	1.085	1.437	0.704	-0.16	20.23	1.859
261	0	0	0	0.875	2.199	1.561	0.612	2.234	2.1	2.457	0	2.565	0.859	-1.36	1.493	1.501	0.185	0.151	0.842	1.624	0.528	-0.83	12.89	1.199
262	5	2	-11.3	1.975	1.997	2.948	0.667	2.302	2.233	2.377	1.674	1.946	1.633	-1.33	1.619	0	0.757	0.363	0.572	1.616	0.713	-0.74	26.3	1.619
263	0	0	0	0	1.75	0	0.604	2.079	2.079	2.079	0	0	0	-1.8	1.839	0	0.46	0.22	0.489	2.174	0.493	-0.94	0	3.477
264	0	0	0	0.802	1.894	2.236	0.643	2.079	1.792	2.197	0	1.946	0	-2	1.525	0.279	1.082	0.238	0.506	2.033	0.458	-0.94	0	3.477
265	1	0	0	1.203	2.052	2.236	0.655	2.079	1.609	2.197	0	1.946	0	-1.85	1.723	0.537	0.555	0.29	0.516	1.953	0.446	-0.94	0	3.477
266	0	0	0	0.917	1.957	1.557	0.706	2.079	1.609	2.303	0	2.565	0	-1.78	1.783	0.816	0.37	0.246	0.511	1.967	0.444	-0.94	0	3.477
267	0	0	0	0.917	1.957	1.557	0.706	2.079	1.609	2.303	0	2.565	0	-1.78	1.783	0.816	0.37	0.246	0.511	1.966	0.444	-0.94	0	3.477
268	4	0	-7.5	1.95	1.207	1.95	0.666	1.946	1.609	1.792	1.099	0	0.519	0	1.671	0.348	0.44	0.463	0.538	1.691	0.421	-0.94	0	2.812
269	5	2	-11.3	1.975	1.997	2.948	0.667	2.302	2.233	2.377	1.674	1.946	1.758	-1.04	1.696	0.044	1.105	0.29	0.507	1.834	0.639	-0.74	26.3	1.727
270	5	2	-11.7	1.975	1.635	2.503	0.626	2.268	2.037	2.346	1.734	1.946	1.597	-1.23	1.655	0.304	0.615	0.812	0.489	1.755	0.903	-0.11	37.3	1.727
271	4	2	-10.4	1.837	1.655	2.948	0.757	2.302	2.197	2.466	1.386	2.565	1.758	-1	1.648	1.571	1.287	0.203	0.459	2.037	0.81	-0.74	26.3	1.727

Annexes

272	5	2	-11	1.975	1.832	3.17	0.693	2.302	2.233	2.377	1.674	1.946	1.758	-1.29	1.738	0.001	1.28	0.221	0.507	1.845	0.651	-0.74	26.3	1.727
273	4	2	-10.4	1.837	2.151	2.948	0.758	2.302	2.397	2.466	1.674	2.565	1.758	-1	1.733	0.375	0.785	0.224	0.494	1.89	0.76	-0.74	26.3	1.727
274	4	2	-11	1.837	1.563	1.837	0.678	2.302	2.037	2.466	1.674	2.565	1.758	-1	1.563	2.454	0.892	0.415	0.486	1.958	0.914	-0.74	26.3	1.727
275	4	0	-7.5	1.95	1.207	1.95	0.666	1.946	1.609	1.792	1.099	0	0	0	1.707	0.429	0.851	0.403	0.486	1.864	0.339	-0.94	0	3.869
276	3	0	-6.96	1.557	1.135	2.236	0.758	1.946	1.609	1.946	1.099	1.946	0	0	1.691	1.887	0.673	0.376	0.472	1.958	0.484	-0.94	0	3.869
277	3	0	-6.7	1.557	1.478	2.807	0.826	1.946	1.792	1.946	0.693	1.946	0	0	1.655	0.663	0.981	0.291	0.458	2.008	0.495	-0.94	0	3.869
278	3	0	-6.43	1.449	1.732	1.449	0.899	1.946	1.946	1.946	0	1.946	0	0	1.562	0.695	0.617	0.238	0.456	1.969	0.496	-0.94	0	3.869
279	2	0	-6.16	1.379	1	2.128	0.97	1.946	1.609	2.197	0	3.219	0	0	1.634	0.193	0.71	0.282	0.467	1.835	0.494	-0.94	0	3.869
280	2	0	-6.16	1.379	1.782	2.522	0.966	1.946	1.946	2.079	0	2.565	0	0	1.613	0.351	0.704	0.26	0.465	1.896	0.518	-0.94	0	3.869
281	2	0	-6.43	1.379	0.943	1.379	0.875	1.946	1.609	2.079	0	2.565	0	0	1.666	0.637	0.806	0.328	0.451	1.967	0.501	-0.94	0	3.869
282	2	0	-5.89	1.379	1.914	1.95	1.074	1.946	1.946	2.197	0	3.219	0	0	1.562	0.028	1.123	0.231	0.45	1.869	0.518	-0.94	0	3.869
283	1	0	-5.62	0.863	1.732	1.842	1.159	1.946	1.946	2.303	0	3.434	0	0	1.564	0.032	1.249	0.254	0.445	1.813	0.5	-0.94	0	3.869
284	5	1	-9.74	2	1.457	2	0.617	2.12	1.846	1.992	1.466	0	0.621	-1.83	1.691	0.402	0.617	0.738	0.465	1.837	0.514	-0.16	20.23	1.94
285	4	1	-9.16	1.906	1.385	2.25	0.68	2.12	1.846	2.159	1.466	1.946	0.621	-1.82	1.688	0.64	0.889	0.43	0.476	1.816	0.649	-0.16	20.23	1.94
286	5	0	-47	1.506	1.457	2.873	1.02	3.597	4.846	4.437	4.528	5.263	3.339	2.792	1.301	2.811	-1.91	0.621	0.426	3.155	6.923	-0.3	0	5.768
287	1	0	0	1.125	2.302	2.156	0.573	2.197	2.079	2.303	0.693	1.946	0	-1.66	1.51	0.411	-0.31	0.241	0.321	0.875	0.547	-0.95	0	2.851
288	1	1	0	1.187	2.593	2.197	0.558	2.335	2.367	2.539	1.204	2.565	1.406	-1	1.519	0.323	0.011	0.376	1.03	1.533	0.84	-0.85	17.07	2.102
289	1	2	0	1.185	3.003	2.446	0.525	2.457	2.59	2.737	1.54	2.944	1.597	-0.99	1.426	0.355	0.42	0.499	1.045	1.47	0.985	-0.16	37.3	2.034
290	1	0	0	1.125	2.302	2.156	0.573	2.197	2.079	2.303	0.693	1.946	0.519	-1.42	1.596	0.682	0.629	0.263	0.632	1.695	0.667	-0.95	0	2.942
291	0	0	0	0.875	2.54	2	0.633	2.197	2.197	2.398	0	2.565	0.859	-1.29	1.412	0.421	0.49	0.228	0.748	1.573	0.52	-0.95	0	2.942
292	0	0	0	0.875	2.199	1.561	0.612	2.197	2.079	2.398	0	2.565	0.859	-1.36	1.493	1.059	0.657	0.172	0.826	1.595	0.502	-0.95	0	2.942
293	0	0	0	0.875	2.305	0.811	0.597	2.197	2.079	2.398	0.693	2.565	0.859	-1.4	1.515	0.31	0.435	0.17	0.776	1.585	0.472	-0.95	0	2.942
294	1	1	0	1.187	2.813	3.17	0.582	2.335	2.485	2.539	0.693	2.565	0.932	-1.22	1.595	0.821	0.42	0.206	0.615	1.635	0.851	-0.21	20.23	2.193
295	1	1	0	1.187	2.622	2.948	0.558	2.335	2.367	2.539	1.204	2.565	0.932	-1.17	1.588	0.913	0.706	0.364	0.611	1.663	0.937	-0.21	20.23	2.193
296	1	1	0	1.187	2.713	2.725	0.54	2.335	2.367	2.539	1.204	2.565	0.932	-1	1.585	0.611	0.578	0.476	0.606	1.666	0.87	-0.21	20.23	2.193
297	0	1	0	0.881	3.114	2.503	0.622	2.335	2.565	2.615	0	2.944	1.169	-1.27	1.411	0.355	0.236	0.296	0.726	1.508	0.69	-0.21	20.23	2.193
298	0	1	0	0.881	2.86	2.725	0.597	2.335	2.485	2.615	0.847	2.944	1.169	-1.21	1.488	0.236	0.33	0.311	0.782	1.559	0.645	-0.21	20.23	2.193

Annexes

299	0	1	0	0.881	2.86	2.725	0.597	2.335	2.485	2.615	0.693	2.944	1.169	-1.2	1.513	0.203	0.422	0.201	0.746	1.55	0.716	-0.21	20.23	2.193
300	0	1	0	0.881	3.114	2.503	0.622	2.335	2.59	2.615	0	2.944	1.169	-1.26	1.493	0.432	-0.05	0.138	0.77	1.541	0.636	-0.21	20.23	2.193
301	0	1	0	0.881	2.414	1.585	0.595	2.335	2.367	2.615	0	2.944	1.169	-1.34	1.493	0.395	0.763	0.444	0.807	1.566	0.754	-0.21	20.23	2.193
302	0	0	0	0	2	0	0.522	2.197	2.197	2.197	0	0	0	-1.41	1.6	0.363	-0.55	0.248	0.419	2.239	0.545	-0.95	0	3.811
303	0	0	0	0.875	2.305	0.811	0.597	2.197	2.079	2.398	0.693	2.565	0	-1.56	1.607	0.085	1.437	0.255	0.439	2.009	0.456	-0.95	0	3.811
304	5	0	-9.74	2	1.457	2	0.617	2.079	1.792	1.946	1.386	0	0.519	-1.8	1.723	0.456	0.553	0.495	0.476	1.711	0.431	-0.95	0	3.146
305	6	2	-14.5	2.246	1.885	2.522	0.586	2.367	2.159	2.437	1.897	1.946	1.597	-0.76	1.713	0.408	0.456	0.837	0.431	1.786	0.849	-0.16	37.3	2.972
306	5	2	-12.3	1.846	2.396	2.646	0.772	2.367	2.512	2.521	1.897	2.565	1.597	-0.98	1.71	1.891	1.153	0.286	0.462	1.747	1.136	-0.16	37.3	2.06
308	6	2	-13.7	2.246	2.082	3.122	0.643	2.398	2.335	2.466	1.846	1.946	1.758	-0.67	1.773	0.001	1.723	0.261	0.453	1.811	0.633	-0.77	26.3	2.06
309	4	2	-12.4	1.761	2.337	2.722	0.74	2.398	2.512	2.623	2.037	2.944	1.758	-1	1.771	0.667	1.157	0.281	0.431	1.869	0.767	-0.77	26.3	2.06
310	5	0	-9.74	2	1.457	2	0.617	2.079	1.792	1.946	1.386	0	0	-1.85	1.753	0.534	0.623	0.42	0.428	1.883	0.347	-0.95	0	4.203
311	4	0	-9.16	1.906	1.385	2.25	0.68	2.079	1.792	2.079	1.386	1.946	0	-1.83	1.748	1.587	0.686	0.409	0.423	1.96	0.482	-0.95	0	4.203
312	4	0	-8.82	1.906	1.747	2.5	0.734	2.079	1.946	2.079	1.386	1.946	0	-1.81	1.725	1.778	1.163	0.366	0.433	1.877	0.437	-0.95	0	4.203
313	4	0	-8.7	1.906	1.563	1.906	0.756	2.079	1.946	2.079	1.099	1.946	0	-1.8	1.707	1.251	0.833	0.349	0.437	1.861	0.438	-0.95	0	4.203
314	4	0	-8.35	1.561	1.852	2.5	0.814	2.079	2.079	2.079	1.099	1.946	0	-1.76	1.669	0.958	0.987	0.292	0.414	1.988	0.509	-0.95	0	4.203
315	3	0	-8.24	1.5	1.28	1.75	0.825	2.079	1.792	2.303	1.386	3.219	0	-1.8	1.717	2.363	1.078	0.346	0.423	1.889	0.504	-0.95	0	4.203
316	3	0	-8.12	1.5	1.882	2.25	0.849	2.079	2.079	2.197	1.099	2.565	0	-1.78	1.692	0.083	0.946	0.294	0.424	1.933	0.531	-0.95	0	4.203
317	3	0	-8.24	1.5	1.571	2.5	0.82	2.079	1.946	2.197	1.099	2.565	0	-1.79	1.71	1.211	0.979	0.331	0.408	1.98	0.524	-0.95	0	4.203
318	3	0	-8.58	1.5	1.321	1.5	0.755	2.079	1.792	2.197	1.609	2.565	0	-1.81	1.74	3.505	0.86	0.435	0.418	1.966	0.514	-0.95	0	4.203
319	3	0	-7.77	1.5	1.884	2.406	0.931	2.079	2.079	2.303	0.693	3.219	0	-1.75	1.663	1.085	0.892	0.254	0.413	1.923	0.542	-0.95	0	4.203
320	3	0	-7.89	1.5	2.259	2	0.897	2.079	2.197	2.197	0.693	2.565	0	-1.75	1.668	0.369	0.571	0.273	0.42	1.929	0.561	-0.95	0	4.203
321	3	0	-7.77	1.406	1.992	2.25	0.923	2.079	2.197	2.197	0	2.565	0	-1.69	1.627	1.486	0.677	0.279	0.427	1.889	0.552	-0.95	0	4.203
322	3	0	-7.42	1.406	2.561	1.811	1.019	2.079	2.303	2.303	0	3.219	0	-1.62	1.562	1.335	0.811	0.204	0.398	1.886	0.536	-0.95	0	4.203
323	2	0	-7.31	1.299	2.091	1.75	1.031	2.079	2.197	2.398	0	3.434	0	-1.71	1.645	0.604	1.114	0.264	0.404	1.842	0.519	-0.95	0	4.203
324	2	0	-7.66	1.299	1.021	1.906	0.932	2.079	1.792	2.398	0	3.434	0	-1.76	1.699	0.978	1.473	0.342	0.405	1.888	0.519	-0.95	0	4.203
325	2	0	-7.19	1.299	2.474	2.5	1.068	2.079	2.303	2.398	0	3.434	0	-1.68	1.617	0.19	1.177	0.233	0.399	1.867	0.538	-0.95	0	4.203
326	2	0	-7.54	1.299	2.103	1.75	0.964	2.079	2.197	2.303	0	2.944	0	-1.73	1.666	0.944	1.173	0.3	0.409	1.876	0.518	-0.95	0	4.203

Annexes

327	1	0	-6.73	0.811	2.25	0.811	1.201	2.079	2.303	2.565	0	3.892	0	-1.65	1.602	0.023	1.377	0.261	0.386	1.807	0.521	-0.95	0	4.203
328	6	1	-12.3	2.281	1.707	2.281	0.58	2.233	1.992	2.12	1.674	0	0.621	-1.48	1.739	0.504	0.493	0.724	0.413	1.848	0.51	-0.21	20.23	3.186
329	5	1	-11.7	1.975	1.635	2.503	0.626	2.233	1.992	2.268	1.674	1.946	0.621	-1.43	1.734	0.822	0.812	0.483	0.421	1.828	0.62	-0.21	20.23	2.274
330	5	1	-10.6	1.891	2.121	2.725	0.738	2.233	2.268	2.233	1.674	1.946	0.621	-1.54	1.72	1.308	1.13	0.574	0.406	1.965	0.68	-0.21	20.23	2.274
331	6	1	-12.3	2.281	1.707	2.281	0.58	2.268	2.037	2.159	1.609	0	1.001	-1.5	1.787	0.006	1.966	0.366	0.429	1.855	0.371	-0.85	9.23	2.274
332	6	0	-12.3	2.281	1.707	2.281	0.58	2.216	1.969	2.1	1.642	0	0.336	-1.5	1.753	0.485	0.574	0.523	0.399	1.839	0.42	0.63	26.02	3.186
333	6	0	-12.3	2.281	1.707	2.281	0.58	2.234	1.992	2.12	1.609	0	0.588	-1.51	1.787	0.059	1.362	0.399	0.41	1.857	0.364	-0.21	12.03	2.274
334	6	0	-56.8	1.601	1.707	3.013	1.006	3.705	4.974	4.547	4.699	5.38	3.44	3.009	1.355	3.21	-0.58	0.635	0.381	3.226	6.8	-0.31	0	6.238
335	0	0	5.499	0	3.466	1.522	0.457	2.512	2.603	2.741	1.099	2.565	0	-0.62	1.553	0.122	-0.33	0.224	0.303	1.003	0.73	-0.86	12.89	2.066
336	0	0	4.45	0	3.216	1.975	0.507	2.398	2.303	2.639	0	2.565	0.859	-1	1.704	0.164	-0.44	0.252	0.716	1.612	0.588	-0.95	0	3.259
337	2	0	0	1.409	2.422	2.419	0.507	2.303	2.197	2.398	1.386	1.946	0.519	-1	1.703	1.115	0.336	0.329	0.528	1.737	0.667	-0.95	0	3.259
338	1	0	0	1.187	2.593	2.197	0.558	2.303	2.303	2.485	1.099	2.565	0.519	-1	1.671	0.973	0.01	0.318	0.544	1.612	0.702	-0.95	0	3.259
339	1	0	0	1.187	2.713	2.725	0.54	2.303	2.303	2.485	1.099	2.565	0.859	-1	1.636	0.738	0.874	0.209	0.555	1.741	0.603	-0.95	0	3.259
340	0	0	0	0.881	3.114	2.503	0.622	2.303	2.485	2.565	0	2.944	1.112	-1.27	1.493	0.671	0.436	0.159	0.609	1.62	0.518	-0.95	0	3.259
341	0	0	0	0.881	2.86	2.725	0.597	2.303	2.398	2.565	0.693	2.944	1.112	-1.22	1.531	0.314	0.829	0.186	0.627	1.685	0.487	-0.95	0	3.259
342	0	0	0	0.881	2.414	1.585	0.595	2.303	2.303	2.565	0	2.944	1.112	-1.36	1.493	2.372	1.201	0.159	0.699	1.725	0.486	-0.95	0	3.259
344	6	0	-12.3	2.281	1.707	2.281	0.58	2.197	1.946	2.079	1.609	0	0.519	-1.42	1.763	0.388	0.272	0.501	0.416	1.721	0.389	-0.95	0	4.375
345	7	2	-17.6	2.3	2.135	2.732	0.555	2.457	2.268	2.521	2.037	1.946	1.597	-0.38	1.756	0.505	0.344	0.851	0.388	1.803	0.828	-0.21	37.3	3.289
346	6	2	-16.1	2.187	2.26	3.096	0.635	2.485	2.427	2.623	1.992	2.565	1.758	-0.63	1.782	0.534	0.598	0.285	0.39	1.978	0.731	-0.79	26.3	2.377
347	6	0	-12.3	2.281	1.707	2.281	0.58	2.197	1.946	2.079	1.609	0	0	-1.53	1.787	0.633	0.622	0.435	0.387	1.887	0.356	-0.95	0	4.52
348	5	0	-11.7	1.975	1.635	2.503	0.626	2.197	1.946	2.197	1.609	1.946	0	-1.45	1.788	1.193	0.855	0.44	0.395	1.921	0.429	-0.95	0	4.52
349	4	0	-10.6	1.837	1.53	2.419	0.73	2.197	1.946	2.398	1.609	3.219	0	-1.28	1.773	2.058	0.851	0.392	0.389	1.912	0.505	-0.95	0	4.52
350	3	0	-10	1.436	1.472	2.197	0.798	2.197	1.946	2.485	1.946	3.434	0	-1	1.77	5.102	1.142	0.436	0.369	1.958	0.544	-0.95	0	4.52
351	2	0	-8.39	1.224	2.914	2.419	1.114	2.197	2.565	2.639	0	3.892	0	-1.42	1.654	0.453	1.127	0.243	0.353	1.8	0.535	-0.95	0	4.52
352	2	0	-8.8	1.224	2.366	2.419	1.011	2.197	2.398	2.565	0	3.611	0	-1.35	1.7	0.796	0.935	0.294	0.355	1.873	0.539	-0.95	0	4.52
353	2	0	-9	1.224	1.061	1.224	0.96	2.197	1.946	2.639	0	3.892	0	-1	1.738	1.442	1.469	0.358	0.354	1.91	0.543	-0.95	0	4.52
354	2	0	-8.59	1.224	2.976	1.837	1.064	2.197	2.565	2.565	0	3.611	0	-1.45	1.666	0.24	1.473	0.228	0.355	1.904	0.56	-0.95	0	4.52

Annexes

355	7	1	-15.1	2.322	1.957	2.322	0.552	2.335	2.12	2.233	1.846	0	0.621	-1.1	1.777	0.604	0.35	0.709	0.373	1.867	0.497	-0.26	20.23	3.503
356	6	1	-14.5	2.246	1.885	2.522	0.586	2.335	2.12	2.367	1.846	1.946	0.621	-1	1.771	0.669	0.792	0.47	0.385	1.832	0.606	-0.26	20.23	3.503
357	7	0	-67.5	1.622	1.957	3.031	0.994	3.802	5.087	4.646	4.846	5.485	3.533	3.222	1.397	2.958	-1.63	0.61	0.347	3.177	6.874	-0.31	0	6.689
358	4	4	0	1.59	4.714	2.128	0.435	2.833	3.149	3.085	2.427	3.219	2.224	1	1.465	0.981	0.397	0.319	0.661	1.737	1.058	-0.7	52.6	2.005
359	0	0	5.499	0	3.466	1.522	0.457	2.485	2.565	2.708	1.099	2.565	0	-0.62	1.581	0.174	-0.13	0.244	0.282	0.967	0.636	-0.96	0	3.386
360	0	0	5.499	0	3.466	1.522	0.457	2.485	2.565	2.708	1.099	2.565	0.859	-0.52	1.665	0.472	0.012	0.291	0.58	1.728	0.614	-0.96	0	3.562
361	0	0	5.698	0.664	3.692	3.122	0.486	2.485	2.565	2.773	0.693	2.944	0.859	-0.74	1.763	0.703	-0.04	0.278	0.529	1.772	0.698	-0.96	0	3.562
362	0	0	5.758	0.664	3.552	3.122	0.468	2.485	2.485	2.773	1.099	2.944	1.112	-0.79	1.704	0.949	-0.18	0.212	0.61	1.718	0.549	-0.96	0	3.562
363	3	0	0	1.661	2.691	2.722	0.451	2.398	2.303	2.485	1.792	1.946	0.519	-1	1.77	2.254	0.156	0.38	0.463	1.826	0.721	-0.96	0	3.562
364	2	0	0	1.461	2.529	2.722	0.486	2.398	2.303	2.565	1.792	2.565	0.519	-1	1.767	1.406	0.321	0.378	0.461	1.737	0.694	-0.96	0	3.562
365	2	0	0	1.261	3.121	1.371	0.498	2.398	2.485	2.565	1.386	2.565	0.859	-1	1.688	0.809	0.207	0.228	0.5	1.763	0.568	-0.96	0	3.562
366	1	0	0	1.185	3.003	2.446	0.525	2.398	2.485	2.639	1.386	2.944	0.859	-1	1.705	0.954	0.492	0.243	0.482	1.701	0.634	-0.96	0	3.562
367	0	0	0	0.861	3.43	0.971	0.589	2.398	2.639	2.708	1.099	3.219	1.314	-0.9	1.564	0.382	1.811	0.231	0.527	1.75	0.479	-0.96	0	3.562
368	2	0	0	1.461	3.099	2.646	0.52	2.398	2.485	2.565	1.609	2.565	0.519	-1	1.732	0.528	0.165	0.348	0.472	1.677	0.706	-0.96	0	3.562
369	0	0	5.499	0	3.466	1.522	0.457	2.485	2.565	2.708	1.099	2.565	0	-0.62	1.723	1.128	0.007	0.302	0.37	2.207	0.579	-0.96	0	4.431
370	0	0	5.499	0	3.466	1.522	0.457	2.485	2.565	2.708	1.099	2.565	0	-0.62	1.723	1.565	1.24	0.318	0.38	2.099	0.528	-0.96	0	4.431
371	7	0	-15.1	2.322	1.957	2.322	0.552	2.303	2.079	2.197	1.792	0	0.519	-1.05	1.795	0.509	0.432	0.528	0.382	1.769	0.438	-0.96	0	4.678
372	8	2	-20.9	2.522	2.385	2.752	0.53	2.539	2.367	2.598	2.159	1.946	1.597	-0.08	1.79	0.051	1.035	0.858	0.35	1.805	0.786	-0.24	37.3	3.593
373	7	0	-15.1	2.322	1.957	2.322	0.552	2.303	2.079	2.197	1.792	0	0	-1.18	1.814	0.736	0.513	0.446	0.35	1.903	0.361	-0.96	0	4.823
374	4	0	-11.5	1.761	2.555	2.646	0.847	2.303	2.398	2.565	1.792	3.434	0	-1.37	1.768	3.21	1.489	0.346	0.334	1.949	0.555	-0.96	0	4.823
375	3	0	-10.5	1.371	2.905	2.322	0.999	2.303	2.639	2.708	1.386	3.892	0	-1	1.718	3.201	1.517	0.267	0.332	1.881	0.56	-0.96	0	4.823
376	3	0	-11.6	1.371	1.625	1.371	0.819	2.303	2.079	2.708	2.303	3.892	0	-1	1.806	6.378	1.801	0.454	0.335	1.943	0.557	-0.96	0	4.823
377	8	1	-18.2	2.55	2.207	2.55	0.528	2.428	2.233	2.335	1.992	0	0.621	-0.74	1.805	0.69	0.414	0.648	0.338	1.89	0.498	-0.29	20.23	3.806
378	0	0	6.78	0.629	3.933	3.278	0.45	2.565	2.773	2.833	1.386	2.944	0.519	-0.62	1.619	0.459	-0.12	0.25	0.968	1.507	0.642	-0.97	0	3.677
379	0	0	6.888	0.629	3.802	3.278	0.431	2.565	2.708	2.833	1.609	2.944	0.519	-0.62	1.656	0.263	0.335	0.237	0.971	1.531	0.614	-0.97	0	3.677
380	8	0	-18.2	2.55	2.207	2.55	0.528	2.398	2.197	2.303	1.946	0	0	-0.83	1.835	0.836	0.381	0.456	0.322	1.908	0.367	-0.97	0	5.115

Annexes

381	9	1	-21.6	2.585	2.457	2.585	0.509	2.512	2.335	2.428	2.12	0	0.621	-0.42	1.828	0.807	0.23	0.687	0.312	1.891	0.486	-0.33	20.23	4.098
382	1	0	9.803	0	3.966	1.918	0.373	2.639	2.708	2.833	2.197	2.565	0	-0.51	1.821	1.864	-0.51	0.345	0.547	1.349	0.916	-0.97	0	3.876
383	0	0	8.361	0.73	4.137	2.752	0.412	2.639	2.833	2.944	1.946	3.219	0.859	-0.11	1.704	0.354	0.942	0.221	0.686	1.654	0.584	-0.97	0	3.958
384	3	0	0	1.299	3.732	2	0.505	2.565	2.773	2.773	2.303	2.944	1.112	-0.61	1.674	1.576	1.196	0.207	0.374	2.049	0.706	-0.97	0	4.135
385	0	0	12.12	0.73	4.646	2.189	0.442	2.708	2.944	3.219	0	4.111	0	-0.46	1.605	1.344	1.978	0.193	0.329	2.206	0.655	-0.97	0	5.004
386	9	0	-21.6	2.585	2.457	2.585	0.509	2.485	2.303	2.398	2.079	0	0.519	-0.48	1.84	0.868	0.062	0.546	0.32	1.794	0.439	-0.97	0	5.251
387	10	2	-28.6	2.753	2.885	2.95	0.492	2.685	2.539	2.737	2.367	1.946	1.597	0.322	1.837	0.811	0.167	0.851	0.296	1.857	0.74	-0.31	37.3	4.165
388	9	0	-21.6	2.585	2.457	2.585	0.509	2.485	2.303	2.398	2.079	0	0	-0.52	1.853	0.94	0.437	0.464	0.296	1.92	0.371	-0.97	0	5.396
389	10	1	-25.3	2.777	2.707	2.777	0.492	2.59	2.428	2.512	2.233	0	0.621	-0.14	1.847	0.894	0.279	0.643	0.287	1.91	0.488	-0.35	20.23	4.379
390	2	0	12.92	0	4.116	2.162	0.328	2.708	2.708	2.89	2.398	2.565	0.859	0.244	1.886	6.463	0.614	0.453	0.451	1.63	0.954	-0.97	0	4.148
391	10	0	-25.3	2.777	2.707	2.777	0.492	2.565	2.398	2.485	2.197	0	0	-0.24	1.867	1.04	0.307	0.471	0.275	1.924	0.375	-0.97	0	5.668
392	11	1	-29.3	2.807	2.957	2.807	0.478	2.663	2.512	2.59	2.335	0	0.621	0.105	1.862	0.995	0.243	0.64	0.267	1.916	0.479	-0.38	20.23	4.651
393	0	0	18.65	0	5.394	2.522	0.343	2.833	3.135	3.135	2.398	3.219	0	0.686	1.801	0.364	-0.39	0.286	0.214	1.024	0.734	-0.98	0	4.332
394	0	0	19	0	5.344	1.557	0.328	2.833	3.091	3.135	2.398	3.219	0	0.445	1.832	0.326	0.111	0.317	0.214	1.037	0.713	-0.98	0	4.332
395	2	0	0	1.197	4.177	1.449	0.475	2.708	2.996	3.135	2.079	4.111	0.859	-1	1.838	1.072	0.233	0.35	0.307	1.878	0.631	-0.98	0	4.67
396	11	0	-29.3	2.807	2.957	2.807	0.478	2.639	2.485	2.565	2.303	0	0	0	1.879	1.143	0.267	0.477	0.256	1.933	0.378	-0.98	0	5.931
397	12	1	-33.6	2.974	3.207	2.974	0.465	2.73	2.59	2.663	2.428	0	0.621	0.312	1.875	1.098	0.143	0.636	0.249	1.925	0.48	-0.4	20.23	4.914
398	2	2	19.73	0.732	6.136	2.676	0.338	2.979	3.344	3.344	2.872	3.892	1.406	1	1.864	2.466	0.622	0.716	0.345	1.601	1.278	0.295	40.46	3.306
399	12	0	-33.6	2.974	3.207	2.974	0.465	2.708	2.565	2.639	2.398	0	0	0.209	1.889	1.242	0.252	0.482	0.24	1.936	0.381	-0.98	0	6.187
400	13	1	-38.1	3	3.457	3	0.454	2.793	2.663	2.73	2.512	0	0.621	0.489	1.885	1.199	0.131	0.633	0.234	1.93	0.473	-0.41	20.23	5.17
401	13	0	-38.1	3	3.457	3	0.454	2.773	2.639	2.708	2.485	0	0	0.39	1.897	1.347	0.1	0.486	0.226	1.943	0.383	-0.98	0	6.437
402	6	0	-26.2	1.842	2.871	2.858	0.757	2.773	2.833	3.219	2.485	4.369	0	-0.61	1.909	5.269	2.449	0.437	0.218	2.021	0.633	-0.98	0	6.437
403	14	1	-43	3.146	3.707	3.146	0.444	2.853	2.73	2.793	2.59	0	0.621	0.642	1.894	1.301	0.017	0.63	0.22	1.937	0.474	-0.43	20.23	5.42
404	14	0	-43	3.146	3.707	3.146	0.444	2.833	2.708	2.773	2.565	0	0	0.547	1.904	1.447	0.073	0.49	0.213	1.945	0.385	-0.98	0	6.68
405	15	1	-48.1	3.17	3.957	3.17	0.435	2.909	2.793	2.853	2.663	0	0.621	0.774	1.902	1.404	-0.07	0.627	0.209	1.941	0.468	-0.44	20.23	5.663
406	2	0	39.95	0	6.386	2.725	0.282	3.045	3.296	3.296	3.219	3.219	0	1	1.916	4.964	-1.33	0.426	0.359	1.591	1.112	-0.98	0	5.165
407	2	0	41.59	0	6.388	2.53	0.259	3.045	3.258	3.296	3.045	3.219	0	1	1.933	3.05	-1.03	0.42	0.38	1.541	1.1	-0.98	0	5.165
408	2	0	42.14	0	6.449	2.197	0.241	3.045	3.258	3.296	2.89	3.219	0	1	1.938	2.582	-0.74	0.415	0.379	1.39	0.971	-0.98	0	5.165
409	16	2	-58.5	3.284	4.385	3.422	0.425	3.028	2.927	3.065	2.813	1.946	1.597	1.005	1.904	0.086	1.476	0.835	0.202	1.885	0.657	-0.42	37.3	5.687
410	15	0	-48.1	3.17	3.957	3.17	0.435	2.89	2.773	2.833	2.639	0	0	0.684	1.91	1.55	0.011	0.494	0.202	1.952	0.387	-0.98	0	6.918
411	16	1	-53.5	3.301	4.207	3.301	0.427	2.962	2.853	2.909	2.73	0	0.621	0.889	1.908	0.114	1.541	0.624	0.197	1.928	0.468	-0.46	20.23	5.901
412	16	0	-53.5	3.301	4.207	3.301	0.427	2.944	2.833	2.89	2.708	0	0	0.803	1.916	1.649	-0.1	0.497	0.192	1.953	0.389	-0.98	0	7.15
413	17	1	-59.3	3.322	4.457	3.322	0.419	3.012	2.909	2.962	2.793	0	0.621	0.989	1.914	0.12	1.608	0.622	0.188	1.931	0.464	-0.47	20.23	6.133

Annexes

414	17	0	-59.3	3.322	4.457	3.322	0.419	2.996	2.89	2.944	2.773	0	0	0.908	1.92	1.748	-0.1	0.5	0.182	1.958	0.39	-0.98	0	7.378
415	18	1	-65.3	3.44	4.707	3.44	0.412	3.06	2.962	3.012	2.853	0	0.621	1.076	1.919	0.125	1.626	0.619	0.179	1.936	0.464	-0.48	20.23	6.361
416	18	0	-65.3	3.44	4.707	3.44	0.412	3.045	2.944	2.996	2.833	0	0	1	1.924	1.853	-0.21	0.502	0.174	1.96	0.392	-0.99	0	7.601
417	19	0	-71.6	3.459	4.957	3.459	0.406	3.091	2.996	3.045	2.89	0	0	1.081	1.928	1.949	-0.26	0.505	0.166	1.964	0.393	-0.99	0	7.819
418	20	0	-78.1	3.567	5.207	3.567	0.4	3.135	3.045	3.091	2.944	0	0	1.153	1.931	2.057	-0.3	0.507	0.16	1.965	0.395	-0.99	0	8.034
419	21	0	-85	3.585	5.457	3.585	0.394	3.178	3.091	3.135	2.996	0	0	1.218	1.934	2.152	-0.42	0.509	0.153	1.969	0.396	-0.99	0	8.245

Tableau A.4. Valeurs des descripteurs pertinentes utilisées pour l'élaboration du modèle de RQSP pour Vc

ID	Sv	nCIC	RBN	nO	Wap	TI1	RDF045u	RDF040m	EEig06d	EEig08d	Mor25u	GATS4m	ESpm01d	H1m	J3D	H0v	nCp	MLOGP
1	4.79	0	0	0	16	-3,101	0	0	0	0	-0.055	0	1.855	0.063	1.916	3.091	1	2.226
2	3.61	0	0	0	16	-3,101	0	0	0	0	0.141	0	1.947	0.073	2.217	1.853	1	1.817
3	4.59	0	0	0	16	-3,101	0	0	0	0	0.135	0	1.943	0.103	2.007	3.182	1	2.226
4	3.23	0	0	0	16	-3,101	0	0	0	0	0.033	0	1.959	0.056	2.284	1.143	1	1.597
5	3.82	0	0	0	16	-3,101	0	0	0	0	-0.042	0	1.859	0.075	2.114	1.773	1	1.817
6	4.41	0	0	0	16	-3,101	0	0	0	0	-0.048	0	1.609	0.056	1.966	2.392	1	2.026
7	5	0	0	0	16	-3,101	0	0	0	0	0	0	1.463	0	1.838	3	1	2.226
8	3.5	0	0	0	9	-2,249	0	0	0	0	0.06	0	1.705	0.014	2.297	1.809	1	1.597
9	3.12	0	0	0	9	-2,249	0	0	0	0	0.023	0	1.719	0.004	2.368	1.094	1	1.364
10	3.71	0	0	0	9	-2,249	0	0	0	0	-0.014	0	1.591	0.025	2.193	1.729	1	1.597
11	4.3	0	0	0	9	-2,249	0	0	0	0	0	0	1.25	0.005	2.045	2.351	1	1.817
12	2.53	0	0	0	9	-2,249	0	0	0	0	0.101	0	1.71	0.003	2.576	0.448	1	1.115
13	1.99	0	0	0	1	-0,602	0	0	0	0	0.045	0	1.526	0.001	1.475	0.291	0	-0.959
14	3.6	0	0	0	4	-1,409	0	0	0	0	0.018	0	1.224	0.008	2.292	1.681	1	1.364
15	2.42	0	0	0	4	-1,409	0	0	0	0	0.062	0	1.391	0.005	2.683	0.391	1	0.845

Annexes

16	2.11	0	0	1	1	-0,602	0	0	0	0	0.036	0	1.224	0	2.158	0.294	0	-0.959
17	2.62	0	0	2	4	-1,409	0	0	0	0	-0.053	0	1.449	0.108	2.43	0.375	0	-1.028
18	3.28	0	0	0	1	-0,602	0	0	0	0	0.002	0	0.908	0.006	2.526	1.707	1	1.115
19	2.9	0	0	0	1	-0,602	0	0	0	0	0.05	0	0.94	0.006	2.602	0.985	1	0.845
20	2.31	0	0	0	1	-0,602	0	0	0	0	0.007	0	0.92	0.003	2.823	0.33	1	0.546
21	3.62	0	0	0	1	-0,602	0	0	0	0	0.079	0	0.829	0.006	2.454	2.54	1	1.364
22	3.1	0	0	1	4	-1,409	0	0	0	0	-0.136	0	1.335	0.202	2.854	0.356	0	-1.434
23	3.62	0	0	2	9	-2,249	0	0	0	0	-0.027	0	1.686	0.478	3.274	0.539	0	-0.433
24	2.2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3.02	0.268	1	1.115
25	2.71	0	0	1	1	-0,602	0	0	0	0	-0.008	0	0.621	0.038	3.102	0.349	1	-0.814
26	3.28	0	0	0	1	-0,602	0	0	0	0	0.126	0	1.374	0.05	2.735	0.801	1	0.203
27	5.05	0	0	0	58	-6,727	0	3.336	0.51	0	0.117	0	2.314	0.971	3.29	1.078	2	2.419
28	6.41	0	0	0	58	-6,727	0.012	0	0.49	0	0.195	0	2.303	1.548	3.094	2.305	2	2.957
29	5.64	0	0	0	58	-6,727	0	6.161	0.2	0	0.087	0	2.245	1.079	3.179	1.56	2	2.604
30	5.64	0	0	0	58	-6,727	0	6.671	0.51	0	-0.004	0	2.318	1.067	3.175	1.549	2	2.604
31	6.23	0	0	0	58	-6,727	0	10.074	0.2	0	-0.043	0	2.25	1.184	3.07	2.022	2	2.783
32	6	0	0	0	29	-4,593	0.131	0	0	0	0.058	0	1.758	1.136	2.112	2	0	2.459
33	3.64	0	0	0	29	-4,593	0	0	0	0	-0.008	0	1.952	0.677	2.533	0.421	0	1.672
34	5.91	0	0	0	42	-5,624	0	7.331	-1.18	0	0.103	0	2.148	1.137	3.202	2.095	2	2.604
35	4.94	0	0	0	42	-5,624	0	3.06	-1.178	0	0.107	0	2.152	0.799	3.353	1.043	2	2.226
36	5.53	0	0	0	42	-5,624	0	6.041	-1.219	0	0.098	0	2.071	0.901	3.242	1.522	2	2.419
37	5.53	0	0	0	42	-5,624	0	6.552	-1.177	0	0.006	0	2.158	0.886	3.235	1.52	2	2.419
38	4.35	0	0	0	42	-5,624	0	0	-1.181	0	0.184	0	2.146	0.721	3.473	0.57	2	2.026
39	4.86	0	0	1	66	-7,655	0.02	1.762	0.51	0	0.223	0	2.329	0.845	3.532	0.613	0	1.009
40	2.6	0	0	0	1	-0,602	0	0	0	0	-0.027	0	0	0.027	1.755	0.194	0	0.7
41	4.6	0	0	0	10	-2,499	0.059	0	0	0	0.119	0	1.416	0.494	2.428	1.162	0	1.672
42	6.6	0	0	0	29	-4,593	0.08	0	0	0	-0.017	0	1.758	0.975	3.087	2.407	2	2.604

Annexes

43	3.42	0	0	0	9	-2,249	0	0	0	0	-0.036	0	1.391	0.343	2.731	0.364	0	1.219
44	4.24	0	0	0	28	-4,434	0	0	0	0	0.131	0	1.952	0.58	3.548	0.538	2	1.817
45	4.24	0	0	0	29	-4,593	0	0	0	0	0.079	0	1.952	0.563	3.534	0.539	2	1.817
46	3.9	0	0	0	4	-1,409	0	0	0	0	0.14	0	0.94	0.227	2.627	0.825	0	1.219
47	4.72	0	0	0	16	-3,101	0	0	0	0	0.105	0	1.719	0.514	3.5	1.043	2	1.817
48	5.31	0	0	0	16	-3,101	0	0	0	0	0.082	0	1.591	0.614	3.377	1.583	2	2.026
49	5.9	0	0	0	16	-3,101	0	0	0	0	0.153	0	1.25	0.738	3.264	2.127	2	2.226
50	5.9	0	0	0	18	-3,489	0	0	0	0	0.074	0	1.601	0.658	3.248	2.052	2	2.226
51	4.13	0	0	0	16	-3,101	0	0	0	0	0.214	0	1.71	0.449	3.63	0.506	2	1.597
52	4.13	0	0	0	18	-3,489	0	0	0	0	0.105	0	1.71	0.421	3.61	0.506	2	1.597
53	3.59	0	0	0	4	-1,409	0	0	0	0	0.093	0	1.805	0.315	2.827	0.626	1	-0.317
54	3.2	0	0	0	1	-0,602	0	0	0	0	0.164	0	0	0.039	2.86	0.294	0	0.7
55	5.96	0	0	0	10	-2,499	0.002	0	0	0	-0.061	0	1.376	0.711	3.325	2.183	2	2.226
56	5.2	0	0	0	9	-2,249	0	0	0	0	0.075	0	1.224	0.427	3.459	1.532	2	1.817
57	5.2	0	0	0	10	-2,499	0	0	0	0	0.132	0	1.416	0.354	3.427	1.519	2	1.817
58	4.02	0	0	0	9	-2,249	0	0	0	0	0.09	0	1.391	0.283	3.698	0.466	2	1.364
59	3.71	0	0	1	4	-1,409	0	0	0	0	0.009	0	1.406	0.236	3.276	0.486	1	-0.317
60	3.71	1	0	1	9	0	0	0	0	0	0.176	0	1.001	0.044	2.303	0.543	0	-0.564
61	4.22	0	0	2	9	-2,249	0	0.007	0	0	0.051	0	1.597	0.238	3.411	0.501	1	-0.386
62	4.22	0	1	2	10	-2,499	0	0.007	0	0	0.092	0	1.633	0.214	3.329	0.547	0	-0.386
63	4.88	0	0	0	4	-1,409	0	0.16	0	0	0.019	0	0.908	0.278	3.574	1.576	2	1.597
64	4.49	0	0	0	4	-1,409	0	0	0	0	0.09	0	0.94	0.177	3.624	0.956	2	1.364
65	3.9	0	0	0	4	-1,409	0	0	0	0	0.089	0	0.92	0.156	3.765	0.426	2	1.115
66	3.79	0	0	0	1	-0,602	0	0	0	0	0.011	0	0	0.048	3.837	0.383	2	1.757
67	4.31	0	0	1	4	-1,409	0	0	0	0	0.028	0	0.621	0.114	4.037	0.442	2	-0.172
68	4.31	0	0	1	4	-1,409	0	0.006	0	0	0.062	0	1.001	0.083	3.799	0.454	0	-0.172
69	4.82	0	1	2	10	-2,499	0	0	0	0	0.082	0	1.001	0.21	4.307	0.491	2	-1.053

Annexes

70	4.88	0	0	0	4	-1,409	0.655	0.009	0	0	0.23	0	1.374	0.103	3.7	0.738	2	0.845
71	4.88	0	0	0	4	-1,409	0.248	0.028	0	0	0.192	0	1.932	0.081	3.383	0.853	0	0.845
72	4.79	0	0	0	4	-1,409	0	0	0	0	0.02	0	0.336	0.101	4.326	0.467	2	-0.172
73	4.79	0	0	0	4	-1,409	0	0	0	0	0.057	0	0.588	0.07	4.213	0.464	0	-0.172
74	5.3	0	1	1	10	-2,499	0.765	0.101	0	0	0.049	0	0.815	0.122	4.383	0.442	2	-1.053
75	5.78	0	1	0	10	-2,499	2.406	0.197	0	0	0.085	0	0.588	0.135	4.662	0.457	2	-1.053
76	6.28	0	0	0	136	11,259	0.013	0.112	0.51	0.51	0.379	0	2.571	1.361	4.164	0.676	2	2.957
77	6.17	0	0	0	111	10,158	0.025	0.17	0.51	-0.648	0.309	0	2.448	1.214	4.226	0.651	2	2.783
78	6.06	0	0	0	86	-8,798	0.023	1.911	0.51	-1.545	0.163	0	2.309	1.059	4.283	0.629	2	2.604
79	6.06	0	0	0	88	-9,003	0.043	0.092	0.51	-1.588	0.29	0	2.309	1.067	4.288	0.625	2	2.604
80	5.95	0	0	0	58	-6,727	0.998	0.364	-0.526	0	0.274	0	2.146	0.88	4.338	0.615	2	2.419
81	5.95	0	0	0	66	-7,655	0.035	1.069	0.135	0	0.198	0	2.146	0.901	4.343	0.6	2	2.419
82	5.95	0	0	0	62	-7,191	0.005	0.846	-0.747	0	0.129	0	2.146	0.864	4.323	0.602	2	2.419
83	6.46	0	1	1	98	10,026	1.641	2.893	0.51	-1.282	0.135	2.13	2.329	0.926	4.219	0.621	1	1.402
84	4.59	0	0	0	10	-2,499	0.93	0	0	0	0.228	0	1.749	0.334	2.835	0.622	0	0.094
85	5.1	1	0	1	50	0	0.017	0	0	0	0.157	0	0	0.537	2.171	0.58	0	-0.366
86	4.2	0	0	0	4	-1,409	0.004	0	0	0	0.121	0	0.908	0.092	2.788	0.484	1	1.219
87	4.2	0	0	0	4	-1,409	0	0.024	0	0	0.106	0	1.194	0.047	2.691	0.446	0	1.111
88	5.19	0	0	0	10	-2,499	0.996	0	0	0	0.038	0	1.805	0.382	3.805	0.746	1	0.202
89	4.79	0	0	0	4	-1,409	0	0.002	0	0	0.172	0	0.519	0.067	3.696	0.478	1	1.219
90	4.79	1	0	0	9	0	0	0	0	0	-0.1	0	0	0.085	2.621	0.543	0	1.884
91	6.79	0	0	0	18	-3,489	0.032	0.001	0	0	0.211	0	1.416	0.585	4.29	1.447	2	2.226
92	5.31	0	1	1	10	-2,499	0.415	0.011	0	0	0.191	0	0.932	0.157	3.92	0.54	1	0.202
93	5.31	0	0	1	9	-2,249	0.01	0.002	0	0	0.066	0	1.56	0.283	4.02	0.566	2	0.202
94	5.31	0	1	1	10	-2,499	0.185	0.07	0	0	-0.061	0	1.406	0.284	4.143	0.562	1	0.202
95	5.31	1	0	1	20	0	0.099	0.006	0	0	0.173	0	1.001	0.152	2.552	0.567	1	-0.045
96	5.82	0	1	2	18	-3,489	1.962	0.24	0	0	-0.022	0	1.597	0.287	4.203	0.523	1	0.133

Annexes

97	5.82	0	1	2	18	-3,489	4.003	0.294	0	0	0.209	0	1.758	0.262	3.863	0.555	1	0.133
98	5.82	0	2	2	20	-3,876	3.919	0.134	0	0	0.094	1.667	1.633	0.312	4.066	0.565	1	0.133
99	6.33	0	2	3	31	-4,909	0.045	0.068	0	0	0.109	0	1.923	0.208	3.784	0.541	0	-0.297
100	6.09	0	0	0	10	-2,499	0.068	0.002	0	0	0.134	0	0.94	0.315	4.434	0.963	2	1.817
101	6.3	0	0	1	18	-3,489	0.005	0.014	0	0	0.068	0	1.526	0.343	4.597	0.615	0	-0.273
102	5.39	0	0	0	4	-1,409	0.096	0.001	0	0	0.065	0	0	0.078	4.584	0.481	2	2.276
103	5.9	0	1	1	10	-2,499	0.413	0.172	0	0	-0.013	0	0.621	0.189	4.695	0.482	2	0.347
104	5.9	0	0	1	9	-2,249	0.025	0.001	0	0	0.089	0	0.621	0.184	4.857	0.531	2	0.347
105	5.9	0	1	1	10	-2,499	3.876	0.294	0	0	0.229	0	1.001	0.141	4.383	0.49	1	0.347
106	6.41	0	2	2	20	-3,876	0.002	0.079	0	0	-0.019	0	1.491	0.27	4.667	0.611	0	-0.128
107	6.41	0	2	2	20	-3,876	1.772	0.279	0	0	0.024	0	1.001	0.255	4.796	0.468	2	-0.534
108	6.93	0	2	3	31	-4,909	1.223	0.311	0	0	0.14	0	1.275	0.335	5.142	0.514	2	-1.37
109	6.48	0	1	0	10	-2,499	3.186	0.032	0	0	0.322	0	1.932	0.222	3.995	0.687	1	1.364
110	6.39	0	1	0	10	-2,499	0.749	0.413	0	0	-0.095	0	0.336	0.167	4.922	0.492	2	0.347
111	6.39	0	0	0	9	-2,249	0.044	0.001	0	0	0.028	0	0.336	0.13	5.141	0.541	2	0.347
112	6.39	0	0	0	9	-2,249	0	0.001	0	0	0.143	0	0.788	0.109	5.07	0.559	0	0.347
113	6.9	0	2	1	20	-3,876	2.538	0.265	0	0	0.204	2.498	0.978	0.189	4.834	0.482	1	-0.534
114	7.28	1	0	0	376	0	0.096	2.109	0.51	0.51	0.496	0	2.571	1.604	2.725	0.753	0	2.899
115	5.71	1	0	1	50	0	0.123	0.003	0	0	0.187	0	0	0.293	2.278	0.552	0	0.156
116	6.28	1	0	0	50	0	0.938	0	0	0	0.124	0	0	0.571	2.16	0.819	0	1.173
117	6.19	1	0	0	50	0	0.16	0	0	0	0.244	0	0	0.214	2.424	0.531	0	0.156
118	5.79	0	0	0	10	-2,499	3.162	0	0	0	0.11	0	0.908	0.18	3.749	0.644	1	1.672
119	5.79	0	0	0	10	-2,499	0.818	0.009	0	0	0.056	0	1.381	0.144	3.462	0.576	1	1.565
120	5.79	0	1	0	10	-2,499	1.616	0.126	0	0	0.42	0	0	0.125	3.622	0.44	0	1.565
121	6.82	0	2	2	32	-5,068	2.954	1.505	0	0	0.183	0.938	1.758	0.281	3.763	0.62	1	0.479
122	7.33	0	2	3	48	-6,427	3.559	1.764	-0.842	0	0.358	0.875	2.184	0.481	3.958	0.704	2	0.455
123	6.79	0	1	0	20	-3,876	0.064	0.121	0	0	0.028	2.5	1.805	0.387	4.542	0.716	1	0.655

Annexes

124	6.39	1	0	0	24	0	0	0.008	0	0	0.045	0	0	0.092	2.985	0.58	0	2.337
125	6.39	0	1	0	10	-2,499	3.206	0.12	0	0	0.182	0	0.519	0.131	4.432	0.591	1	1.672
126	6.39	0	0	0	10	-2,499	3.156	0.579	0	0	0.273	0	0.859	0.115	4.175	0.487	2	1.672
127	6.39	0	0	0	10	-2,499	1.98	0.225	0	0	0.066	0	0.859	0.136	4.371	0.56	2	1.672
128	6.39	0	0	0	9	-2,249	0.035	0.006	0	0	0.347	0	0.859	0.11	4.537	0.564	2	1.672
129	6.9	0	2	1	20	-3,876	0.269	0.479	0	0	-0.027	2.5	1.406	0.305	4.775	0.576	1	0.655
130	6.9	0	1	1	18	-3,489	1.931	0.735	0	0	0.025	0	1.56	0.256	4.603	0.563	2	0.655
131	6.9	1	0	1	50	0	0	0.01	0	0	0.229	0	1.001	0.292	3.066	0.612	0	0.408
132	7.41	0	2	2	32	-5,068	1.95	0.594	0	0	-0.001	1.875	1.597	0.337	4.799	0.546	1	0.586
133	7.41	0	1	2	29	-4,593	2.641	0.271	0	0	0.09	0	1.597	0.364	5.1	0.624	2	0.586
134	7.41	1	0	2	90	0	0.035	0.03	-1.575	0	0.258	0	1.491	0.456	3.096	0.646	0	-0.067
135	7.41	1	0	2	90	0	0	0.049	-1.486	0	0.368	0	1.491	0.442	3.07	0.64	0	-0.473
136	7.41	0	2	2	31	-4,909	4.572	0.485	0	0	0.136	0	1.758	0.203	4.429	0.551	1	0.586
137	7.41	0	2	2	32	-5,068	4.475	0.545	0	0	0.256	0.938	1.758	0.265	4.402	0.598	2	0.586
138	7.41	0	3	2	35	-5,543	3.908	0.141	0	0	0.045	0.938	1.633	0.365	4.684	0.589	1	0.586
139	7.69	0	1	0	18	-3,489	0.893	0.608	0	0	0.212	0	0.94	0.319	4.993	0.926	2	2.226
140	7.39	1	0	0	50	0	0	0.023	0	0	0.385	0	0.588	0.209	3.171	0.591	0	0.408
141	6.99	0	1	0	10	-2,499	1.927	0.622	0	0	0.101	0	0	0.123	5.102	0.505	2	2.729
142	6.99	0	0	0	9	-2,249	0.232	0.002	0	0	0.06	0	0	0.106	5.41	0.569	3	2.729
143	8.38	1	0	0	90	0	0.006	0.061	-1.746	0	0.209	0	0.956	0.294	3.348	0.613	0	-0.473
144	7.5	0	2	1	20	-3,876	2.335	0.77	0	0	0.054	2.5	0.621	0.216	5.207	0.505	2	0.8
145	7.5	0	1	1	18	-3,489	1.736	0.147	0	0	0.11	0	0.621	0.203	5.529	0.558	3	0.8
146	7.5	0	0	1	16	-3,101	0.087	0.005	0	0	0.153	0	0.621	0.174	5.686	0.601	3	0.8
147	7.5	0	1	1	18	-3,489	1.507	0.545	0	0	0.105	0	0.621	0.167	5.365	0.531	2	0.8
148	7.5	0	2	1	20	-3,876	4.628	0.643	0	0	0.438	0	1.001	0.137	4.811	0.543	2	0.8
149	8.01	0	3	2	35	-5,543	7.224	0.535	0	0	0.247	1.875	1.491	0.237	4.742	0.51	0	-0.081
150	8.01	0	2	2	31	-4,909	2.014	0.732	0	0	0.097	1.875	1.001	0.247	5.5	0.533	2	-0.081

Annexes

151	8.01	0	2	2	32	-5,068	1.296	0.719	0	0	0.083	0.938	1.001	0.284	5.497	0.529	2	-0.081
152	8.52	0	4	3	56	-7,498	2.933	0.699	-1.313	0	0.372	1.167	1.491	0.343	4.99	0.533	2	-0.917
153	8.08	0	2	0	20	-3,876	5.183	0.027	0	0	0.351	0	1.932	0.146	4.374	0.6	2	1.817
154	7.98	0	2	0	20	-3,876	1.856	0.745	0	0	-0.038	2.5	0.336	0.164	5.324	0.504	2	0.8
155	7.98	0	2	0	20	-3,876	1.178	0.25	0	0	0.199	0	0.588	0.141	5.176	0.538	2	0.8
156	7.98	0	1	0	18	-3,489	1.09	0.347	0	0	-0.038	0	0.336	0.21	5.798	0.581	3	0.8
157	7.98	0	0	0	16	-3,101	0.134	0.001	0	0	0.033	0	0.336	0.151	5.993	0.62	3	0.8
158	9.01	0	4	2	56	-7,498	2.631	0.664	-1.515	0	0.352	1.473	1.258	0.318	5.298	0.518	2	-0.917
-																		
159	9.92	0	2	0	436	22,959	8.587	1.392	0.51	0.51	0.53	0.84	2.951	2.123	5.406	0.808	2	4.203
160	7.22	1	1	2	118	0	2.513	0.021	-1.618	0	0.171	2.1	1.224	0.507	2.316	0.628	0	-0.145
161	7.19	1	0	0	90	0	0.057	0.035	-2	0	0.401	0	0	0.391	2.438	0.632	0	0.468
162	7.39	0	1	0	20	-3,876	2.82	0.148	0	0	0.082	0	0.908	0.241	4.461	0.661	1	2.081
163	7.39	1	0	0	50	0	0.068	0.032	0	0	0.337	0	0.859	0.207	2.941	0.64	0	1.689
164	7.9	1	0	1	79	0	1.981	0.231	-1.605	0	0.336	0	1.56	0.404	3.103	0.685	0	0.672
165	8.39	0	2	0	35	-5,543	1.554	0.713	0	0	0.014	1.5	1.805	0.401	5.068	0.73	1	1.064
166	8.9	1	0	1	117	0	4.688	0.291	-1.211	0	0.342	0	1.664	0.403	3.138	0.672	0	0.198
167	7.99	1	0	0	50	0	0.009	0.025	0	0	0.385	0	0	0.196	3.315	0.619	0	2.746
168	7.99	0	2	0	20	-3,876	3.153	0.496	0	0	0.251	0	0.519	0.188	4.971	0.607	1	2.081
169	7.99	0	1	0	20	-3,876	3.983	0.301	0	0	0.079	0	0.859	0.197	4.939	0.651	2	2.081
170	7.99	0	1	0	20	-3,876	4.976	0.714	0	0	0.242	0	0.859	0.158	4.73	0.586	2	2.081
171	7.99	0	1	0	18	-3,489	4.37	0.1	0	0	0.361	0	0.859	0.169	5.23	0.667	2	2.081
172	7.99	0	0	0	18	-3,489	5.767	0.696	0	0	0.197	0	1.112	0.16	5.054	0.579	3	2.081
173	7.99	0	1	0	18	-3,489	5.733	0.204	0	0	0.192	0	0.519	0.185	5.271	0.659	2	2.081
174	8.5	1	0	1	79	0	0.592	0.139	-1.699	0	0.427	0	0.621	0.289	3.396	0.641	0	0.817
175	8.5	0	2	1	32	-5,068	1.594	1.31	0	0	0.112	1.5	1.56	0.283	5.084	0.587	2	1.064
176	8.5	0	2	1	31	-4,909	2.535	1.568	0	0	-0.118	0	1.56	0.187	5.015	0.562	2	1.064
177	8.5	0	1	1	29	-4,593	1.616	0.435	0	0	0.097	0	1.56	0.317	5.49	0.68	3	1.064

Annexes

178	8.5	1	0	1	79	0	3.971	0.25	-1.688	0	0.304	0	1.001	0.305	3.225	0.636	1	0.817
179	9.01	0	3	2	52	-6,962	3.647	1.13	-1.596	0	0.02	1.4	1.597	0.382	5.246	0.569	1	0.996
180	9.01	0	2	2	48	-6,427	2.638	0.364	-1.444	0	0.064	2.1	1.597	0.447	5.757	0.676	2	0.996
181	9.01	0	3	2	50	-6,695	3.833	0.854	-1.398	0	0.145	1.4	1.758	0.262	4.893	0.56	1	0.996
182	9.01	0	3	2	50	-6,695	5.542	0.745	-1.13	0	0.193	0.7	1.758	0.225	4.771	0.584	2	0.996
183	9.01	0	2	2	46	-6,159	4.081	0.434	-1.048	0	0.197	0	1.758	0.282	5.283	0.655	2	0.996
184	9.01	0	3	2	52	-6,962	4.931	0.54	-1.358	0	0.142	0.7	1.758	0.31	4.864	0.603	2	0.996
185	9.01	0	3	2	52	-6,962	3.266	0.198	-1.401	0	0.058	0.7	1.633	0.441	5.515	0.688	2	0.996
186	9.01	0	2	2	48	-6,427	6.041	0.995	-1	0	0.237	1.05	1.758	0.322	5.241	0.701	3	0.996
187	9.29	0	2	0	35	-5,543	2.149	1.205	0	0	0.085	1.5	0.94	0.426	5.421	0.899	2	2.604
188	8.59	0	2	0	20	-3,876	2.959	1.331	0	0	0.086	0	0	0.148	5.494	0.534	2	3.138
189	8.59	0	1	0	18	-3,489	1.907	0.051	0	0	0.29	0	0	0.18	6.073	0.653	3	3.138
190	8.59	0	0	0	16	-3,101	0.407	0.001	0	0	-0.003	0	0	0.135	6.27	0.656	4	3.138
191	9.1	0	3	1	35	-5,543	3.4	1.45	0	0	0.036	1.5	0.621	0.249	5.569	0.527	2	1.209
192	9.1	0	2	1	32	-5,068	4.859	1.226	0	0	0.074	1.5	0.621	0.238	5.764	0.569	2	1.209
193	9.1	0	2	1	31	-4,909	5.257	0.848	0	0	0.208	3	0.621	0.306	6.115	0.606	3	1.209
194	9.1	0	1	1	28	-4,434	1.225	0.6	0	0	0.176	0	0.621	0.219	6.244	0.625	3	1.209
195	9.1	0	2	1	32	-5,068	7.807	0.248	0	0	0.27	3	0.621	0.315	6.151	0.642	3	1.209
196	9.1	0	1	1	29	-4,593	1.111	0.606	0	0	0.163	0	0.621	0.226	6.202	0.622	3	1.209
197	9.1	0	3	1	35	-5,543	4.855	0.671	0	0	0.373	0	1.001	0.169	5.188	0.55	2	1.209
198	9.1	0	1	1	28	-4,434	2.771	0.436	0	0	0.083	0	1.001	0.243	6.212	0.688	3	1.209
199	9.1	0	2	1	31	-4,909	2.085	1.372	0	0	0.098	0	0.621	0.195	5.821	0.568	2	1.209
200	8.46	1	0	0	486	0	0.05	2.529	1.51	-0.496	0.223	0.917	2.309	1.488	2.407	0.68	0	4.331
201	11.74	0	3	0	676	30,118	3.959	17.47	2.636	0.51	0.798	0.88	3.097	2.12	5.677	0.817	2	4.756
202	9.2	1	0	0	182	0	2.035	11.881	-1.085	-2	0.545	1.556	1.416	1.125	2.421	1.169	0	3.478
203	9.2	1	0	0	182	0	1.791	10.962	-1.109	-2	0.424	2.333	1.416	1.088	2.42	1.16	0	3.478
204	8.49	1	0	0	131	0	0.948	5.751	-1.163	0	0.504	3.5	0.94	0.713	2.484	0.898	0	2.876

Annexes

205	9.22	1	0	0	131	0	0.96	0.09	-1.184	0	0.501	3.5	0.829	1.824	2.441	1.703	0	3.21
206	9.21	1	1	2	239	0	0.63	0.916	-0.479	-1.431	0.433	2.186	1.686	0.769	2.64	0.652	0	1.887
207	7.79	1	0	0	90	0	0.079	0.098	-2	0	0.595	0	0	0.312	2.551	0.616	0	2.255
208	8.31	1	0	1	131	0	3.022	0.185	-1.232	0	0.554	3.5	0.621	0.404	2.599	0.591	0	1.506
209	8.79	1	0	0	131	0	2.933	0.255	-1.31	0	0.573	3.5	0.336	0.511	2.681	0.864	0	1.506
210	8.79	1	0	0	131	0	2.564	0.064	-1.258	0	0.415	0	0.519	0.38	2.629	0.717	1	0.846
211	8.79	1	0	0	131	0	2.05	0.167	-1.258	0	0.438	0	0.519	0.436	2.669	0.726	1	0.846
212	8.79	1	0	0	131	0	1.869	0.152	-1.258	0	0.443	3.5	0.519	0.433	2.686	0.726	1	0.846
213	8.9	1	0	1	131	0	1.861	0.36	-1.089	0	0.305	3.5	1.56	0.485	3.075	0.752	0	0.943
214	8.99	1	0	0	90	0	0.769	0.265	-1.817	0	0.384	0	0.859	0.293	3.262	0.688	0	2.067
215	9.5	1	0	1	131	0	2.471	0.747	-0.986	0	0.264	3.5	1.56	0.466	3.42	0.724	0	1.05
216	9.5	0	1	1	48	-6,427	3.127	0.593	-1.574	0	0.159	1.75	1.694	0.271	5.065	0.627	3	1.335
217	9.59	1	0	0	90	0	0.244	0.456	-2	0	0.474	0	0	0.277	3.623	0.659	0	3.124
218	9.59	1	0	0	79	0	2.622	0.261	-1.757	0	0.437	0	0	0.245	3.525	0.635	1	3.124
219	9.59	0	3	0	35	-5,543	4.508	1.203	0	0	0.235	0	0.519	0.209	5.381	0.63	1	2.459
220	9.59	0	2	0	32	-5,068	2.833	0.653	0	0	0.255	0	0.519	0.231	5.855	0.685	2	2.459
221	10.1	1	0	1	131	0	3.055	0.51	-1.232	0	0.431	3.5	0.621	0.351	3.672	0.642	0	1.195
222	10.1	0	3	1	52	-6,962	3.298	1.891	-1.599	0	0.072	1.167	1.56	0.306	5.448	0.596	2	1.442
223	10.1	0	3	1	50	-6,695	2.603	2.232	-1.429	0	-0.05	1.167	1.56	0.222	5.354	0.575	2	1.442
224	10.1	0	2	1	48	-6,427	3.996	1.417	-1.45	0	0.252	1.75	1.56	0.326	5.9	0.686	3	1.442
225	10.1	0	4	1	56	-7,498	4.789	0.847	-1.582	0	0.282	1.167	1.001	0.228	5.144	0.595	1	1.442
226	10.61	0	4	2	79	-9,163	4.537	1.901	-0.984	0	-0.04	1.167	1.597	0.386	5.566	0.579	1	1.373
227	10.61	0	4	2	75	-8,699	4.722	1.133	-0.925	0	0.219	1.4	1.758	0.267	5.117	0.598	2	1.373
228	10.61	0	4	2	76	-8,815	6.42	0.736	-0.975	0	0.208	0.583	1.758	0.239	5.094	0.588	2	1.373
229	10.61	0	3	2	70	-8,119	6.784	0.733	-1	0	0.234	0.583	1.758	0.306	5.532	0.694	3	1.373
230	10.61	0	4	2	79	-9,163	5.99	1.01	-0.736	0	0.173	1.167	1.758	0.32	5.245	0.613	2	1.373
231	10.61	0	3	2	74	-8,583	5.366	0.616	-1	0	0.247	0.583	1.758	0.365	5.683	0.692	3	1.373

Annexes

232	10.61	0	5	2	84	-9,743	6.05	1.236	-0.954	0	0.02	1.167	1.633	0.405	5.493	0.603	1	1.373
-																		
233	11.12	0	5	3	114	11,663	7.676	1.125	-0.327	-1.32	0.586	1.2	2.018	0.36	5.045	0.621	2	0.538
234	10.18	0	3	0	35	-5,543	1.647	0.755	0	0	-0.015	0	0	0.172	5.847	0.548	2	3.516
235	10.18	0	2	0	32	-5,068	2.265	1.428	0	0	0.164	0	0	0.198	6.265	0.62	3	3.516
236	10.18	0	2	0	31	-4,909	4.993	1.3	0	0	0.18	0	0	0.221	6.464	0.639	3	3.516
237	10.18	0	1	0	28	-4,434	3.603	0.669	0	0	0.194	0	0	0.206	6.835	0.686	4	3.516
238	10.18	0	1	0	29	-4,593	2.21	0.618	0	0	0.211	0	0	0.219	6.757	0.689	4	3.516
239	10.7	0	4	1	56	-7,498	4.338	2.138	-1.774	0	-0.01	1.167	0.621	0.261	5.842	0.538	2	1.587
240	10.7	0	3	1	52	-6,962	2.763	1.616	-1.756	0	0.24	1.167	0.621	0.278	6.142	0.6	2	1.587
241	10.7	0	3	1	50	-6,695	6.178	1.468	-1.736	0	0.087	1.167	0.621	0.28	6.231	0.614	2	1.587
242	10.7	0	3	1	50	-6,695	5.526	1.716	-1.709	0	0.245	1.167	0.621	0.33	6.404	0.623	3	1.587
243	10.7	0	2	1	48	-6,427	5.26	1.266	-1.706	0	0.33	1.75	0.621	0.28	6.618	0.663	3	1.587
244	10.7	0	2	1	48	-6,427	5.999	0.65	-1.095	0	0.283	0	1.001	0.247	6.334	0.707	4	1.587
245	10.7	0	4	1	56	-7,498	5.345	0.695	-1.451	0	0.306	0	1.001	0.186	5.45	0.559	2	1.587
246	11.21	0	4	2	75	-8,699	14.198	1.43	-1.058	0	0.543	0.933	1.491	0.299	5.978	0.698	3	1.112
247	11.18	0	3	0	48	-6,427	13.696	0.628	-1.344	0	0.302	0	0.788	0.265	6.72	0.708	3	1.587
248	11.18	0	4	0	56	-7,498	1.585	0.62	-1.611	0	0.158	0	0.588	0.188	5.747	0.557	2	1.587
-																		
249	12.71	0	6	3	138	12,629	15.022	0.947	0.103	-1.515	0.375	1.481	1.564	0.631	6.947	0.675	3	-0.937
-																		
250	13.56	0	4	0	988	38,147	5.123	22.628	2.879	0.51	0.953	0.904	3.225	2.189	6.013	0.831	2	5.275
251	10.52	1	1	2	314	0	2.587	6.07	0.294	-1.15	0.388	1.597	1.761	0.892	2.605	0.873	0	2.302
252	9.19	1	0	0	184	0	0.863	0.098	-1	-2	0.651	2.667	1.749	0.59	2.525	0.813	0	1.769
253	9.31	1	1	1	184	0	0.683	0.217	-1	-2	0.581	2.667	1.224	0.523	2.635	0.678	0	1.769
254	10.09	1	0	0	182	0	2.153	5.857	-1	-2	0.52	2	1.176	0.704	2.716	0.918	1	3.21
255	9.39	1	0	0	131	0	1.577	0.253	-1.258	0	0.593	0	0.519	0.335	2.768	0.711	1	2.608
256	9.9	1	1	1	184	0	3.526	0.441	-1	-2	0.543	1.333	1.001	0.449	2.745	0.729	0	1.859
257	9.9	1	1	1	184	0	0.965	0.339	-1	-2	0.624	2.667	0.932	0.456	2.847	0.745	1	1.591
258	9.9	1	0	1	182	0	5.39	0.46	-1.192	-2	0.549	2	0.932	0.433	2.876	0.704	1	1.859

Annexes

259	9.9	1	0	1	182	0	3.671	0.375	-1.134	-2	0.566	2.667	0.932	0.426	2.811	0.68	1	1.859
260	9.9	1	0	1	182	0	4.726	0.264	-1	-2	0.561	2	0.932	0.407	2.796	0.673	1	1.859
261	10.39	1	0	0	182	0	2.202	0.092	-1.143	-2	0.451	0	0.859	0.346	2.821	0.715	2	1.199
262	11.61	0	5	2	110	11,254	6.628	1.075	-0.57	-1.598	0.285	1.029	1.633	0.323	5.113	0.649	1	1.619
263	11.18	1	0	0	147	0	1.48	0.143	-1.802	0	0.521	0	0	0.348	3.876	0.7	0	3.477
264	11.18	1	0	0	131	0	3.557	1.331	-1.414	0	0.368	0	0	0.293	3.822	0.669	1	3.477
265	11.18	1	1	0	118	0	5.955	1.162	-1.618	0	0.5	0	0	0.287	3.676	0.658	1	3.477
266	11.18	1	0	0	117	0	2.97	0.377	-1.732	0	0.347	0	0	0.253	3.721	0.656	2	3.477
267	11.18	1	0	0	117	0	2.96	0.378	-1.732	0	0.347	0	0	0.253	3.721	0.656	2	3.477
268	11.18	0	4	0	56	-7,498	5.528	1.885	-1.724	0	0.177	0	0.519	0.232	5.689	0.635	1	2.812
269	12.21	0	5	2	110	11,254	5.546	1.132	-0.547	-1.583	0.145	1.029	1.758	0.273	5.35	0.604	2	1.727
270	12.21	0	5	2	114	11,663	5.686	2.472	-0.473	-1.792	-0.13	1.029	1.597	0.409	5.842	0.592	1	1.727
271	12.21	0	4	2	102	10,435	10.338	0.594	-0.923	-1.47	0.314	1.837	1.758	0.412	6.191	0.76	3	1.727
272	12.21	0	5	2	108	11,049	5.612	1.119	-0.407	-1.445	0.243	1.286	1.758	0.268	5.335	0.599	2	1.727
273	12.21	0	4	2	102	10,435	6.434	0.726	-0.968	-1.379	0.205	0.514	1.758	0.31	5.734	0.693	3	1.727
274	12.21	0	4	2	108	11,049	11.225	0.525	-0.71	-1.638	0.244	1.543	1.758	0.424	6.08	0.745	3	1.727
275	11.78	0	4	0	56	-7,498	4.897	2.714	-1.802	0	-0.074	0	0	0.192	6.008	0.559	2	3.869
276	11.78	0	3	0	52	-6,962	7.231	1.559	-1.775	0	0.27	0	0	0.262	6.637	0.692	3	3.869
277	11.78	0	3	0	50	-6,695	6.841	1.552	-1.74	0	0.247	0	0	0.285	6.964	0.703	3	3.869
278	11.78	0	3	0	48	-6,427	7.616	1.49	-1.618	0	0.283	0	0	0.265	7.116	0.703	3	3.869
279	11.78	0	2	0	46	-6,159	8.135	1.604	-1.704	0	0.332	0	0	0.237	7.094	0.701	4	3.869
280	11.78	0	2	0	46	-6,159	8.888	1.532	-1.678	0	0.326	0	0	0.276	7.256	0.723	4	3.869
281	11.78	0	2	0	48	-6,427	8.669	1.017	-1.732	0	0.415	0	0	0.269	7.131	0.708	4	3.869
282	11.78	0	2	0	44	-5,891	8.756	1.349	-1.618	0	0.406	0	0	0.27	7.436	0.723	4	3.869
283	11.78	0	1	0	42	-5,624	4.372	1.734	-1.602	0	0.272	0	0	0.235	7.536	0.707	5	3.869

Annexes

284	12.29	0	5	1	84	-9,743	5.308	2.819	-1.345	0	-0.085	1	0.621	0.277	6.053	0.551	2	1.94
285	12.29	0	4	1	79	-9,163	7.185	2.559	-1.255	0	0.015	1	0.621	0.277	6.22	0.586	2	1.94
286	15.38	0	5	0	1381	47,046	11.284	10.124	3.138	2.58	1.14	0.919	3.339	2.125	6	0.828	2	5.768
287	10.39	1	1	0	184	0	2.369	0.291	-1	-2	0.575	0	0	0.392	2.726	0.668	0	2.851
288	10.9	1	1	1	239	0	1.277	0.54	-0.657	-1.623	0.564	1.8	1.406	0.501	2.818	0.768	1	2.102
289	11.41	1	1	2	314	0	2.904	0.562	0.047	-1	0.537	1.875	1.597	0.528	2.831	0.703	1	2.034
290	10.99	1	1	0	184	0	3.075	0.302	-1	-2	0.616	0	0.519	0.43	3.013	0.86	1	2.942
291	10.99	1	0	0	182	0	5.047	0.534	-1.21	-2	0.658	0	0.859	0.371	3.087	0.725	2	2.942
292	10.99	1	0	0	182	0	2.884	0.429	-1.143	-2	0.608	0	0.859	0.343	2.964	0.709	2	2.942
293	10.99	1	0	0	182	0	4.398	0.422	-1	-2	0.83	0	0.859	0.31	2.94	0.682	2	2.942
294	11.5	1	1	1	247	0	7.708	0.665	-0.757	-1.422	0.579	1.8	0.932	0.493	3.113	0.832	1	2.193
295	11.5	1	1	1	247	0	5.211	0.416	-0.687	-1.462	0.593	1.8	0.932	0.526	3.049	0.829	1	2.193
296	11.5	1	1	1	247	0	5.813	0.327	-0.898	-1.486	0.565	1.125	0.932	0.504	3.026	0.821	1	2.193
297	11.5	1	0	1	243	0	9.223	0.703	-0.767	-1.342	0.62	2.25	1.169	0.425	3.154	0.697	2	2.193
298	11.5	1	0	1	243	0	7.404	0.476	-0.628	-1.411	0.592	1.125	1.169	0.392	3.034	0.674	2	2.193
299	11.5	1	0	1	243	0	6.317	0.629	-0.664	-1.416	0.552	2.25	1.169	0.397	3.015	0.67	2	2.193
300	11.5	1	0	1	243	0	7.316	0.663	-0.755	-1.357	0.559	1.125	1.169	0.384	3.092	0.702	2	2.193
301	11.5	1	0	1	243	0	6.689	0.557	-0.649	-1.406	0.65	2.25	1.169	0.441	3.111	0.683	2	2.193
303	12.78	1	0	0	224	0	9.381	0.274	-1.414	-2	1.064	0	0	0.417	4.154	0.749	0	3.811
304	12.78	1	0	0	182	0	8.144	2.185	-1	-2	0.283	0	0	0.293	3.983	0.667	2	3.811
305	12.78	0	5	0	84	-9,743	6.47	2.576	-1.267	0	0.123	0	0.519	0.248	5.928	0.644	1	3.146
306	13.81	0	6	2	158	14,459	6.63	3.147	-0.091	-1.398	-0.194	0.937	1.597	0.405	6.045	0.597	1	2.972
307	13.81	0	5	2	134	12,263	7.862	3.162	-0.085	-1.387	0.068	1.406	1.597	0.495	6.686	0.691	2	2.06
308	13.81	0	6	2	150	13,727	6.633	1.59	-0.092	-1.384	0.249	1.607	1.758	0.285	5.557	0.615	2	2.06
309	13.81	0	4	2	136	12,446	7.58	0.826	-0.967	-1	0.215	0.469	1.758	0.362	6.364	0.758	4	2.06

Annexes

310	13.38	0	5	0	84	-9,743	5.857	3.406	-1.41	0	-0.09	0	0	0.209	6.184	0.567	2	4.203
311	13.38	0	4	0	79	-9,163	8.074	2.26	-1.27	0	0.187	0	0	0.28	6.765	0.691	3	4.203
312	13.38	0	4	0	76	-8,815	4.688	2.815	-1.41	0	0.114	0	0	0.248	6.806	0.649	3	4.203
313	13.38	0	4	0	75	-8,699	5.404	3.027	-1.51	0	0.1	0	0	0.252	6.869	0.65	3	4.203
314	13.38	0	4	0	72	-8,351	8.179	2.347	-1.62	0	0.249	0	0	0.299	7.35	0.716	3	4.203
315	13.38	0	3	0	71	-8,235	9.458	2.215	-1	0	0.289	0	0	0.27	7.248	0.711	4	4.203
316	13.38	0	3	0	70	-8,119	10.04	2.446	-1.41	0	0.377	0	0	0.308	7.467	0.735	4	4.203
317	13.38	0	3	0	71	-8,235	10.76	1.598	-1.38	0	0.368	0	0	0.318	7.545	0.729	4	4.203
318	13.38	0	3	0	74	-8,583	8.22	1.591	-1	0	0.269	0	0	0.295	7.234	0.72	4	4.203
319	13.38	0	3	0	67	-7,771	11.01	2.363	-1.45	0	0.514	0	0	0.303	7.724	0.746	4	4.203
320	13.38	0	3	0	68	-7,887	14.31	2.216	-1.41	0	0.289	0	0	0.339	7.772	0.763	4	4.203
321	13.38	0	3	0	67	-7,771	11.93	2.478	-1.62	0	0.467	0	0	0.317	7.709	0.754	4	4.203
322	13.38	0	3	0	64	-7,423	12.87	2.362	-1.62	0	0.244	0	0	0.304	7.955	0.74	4	4.203
323	13.38	0	2	0	63	-7,307	8.16	2.535	-1.33	0	0.596	0	0	0.266	7.904	0.725	5	4.203
324	13.38	0	2	0	66	-7,655	6.454	1.903	-1	0	0.376	0	0	0.266	7.737	0.725	5	4.203
325	13.38	0	2	0	62	-7,191	8.095	2.828	-1.41	0	0.437	0	0	0.29	8.081	0.742	5	4.203
326	13.38	0	2	0	65	-7,539	9.941	2.768	-1.34	0	0.451	0	0	0.273	7.82	0.724	5	4.203
327	13.38	0	1	0	58	-6,727	6.558	3.194	-1	0	0.602	0	0	0.252	8.297	0.727	6	4.203
328	13.89	0	6	1	120	- 12,277	6.243	3.51	-0.9	-1.87	-0.12	0.9	0.621	0.286	6.219	0.558	2	3.186
329	13.89	0	5	1	114	- 11,663	6.738	3.252	-0.79	-1.86	0	0.9	0.621	0.287	6.39	0.582	2	2.274
330	13.89	0	5	1	104	-10,64	7.443	2.379	-1.11	-1.82	0.282	1.5	0.621	0.392	7.227	0.703	3	2.274
331	13.89	0	6	1	120	- 12,277	6.933	1.806	-0.67	-1.64	0.272	1.8	1.001	0.22	5.861	0.586	2	2.274
332	14.37	0	6	0	120	- 12,277	5.799	3.5	-0.94	-1.87	-0.2	0.9	0.336	0.243	6.255	0.555	2	3.186
333	14.37	0	6	0	120	- 12,277	4.347	1.86	-0.85	-1.74	0.125	1.8	0.588	0.218	6.108	0.58	2	2.274
334	17.2	0	6	0	1864	- 56,815	10.29	21.59	3.379	2.733	1.486	0.931	3.44	2.497	6.534	0.896	2	6.238
335	11.79	2	0	0	751	5,499	4.095	0.44	-0.62	-1.12	0.73	0.833	0	0.594	2.099	0.757	0	2.066

Annexes

336	11.79	2	0	0	751	5,499	1.975	0.383	-0.62	-1.12	0.791	1.667	0	0.626	2.127	0.761	0	2.066
337	11.99	2	0	0	540	4,45	4.387	0.427	-0.71	-1.32	0.934	0	0.859	0.458	2.365	0.788	0	3.259
338	12.59	1	2	0	250	0	5.239	0.766	-1	-1.57	0.663	0	0.519	0.501	3.147	0.861	1	3.259
339	12.59	1	1	0	239	0	10.77	0.362	-1	-1.46	0.577	0	0.519	0.473	3.34	0.892	2	3.259
340	12.59	1	1	0	247	0	5.971	0.44	-0.93	-1.49	0.81	0	0.859	0.383	3.141	0.802	2	3.259
341	12.59	1	0	0	243	0	6.432	0.853	-0.8	-1.36	0.534	0	1.112	0.369	3.343	0.724	3	3.259
342	12.59	1	0	0	243	0	7.089	0.677	-0.67	-1.42	0.73	0	1.112	0.336	3.221	0.695	3	3.259
343	12.59	1	0	0	243	0	4.002	0.615	-0.22	-1.36	0.695	0	1.112	0.332	3.171	0.695	3	3.259
344	14.38	0	6	0	120	- 12,277	5.675	3.413	-0.88	-1.84	-0.03	0	0.519	0.246	6.079	0.605	1	4.375
345	15.4	0	7	2	212	-17,55	7.581	3.847	0.177	-0.99	-0.26	0.873	1.597	0.415	6.207	0.605	1	3.289
346	15.4	0	6	2	194	-16,06	8.06	1.129	0.002	-1	0.615	1.91	1.758	0.357	6.28	0.725	3	2.377
347	14.98	0	6	0	120	- 12,277	6.81	4.114	-1	-1.88	-0.15	0	0	0.22	6.325	0.575	2	4.52
348	14.98	0	5	0	114	- 11,663	5.507	3.49	-1	-1.87	0.088	0	0	0.26	6.718	0.642	3	4.52
349	14.98	0	4	0	104	-10,64	10.35	2.924	-1	-1.85	0.279	0	0	0.287	7.308	0.712	4	4.52
350	14.98	0	3	0	98	- 10,026	9.821	1.588	-1	-1.84	0.273	0	0	0.316	7.927	0.747	5	4.52
351	14.98	0	2	0	82	-8,389	15.74	1.699	-1	-1.72	0.715	0	0	0.281	8.867	0.739	6	4.52
352	14.98	0	2	0	86	-8,798	14.87	1.694	-1	-1.76	1.191	0	0	0.29	8.711	0.743	6	4.52
353	14.98	0	2	0	88	-9,003	12.11	2.005	-1	-1.79	0.647	0	0	0.288	8.461	0.746	6	4.52
354	14.98	0	2	0	84	-8,594	13.76	3.484	-1	-1.73	0.552	0	0	0.326	8.915	0.762	6	4.52
355	15.49	0	7	1	165	-15,1	7.228	4.213	-0.5	-1.58	-0.17	0.833	0.621	0.295	6.353	0.567	2	3.503
356	15.49	0	6	1	158	- 14,459	6.682	3.848	-0.62	-1.55	-0.07	0.833	0.621	0.287	6.46	0.587	2	3.503
357	19.02	0	7	0	2446	- 67,452	9.655	16.6	3.59	2.915	1.588	0.939	3.533	2.23	6.443	0.855	2	6.689
358	15.04	1	4	4	750	0	3.374	1.096	1.46	0.014	0.946	1.3	2.224	0.607	2.819	0.721	0	2.005
359	12.39	2	0	0	751	5,499	2.198	0.419	-0.62	-1.12	1.032	0	0	0.536	2.169	0.749	0	3.386
360	13.59	2	0	0	751	5,499	5.691	0.758	-0.42	-1.09	0.773	0	0.859	0.491	2.546	0.812	0	3.562
361	13.59	2	0	0	698	5,698	5.968	0.505	-0.47	-1.19	0.777	0	0.859	0.527	2.559	0.889	1	3.562

Annexes

362	13.59	2	0	0	694	5,758	6.06	0.625	-0.14	-1.16	0.927	0	1.112	0.426	2.403	0.752	1	3.562
363	14.18	1	3	0	330	0	8.429	1.293	-0.49	-1.19	1.102	0	0.519	0.557	3.51	0.91	1	3.562
364	14.18	1	2	0	318	0	8.894	0.524	-1	-1	1.082	0	0.519	0.519	3.541	0.885	2	3.562
365	14.18	1	2	0	326	0	8.162	0.665	-0.5	-1.14	0.742	0	0.859	0.376	3.284	0.77	2	3.562
366	14.18	1	1	0	314	0	12.64	0.493	-0.92	-1	0.599	0	0.859	0.412	3.399	0.83	3	3.562
367	14.18	1	0	0	314	0	10.92	0.971	-0.17	-1.29	0.543	0	1.314	0.327	3.461	0.688	4	3.562
368	14.18	1	2	0	308	0	8.105	0.64	-0.65	-1.33	0.972	0	0.519	0.522	3.568	0.896	2	3.562
369	15.38	2	0	0	751	5,499	13.29	3.52	-0.62	-1.12	0.685	0	0	0.469	3.187	0.779	0	4.431
370	15.38	2	0	0	751	5,499	10.99	3.534	-0.62	-1.12	0.424	0	0	0.436	3.137	0.733	0	4.431
371	15.98	0	7	0	165	-15,1	6.746	3.233	-0.56	-1.53	-0.07	0	0.519	0.271	6.292	0.65	1	4.678
372	17	0	8	2	277	- 20,935	3.322	1.048	0.358	-0.63	0.104	0.825	1.597	0.411	6.453	0.607	1	3.593
373	16.58	0	7	0	165	-15,1	7.77	4.789	-0.62	-1.62	-0.23	0	0	0.236	6.439	0.58	2	4.823
374	16.58	0	4	0	126	- 11,531	13.13	2.978	-1	-1.48	0.388	0	0	0.336	8.547	0.758	5	4.823
375	16.58	0	3	0	115	- 10,524	19.37	4.943	-1	-1.53	1.096	0	0	0.322	8.916	0.762	6	4.823
376	16.58	0	3	0	127	- 11,622	12.46	2.089	-1	-1	0.331	0	0	0.323	8.427	0.759	6	4.823
377	17.09	0	8	1	220	- 18,213	8.26	4.742	-0.16	-1.25	-0.33	0.786	0.621	0.292	6.441	0.569	2	3.806
378	13.99	2	0	0	940	6,78	4.099	0.724	-0.02	-0.82	1.083	0	0.519	0.536	2.329	0.838	1	3.677
379	13.99	2	0	0	942	6,888	4.434	0.54	-0.02	-0.88	0.994	0	0.519	0.507	2.241	0.812	1	3.677
380	18.17	0	8	0	220	- 18,213	8.738	5.489	-0.29	-1.31	-0.29	0	0	0.243	6.534	0.585	2	5.115
381	18.69	0	9	1	286	- 21,615	9.133	5.594	0.123	-0.93	-0.3	0.75	0.621	0.306	6.553	0.577	2	4.098
382	14.99	2	1	0	961	9,803	9.545	0.232	1	-1	0.783	0	0	0.737	2.211	1.089	0	3.876
383	15.59	2	0	0	1163	8,361	6.698	0.664	0.064	-0.83	0.986	0	0.859	0.478	2.305	0.784	2	3.958
384	17.38	1	3	0	516	0	13.38	0.677	0.456	-0.61	1.754	0	1.112	0.534	3.827	0.896	3	4.135
385	17.98	3	0	0	2008	12,117	16.23	3.484	0	-0.56	0.591	0	0	0.537	2.844	0.85	2	5.004

Annexes

386	19.17	0	9	0	286	- 21,615	10.3	5.347	0	-0.9	-0.08	0	0.519	0.288	6.489	0.651	1	5.251
387	20.2	0	10	2	444	-28,58	10.46	5.93	0.628	-0.07	-0.35	0.758	1.597	0.41	6.537	0.614	1	4.165
388	19.77	0	9	0	286	- 21,615	9.699	6.197	0	-1	-0.33	0	0	0.252	6.612	0.588	2	5.396
389	20.28	0	10	1	364	- 25,307	10.19	6.125	0.361	-0.63	-0.39	0.722	0.621	0.303	6.612	0.579	2	4.379
390	16.59	2	2	0	1164	12,917	6.735	0.623	1	-0.53	1.071	0	0.859	0.828	2.382	1.124	0	4.148
391	21.37	0	10	0	364	- 25,307	10.66	6.914	0.241	-0.71	-0.36	0	0	0.259	6.679	0.592	2	5.668
392	21.88	0	11	1	455	- 29,288	11.16	6.825	0.559	-0.36	-0.41	0.7	0.621	0.307	6.678	0.583	2	4.651
393	16.99	3	0	0	3511	18,648	4.988	0.819	1	-0.41	1.265	0	0	0.677	1.906	0.839	0	4.332
394	16.99	3	0	0	3516	19,004	3.754	0.712	1.247	-0.38	1.382	0	0	0.65	1.854	0.819	0	4.332
395	20.58	1	2	0	710	0	18.59	1.92	-0.29	-1	-0.11	0	0.859	0.402	4.212	0.827	6	4.67
396	22.97	0	11	0	455	- 29,288	11.62	7.606	0.445	-0.45	-0.37	0	0	0.265	6.736	0.595	2	5.931
397	23.48	0	12	1	560	- 33,559	12.11	7.533	0.726	-0.12	-0.43	0.682	0.621	0.312	6.734	0.587	2	4.914
398	20.81	2	2	2	1950	19,726	19.13	2.617	1	0.213	0.711	0.453	1.406	0.926	2.883	1.013	2	3.306
399	24.56	0	12	0	560	- 33,559	12.58	8.314	0.618	-0.21	-0.41	0	0	0.271	6.785	0.598	2	6.187
400	25.08	0	13	1	680	- 38,119	13.08	8.217	0.867	0.091	-0.47	0.667	0.621	0.315	6.783	0.59	2	5.17
401	26.16	0	13	0	680	- 38,119	13.54	8.997	0.765	0	-0.44	0	0	0.277	6.828	0.6	2	6.437
402	26.16	0	6	0	468	- 26,235	31.76	3.418	-0.36	-1	1.695	0	0	0.453	10.82	0.829	9	6.437
403	26.67	0	14	1	816	- 42,969	14.03	8.908	0.986	0.274	-0.52	0.654	0.621	0.319	6.825	0.593	2	5.42
404	27.76	0	14	0	816	- 42,969	14.51	9.714	0.891	0.185	-0.51	0	0	0.28	6.865	0.602	2	6.68

Annexes

405	28.27	0	15	1	969	-48,108	15	9.625	1.089	0.435	-0.59	0.643	0.621	0.32	6.863	0.595	2	5.663
406	22.18	3	2	0	4362	39,946	20.35	0.416	1	1	1.21	0	0	1.036	2.181	1.269	0	5.165
407	22.18	3	2	0	4362	41,594	21.68	0.407	1	1	1.307	0	0	1.019	1.932	1.258	0	5.165
408	22.18	3	2	0	4362	42,143	21.96	0.399	1	1	1.352	0	0	0.828	1.852	1.139	0	5.165
409	29.78	0	16	2	1313	-58,498	3.08	2.142	1.274	0.73	0.125	0.66	1.597	0.415	7.032	0.625	1	5.687
410	29.36	0	15	0	969	-48,108	15.46	10.41	1	0.347	-0.58	0	0	0.285	6.898	0.603	2	6.918
411	29.87	0	16	1	1140	-53,537	4.414	2.141	1.176	0.575	0.105	0.633	0.621	0.323	7.058	0.597	2	5.901
412	30.96	0	16	0	1140	-53,537	16.32	11.03	1.094	0.491	-0.66	0	0	0.288	6.928	0.605	2	7.15
413	31.47	0	17	1	1330	-59,255	4.616	2.27	1.252	0.699	0.121	0.625	0.621	0.325	7.09	0.599	2	6.133
414	32.55	0	17	0	1330	-59,255	17.17	11.71	1.176	0.618	-0.73	0	0	0.292	6.954	0.607	2	7.378
415	33.07	0	18	1	1540	-65,263	4.795	2.4	1.319	0.808	0.147	0.618	0.621	0.327	7.118	0.601	2	6.361
416	34.15	0	18	0	1540	-65,263	18.34	12.51	1.247	0.731	-0.78	0	0	0.295	6.976	0.608	2	7.601
417	35.75	0	19	0	1771	-71,56	19.09	13.09	1.31	0.831	-0.81	0	0	0.298	6.998	0.609	2	7.819
418	37.35	0	20	0	2024	-78,147	20.3	13.83	1.365	0.92	-0.84	0	0	0.3	7.016	0.61	2	8.034
419	38.95	0	21	0	2300	-85,024	21.13	14.49	1.414	1	-0.85	0	0	0.303	7.034	0.611	2	8.245

Tableau B.1. Valeurs expérimentales et valeurs prédites par les modèles RQSP-RNA pour Tb et Tc des propriétés physicochimiques des composés organiques, ainsi que leurs rangs de répartition dans les ensembles d'apprentissage et de test pour chaque paramètre

ANEXES

ID	SAMPLES	Tb ex	Tb cal	SAMPLES	Tc exp	Tc cal
1	Test	269.1400	258.7001	Train	426.1500	433.6052
2	Train	215.2600	214.9421	Train	340.1500	329.0799
3	Test	295.9400	295.8629	Train	478.0000	477.8125
4	Test	191.7400	199.6753	Train	302.0000	300.3051
5	Train	243.3600	239.8278	Train	384.9500	372.7183
6	Train	296.9700	295.1647	Train	471.2000	480.8662
7	Train	349.7900	350.9536	Train	556.3500	557.8959
8	Train	257.6700	258.7561	Train	411.9800	420.7002
9	Train	232.3200	236.3876	Train	369.3000	370.5625
10	Train	282.0500	283.3781	Train	451.5800	445.2062
11	Train	334.3300	337.5367	Train	536.4000	536.5635
12	Train	191.0900	194.2875	Train	299.0100	309.2926
13	Train	298.8000	298.6182	Test	457.0000	440.4442
14	Train	312.9000	313.4212	Test	510.0000	484.1844
15	Train	221.5000	213.3148	Train	351.2500	345.1440

ANEXES

16	Train	253.8500	253.7797	Train	420.0000	423.3564
17	Train	373.7100	382.1770	Train	588.0000	588.7015
18	Train	276.6600	286.1438	Train	464.0000	465.4139
19	Train	248.9500	243.2131	Train	416.2500	410.4583
20	Train	194.8200	193.9313	Train	317.4200	318.2523
21	Train	315.6000	317.3160	Train	528.2000	529.2752
22						
23	Train	374.3500	373.7838	Train	588.1500	587.6215
24	Train	111.6700	114.5414	Train	190.5600	194.7651
25	Train	337.8500	340.0227	Train	512.5000	508.9762
26	Train	279.1100	282.4154	Train	469.9500	471.0957
27	Train	234.0400	242.5596	Train	353.1500	354.9418
28	Train	320.3100	322.1919	Train	487.8000	487.2382
29	Test	276.1700	276.3006	Train	418.5500	411.7253
30	Train	276.9200	277.0845	Test	418.8500	420.1018
31	Train	320.7500	320.5844	Train	487.2500	484.5098
32	Test	394.4000	404.6479	Train	620.0000	617.6882
33	Train	197.5100	203.9863	Train	306.4500	305.1877
34	Train	323.3500	325.2781	Test	496.0000	466.0801

ANEXES

35	Train	261.0500	262.2482	Train	395.6500	391.6122
36	Train	301.0500	300.7864	Train	456.9400	454.6480
37	Train	301.1500	302.7687	Train	461.6000	452.9973
38	Train	225.0400	232.5412	Train	339.1700	347.2894
39	Train	237.9000	234.3696	Train	354.4900	357.0813
40				Train	308.3000	310.5524
41	Test	320.8500	331.5648	Train	516.5000	513.7330
42	Train	418.2500	415.2821	Train	645.0000	639.3157
43	Train	187.5000	180.9932	Train	302.8000	303.1926
44	Train	247.0800	243.8305	Train	374.1800	375.8479
45	Train	250.1500	254.5709	Train	391.8000	393.2467
46	Test	259.2500	262.1865	Test	432.0000	450.0718
47	Train	263.9500	266.0691	Test	410.2900	407.8374
48	Train	305.1500	305.9258	Train	478.8500	481.1362
49	Train	347.2300	342.3826	Train	545.0000	542.9551
50	Train	387.0000	390.2384	Train	602.0000	607.7430
51	Train	225.8100	223.0603	Train	345.8800	353.8075
52	Test	278.1500	271.0997	Train	429.8000	428.9770

ANEXES

53	Train	354.8100	346.5414	Train	545.5000	543.2977
54	Train	169.4100	171.4690	Test	282.3400	304.6025
55	Train	404.5100	399.0126	Train	650.1500	655.7692
56	Train	330.4500	327.6699	Test	523.0000	517.9796
57	Train	356.5900	350.4866	Train	561.6000	550.1755
58	Train	249.1300	243.6995	Train	386.4400	387.6727
59	Train	294.1500	297.0343	Train	466.0000	459.5144
60	Train	283.6000	277.7754	Train	469.1500	459.2023
61	Train	391.0500	384.1285	Train	591.9500	590.7818
62	Train	304.9000	303.3518	Train	487.2000	496.6619
63	Train	311.4900	319.0140	Train	503.8000	513.7002
64	Train	285.4500	286.2674	Train	460.3500	459.7493
65	Test	235.4500	229.2415	Train	375.3100	380.2894
66	Test	184.5700	172.8144	Test	305.3200	303.0349
67	Test	351.4400	338.9494	Train	514.0000	505.1194
68	Train	248.3100	249.8833	Test	400.1000	403.1394
69	Test	470.3800	460.2712	Train	719.0000	711.2731
70	Train	308.1500	302.0778	Train	499.1500	475.3951
71	Train	310.4800	303.3015	Train	503.0400	502.1802
72	Test	289.7300	298.6754	Train	456.1500	463.0250
73	Train	280.0300	281.2667	Train	437.2000	424.9692

ANEXES

74	Test	443.1500	440.1378	Test	678.2000	639.0443
75	Train	390.4100	389.6649	Train	613.1000	621.3043
76	Train	236.4500	236.5270	Test	345.0500	349.4794
77	Train	256.7900	252.8812	Test	374.8300	385.7148
78	Train	279.4000	279.1099	Train	412.3800	420.1750
79	Test	272.4500	261.1893	Test	398.0700	404.5904
80	Train	255.5000	251.8989	Train	380.1100	385.3775
81	Train	288.4500	284.8510	Train	427.2000	426.6450
82	Test	298.4000	284.5405	Train	447.5700	430.4789
83	Train	302.1500	298.9532	Train	444.0300	444.7048
84	Test	350.4500	379.3072	Train	540.0000	535.3589
85	Train	367.9000	370.0987	Train	590.0000	586.0557
86	Train	249.9400	242.2664	Test	402.4000	395.3885
87	Train	238.6500	230.9442	Train	394.0000	383.1916
88	Train	370.2500	379.8038	Train	561.3000	565.9655
89	Train	225.4500	241.8646	Train	364.8500	385.6525
90	Train	240.3700	242.4043	Train	398.0000	398.1587
91	Train	369.5200	370.1257	Train	578.0000	576.4289
92	Train	370.2300	370.0665	Train	545.1000	555.7842

ANEXES

93	Test	329.2800	307.6389	Train	508.1000	513.5116
94	Train	322.1500	331.6262	Train	503.6000	518.2763
95	Train	307.6500	323.5006	Train	482.2500	497.3900
96	Train	414.3200	415.9655	Train	600.8100	593.2774
97	Train	330.0900	328.8913	Test	506.5500	516.4065
98	Train	327.4600	333.9571	Train	508.4000	522.7936
99	Train	363.4000	362.9125	Train	548.0000	537.4238
100	Train	319.6700	321.3139	Train	503.1500	511.8049
101	Train	425.1500	410.1509	Test	649.6000	638.0769
102	Train	231.0400	230.3837	Train	369.8300	372.7007
103	Train	370.3500	359.2316	Train	536.8000	514.5785
104	Train	355.3000	345.4965	Train	508.3000	503.0468
105	Train	280.5000	287.2807	Test	437.8000	451.3636
106	Train	315.0000	319.9176	Test	480.6000	487.1187
107	Train	487.3700	490.6115	Train	718.2000	716.1016
108	Train	561.0000	558.9693	Train	850.0000	849.1872
109	Train	339.8000	343.1602	Train	533.0000	545.3793
110	Train	321.7000	322.7729	Train	496.9500	499.9440
111	Train	304.9200	309.6148	Train	471.8500	474.7384
112	Train	276.0200	277.7030	Train	433.2500	429.8074
113	Train	431.1500	435.9624	Train	630.0000	605.3953

ANEXES

114	Train	267.1700	267.1768	Train	388.3700	393.6789
115	Train	304.5000	311.8389	Train	490.1500	530.7019
116	Train	357.3100	353.1790	Test	579.3500	602.6114
117	Test	403.0000	387.0390	Train	639.7500	600.3874
118	Train	281.2200	274.3519	Train	440.0000	431.0822
119	Train	284.0000	276.9177	Train	452.0000	441.0755
120	Train	268.7400	267.0858	Train	425.0000	431.9691
121	Train	345.6500	347.1112	Train	519.1300	521.3833
122	Test	412.7000	417.9226	Train	606.0000	603.7520
123	Train	390.7400	391.4757	Train	585.4000	586.7589
124	Train	285.6600	276.2123	Train	459.9300	453.7360
125	Train	266.9100	274.5268	Test	419.5000	430.2715
126	Test	274.0300	272.4202	Train	428.6000	435.7556
127	Train	276.8700	275.8531	Train	435.5000	430.7151
128	Train	266.2500	277.6057	Train	417.9000	416.6479
129	Train	347.9400	359.5171	Train	537.2000	536.3269
130	Train	352.7300	344.9662	Test	536.7000	526.8313
131	Test	339.1200	325.6546	Train	540.1500	525.5294
132	Train	436.4200	439.1634	Train	615.7000	618.1212
133	Test	427.6500	432.0980	Train	605.0000	613.0542

ANEXES

134	Train	378.1500	372.7672	Train	590.0000	574.8952
135	Train	374.4700	376.9139	Train	587.0000	594.3718
136	Train	352.6000	357.3894	Train	530.6000	541.2086
137	Test	350.2100	357.0083	Train	523.3000	526.8128
138	Train	353.9700	352.2946	Test	538.0000	538.7707
139	Train	341.2500	339.4815	Train	520.6000	526.1704
140	Test	359.7200	358.9654	Train	568.5500	569.2292
141	Train	272.6600	269.3339	Train	425.1200	431.5345
142	Test	261.4300	272.0644	Train	407.8000	407.1383
143	Train	421.7200	424.5866	Test	656.3000	658.2545
144	Test	391.9000	382.6348	Train	563.1000	550.2699
145	Test	380.8100	373.2197	Train	547.8000	531.8017
146	Train	355.5700	352.1881	Train	506.2000	512.3251
147	Train	372.9000	372.5997	Train	535.9000	526.7581
148	Test	307.5800	312.7852	Train	466.7000	481.0254
149	Train	357.7500	352.5031	Train	536.1500	552.5040
150	Train	469.5700	473.3730	Train	680.0000	671.4142
151	Train	481.3800	474.9599	Train	676.0000	664.9820
152	Test	518.1500	510.2594	Train	753.0000	747.6748
153	Train	365.2500	366.2516	Test	557.1500	566.4036
154	Train	351.2000	348.8860	Train	531.9000	552.2779

ANEXES

155	Test	328.6000	337.1978	Train	496.6000	501.3915
156	Train	340.8800	332.2964			
157	Train	317.5500	325.0142	Train	483.9000	490.7052
158	Train	541.5400	538.7603	Train	736.6000	748.5862
159	Train	302.4000	302.5475	Test	423.1000	436.4889
160	Train	434.8500	431.5964	Test	670.1500	658.0633
161	Test	388.4100	401.5065	Test	619.9500	620.9370
162	Train	313.3300	313.0338	Train	481.2000	480.9892
163	Train	317.3800	311.3896	Test	507.0000	501.5631
164	Train	403.8000	399.2219	Train	624.5000	619.9486
165	Train	414.7100	413.6759	Test	610.3000	605.8612
166	Train	477.4200	459.2478	Train	721.6000	716.6038
167	Train	322.4000	320.4344	Train	511.7000	518.9352
168	Train	303.2200	309.6879	Train	464.8000	473.4135
169	Test	310.0800	313.3888	Train	475.0000	473.2633
170	Train	309.4900	310.5680	Train	474.2000	474.6164
171	Train	304.3100	303.8033	Train	465.0000	464.3222
172	Train	311.7000	309.9774	Train	470.0000	471.4562
173	Test	293.2000	302.7928	Train	452.7000	470.8479
174	Train	413.9500	420.0046	Train	619.5000	633.2240
175	Test	375.4100	377.7807	Train	561.1900	546.9720

ANEXES

176	Train	375.1400	372.6506	Train	560.9500	560.8273
177	Train	367.4800	371.9930	Train	552.8000	562.1026
178	Test	352.9400	364.8710	Train	537.0000	545.1640
179	Train	458.9500	456.1670	Train	639.1600	631.6175
180	Train	449.6800	454.6448	Train	629.0900	622.1287
181	Train	375.9000	377.1238	Train	554.5000	559.0205
182	Train	372.2500	377.6527	Train	546.0000	541.9117
183	Train	365.4500	369.4667	Train	540.7000	552.0675
184	Train	374.6500	370.2648	Train	549.7300	544.3093
185	Test	371.2200	365.7608	Train	551.3500	559.1614
186	Train	361.6500	374.1116	Train	532.0000	528.5471
187	Train	380.6500	370.4095	Train	571.2000	563.0299
188	Train	309.2100	309.9798	Train	469.7000	456.3303
189	Train	300.9900	302.8753	Train	460.4000	455.2915
190	Train	282.6500	291.1000	Test	433.8000	409.9178
191	Train	410.9000	404.3475	Train	588.1000	582.8255
192	Train	392.2000	396.9591	Train	561.0000	558.2291
193	Train	401.8500	399.5455	Train	575.4000	581.1458
194	Train	375.2000	377.5699	Train	543.7000	551.1065
195	Train	404.1500	392.3722	Test	577.2000	560.3607

ANEXES

196	Train	383.8800	385.0664	Train	556.1000	559.7395
197	Train	337.0100	335.7455	Train	500.2300	496.3657
198	Train	328.2000	316.7195	Train	497.1000	481.2316
199	Train	388.4500	395.3046	Train	559.6000	556.9255
200	Train	353.4100	354.7226	Train	516.7300	515.2687
201	Test	330.3000	331.0382	Test	449.5500	457.3537
202	Train	446.2300	440.1220	Train	683.9500	685.9001
203	Test	453.5700	442.8241	Train	705.0000	701.5329
204	Train	404.8700	406.3455	Train	632.3500	631.7180
205	Train	461.6000	465.8847	Train	721.1500	725.0785
206	Train	483.9500	483.5620			
207	Train	353.2400	360.0300	Train	562.0500	553.0027
208	Train	454.9900	457.5309	Test	694.2500	684.7120
209	Train	457.2500	450.2631	Train	705.0000	711.0428
210	Test	402.5500	414.1524	Test	621.0000	620.8155
211	Test	417.2900	418.5936	Train	645.0000	624.1217
212	Train	418.5000	418.1181	Train	646.1500	654.1643
213	Train	445.1500	442.4437	Train	684.2000	674.2774
214	Train	356.1200	353.3449	Train	560.4000	553.1306
215	Train	428.5800	423.2174	Train	653.0000	639.2159
216	Train	402.9500	395.5180			

ANEXES

217	Test	353.8700	356.7474	Test	553.8000	566.4581
218	Test	344.9600	345.1168	Train	532.7000	537.3437
219	Train	336.6300	334.6301	Train	504.0000	496.4788
220	Test	327.0100	332.2007	Test	496.0000	491.1733
221	Train	434.0000	441.8251	Train	650.1000	659.7860
222	Train	400.7000	399.2985	Test	587.1000	577.1517
223	Train	396.6500	398.3098	Train	582.8200	575.1049
224	Train	389.1500	398.0528	Train	574.6000	567.8154
225	Train	366.9700	369.5252	Train	536.0000	524.5213
226	Train	478.8500	475.0680	Train	660.2000	652.3734
227	Test	394.6500	400.3503	Train	571.0000	569.5282
228	Train	395.6500	395.9697	Train	568.6000	562.9266
229	Train	383.0000	389.0111	Test	553.1500	563.5693
230	Train	399.2600	392.6281	Train	575.4000	577.9444
231	Train	389.8000	379.2227	Test	560.8000	562.8027
232	Train	405.4500	403.1780	Train	576.0000	603.8090
233	Train	429.7400	425.6358	Train	607.3000	622.3210
234	Test	341.8600	342.8859	Test	507.6000	510.9702
235	Train	333.4100	334.3154	Train	497.7000	493.1518
236	Test	336.4200	334.5465	Test	504.6000	509.7277

ANEXES

237	Test	322.8800	326.7482	Train	489.0000	493.4732
238	Test	331.1300	333.8066	Test	500.0000	507.6810
239	Train	429.9000	428.6353	Train	611.3000	604.5351
240	Train	412.4000	418.2566	Train	585.3000	595.7353
241	Train	406.1500	418.2338	Train	582.4000	589.1336
242	Test	421.1500	419.4180	Test	604.4000	595.1729
243	Train	404.8500	408.7962	Train	574.4000	571.3243
244	Train	341.4500	347.7027	Test	500.0500	491.9938
245	Test	363.2300	359.5624	Train	530.6000	517.8600
246	Test	376.6500	383.5551	Train	539.7000	522.1241
247	Train	361.9200	362.2581	Test	535.1500	513.1508
248	Test	382.0000	387.6971	Test	550.0000	550.5955
249	Test	608.5400	609.8359	Train	772.1000	748.6166
250	Train	355.6600	357.5182	Train	475.6500	476.1050
251	Train	560.1500	563.5563	Train	792.0000	804.6565
252	Train	464.1500	463.3772	Train	702.3000	701.4720
253	Train	451.9000	447.2534	Train	695.0000	688.6799
254	Train	435.6500	439.0616	Train	660.0000	676.9141
255	Train	383.7800	391.8274	Test	591.7500	599.2885
256	Train	426.7300	416.4443	Train	645.6000	631.5879
257	Train	478.6000	489.2841	Train	713.0000	719.2494

ANEXES

258	Train	464.1500	474.1551	Train	697.5500	714.6694
259	Train	475.4300	470.9368	Test	705.8500	702.0847
260	Train	475.1300	473.1595	Test	704.6500	717.0295
261	Train	417.2000	427.1853	Train	623.7500	641.8369
262	Test	420.5500	423.6998	Train	598.0000	594.1710
263	Test	391.9400	388.5516	Train	604.2000	594.9691
264	Train	374.0800	376.0260	Train	572.1000	567.0231
265	Train	376.6200	376.1712	Train	569.5000	571.5844
266	Train	363.9200	366.4744			
267	Train	364.8800	366.4888	Train	553.0000	553.5227
268	Train	366.7900	362.5192	Train	537.4000	532.9918
269	Train	418.2600	418.8066	Train	594.6000	597.2849
270	Test	496.1500	492.1124	Train	677.3000	666.8922
271	Train	407.4500	415.1383	Train	587.9500	583.2930
272	Train	415.8500	415.8165	Train	593.7000	590.2241
273	Test	408.6500	407.8945	Train	579.4000	577.8038
274	Train	415.1500	414.7584	Train	586.1000	590.5858
275	Train	371.5300	371.1855	Train	540.2000	540.4049
276	Train	363.2000	361.9394	Train	530.4000	531.6251

ANEXES

277	Train	365.0000	362.7339	Train	535.2000	534.6996
278	Train	366.6200	367.0015	Train	540.6000	535.7241
279	Train	352.3400	351.0140	Train	520.5000	526.1262
280	Train	362.9300	361.6272	Train	537.3000	543.1444
281	Train	353.6400	356.9718	Test	519.8000	516.1054
282	Train	359.2100	358.8785	Test	536.4000	542.6492
283	Train	354.0300	357.7754	Train	531.1000	534.8652
284	Train	448.6000	446.7906	Train	632.3000	626.6153
285	Train	432.9000	441.3464	Train	608.3000	612.5882
286	Train	376.4500	376.0932	Train	502.2000	502.3438
287	Train	418.3100	413.2256	Test	635.2000	646.4819
288	Train	475.2600	475.7837	Train	709.6000	706.6533
289	Train	547.6500	558.6971	Train	775.0000	779.3154
290	Train	409.3100	412.0950	Train	617.2600	615.9542
291	Train	417.4400	416.2874	Train	630.3000	626.8462
292	Train	412.2200	412.4986	Train	617.0000	626.1989
293	Test	411.4300	412.7735	Train	616.2000	622.4997
294	Test	477.6700	488.2019	Train	703.0000	706.6816
295	Train	491.5700	486.7178	Train	716.4500	704.3885
296	Train	491.1400	489.5337	Train	716.4500	701.2559

ANEXES

297	Test	490.0700	488.1883	Train	722.9500	717.9484
298	Train	484.1300	485.9345	Test	707.6500	703.0970
299	Train	484.3300	487.3932	Train	707.0500	714.7956
300	Train	474.2200	485.7854	Train	701.0500	706.5968
301	Train	500.1500	488.1479	Test	729.9500	716.7238
302	Train	494.8900	482.9864	Train	715.6500	705.5342
303	Train	424.2900	419.9299	Train	647.2000	636.4644
304	Test	392.5100	394.9772	Train	587.7000	597.6820
305	Train	394.4100	389.1251	Train	566.9000	565.7885
306	Test	512.8500	506.5185	Train	694.2600	683.4507
307	Test	500.6600	492.8199	Test	674.6000	685.6499
308	Train	438.1500	437.2099	Train	616.0000	616.1152
309	Train	420.4500	417.0606	Train	601.8900	593.5707
310	Train	398.7700	397.7273	Train	568.7000	570.4154
311	Train	390.8000	390.5697	Train	559.7000	557.1256
312	Test	392.0800	396.9470	Test	563.6000	569.7128
313	Train	390.8600	399.0981	Train	561.7000	568.6584
314	Train	391.6900	394.4793	Train	565.5000	568.6576
315	Train	379.9900	376.4982	Train	549.8000	552.1712
316	Train	388.7600	389.2688	Train	563.5000	568.1740

ANEXES

317	Train	382.5800	384.6306	Train	553.5000	554.8009
318	Train	382.2600	382.5159	Train	550.0000	553.9234
319	Train	385.1200	383.1286	Test	562.0000	567.3284
320	Train	390.8800	389.6217	Train	568.8000	569.9568
321	Train	388.8000	390.6899	Test	567.1000	570.7832
322	Train	391.4200	390.6932	Test	576.5000	575.3725
323	Test	383.0000	382.0946	Train	563.5000	570.3964
324	Train	372.3900	369.1145	Train	543.8000	534.0926
325	Test	387.9200	384.7931	Train	573.5000	573.7311
326	Train	386.6200	388.8619	Train	566.4000	574.5544
327	Train	379.4400	384.1525	Train	568.0000	559.5230
328	Train	467.1000	467.1344	Train	652.3000	647.8572
329	Train	452.9000	457.5898	Train	629.8000	639.8206
330	Train	457.6000	455.8411	Train	640.4000	636.9871
331	Train	414.1500	412.3760	Train	584.1000	579.3000
332	Train	452.7500	441.2060	Train	641.0000	662.1949
333	Train	432.0000	437.5316	Train	602.3000	606.1838
334	Train	398.4500	394.1901	Test	523.9000	522.2366
335	Train	510.3100	513.2399	Train	782.1500	795.3849

ANEXES

336	Train	516.3700	512.9469	Train	803.1500	794.0115
337	Train	451.1200	455.9684	Train	684.9000	695.7692
338	Train	432.3900	433.6357	Train	638.3500	633.5339
339	Train	425.5600	428.6387	Train	631.0000	640.7482
340	Train	435.1600	434.7863	Train	640.2000	639.7298
341	Test	449.2700	442.5443	Train	664.5000	653.0961
342	Train	442.5300	438.4924	Test	649.1000	644.6268
343	Train	437.8900	432.0628	Train	637.3000	645.3089
344	Train	420.0200	414.3558	Train	593.1000	593.6989
345	Train	528.7500	522.4199	Test	710.7000	699.9953
346	Train	450.6500	454.1989	Train	618.8300	622.5989
347	Test	423.9100	422.6792	Train	594.6000	595.8847
348	Test	416.4500	407.5161	Train	582.8700	584.4393
349	Train	405.8400	405.4770	Train	576.7000	572.6189
350	Train	397.2400	396.2539	Train	569.8000	569.7059
351	Train	413.4400	411.5503	Train	607.5000	610.6489
352	Test	406.1800	408.3843	Train	592.6000	595.8709
353	Train	395.4400	384.6392	Test	574.6000	549.4416
354	Train	414.7000	413.3486	Train	607.5000	604.1662

ANEXES

355	Train	485.2000	486.3115	Train	670.9000	666.8050
356	Train	471.7000	480.9731	Train	649.5000	662.8443
357	Train	417.3500	422.2308	Train	542.3500	539.5482
358	Train	559.2000	560.0942			
359	Test	491.1400	507.0055	Train	748.4000	756.8250
360	Train	480.7700	482.2050	Test	720.0000	719.0195
361	Train	463.7500	460.1661	Train	694.1000	702.5634
362	Train	475.1500	474.3950	Train	711.2000	704.4560
363	Test	456.4500	449.8505	Train	660.5000	659.0688
364	Train	445.9400	447.9442	Test	650.0000	656.1365
365	Train	456.9400	463.3570	Train	657.9000	665.8730
366	Train	450.2800	453.1587	Test	652.0000	651.0775
367	Train	469.9900	466.3016	Test	676.0000	664.5028
368	Test	446.4800	454.1716	Test	664.5400	672.5426
369	Test	468.9600	467.8013	Train	703.6000	701.8153
370	Train	460.4600	464.7443	Test	687.0000	711.4421
371	Train	443.7500	442.3972	Train	616.6000	618.2842
372	Train	543.1500	553.6018	Train	722.1000	719.9218
373	Train	447.2700	446.7233	Train	617.7000	617.2371
374	Test	428.8300	444.6518	Train	609.5000	610.7640

ANEXES

375	Train	433.4600	432.4777	Train	623.0000	608.3922
376	Train	410.6100	414.0963	Train	581.4000	584.4737
377	Train	503.0000	504.1594	Test	688.0000	686.3380
378	Train	517.8300	520.8353	Train	772.0000	769.3307
379	Train	514.2600	521.8666	Train	761.0000	766.3983
380	Test	469.0500	468.7257	Train	639.0000	636.1852
381	Train	520.3000	522.6361	Train	703.9000	701.8537
382	Train	528.1500	519.5888	Test	773.0000	787.9976
383	Train	536.1500	537.5124	Train	775.0000	765.6390
384	Train	489.0500	488.5604	Train	678.0000	686.9777
385	Train	476.4400	474.4537	Train	708.0000	710.4310
386	Train	486.1500	490.3051	Train	657.1000	658.2712
387	Train	571.8500	565.1596	Train	743.0000	741.5065
388	Train	489.4500	489.4457	Test	658.0000	653.4049
389	Train	537.1000	538.2698	Train	718.7000	718.7161
390	Train	537.4200	540.7987	Test	778.0000	789.0872
391	Train	508.6300	509.1402	Train	675.0000	669.9339
392	Test	553.4000	554.3745	Train	732.4000	733.7531
393	Train	612.7000	608.9643	Train	893.0000	859.8383
394	Train	615.1800	618.0264	Train	873.0000	871.0264

ANEXES

395	Train	510.4300	509.3673	Train	708.0000	702.6773
396	Train	526.7400	527.3033	Test	693.0000	685.6786
397	Train	569.0000	569.4405	Train	745.3000	747.8348
398	Train	633.6500	634.7112			
399	Test	543.9100	544.7599	Test	708.0000	701.1413
400	Test	583.9000	583.9523	Train	757.3000	761.1463
401	Train	560.2000	561.3024	Train	722.0000	715.9866
402	Train	519.5000	520.2699	Train	692.0000	680.7774
403	Train	598.0000	598.2222	Test	768.6000	773.5643
404	Test	575.7000	577.0686	Test	735.3000	730.3181
405	Train	611.3000	611.7743	Train	779.2000	784.8885
406	Train	609.1500	611.1685	Train	857.0000	886.5842
407	Test	648.1500	649.4094	Test	883.0000	886.9033
408	Train	655.1500	653.5450	Train	908.0000	896.1036
409	Train	647.1500	650.1779	Test	803.0000	808.8690
410	Train	590.4000	591.9020	Test	747.8000	743.8793
411	Train	623.6000	621.1996	Train	789.3000	796.0249
412	Train	604.5000	606.0656	Train	759.5000	757.0029
413	Test	635.1000	632.3906	Train	798.8000	804.0679
414	Train	617.8000	619.2000	Train	770.6000	769.4473
415	Train	645.5000	643.2232	Train	807.7000	811.1634

ANEXES

416	Train	630.6000	631.0390	Train	781.0000	781.2496
417	Train	642.8000	642.4219	Test	790.9000	792.1279
418	Train	654.5000	652.6325	Train	800.3000	802.2750
419	Train	665.7000	662.8624	Train	809.3000	811.5384

Tableau A.1. Valeurs expérimentales et valeurs prédites par les modèles RQSP-RNA pour PC et Vc des propriétés physicochimiques des composés organiques, ainsi que leurs rangs de répartition dans les ensembles d'apprentissage et de test pour chaque paramètre

ANEXES

ID	SAMPLES	PC ex	PC cal	SAMPLES	Vc exp	Vc cal
1	Train	4254.0000	4282.8002	Train	246.0000	257.3696
2	Train	3970.0000	3941.8172	Test	200.0000	199.0567
3	Test	4070.0000	3983.2238	Test	249.0000	252.5911
4				Test	180.2800	170.4900
5	Train	3870.0000	3893.7170	Train	217.0000	204.5660
6	Train	4125.0000	4198.5186	Train	248.0000	233.5308
7	Train	4408.0000	4407.3882	Train	276.0000	273.3954
8	Train	4560.0000	4676.2613	Train	167.0000	186.9565
9	Train	5132.0000	5113.2584	Train	166.0000	159.6883
10	Train	4971.0000	4981.5995	Train	196.0000	193.3631
11	Test	5184.0000	5132.6110	Train	239.0000	223.6142
12	Train	5472.0000	5354.0213	Train	132.0000	127.5466
13	Test	4816.0000	4809.5979	Train	135.0000	118.1174
14	Train	5400.0000	5390.4956	Train	185.0000	181.5324
15	Train	6080.0000	6190.3458	Train	123.0000	121.9848
16	Train	5784.0000	5719.9233	Train	85.1000	108.5677
17	Train	6590.0000	6557.3567	Train	125.0000	118.1709
18				Train	152.0000	163.9957

ANEXES

19	Test	6929.0000	6976.5057	Test	141.0000	141.0451
20	Train	6680.0000	6548.9837	Train	113.0000	116.4219
21	Train	5875.0000	5952.0561	Train	175.0000	185.5214
22	Train	6600.0000	6629.0264	Train	163.0000	150.4397
23				Train	173.0000	162.3566
24	Train	6310.0000	6311.2181	Train	98.6000	106.1390
25	Train	4599.0000	4664.5690	Test	117.0000	122.3051
26	Train	8084.0000	8092.3185	Train	145.0000	156.7799
27	Train	7230.0000	7260.4636	Train	252.0000	255.9462
28	Train	3157.0000	3036.5213	Train	341.0000	331.8446
29	Train	3393.0000	3422.9832	Train	294.0000	293.1805
30	Train	3300.0000	3228.9324	Train	294.0000	292.9323
31	Train	3260.0000	3234.5737	Train	325.0000	327.4318
32	Train	3410.0000	3382.0033	Train	248.0000	269.5720
33	Train	4490.0000	4505.6951	Test	172.0000	175.9046
34	Train	3944.0000	3855.7615	Train	296.0000	298.7947
35	Train	3920.0000	3825.9271	Train	243.8100	244.5625
36	Train	3660.0000	3740.8297	Train	278.0000	275.7301
37	Train	3676.0000	3829.3368	Train	278.0000	276.5399

ANEXES

38	Train	3610.0000	3622.0079	Train	211.3000	213.2644
39	Train	3620.0000	3676.4710	Test	212.0000	230.3559
40	Train	3376.0000	3385.7636	Train	112.0000	108.1642
41	Train	6138.0000	6116.2591	Train	224.0000	210.5683
42	Test	5510.0000	5810.5065	Train	325.0000	309.3538
43	Train	4090.0000	4254.5418	Train	154.0000	154.5866
44	Train	4460.0000	4479.6410	Test	198.8000	201.9079
45	Train	4056.0000	3825.5069	Train	191.0000	201.2822
46	Train	4640.0000	4448.9594	Train	179.0000	169.8254
47	Train	5670.0000	5607.4501	Test	225.0000	223.5113
48	Train	4041.0000	4011.0079	Train	253.0000	255.4708
49	Train	4340.0000	4128.6009	Train	281.0000	279.2996
50	Train	4300.0000	4327.7545	Train	281.0000	283.6729
51	Test	4480.0000	4654.0156	Train	195.0000	190.5926
52	Train	3764.0000	3889.3315	Train	179.0000	189.6410
53	Train	4850.0000	4860.3646	Train	193.0000	183.9436
54	Test	5041.0000	5210.4066	Train	131.0000	130.4796
55				Test	261.6000	273.1029
56	Train	5477.0000	5460.4435	Train	240.0000	239.0848

ANEXES

57	Test	5070.0000	4921.5258	Train	220.0000	242.4506
58	Train	5370.0000	5401.7730	Train	179.0000	176.7393
59	Train	4520.0000	4620.5562	Train	154.0000	163.8901
60	Train	5570.0000	5719.5366	Train	140.3000	128.4007
61	Train	7190.0000	7160.8500	Train	177.0000	171.8444
62	Train	5786.0000	5746.7446	Train	172.0000	178.2956
63	Train	6000.0000	5999.8218	Train	204.0000	218.4956
64	Train	5565.0000	5581.6242	Train	192.0000	192.0550
65	Test	5270.0000	5300.6821	Test	159.0000	163.7032
66	Train	5028.0000	4994.0615	Train	145.5000	144.3503
67	Test	4872.0000	4707.2090	Train	168.0000	169.6019
68	Train	6137.0000	6053.6001	Train	170.0000	171.5956
69	Train	5370.0000	5321.4315	Train	187.0000	194.9393
70	Test	8200.0000	8147.7957	Train	207.0000	202.0215
71	Test	5490.0000	5750.4062	Train	201.0000	206.6048
72	Train	5530.0000	5529.3419	Train	206.0000	192.6769
73	Train	5620.0000	5710.3340	Train	180.0000	193.5704
74	Test	5340.0000	5358.1013	Train	225.0000	212.5708
75	Test	7124.0000	7701.0303	Train	202.0000	229.8365
76	Train	6707.0000	6740.8050	Train	299.0000	295.0613
77	Test	2680.0000	2554.0023	Test	274.0000	281.8896

ANEXES

78	Train	2912.0000	2962.2490	Train	270.0000	268.3597
79	Test	3412.0000	3586.9471	Train	266.0000	269.5810
80	Test	3219.0000	3226.1132	Test	273.2000	265.6624
81	Train	3137.0000	3371.4835	Train	259.0000	263.7949
82	Train	3640.0000	3705.3215	Train	256.0000	262.9467
83	Train	3925.0000	3831.3654	Train	289.0000	292.2018
84	Train	3420.0000	3354.1694	Train	216.0000	210.5586
85	Train	4660.0000	4690.8222	Train	190.9400	195.8566
86	Train	6100.0000	6067.4385	Train	164.0000	167.8012
87	Train	5630.0000	5414.2175	Train	165.0000	168.6066
88	Train	5250.0000	5246.7386	Train	242.0000	228.8097
89	Train	4260.0000	4157.6082	Train	185.0000	182.5820
90	Train	4600.0000	4865.5551	Train	162.0000	159.1040
91	Train	5540.0000	5660.1120	Train	289.7100	286.1047
92	Train	4650.0000	4285.5716	Train	208.0000	209.9662
93	Train	5620.0000	5385.2365	Train	213.0000	216.4193
94	Test	4700.0000	4944.2413	Train	204.0000	216.8680
95	Test	5038.0000	4797.0685	Train	186.0000	187.1217
96	Train	4920.0000	5031.3587	Train	235.0000	226.4097
97	Test	4668.0000	4512.8796	Train	228.0000	225.6680

ANEXES

98	Train	4750.0000	4640.0322	Train	229.0000	220.5990
99	Train	4740.0000	4905.9477	Train	251.0000	250.8188
100	Test	4500.0000	4574.1750	Train	243.0000	240.2655
101	Train	4425.0000	4731.3011	Train	261.9900	245.0128
102	Train	4420.0000	4449.6198	Train	200.0000	194.2681
103	Train	4248.0000	4259.7300	Train	219.0000	225.0720
104	Train	5169.0000	5053.5722	Train	222.0000	221.0566
105	Train	4765.0000	4769.4283	Train	221.0000	219.9413
106	Train	4400.0000	4471.6266	Train	213.0000	245.4460
107	Train	3950.0000	3958.7695	Train	239.0000	247.9977
108	Train	6550.0000	6530.6439	Test	264.0000	265.0414
109	Test	7500.0000	7633.8817	Train	254.0000	261.5060
110	Train	4260.0000	4478.1703	Train	258.0000	244.0682
111	Train	4740.0000	4642.4110	Test	221.0000	238.8204
112	Train	4540.0000	4501.9128	Train	254.0000	240.5881
113	Train	4070.0000	3856.4875	Train	253.0000	257.0870
114	Train	5220.0000	5193.8555	Train	324.8000	321.4041
115	Train	2778.0000	2772.9185	Test	218.0000	203.5722
116	Train	5500.0000	5615.6444	Train	219.0000	231.2485
117	Train	5690.0000	5668.7819	Train	230.0000	230.1122
118	Train	4600.0000	4572.7624	Train	208.0000	222.1384

ANEXES

119	Test	4360.0000	4527.5977	Train	220.0000	226.0058
120	Test	4320.0000	4437.7164	Test	221.0000	217.7176
121				Test	270.0000	273.2711
122	Train	3958.0000	4162.1523	Train	304.0000	306.9085
123	Train	4000.0000	3829.4978	Train	291.0000	283.9982
124	Train	3880.0000	3853.5970	Test	210.0000	206.6999
125	Train	4980.0000	4961.8239	Train	241.0000	239.7857
126	Train	4020.0000	4128.9661	Train	238.0000	235.1964
127	Test	4100.0000	4255.1638	Train	234.0000	238.1339
128	Train	4210.0000	4237.0407	Train	239.0000	235.8175
129	Train	4000.0000	3926.3181	Test	258.0000	276.7551
130	Train	4410.0000	4199.3103	Train	267.0000	267.2160
131	Train	4207.0000	3986.1371	Test	224.0000	232.3834
132	Train	5190.0000	5138.9813	Train	293.0000	286.3094
133	Train	4060.0000	3918.5367	Train	292.0000	281.9195
134	Train	3700.0000	4042.4403	Train	239.0000	240.7638
135	Test	5150.0000	5387.1967	Train	238.0000	246.8360
136	Test	5208.0000	5224.3320	Train	282.0000	281.0738
137	Train	4004.0000	4017.6573	Train	286.0000	284.8507
138	Test	3880.0000	3829.8746	Test	285.0000	290.1810
139	Train	4020.0000	4166.5746	Train	300.0000	292.2925

ANEXES

140	Train	3900.0000	3654.5897	Test	249.0000	255.3923
141	Train	5610.0000	5714.4573	Train	255.0000	251.2759
142	Test	3796.0000	3712.5983	Train	259.0000	247.5997
143	Train	3640.0000	3647.6228	Train	267.5100	273.0143
144	Train	5420.0000	5365.3329	Train	273.0000	277.8087
145	Test	4414.0000	4459.3074	Train	274.0000	276.1041
146	Train	4295.0000	4414.0557	Test	275.0000	270.1999
147	Test	3972.0000	4118.9402	Test	270.0000	274.4099
148	Train	4188.0000	4142.1002	Train	280.0000	276.7306
149	Train	3640.0000	3790.0466	Train	270.6400	281.1665
150	Train	3871.0000	3769.9730	Train	303.0000	297.5171
151	Train	5210.0000	4990.4933	Train	305.0000	300.1197
152	Train	4020.0000	4238.3156	Train	327.0000	332.3769
153	Train	4770.0000	4854.7847	Train	318.0000	308.0389
154	Train	3960.0000	3744.6675	Test	309.0000	299.0465
155	Train	4150.0000	4250.4286	Train	301.0000	295.5031
156	Train	3710.0000	3971.3482	Test	312.6000	292.4374
157	Train	4215.0000	4131.6920	Train	293.0000	285.5284
158	Train	3840.0000	3884.6497	Train	349.0000	346.3007
159	Train	2047.0000	1992.3097	Test	461.0000	445.8733
160	Train	5660.0000	5639.3760	Test	252.0000	244.0087

ANEXES

161	Test	5630.0000	5568.5771	Train	254.0000	248.6213
162	Train	4170.0000	3950.3418	Train	277.0000	280.2830
163				Train	245.0000	252.0735
164	Test	4800.0000	5084.9421	Train	258.0000	262.6970
165	Train	4600.0000	4616.8037	Train	342.0000	329.0487
166	Train	3580.0000	3680.3196	Test	310.0000	291.8592
167	Test	4520.0000	4545.0175	Test	260.0000	264.7202
168	Train	4510.0000	4480.2964	Train	293.4000	297.3671
169	Train	3560.0000	3613.3719	Train	292.0000	298.0967
170	Train	3640.0000	3688.4933	Train	293.0000	295.7726
171	Test	3660.0000	3684.1915	Train	292.0000	293.8970
172	Train	3447.0000	3524.4145	Train	292.0000	292.8911
173	Train	3420.0000	3609.5211	Train	305.0000	295.6333
174	Train	3530.0000	3686.3197	Train	288.0000	267.7215
175	Train	4900.0000	4835.0768	Train	321.0000	324.4484
176	Train	3672.0000	3658.9075	Train	336.0000	317.7568
177	Train	3740.0000	3631.7371	Train	310.0000	318.2816
178	Train	3800.0000	3609.9137	Train	267.0100	273.9319
179	Train	3758.0000	3847.6622	Train	350.0000	336.6032
180	Train	3630.0000	3544.9666	Train	311.6000	334.0119
181	Train	3688.0000	3606.9767	Train	340.0000	339.1479

ANEXES

182	Train	3473.0000	3526.6353	Train	345.0000	342.3758
183	Train	3362.0000	3465.2000	Test	339.0000	335.8416
184	Train	3432.0000	3638.3976	Train	345.0000	346.2592
185	Train	3360.0000	3371.7906	Train	352.0000	341.2033
186	Train	3881.0000	3745.9581	Train	336.0000	340.8086
187	Test	3290.0000	3414.7190	Train	356.0000	355.7263
188	Train	3352.0000	3480.5290	Train	313.0000	308.3273
189	Train	3370.0000	3356.4531	Train	306.0000	306.8388
190	Train	3380.0000	3283.6996	Train	307.0000	300.6647
191	Train	3196.0000	3339.5081	Train	326.0000	340.8099
192	Train	3897.0000	3896.9092	Train	326.0000	334.8640
193	Test	3700.0000	3746.9604	Test	329.0000	325.0813
194	Train	3940.0000	4039.0687	Train	324.0000	327.4802
195	Train	3710.0000	3614.7620	Train	329.0000	313.3616
196	Train	3930.0000	3933.2970	Train	327.0000	328.1528
197	Train	3870.0000	3955.4974	Train	339.0000	338.8450
198	Train	3370.0000	3319.4903	Train	329.0000	331.2018
199	Train	3286.0000	3252.9876	Test	325.0000	331.4926
200	Train	3714.0000	3851.5499	Train	335.0000	331.2663
201	Train	3273.0000	3298.5304	Test	563.0000	560.0927
202	Train	1802.0000	1796.8719	Train	351.0000	352.3440

ANEXES

203	Test	4070.0000	4014.7946	Train	351.0000	351.8193
204	Test	4070.0000	4189.3049	Test	308.0000	317.3863
205	Test	4519.0000	4591.6512	Train	351.0000	348.7228
206	Train	4519.0000	4532.3747	Train	349.0000	344.7025
207	Train	4400.0000	4341.8661	Train	256.0000	258.1685
208	Train	4895.0000	4856.6963	Train	229.0000	233.7168
209	Train	6130.0000	6151.4666	Train	293.0000	289.9517
210	Test	5630.0000	5472.4827	Test	335.0000	313.9273
211	Test	4600.0000	4580.1717	Train	320.0000	315.0386
212	Train	4660.0000	4556.3574	Test	326.0000	311.4364
213	Test	4660.0000	4520.2370	Train	315.0000	306.7070
214	Train	4535.0000	4438.6451	Train	291.0000	291.1612
215	Train	4350.0000	4363.3403	Train	311.0000	318.4815
216	Train	4000.0000	3978.3596	Train	355.0000	357.6487
217	Test	3410.0000	3404.1389	Train	308.0000	301.4793
218	Train	4080.0000	4064.3244	Train	319.0000	309.6743
219	Train	3790.0000	3479.1734	Train	348.0000	356.2308
220	Train	3210.0000	3282.8643	Train	345.0000	351.1814
221	Train	3220.0000	3249.0711	Train	322.0000	320.2923
222	Train	4260.0000	4534.9635	Train	377.0000	374.1261
223	Test	3300.0000	3288.6423	Train	378.0000	371.7191

ANEXES

224	Test	3320.0000	3365.8533	Train	374.0000	369.6918
225	Train	3270.0000	3326.3280	Test	364.0000	370.2587
226	Train	3120.0000	3121.3240	Train	408.0000	389.2134
227	Train	3308.0000	3259.5294	Test	403.0000	397.1654
228	Test	2950.0000	3034.2856	Train	389.0000	396.6473
229	Train	3060.0000	3105.8634	Train	410.0000	396.1755
230	Train	3040.0000	3223.3038	Train	389.0000	398.8528
231	Train	3090.0000	3042.9805	Train	389.0000	397.6002
232	Train	3010.0000	3133.5748	Train	389.0000	393.4592
233	Train	3125.0000	3043.0278	Train	453.0000	418.2271
234	Test	3166.0000	2897.8244	Test	371.0000	366.5139
235	Train	3025.0000	2981.5380	Test	368.0000	363.0719
236	Train	3040.0000	3064.3736	Test	368.0000	363.9690
237	Train	3120.0000	3082.4832	Train	358.0000	360.1581
238	Train	3100.0000	3031.8015	Train	361.0000	360.6938
239	Train	3150.0000	3107.6773	Test	382.0000	385.1283
240	Test	3446.0000	3515.9547	Train	385.0000	384.4252
241	Train	3311.0000	3244.2573	Train	383.0000	380.2736
242	Train	3360.0000	3386.1264	Train	380.0000	384.9725
243	Test	3450.0000	3608.1935	Train	380.0000	377.0959
244	Train	3470.0000	3372.7331	Test	386.0000	389.0742

ANEXES

245	Train	2880.0000	2938.4050	Train	382.0000	390.6388
246	Test	3028.0000	2913.4194	Train	402.0000	400.8494
247	Train	3220.0000	2936.5321	Test	390.0000	397.8938
248	Train	3040.0000	3152.4697	Train	402.0000	399.9679
249	Test	3140.0000	3288.9766	Train	472.0000	476.4466
250	Test	1610.0000	1573.2432	Train	657.7000	659.2709
251	Train	4030.0000	3985.1976	Train	383.0000	384.5965
252	Train	4215.0000	4380.4773	Train	313.2000	327.8439
253	Train	4650.0000	4576.7393	Train	324.0000	323.3734
254	Train	3910.0000	3774.6060	Train	360.0000	357.5893
255	Train	4108.0000	4263.4186	Test	316.0000	325.9794
256	Train	4250.0000	4199.0254	Train	337.0000	326.8615
257	Train	4330.0000	4807.7250	Train	335.0000	334.7099
258	Train	5010.0000	4855.5779	Train	282.0000	289.8711
259	Train	4560.0000	4694.1166	Train	312.0000	290.4987
260	Train	5150.0000	4821.4584	Train	277.0000	295.5996
261	Train	3750.0000	3881.3081	Train	373.0000	366.3263
262	Test	2910.0000	2947.2662	Train	428.0000	434.4861
263	Train	3820.0000	3790.8830	Train	353.0000	357.9255
264	Train	3480.0000	3417.4810	Train	369.0000	367.9774
265	Train	3400.0000	3297.4550	Train	375.0000	371.1267

ANEXES

266	Train	3445.0000	3380.2779	Train	360.0000	369.5517
267	Test	3445.0000	3380.6615	Train	360.0000	369.5437
268	Train	2920.0000	2955.1760	Train	402.0000	403.3961
269	Train	2800.0000	2807.8998	Train	442.0000	451.0358
270	Train	3043.0000	2983.4436	Train	466.0000	456.4648
271	Train	2840.0000	2883.3248	Test	442.0000	436.3161
272	Train	2720.0000	2803.9812	Test	442.0000	451.6853
273	Train	2840.0000	2933.1434	Train	442.0000	446.9840
274	Train	2760.0000	2872.5542	Train	442.0000	444.3684
275	Train	2740.0000	2713.6851	Train	428.0000	421.1445
276	Train	2740.0000	2784.9107	Train	421.0000	416.8155
277	Train	2810.0000	2793.8887	Test	404.0000	416.7289
278	Train	2890.0000	2878.8351	Train	416.0000	414.0556
279	Train	2770.0000	2858.2812	Train	416.0000	409.5976
280	Train	2910.0000	2973.8020	Train	393.0000	410.5790
281	Train	2740.0000	2852.8917	Train	418.0000	409.4507
282	Train	2950.0000	2811.1157	Test	414.0000	406.8060
283	Test	2950.0000	2935.4462	Train	398.0000	408.2621
284	Train	3085.0000	2934.8495	Train	444.0000	445.2458
285	Train	3000.0000	3086.2549	Test	447.0000	445.9060
286	Train	1478.0000	1491.2273	Train	718.4100	719.7932

ANEXES

287	Train	3870.0000	4055.0591	Train	352.0000	355.0105
288	Train	4010.0000	3926.3140	Test	386.0000	388.9154
289	Train	3800.0000	3914.4175	Train	394.0000	402.1620
290	Train	3616.0000	3486.0682	Train	372.0000	379.0053
291	Train	3763.0000	3682.1274	Train	370.0000	370.2184
292	Test	3541.0000	3586.0431	Train	376.0000	373.2902
293	Train	3531.0000	3532.3755	Train	379.0000	364.7285
294	Test	4290.0000	4308.6812	Test	351.0000	375.1566
295	Train	4290.0000	4096.3453	Train	387.0000	389.5525
296	Train	4290.0000	4144.6409	Test	374.0000	390.1590
297	Train	4900.0000	4653.9975	Train	360.0000	351.7716
298	Test	4400.0000	4497.6980	Train	390.0000	386.6816
299	Train	4900.0000	4478.1545	Test	350.0000	374.3973
300	Train	4300.0000	4638.4960	Train	390.0000	385.4441
301	Test	3600.0000	4193.9201	Train	350.0000	371.2175
302	Train	3560.0000	3560.7068			
303	Train	2940.0000	3223.7462	Test	410.0000	419.0530
304	Train	2663.0000	2669.8122	Test	450.0000	434.4185
305	Train	2779.0000	2694.6001	Train	464.0000	465.6763
306				Train	523.0000	522.9100
307	Train	2778.0000	2656.9375	Train	528.0000	522.9916

ANEXES

308	Train	2540.0000	2476.2270	Train	494.0000	507.6196
309	Train	2610.0000	2701.3113	Train	502.0000	498.3656
310	Train	2490.0000	2468.2677	Train	486.0000	484.4870
311	Train	2500.0000	2555.0831	Train	488.0000	480.9933
312	Train	2550.0000	2520.7699	Test	464.0000	478.7264
313	Test	2540.0000	2567.3249	Train	476.0000	477.0320
314	Train	2610.0000	2591.8154	Train	455.0000	470.5741
315	Train	2530.0000	2566.1645	Train	478.0000	471.9148
316	Train	2630.0000	2622.3007	Train	468.0000	464.7301
317	Train	2560.0000	2651.3303	Train	472.0000	466.2079
318	Train	2490.0000	2612.0762	Train	482.0000	477.8538
319	Train	2650.0000	2630.6194	Test	443.0000	454.9645
320	Train	2690.0000	2683.6986	Train	466.0000	462.0542
321	Test	2700.0000	2740.0825	Train	442.0000	456.1756
322	Train	2810.0000	2648.9983	Train	455.0000	458.8572
323	Test	2730.0000	2702.3224	Train	436.0000	452.1517
324	Train	2570.0000	2620.0753	Train	468.0000	466.7616
325	Train	2820.0000	2771.2352	Test	455.0000	455.1176
326	Train	2730.0000	2733.0128	Train	460.0000	455.4832
327	Train	2870.0000	2779.8381	Train	461.0000	451.3775

ANEXES

328	Train	2783.0000	2749.6270	Train	509.0000	508.5904
329	Train	2749.0000	2848.6368	Train	512.0000	514.6490
330	Train	2756.0000	2859.4449	Train	492.0000	496.1140
331	Train	2460.0000	2351.3807	Train	487.0000	495.3929
332	Train	2673.0000	2678.3190	Test	543.0000	517.2257
333	Train	2570.0000	2643.7576	Train	512.0000	507.8688
334	Train	1296.0000	1362.9144	Train	823.0000	830.4858
335	Train	4860.0000	4974.4562	Train	371.0000	369.0149
336	Train	3950.0000	3968.8826	Train	374.0000	370.9296
337	Train	3200.0000	3146.8197	Train	396.0000	373.0834
338	Train	3209.0000	3302.7764	Train	440.0000	435.9997
339	Train	3230.0000	3159.8573	Train	434.0000	437.0294
340	Test	3454.0000	3454.8910	Train	427.0000	431.8086
341	Train	3232.0000	3367.7786	Train	414.0000	433.7899
342	Train	3127.0000	3183.7231	Train	430.0000	429.5391
343				Train	433.0000	436.1596
344	Train	2428.0000	2430.3060	Train	524.0000	522.0350
345	Test	2514.0000	2490.7450	Test	584.0000	586.0787
346	Train	2355.0000	2373.3867	Train	570.0000	559.6362
347	Test	2290.0000	2273.8776	Test	551.0000	540.5957

ANEXES

348	Train	2310.0000	2379.0683	Test	541.0000	533.0435
349	Train	2350.0000	2396.6170	Train	519.0000	522.5108
350	Test	2330.0000	2343.4436	Train	519.0000	522.2754
351	Train	2741.0000	2687.4998	Train	478.0000	491.0649
352	Train	2600.0000	2697.0709	Train	490.0000	494.1728
353	Train	2490.0000	2530.1108	Train	504.0000	504.5772
354	Test	2720.0000	2609.4469	Train	493.0000	496.0216
355	Test	2527.0000	2536.7659	Train	576.0000	575.7249
356	Test	2541.0000	2533.4176	Train	577.0000	577.3893
357	Train	1172.0000	1182.1375	Train	893.2000	886.6672
358	Train	2760.0000	2789.8504	Train	529.0000	526.7099
359	Train	4050.0000	3893.0257	Test	407.0000	403.6667
360	Test	3650.0000	3571.1897	Train	408.0000	429.8363
361	Test	3437.0000	3569.3217	Train	441.0000	436.6320
362	Train	3522.0000	3506.3921	Test	440.0000	441.5812
363	Train	2890.0000	2903.7999	Train	497.0000	490.2556
364	Train	3050.0000	2963.9802	Train	478.0000	482.6022
365	Test	2803.0000	2839.7827	Train	497.0000	491.8253
366	Train	2800.0000	3001.3453	Train	497.0000	490.5435
367	Train	2900.0000	2898.9670	Train	482.0000	491.5076

ANEXES

368	Train	2950.0000	2993.1707	Test	497.0000	490.5705
369	Test	3200.0000	3338.1247	Test	480.0000	480.1278
370	Test	3200.0000	3470.0383	Train	480.0000	481.8159
371	Train	2223.0000	2237.4222	Test	584.0000	589.7318
372	Train	2280.0000	2235.0598	Train	639.0000	650.2453
373	Train	2110.0000	2108.3366	Train	617.0000	610.8856
374	Train	2320.0000	2225.5502	Train	577.0000	569.3273
375	Train	2510.0000	2298.1505	Train	557.0000	549.7558
376	Train	2190.0000	2110.5181	Train	584.0000	575.1000
377	Train	2308.0000	2312.9637	Train	645.0000	644.8245
378	Train	3600.0000	3691.1170	Test	465.0000	475.3016
379	Train	3500.0000	3583.7289	Test	465.0000	475.1188
380	Train	1950.0000	1945.7494	Train	685.0000	682.1510
381	Train	2119.0000	2149.2886	Test	715.0000	714.7231
382	Train	3380.0000	3450.5805	Test	497.0000	522.9000
383	Train	3230.0000	3019.0372	Test	600.0000	535.0724
384	Train	2300.0000	2409.8575	Train	593.0000	591.2077
385	Train	3000.0000	3032.9241	Train	570.0000	568.5359
386	Train	1888.0000	1944.5235	Train	725.0000	726.6114
387	Train	1930.0000	1990.2385	Train	767.0000	765.3595

ANEXES

388	Train	1820.0000	1810.4728	Train	755.0000	755.4125
389	Train	1954.0000	1965.3999	Train	787.0000	785.1581
390	Train	2923.0000	2946.2445	Train	561.6000	559.5737
391	Train	1680.0000	1680.5131	Test	826.0000	829.3124
392	Test	1810.0000	1822.4142	Train	860.0000	858.5009
393	Test	3250.0000	3100.7719	Test	554.0000	553.9608
394	Train	2900.0000	3043.6411	Train	554.0000	553.1757
395	Train	2300.0000	2241.1705	Train	732.0000	730.8060
396	Train	1570.0000	1575.0040	Train	897.0000	903.3873
397	Train	1682.0000	1692.6501	Train	933.0000	933.4840
398	Test	2930.0000	3153.7235	Train	677.0000	678.1524
399	Train	1480.0000	1471.8354	Test	969.0000	976.3004
400	Test	1569.0000	1581.4075	Test	1010.0000	1008.4363
401	Train	1373.0000	1387.3958	Train	1040.0000	1047.8159
402	Train	1570.0000	1594.4078	Train	863.0000	860.9965
403	Train	1468.0000	1479.3235	Train	1080.0000	1082.3665
404	Test	1288.0000	1304.2475	Test	1120.0000	1117.8655
405	Train	1377.0000	1391.4699	Train	1160.0000	1156.3257
406	Train	2990.0000	2996.0360	Train	731.0000	728.5535
407	Test	2480.0000	2934.4273	Test	724.0000	737.0739
408	Train	2990.0000	2897.5286	Train	729.0000	732.5906

ANEXES

409	Train	1330.0000	1311.5618	Train	1140.0000	1136.3176
410	Train	1212.0000	1235.8855	Train	1189.2300	1187.1227
411	Train	1295.0000	1244.4139	Train	1230.0000	1230.9710
412	Train	1143.0000	1165.7901	Test	1260.0000	1258.1428
413	Train	1220.0000	1173.1842	Test	1310.0000	1307.5607
414	Train	1081.0000	1109.0900	Train	1340.0000	1331.9358
415	Train	1154.0000	1101.8760	Train	1380.0000	1381.7022
416	Train	1026.0000	1049.4838	Train	1410.0000	1412.0034
417	Train	975.0000	1000.5489	Train	1490.0000	1496.5298
418	Train	929.0000	950.2561	Train	1570.0000	1577.4028
419	Test	887.0000	906.5972	Train	1650.0000	1628.9170

Tableau B.3. Valeurs expérimentales et valeurs prédites par les modèles RQSP-SVR pour T_b et T_c des propriétés physicochimiques des composés organiques, ainsi que leurs rangs de répartition dans les ensembles d'apprentissage et de test pour chaque paramètre

ANEXES

ID	269.1400	291.8943	<i>Test</i>	<i>426.1500</i>	<i>476.7118</i>	<i>Test</i>
1	215.2600	217.2904	<i>Train</i>	<i>340.1500</i>	<i>342.3626</i>	<i>Train</i>
2	295.9400	295.0615	<i>Train</i>	<i>478.0000</i>	<i>474.2300</i>	<i>Train</i>
3	191.7400	197.1690	<i>Train</i>	<i>302.0000</i>	<i>321.5591</i>	<i>Test</i>
4	243.3600	238.0772	<i>Test</i>	<i>384.9500</i>	<i>393.9201</i>	<i>Train</i>
5	296.9700	290.7952	<i>Train</i>	<i>471.2000</i>	<i>476.2308</i>	<i>Train</i>
6	349.7900	355.1605	<i>Train</i>	<i>556.3500</i>	<i>556.6908</i>	<i>Train</i>
7	257.6700	261.2172	<i>Test</i>	<i>411.9800</i>	<i>466.4106</i>	<i>Test</i>
8	232.3200	226.2656	<i>Test</i>	<i>369.3000</i>	<i>397.5425</i>	<i>Test</i>
9	282.0500	274.1666	<i>Test</i>	<i>451.5800</i>	<i>469.1975</i>	<i>Test</i>
10	334.3300	333.9036	<i>Train</i>	<i>536.4000</i>	<i>544.0179</i>	<i>Train</i>
11	191.0900	197.3093	<i>Train</i>	<i>299.0100</i>	<i>313.9128</i>	<i>Train</i>
12	298.8000	290.2467	<i>Train</i>	<i>457.0000</i>	<i>470.3733</i>	<i>Train</i>
13	312.9000	309.2930	<i>Train</i>	<i>510.0000</i>	<i>507.7981</i>	<i>Train</i>
14	221.5000	218.3518	<i>Train</i>	<i>351.2500</i>	<i>349.7227</i>	<i>Train</i>
15	253.8500	251.9300	<i>Train</i>	<i>420.0000</i>	<i>416.6466</i>	<i>Train</i>
16	373.7100	376.2358	<i>Train</i>	<i>588.0000</i>	<i>598.4639</i>	<i>Train</i>
17	276.6600	278.1008	<i>Train</i>	<i>464.0000</i>	<i>467.3088</i>	<i>Train</i>
18	248.9500	241.7485	<i>Train</i>	<i>416.2500</i>	<i>420.7697</i>	<i>Train</i>

ANEXES

19	194.8200	196.0963	<i>Train</i>	317.4200	320.3387	<i>Train</i>
20	315.6000	311.9515	<i>Train</i>	528.2000	533.3075	<i>Train</i>
21						
22	374.3500	371.4770	<i>Train</i>	588.1500	600.2175	<i>Train</i>
23	111.6700	188.9524	<i>Test</i>	190.5600	343.5355	<i>Test</i>
24	337.8500	328.5944	<i>Train</i>	512.5000	510.9079	<i>Train</i>
25	279.1100	276.4311	<i>Train</i>	469.9500	466.1594	<i>Train</i>
26	234.0400	244.1729	<i>Train</i>	353.1500	364.9218	<i>Train</i>
27	320.3100	325.3235	<i>Train</i>	487.8000	487.3617	<i>Train</i>
28	276.1700	281.9467	<i>Train</i>	418.5500	418.7622	<i>Train</i>
29	276.9200	278.7543	<i>Train</i>	418.8500	420.7260	<i>Train</i>
30	320.7500	321.7956	<i>Train</i>	487.2500	486.0651	<i>Train</i>
31	394.4000	400.1360	<i>Train</i>	620.0000	618.5481	<i>Train</i>
32	197.5100	204.0873	<i>Train</i>	306.4500	312.4250	<i>Train</i>
33	323.3500	327.2148	<i>Train</i>	496.0000	492.6542	<i>Train</i>
34	261.0500	266.3026	<i>Train</i>	395.6500	407.3059	<i>Train</i>
35	301.0500	305.1718	<i>Test</i>	456.9400	457.6024	<i>Test</i>
36	301.1500	306.1711	<i>Train</i>	461.6000	462.6276	<i>Train</i>
37	225.0400	235.8600	<i>Train</i>	339.1700	350.7437	<i>Train</i>

ANEXES

38	237.9000	238.6483	<i>Train</i>	354.4900	357.5284	<i>Train</i>
39				308.3000	312.0005	<i>Train</i>
40	320.8500	327.3894	<i>Train</i>	516.5000	525.1776	<i>Train</i>
41	418.2500	418.0353	<i>Train</i>	645.0000	623.0509	<i>Test</i>
42	187.5000	195.9703	<i>Test</i>	302.8000	317.3506	<i>Train</i>
43	247.0800	244.4753	<i>Train</i>	374.1800	367.0930	<i>Test</i>
44	250.1500	256.4134	<i>Test</i>	391.8000	389.2208	<i>Train</i>
45	259.2500	263.5392	<i>Train</i>	432.0000	445.6994	<i>Train</i>
46	263.9500	259.2759	<i>Train</i>	410.2900	414.9102	<i>Train</i>
47	305.1500	300.2694	<i>Train</i>	478.8500	485.5521	<i>Train</i>
48	347.2300	346.3444	<i>Train</i>	545.0000	571.4912	<i>Test</i>
49	387.0000	397.6060	<i>Train</i>	602.0000	616.9894	<i>Train</i>
50	225.8100	216.7642	<i>Test</i>	345.8800	344.3920	<i>Train</i>
51	278.1500	272.2555	<i>Train</i>	429.8000	426.3013	<i>Train</i>
52	354.8100	345.4315	<i>Train</i>	545.5000	541.7167	<i>Train</i>
53	169.4100	168.4459	<i>Train</i>	282.3400	277.9942	<i>Train</i>
54	404.5100	414.7726	<i>Train</i>	650.1500	645.2538	<i>Train</i>
55	330.4500	328.9960	<i>Train</i>	523.0000	537.7935	<i>Train</i>
56	356.5900	350.5012	<i>Train</i>	561.6000	527.1424	<i>Test</i>
57	249.1300	242.9373	<i>Train</i>	386.4400	388.7533	<i>Train</i>
58	294.1500	309.6954	<i>Test</i>	466.0000	481.0904	<i>Train</i>

ANEXES

59	283.6000	278.3655	<i>Train</i>	469.1500	448.2606	<i>Test</i>
60	391.0500	394.3173	<i>Train</i>	591.9500	591.3979	<i>Train</i>
61	304.9000	321.4998	<i>Test</i>	487.2000	508.7059	<i>Train</i>
62	311.4900	317.5931	<i>Train</i>	503.8000	518.5987	<i>Train</i>
63	285.4500	285.9066	<i>Train</i>	460.3500	461.0021	<i>Train</i>
64	235.4500	239.1521	<i>Train</i>	375.3100	380.5782	<i>Train</i>
65	184.5700	183.9415	<i>Train</i>	305.3200	313.1066	<i>Train</i>
66	351.4400	339.8865	<i>Train</i>	514.0000	510.7991	<i>Test</i>
67	248.3100	263.8241	<i>Test</i>	400.1000	400.2254	<i>Train</i>
68	470.3800	472.8709	<i>Train</i>	719.0000	698.4398	<i>Train</i>
69	308.1500	295.0524	<i>Train</i>	499.1500	475.4341	<i>Train</i>
70	310.4800	301.5388	<i>Train</i>	503.0400	503.7829	<i>Train</i>
71	289.7300	285.9341	<i>Train</i>	456.1500	500.4655	<i>Train</i>
72	280.0300	277.8455	<i>Train</i>	437.2000	435.7076	<i>Train</i>
73	443.1500	438.8567	<i>Train</i>	678.2000	639.5483	<i>Test</i>
74	390.4100	379.1130	<i>Train</i>	613.1000	631.3332	<i>Train</i>
75	236.4500	239.8082	<i>Test</i>	345.0500	343.8743	<i>Train</i>
76	256.7900	256.6976	<i>Train</i>	374.8300	372.6534	<i>Train</i>
77	279.4000	291.7111	<i>Train</i>	412.3800	425.0606	<i>Train</i>
78	272.4500	271.2301	<i>Train</i>	398.0700	404.8232	<i>Test</i>
79	255.5000	256.3354	<i>Train</i>	380.1100	395.7623	<i>Train</i>

ANEXES

80	288.4500	299.4897	<i>Test</i>	427.2000	439.5031	<i>Train</i>
81	298.4000	296.6984	<i>Train</i>	447.5700	440.2568	<i>Train</i>
82	302.1500	309.3185	<i>Train</i>	444.0300	466.8683	<i>Test</i>
83	350.4500	347.6214	<i>Train</i>	540.0000	614.4533	<i>Test</i>
84	367.9000	365.8566	<i>Test</i>	590.0000	603.9359	<i>Train</i>
85	249.9400	232.2209	<i>Test</i>	402.4000	398.7330	<i>Train</i>
86	238.6500	232.5047	<i>Train</i>	394.0000	384.6519	<i>Train</i>
87	370.2500	363.1298	<i>Train</i>	561.3000	580.3953	<i>Train</i>
88	225.4500	227.6290	<i>Train</i>	364.8500	388.9967	<i>Train</i>
89	240.3700	242.2466	<i>Train</i>	398.0000	402.4760	<i>Train</i>
90	369.5200	379.3868	<i>Train</i>	578.0000	593.2305	<i>Train</i>
91	370.2300	358.5522	<i>Train</i>	545.1000	556.6230	<i>Train</i>
92	329.2800	322.6752	<i>Train</i>	508.1000	512.4724	<i>Train</i>
93	322.1500	328.4883	<i>Train</i>	503.6000	526.5541	<i>Test</i>
94	307.6500	310.9194	<i>Train</i>	482.2500	515.3132	<i>Test</i>
95	414.3200	414.1186	<i>Test</i>	600.8100	603.2120	<i>Test</i>
96	330.0900	333.0072	<i>Test</i>	506.5500	503.2769	<i>Train</i>
97	327.4600	348.9933	<i>Test</i>	508.4000	522.7288	<i>Train</i>
98	363.4000	360.5719	<i>Train</i>	548.0000	531.6888	<i>Test</i>
99	319.6700	324.5924	<i>Train</i>	503.1500	520.4576	<i>Train</i>
100	425.1500	336.5928	<i>Test</i>	649.6000	641.7731	<i>Train</i>

ANEXES

101	231.0400	222.5904	<i>Train</i>	369.8300	365.2438	<i>Train</i>
102	370.3500	357.3578	<i>Train</i>	536.8000	531.5178	<i>Train</i>
103	355.3000	342.9024	<i>Train</i>	508.3000	515.2509	<i>Train</i>
104	280.5000	286.9298	<i>Train</i>	437.8000	454.6380	<i>Train</i>
105	315.0000	316.0366	<i>Train</i>	480.6000	503.3792	<i>Train</i>
106	487.3700	482.2058	<i>Train</i>	718.2000	734.2378	<i>Train</i>
107	561.0000	560.1673	<i>Train</i>	850.0000	845.4516	<i>Train</i>
108	339.8000	332.6919	<i>Train</i>	533.0000	547.3209	<i>Train</i>
109	321.7000	317.4771	<i>Train</i>	496.9500	524.3592	<i>Train</i>
110	304.9200	300.3934	<i>Train</i>	471.8500	497.5134	<i>Train</i>
111	276.0200	267.7983	<i>Train</i>	433.2500	448.8815	<i>Train</i>
112	431.1500	421.6342	<i>Train</i>	630.0000	613.8124	<i>Train</i>
113	267.1700	272.8056	<i>Train</i>	388.3700	401.6943	<i>Test</i>
114	304.5000	308.3873	<i>Train</i>	490.1500	557.8764	<i>Test</i>
115	357.3100	359.4999	<i>Test</i>	579.3500	583.2481	<i>Train</i>
116	403.0000	387.4162	<i>Train</i>	639.7500	608.2611	<i>Train</i>
117	281.2200	262.3709	<i>Test</i>	440.0000	437.6704	<i>Test</i>
118	284.0000	274.6495	<i>Train</i>	452.0000	444.0972	<i>Train</i>
119	268.7400	261.0201	<i>Train</i>	425.0000	436.1148	<i>Train</i>
120	345.6500	355.7952	<i>Test</i>	519.1300	532.7249	<i>Train</i>
121	412.7000	408.4617	<i>Train</i>	606.0000	605.6016	<i>Train</i>

ANEXES

122	390.7400	380.6379	<i>Train</i>	585.4000	570.9289	<i>Train</i>
123	285.6600	275.9104	<i>Train</i>	459.9300	456.8093	<i>Test</i>
124	266.9100	263.4961	<i>Train</i>	419.5000	434.2469	<i>Test</i>
125	274.0300	264.6949	<i>Train</i>	428.6000	431.9588	<i>Train</i>
126	276.8700	265.0260	<i>Test</i>	435.5000	430.6089	<i>Train</i>
127	266.2500	266.2282	<i>Test</i>	417.9000	426.5306	<i>Train</i>
128	347.9400	354.6954	<i>Train</i>	537.2000	532.5448	<i>Train</i>
129	352.7300	339.2154	<i>Train</i>	536.7000	526.4749	<i>Train</i>
130	339.1200	327.5082	<i>Train</i>	540.1500	547.0816	<i>Train</i>
131	436.4200	429.6260	<i>Train</i>	615.7000	603.7914	<i>Train</i>
132	427.6500	426.9894	<i>Train</i>	605.0000	626.2479	<i>Train</i>
133	378.1500	372.0247	<i>Train</i>	590.0000	587.7327	<i>Train</i>
134	374.4700	382.8774	<i>Train</i>	587.0000	600.5363	<i>Train</i>
135	352.6000	361.7125	<i>Train</i>	530.6000	554.9360	<i>Train</i>
136	350.2100	359.0474	<i>Train</i>	523.3000	536.8154	<i>Train</i>
137	353.9700	363.7185	<i>Train</i>	538.0000	555.0230	<i>Train</i>
138	341.2500	349.8274	<i>Train</i>	520.6000	541.6555	<i>Train</i>
139	359.7200	349.7262	<i>Train</i>	568.5500	556.1542	<i>Train</i>
140	272.6600	265.8377	<i>Train</i>	425.1200	421.3761	<i>Train</i>
141	261.4300	261.5525	<i>Train</i>	407.8000	408.3284	<i>Train</i>
142	421.7200	422.8237	<i>Train</i>	656.3000	640.1624	<i>Test</i>

ANEXES

143	391.9000	386.6571	<i>Train</i>	563.1000	539.2817	<i>Test</i>
144	380.8100	366.6379	<i>Train</i>	547.8000	539.4274	<i>Train</i>
145	355.5700	334.7643	<i>Test</i>	506.2000	519.5166	<i>Train</i>
146	372.9000	360.7961	<i>Test</i>	535.9000	521.6102	<i>Test</i>
147	307.5800	308.3932	<i>Train</i>	466.7000	479.6792	<i>Train</i>
148	357.7500	356.0546	<i>Train</i>	536.1500	550.0470	<i>Train</i>
149	469.5700	478.4918	<i>Test</i>	680.0000	636.9061	<i>Test</i>
150	481.3800	485.0954	<i>Train</i>	676.0000	690.1523	<i>Train</i>
151	518.1500	522.4852	<i>Train</i>	753.0000	749.0662	<i>Train</i>
152	365.2500	359.2084	<i>Test</i>	557.1500	563.9408	<i>Test</i>
153	351.2000	351.9312	<i>Train</i>	531.9000	542.3370	<i>Train</i>
154	328.6000	323.5500	<i>Test</i>	496.6000	506.5707	<i>Train</i>
155	340.8800	343.2413	<i>Train</i>			
156	317.5500	317.4576	<i>Train</i>	483.9000	512.6673	<i>Train</i>
157	541.5400	544.9550	<i>Train</i>	736.6000	746.1627	<i>test</i>
158	302.4000	289.0267	<i>Test</i>	423.1000	413.8019	<i>Train</i>
159	434.8500	436.9458	<i>Train</i>	670.1500	669.0702	<i>Train</i>
160	388.4100	381.8948	<i>Train</i>	619.9500	626.5952	<i>Train</i>
161	313.3300	305.7936	<i>Train</i>	481.2000	478.7515	<i>Train</i>
162	317.3800	310.7779	<i>Train</i>	507.0000	517.2114	<i>Test</i>
163	403.8000	409.4744	<i>Train</i>	624.5000	627.4644	<i>Train</i>

ANEXES

164	414.7100	410.5716	<i>Test</i>	610.3000	609.5304	<i>Train</i>
165	477.4200	467.2235	<i>Train</i>	721.6000	705.6146	<i>Train</i>
166	322.4000	314.6229	<i>Train</i>	511.7000	501.7622	<i>Train</i>
167	303.2200	307.2784	<i>Train</i>	464.8000	474.1235	<i>Train</i>
168	310.0800	307.9404	<i>Train</i>	475.0000	478.4908	<i>Train</i>
169	309.4900	307.1940	<i>Train</i>	474.2000	476.3458	<i>Train</i>
170	304.3100	300.1456	<i>Train</i>	465.0000	472.6814	<i>Train</i>
171	311.7000	305.2243	<i>Train</i>	470.0000	481.0773	<i>Train</i>
172	293.2000	298.7974	<i>Train</i>	452.7000	472.6495	<i>Train</i>
173	413.9500	418.1687	<i>Train</i>	619.5000	620.6255	<i>Train</i>
174	375.4100	368.9904	<i>Train</i>	561.1900	553.9001	<i>Train</i>
175	375.1400	368.5457	<i>Train</i>	560.9500	560.1715	<i>Train</i>
176	367.4800	371.2457	<i>Train</i>	552.8000	565.0406	<i>Test</i>
177	352.9400	359.6976	<i>Train</i>	537.0000	563.9501	<i>Test</i>
178	458.9500	452.5943	<i>Train</i>	639.1600	627.6520	<i>Test</i>
179	449.6800	440.8634	<i>Test</i>	629.0900	612.7476	<i>Train</i>
180	375.9000	386.8129	<i>Test</i>	554.5000	557.5947	<i>Train</i>
181	372.2500	377.0770	<i>Test</i>	546.0000	555.7598	<i>Train</i>
182	365.4500	375.8902	<i>Train</i>	540.7000	562.6415	<i>Train</i>
183	374.6500	376.7145	<i>Train</i>	549.7300	548.9947	<i>Train</i>
184	371.2200	378.1724	<i>Train</i>	551.3500	573.9341	<i>Train</i>

ANEXES

185	361.6500	371.9384	<i>Train</i>	532.0000	544.2395	<i>Train</i>
186	380.6500	377.6636	<i>Train</i>	571.2000	559.5529	<i>Train</i>
187	309.2100	309.2165	<i>Train</i>	469.7000	482.8614	<i>Train</i>
188	300.9900	301.4126	<i>Train</i>	460.4000	465.5815	<i>Train</i>
189	282.6500	287.3143	<i>Train</i>	433.8000	444.8725	<i>Train</i>
190	410.9000	406.6869	<i>Train</i>	588.1000	578.8040	<i>Train</i>
191	392.2000	389.3197	<i>Train</i>	561.0000	551.2508	<i>Test</i>
192	401.8500	405.7300	<i>Train</i>	575.4000	576.2776	<i>Train</i>
193	375.2000	372.9621	<i>Test</i>	543.7000	538.8224	<i>Train</i>
194	404.1500	400.4692	<i>Train</i>	577.2000	569.3855	<i>Train</i>
195	383.8800	387.1175	<i>Train</i>	556.1000	551.1905	<i>Train</i>
196	337.0100	334.0932	<i>Train</i>	500.2300	511.2530	<i>Train</i>
197	328.2000	319.0937	<i>Train</i>	497.1000	487.9758	<i>Train</i>
198	388.4500	387.6883	<i>Train</i>	559.6000	550.9038	<i>Train</i>
199	353.4100	357.9475	<i>Train</i>	516.7300	502.0522	<i>Train</i>
200	330.3000	338.4214	<i>Train</i>	449.5500	444.7222	<i>Train</i>
201	446.2300	440.8798	<i>Train</i>	683.9500	663.2895	<i>Train</i>
202	453.5700	448.8957	<i>Train</i>	705.0000	677.8983	<i>Train</i>
203	404.8700	412.9063	<i>Train</i>	632.3500	618.1388	<i>Train</i>
204	461.6000	465.2545	<i>Train</i>	721.1500	696.4545	<i>Train</i>
205	483.9500	489.6987	<i>Train</i>			

ANEXES

206	353.2400	357.8354	<i>Train</i>	562.0500	554.1446	<i>Train</i>
207	454.9900	444.5318	<i>Train</i>	694.2500	666.0226	<i>Train</i>
208	457.2500	449.4102	<i>Train</i>	705.0000	677.5026	<i>Train</i>
209	402.5500	410.1175	<i>Train</i>	621.0000	627.8003	<i>Train</i>
210	417.2900	415.3361	<i>Train</i>	645.0000	629.3536	<i>Train</i>
211	418.5000	420.2557	<i>Train</i>	646.1500	634.6450	<i>Train</i>
212	445.1500	447.4413	<i>Train</i>	684.2000	656.0024	<i>Train</i>
213	356.1200	343.9336	<i>Train</i>	560.4000	550.0071	<i>Test</i>
214	428.5800	435.1052	<i>Test</i>	653.0000	617.6808	<i>Test</i>
215	402.9500	376.2151	<i>Test</i>			
216	353.8700	353.7130	<i>Train</i>	553.8000	544.6856	<i>Train</i>
217	344.9600	342.9313	<i>Train</i>	532.7000	542.5499	<i>Train</i>
218	336.6300	336.2537	<i>Test</i>	504.0000	505.0559	<i>Test</i>
219	327.0100	335.2018	<i>Test</i>	496.0000	497.5836	<i>Test</i>
220	434.0000	457.7754	<i>Test</i>	650.1000	614.3111	<i>Test</i>
221	400.7000	390.9427	<i>Train</i>	587.1000	575.3427	<i>Train</i>
222	396.6500	390.4715	<i>Train</i>	582.8200	583.6222	<i>Train</i>
223	389.1500	388.4271	<i>Train</i>	574.6000	576.4284	<i>Train</i>
224	366.9700	361.5716	<i>Train</i>	536.0000	527.4617	<i>Train</i>
225	478.8500	474.5365	<i>Train</i>	660.2000	650.1133	<i>Train</i>
226	394.6500	400.6510	<i>Train</i>	571.0000	571.0859	<i>Train</i>

ANEXES

227	395.6500	394.6335	<i>Train</i>	568.6000	565.6170	<i>Test</i>
228	383.0000	389.7846	<i>Test</i>	553.1500	569.7714	<i>Train</i>
229	399.2600	403.2521	<i>Train</i>	575.4000	569.4084	<i>Train</i>
230	389.8000	389.8901	<i>Train</i>	560.8000	566.7058	<i>Train</i>
231	405.4500	416.0565	<i>Train</i>	576.0000	594.1372	<i>Train</i>
232	429.7400	434.7968	<i>Train</i>	607.3000	620.6287	<i>Train</i>
233	341.8600	344.8175	<i>Train</i>	507.6000	520.1837	<i>Train</i>
234	333.4100	337.2284	<i>Train</i>	497.7000	506.4911	<i>Train</i>
235	336.4200	342.9210	<i>Train</i>	504.6000	509.9558	<i>Test</i>
236	322.8800	327.0190	<i>Test</i>	489.0000	488.3351	<i>Train</i>
237	331.1300	337.6859	<i>Train</i>	500.0000	502.4551	<i>Train</i>
238	429.9000	429.5040	<i>Train</i>	611.3000	601.7460	<i>Train</i>
239	412.4000	421.0509	<i>Train</i>	585.3000	598.1623	<i>Test</i>
240	406.1500	412.8792	<i>Test</i>	582.4000	584.4508	<i>Test</i>
241	421.1500	422.9804	<i>Test</i>	604.4000	594.1834	<i>Train</i>
242	404.8500	399.0325	<i>Train</i>	574.4000	560.2880	<i>Test</i>
243	341.4500	341.7820	<i>Test</i>	500.0500	514.6453	<i>Train</i>
244	363.2300	355.4572	<i>Train</i>	530.6000	526.4999	<i>Train</i>
245	376.6500	379.1493	<i>Train</i>	539.7000	547.2594	<i>Train</i>
246	361.9200	365.4724	<i>Train</i>	535.1500	531.5500	<i>Train</i>
247	382.0000	375.6563	<i>Test</i>	550.0000	556.7927	<i>Train</i>

ANEXES

248	608.5400	612.3747	<i>Train</i>	772.1000	757.6492	<i>Train</i>
249	355.6600	360.9958	<i>Train</i>	475.6500	468.8048	<i>Train</i>
250	560.1500	559.0601	<i>Train</i>	792.0000	787.5807	<i>Train</i>
251	464.1500	471.0506	<i>Train</i>	702.3000	737.9712	<i>Test</i>
252	451.9000	448.2272	<i>Test</i>	695.0000	703.3660	<i>Test</i>
253	435.6500	442.4649	<i>Test</i>	660.0000	657.6906	<i>Train</i>
254	383.7800	390.0947	<i>Train</i>	591.7500	601.4869	<i>Test</i>
255	426.7300	419.1984	<i>Train</i>	645.6000	623.0040	<i>Test</i>
256	478.6000	486.8286	<i>Train</i>	713.0000	707.7178	<i>Train</i>
257	464.1500	472.1784	<i>Train</i>	697.5500	697.7361	<i>Train</i>
258	475.4300	467.4505	<i>Train</i>	705.8500	684.3517	<i>Train</i>
259	475.1300	473.5859	<i>Train</i>	704.6500	698.4337	<i>Train</i>
260	417.2000	422.5739	<i>Train</i>	623.7500	636.3280	<i>Train</i>
261	420.5500	419.5885	<i>Train</i>	598.0000	594.0336	<i>Train</i>
262	391.9400	389.1330	<i>Train</i>	604.2000	592.9257	<i>Train</i>
263	374.0800	373.3313	<i>Train</i>	572.1000	573.0614	<i>Train</i>
264	376.6200	378.9663	<i>Train</i>	569.5000	580.9026	<i>Test</i>
265	363.9200	369.3410	<i>Test</i>			
266	364.8800	369.3207	<i>Train</i>	553.0000	579.8559	<i>Test</i>
267	366.7900	367.7985	<i>Test</i>	537.4000	530.5709	<i>Train</i>
268	418.2600	420.9973	<i>Train</i>	594.6000	591.1442	<i>Train</i>

ANEXES

269	496.1500	491.9383	<i>Train</i>	677.3000	668.2468	<i>Train</i>
270	407.4500	413.2516	<i>Test</i>	587.9500	576.8334	<i>Test</i>
271	415.8500	414.4276	<i>Train</i>	593.7000	581.8030	<i>Train</i>
272	408.6500	408.5045	<i>Train</i>	579.4000	581.9445	<i>Test</i>
273	415.1500	420.1821	<i>Test</i>	586.1000	579.1685	<i>Test</i>
274	371.5300	374.5347	<i>Train</i>	540.2000	543.0758	<i>Train</i>
275	363.2000	362.0754	<i>Test</i>	530.4000	537.8574	<i>Test</i>
276	365.0000	367.2464	<i>Test</i>	535.2000	537.6805	<i>Test</i>
277	366.6200	370.6729	<i>Test</i>	540.6000	531.8714	<i>Test</i>
278	352.3400	356.7973	<i>Train</i>	520.5000	524.0376	<i>Test</i>
279	362.9300	368.6474	<i>Test</i>	537.3000	538.6075	<i>Train</i>
280	353.6400	355.1097	<i>Test</i>	519.8000	525.9230	<i>Train</i>
281	359.2100	367.5707	<i>Train</i>	536.4000	536.1547	<i>Test</i>
282	354.0300	359.0356	<i>Test</i>	531.1000	535.3748	<i>Train</i>
283	448.6000	446.7737	<i>Train</i>	632.3000	623.1528	<i>Train</i>
284	432.9000	435.0901	<i>Train</i>	608.3000	608.0210	<i>Train</i>
285	376.4500	385.3943	<i>Train</i>	502.2000	492.8342	<i>Train</i>
286	418.3100	414.9737	<i>Train</i>	635.2000	633.4191	<i>Train</i>
287	475.2600	473.0278	<i>Train</i>	709.6000	701.5142	<i>Train</i>
288	547.6500	545.2449	<i>Train</i>	775.0000	752.2686	<i>Train</i>
289	409.3100	410.1569	<i>Train</i>	617.2600	612.1248	<i>Train</i>

ANEXES

290	417.4400	420.2787	<i>Train</i>	630.3000	628.1718	<i>Train</i>
291	412.2200	411.3248	<i>Train</i>	617.0000	616.7353	<i>Train</i>
292	411.4300	414.3949	<i>Train</i>	616.2000	622.5480	<i>Train</i>
293	477.6700	480.1116	<i>Train</i>	703.0000	694.0221	<i>Train</i>
294	491.5700	485.0000	<i>Train</i>	716.4500	694.2965	<i>Train</i>
295	491.1400	497.9553	<i>Train</i>	716.4500	707.2465	<i>Train</i>
296	490.0700	489.0302	<i>Train</i>	722.9500	710.2565	<i>Train</i>
297	484.1300	488.5113	<i>Train</i>	707.6500	710.1831	<i>Train</i>
298	484.3300	480.2630	<i>Train</i>	707.0500	696.5815	<i>Train</i>
299	474.2200	480.4680	<i>Train</i>	701.0500	704.4896	<i>Train</i>
300	500.1500	494.4534	<i>Train</i>	729.9500	710.5275	<i>Train</i>
301	494.8900	488.1788	<i>Train</i>	715.6500	700.2133	<i>Train</i>
302	424.2900	418.0149	<i>Train</i>	647.2000	631.5030	<i>Train</i>
303	392.5100	396.8359	<i>Train</i>	587.7000	589.9717	<i>Train</i>
304	394.4100	393.5902	<i>Train</i>	566.9000	558.0762	<i>Train</i>
305	512.8500	509.6667	<i>Train</i>	694.2600	683.8109	<i>Train</i>
306	500.6600	500.7891	<i>Train</i>	674.6000	668.6185	<i>Train</i>
307	438.1500	436.9798	<i>Train</i>	616.0000	607.6390	<i>Train</i>
308	420.4500	424.2153	<i>Train</i>	601.8900	599.8489	<i>Train</i>
309	398.7700	399.3773	<i>Train</i>	568.7000	574.1359	<i>Train</i>
310	390.8000	394.9587	<i>Train</i>	559.7000	561.3587	<i>Train</i>

ANEXES

311	392.0800	398.0546	<i>Test</i>	563.6000	569.5954	<i>Test</i>
312	390.8600	396.1837	<i>Train</i>	561.7000	570.7644	<i>Test</i>
313	391.6900	394.1164	<i>Test</i>	565.5000	569.4643	<i>Train</i>
314	379.9900	379.5099	<i>Train</i>	549.8000	548.3256	<i>Train</i>
315	388.7600	391.5544	<i>Train</i>	563.5000	566.4319	<i>Test</i>
316	382.5800	382.2976	<i>Test</i>	553.5000	553.8820	<i>Train</i>
317	382.2600	385.3957	<i>Train</i>	550.0000	565.5629	<i>Test</i>
318	385.1200	387.2319	<i>Test</i>	562.0000	560.9713	<i>Train</i>
319	390.8800	392.8696	<i>Train</i>	568.8000	562.2792	<i>Train</i>
320	388.8000	393.2264	<i>Train</i>	567.1000	569.9571	<i>Train</i>
321	391.4200	393.4498	<i>Train</i>	576.5000	563.7906	<i>Train</i>
322	383.0000	388.2831	<i>Train</i>	563.5000	559.1136	<i>Train</i>
323	372.3900	370.6183	<i>Train</i>	543.8000	532.3668	<i>Train</i>
324	387.9200	390.5850	<i>Train</i>	573.5000	564.3271	<i>Train</i>
325	386.6200	390.4712	<i>Train</i>	566.4000	569.9845	<i>Train</i>
326	379.4400	379.5922	<i>Train</i>	568.0000	559.4898	<i>Train</i>
327	467.1000	466.6298	<i>Train</i>	652.3000	644.0311	<i>Train</i>
328	452.9000	455.9022	<i>Train</i>	629.8000	631.0819	<i>Test</i>
329	457.6000	467.9354	<i>Test</i>	640.4000	653.8175	<i>Test</i>
330	414.1500	409.5458	<i>Test</i>	584.1000	579.2309	<i>Train</i>

ANEXES

331	452.7500	444.7056	<i>Train</i>	641.0000	645.2293	<i>Train</i>
332	432.0000	427.3684	<i>Train</i>	602.3000	609.3083	<i>Test</i>
333	398.4500	405.4556	<i>Test</i>	523.9000	513.9492	<i>Train</i>
334	510.3100	512.7130	<i>Train</i>	782.1500	771.1985	<i>Test</i>
335	516.3700	516.3247	<i>Test</i>	803.1500	761.5549	<i>Test</i>
336	451.1200	456.7909	<i>Test</i>	684.9000	687.4085	<i>Train</i>
337	432.3900	429.8040	<i>Train</i>	638.3500	629.6747	<i>Train</i>
338	425.5600	431.1699	<i>Train</i>	631.0000	634.4115	<i>Train</i>
339	435.1600	432.4527	<i>Train</i>	640.2000	637.0567	<i>Train</i>
340	449.2700	443.5274	<i>Train</i>	664.5000	649.4768	<i>Train</i>
341	442.5300	438.7070	<i>Train</i>	649.1000	641.1454	<i>Train</i>
342	437.8900	431.6849	<i>Train</i>	637.3000	627.8242	<i>Train</i>
343	420.0200	418.0346	<i>Train</i>	593.1000	583.2960	<i>Train</i>
344	528.7500	527.0292	<i>Train</i>	710.7000	698.8741	<i>Train</i>
345	450.6500	459.1612	<i>Train</i>	618.8300	625.6059	<i>Train</i>
346	423.9100	422.9435	<i>Train</i>	594.6000	602.1444	<i>Train</i>
347	416.4500	422.8202	<i>Train</i>	582.8700	589.8901	<i>Test</i>
348	405.8400	410.1625	<i>Test</i>	576.7000	566.4920	<i>Test</i>
349	397.2400	400.6733	<i>Test</i>	569.8000	571.1323	<i>Train</i>
350	413.4400	415.3031	<i>Train</i>	607.5000	590.2456	<i>Test</i>

ANEXES

351	406.1800	412.0633	<i>Train</i>	592.6000	582.9980	<i>Train</i>
352	395.4400	390.0936	<i>Test</i>	574.6000	557.3265	<i>Test</i>
353	414.7000	414.5654	<i>Test</i>	607.5000	593.3869	<i>Train</i>
354	485.2000	486.1322	<i>Train</i>	670.9000	663.0550	<i>Train</i>
355	471.7000	480.3271	<i>Train</i>	649.5000	660.3135	<i>Train</i>
356	417.3500	422.0550	<i>Train</i>	542.3500	531.4081	<i>Train</i>
357	559.2000	566.8436	<i>Train</i>			
358	491.1400	493.3617	<i>Train</i>	748.4000	742.0949	<i>Train</i>
359	480.7700	475.7089	<i>Train</i>	720.0000	704.9714	<i>Train</i>
360	463.7500	468.0411	<i>Train</i>	694.1000	697.6559	<i>Train</i>
361	475.1500	472.4337	<i>Train</i>	711.2000	693.1019	<i>Train</i>
362	456.4500	451.5184	<i>Train</i>	660.5000	657.1994	<i>Train</i>
363	445.9400	452.9109	<i>Test</i>	650.0000	653.3244	<i>Test</i>
364	456.9400	455.9278	<i>Train</i>	657.9000	661.9892	<i>Train</i>
365	450.2800	445.9177	<i>Train</i>	652.0000	646.3912	<i>Train</i>
366	469.9900	465.2332	<i>Test</i>	676.0000	666.1534	<i>Test</i>
367	446.4800	453.9759	<i>Train</i>	664.5400	672.7726	<i>Train</i>
368	468.9600	460.0819	<i>Train</i>	703.6000	687.3342	<i>Train</i>
369	460.4600	459.4727	<i>Train</i>	687.0000	685.8119	<i>Train</i>

ANEXES

370	443.7500	443.9233	<i>Train</i>	616.6000	613.3688	<i>Train</i>
371	543.1500	552.4195	<i>Train</i>	722.1000	730.4694	<i>Train</i>
372	447.2700	445.3489	<i>Train</i>	617.7000	626.4314	<i>Train</i>
373	428.8300	428.1602	<i>Train</i>	609.5000	613.6447	<i>Train</i>
374	433.4600	419.9010	<i>Test</i>	623.0000	589.9432	<i>Test</i>
375	410.6100	412.4370	<i>Train</i>	581.4000	585.3003	<i>Test</i>
376	503.0000	504.6169	<i>Test</i>	688.0000	679.7590	<i>Train</i>
377	517.8300	511.6199	<i>Train</i>	772.0000	754.3492	<i>Train</i>
378	514.2600	519.2719	<i>Train</i>	761.0000	747.8241	<i>Test</i>
379	469.0500	466.6484	<i>Test</i>	639.0000	647.2766	<i>Train</i>
380	520.3000	525.0516	<i>Train</i>	703.9000	699.6368	<i>Train</i>
381	528.1500	528.2252	<i>Train</i>	773.0000	763.9738	<i>Train</i>
382	536.1500	531.7739	<i>Train</i>	775.0000	750.0369	<i>Test</i>
383	489.0500	501.7716	<i>Test</i>	678.0000	689.6585	<i>Test</i>
384	476.4400	470.9063	<i>Test</i>	708.0000	654.6752	<i>Test</i>
385	486.1500	489.3719	<i>Test</i>	657.1000	655.0483	<i>Train</i>
386	571.8500	573.9184	<i>Train</i>	743.0000	735.0388	<i>Test</i>
387	489.4500	487.1628	<i>Test</i>	658.0000	665.4789	<i>Train</i>
388	537.1000	541.8026	<i>Train</i>	718.7000	713.8758	<i>Train</i>

ANEXES

389	537.4200	541.6978	<i>Train</i>	778.0000	779.2388	<i>Train</i>
390	508.6300	507.1692	<i>Train</i>	675.0000	682.3048	<i>Train</i>
391	553.4000	559.1520	<i>Train</i>	732.4000	729.7056	<i>Train</i>
392	612.7000	608.1597	<i>Train</i>	893.0000	876.0653	<i>Train</i>
393	615.1800	616.7512	<i>Train</i>	873.0000	872.2371	<i>Train</i>
394	510.4300	519.4510	<i>Test</i>	708.0000	712.4261	<i>Train</i>
395	526.7400	526.5462	<i>Train</i>	693.0000	697.6437	<i>Train</i>
396	569.0000	575.3638	<i>Train</i>	745.3000	744.4425	<i>Train</i>
397	633.6500	636.9258	<i>Train</i>			
398	543.9100	545.3148	<i>Train</i>	708.0000	712.3949	<i>Train</i>
399	583.9000	590.6626	<i>Train</i>	757.3000	758.8288	<i>Train</i>
400	560.2000	563.4077	<i>Train</i>	722.0000	726.3777	<i>Train</i>
401	519.5000	523.1268	<i>Train</i>	692.0000	681.8362	<i>Train</i>
402	598.0000	605.0542	<i>Train</i>	768.6000	773.0032	<i>Train</i>
403	575.7000	580.5390	<i>Train</i>	735.3000	739.7417	<i>Train</i>
404	611.3000	618.0371	<i>Train</i>	779.2000	786.1798	<i>Train</i>
405	609.1500	610.9951	<i>Train</i>	857.0000	853.0761	<i>Train</i>
406	648.1500	651.7126	<i>Train</i>	883.0000	864.8280	<i>Train</i>
407	655.1500	652.2143	<i>Train</i>	908.0000	890.2813	<i>Train</i>
408	647.1500	647.3912	<i>Train</i>	803.0000	800.1769	<i>Train</i>
409	590.4000	596.6831	<i>Train</i>	747.8000	752.2820	<i>Train</i>

ANEXES

410	623.6000	631.4110	<i>Train</i>	789.3000	788.0340	<i>Train</i>
411	604.5000	611.7675	<i>Test</i>	759.5000	764.0991	<i>Train</i>
412	635.1000	640.3841	<i>Train</i>	798.8000	796.0320	<i>Test</i>
413	617.8000	625.6879	<i>Train</i>	770.6000	775.1943	<i>Train</i>
414	645.5000	647.7407	<i>Test</i>	807.7000	803.0126	<i>Test</i>
415	630.6000	638.2177	<i>Train</i>	781.0000	785.3617	<i>Train</i>
416	642.8000	649.3016	<i>Train</i>	790.9000	794.1254	<i>Train</i>
417	654.5000	658.4448	<i>Train</i>	800.3000	801.5134	<i>Train</i>
418	665.7000	665.9900	<i>Train</i>	809.3000	807.5088	<i>Train</i>

ANEXES

Tableau B.4. Valeurs expérimentales et valeurs prédites par les modèles RQSP-SVR pour P_c et V_c des propriétés physicochimiques des composés organiques, ainsi que leurs rangs de répartition dans les ensembles d'apprentissage et de test pour chaque paramètre

ID	<i>PC ex</i>	<i>PC cal</i>	<i>SAMPLES</i>	<i>Vc exp</i>	<i>Vc cal</i>	<i>SAMPLES</i>
1	4254	4332.133	Test	246	283.845	Test
2	3970	3828.631	Train	200	221.436	Train
3	4070	4048.204	Train	249	274.344	Train
4				180.28	192.762	Train
5	3870	3760.644	Test	217	228.287	Test
6	4125	4034.016	Train	248	253.512	Train
7	4408	4282.843	Train	276	275.153	Train
8	4560	4554.513	Train	167	210.516	Test
9	5132	4910.512	Test	166	180.412	Test
10	4971	4819.299	Test	196	213.76	Test
11	5184	5053.762	Test	239	235.446	Train
12	5472	5313.967	Train	132	141.824	Train
13	4816	4686.464	Train	135	129.72	Train
14	5400	5257.968	Train	185	196.813	Train
15	6080	6115.941	Train	123	131.328	Train
16	5784	5638.925	Train	85.1	102.839	Train
17	6590	6401.083	Train	125	111.978	Train
18			Train	152	179.176	Train
19	6929	6903.506	Train	141	151.537	Train
20	6680	6490.912	Train	113	121.411	Train
21	5875	5793.595	Train	175	198.8	Train

ANEXES

22	6600	6561.693	Train	163	149.663	Train
23			Train	173	163.465	Test
24	6310	6212.88	Train	98.6	113.563	Train
25	4599	4469.212	Train	117	114.654	Test
26	8084	7068.23	Test	145	165.089	Train
27	7230	7039.762	Train	252	278.627	Train
28	3157	3141.605	Train	341	347.956	Train
29	3393	3356.075	Train	294	306.627	Train
30	3300	3237.363	Train	294	312.693	Train
31	3260	3251.504	Train	325	338.668	Train
32	3410	3322.863	Train	248	278.612	Train
33	4490	4373.194	Train	172	190.41	Train
34	3944	3956.463	Train	296	305.198	Test
35	3920	3823.222	Train	243.81	252.417	Train
36	3660	3674.646	Train	278	282.062	Train
37	3676	3750.675	Test	278	286.48	Train
38	3610	3597.317	Train	211.3	219.437	Train
39	3620	3573.361	Train	212	238.447	Train
40	3376	3354.103	Train	112	130.673	Train
41	6138	5891.258	Train	224	216.541	Train
42	5510	5498.031	Train	325	324.998	Test
43	4090	4156.482	Train	154	169.807	Test
44	4460	4593.582	Test	198.8	215.368	Train
45	4056	3746.596	Test	191	215.901	Train
46	4640	4473.115	Train	179	179.112	Train
47	5670	5557.135	Train	225	235.351	Train

ANEXES

48	4041	3973.685	Train	253	264.397	Train
49	4340	4152.501	Train	281	282.346	Test
50	4300	4288.744	Train	281	290.212	Train
51	4480	4873.703	Test	195	200.869	Train
52	3764	3752.461	Train	179	202.249	Train
53	4850	4882.57	Train	193	189.263	Train
54	5041	4926.794	Train	131	142.451	Train
55			Train	261.6	291.217	Train
56	5477	5378.639	Train	240	247.442	Train
57	5070	4917.118	Train	220	248.356	Test
58	5370	5427.404	Train	179	187.664	Train
59	4520	4540.742	Train	154	163.298	Train
60	5570	6011.278	Test	140.3	140.373	Test
61	7190	7074.673	Train	177	170.262	Train
62	5786	5767.334	Train	172	163.952	Train
63	6000	5928.981	Test	204	229.058	Train
64	5565	5663.611	Train	192	201.248	Train
65	5270	5188.224	Train	159	171.711	Train
66	5028	4896.749	Train	145.5	160.716	Train
67	4872	4652.549	Train	168	165.227	Test
68	6137	6165.183	Train	170	166.556	Train
69	5370	5258.732	Test	187	182.309	Train
70	8200	8098.07	Train	207	207.401	Train
71	5490	5539.895	Train	201	221.419	Train
72	5530	5378.053	Train	206	193.6	Train
73	5620	5622.29	Train	180	200.426	Train

ANEXES

74	5340	5192.236	Train	225	197.018	Test
75	7124	7162.502	Train	202	222.495	Train
76	6707	6644.703	Train	299	323.856	Train
77	2680	2620.081	Test	274	305.386	Train
78	2912	2901.647	Train	270	295.815	Train
79	3412	3451.151	Train	266	293.251	Test
80	3219	3102.479	Train	273.2	273.405	Train
81	3137	3202.953	Train	259	283.536	Train
82	3640	3549.678	Test	256	275.704	Train
83	3925	3800.264	Train	289	311.363	Train
84	3420	3353.217	Train	216	211.111	Test
85	4660	4584.471	Train	190.94	200.722	Train
86	6100	6015.845	Test	164	177.406	Train
87	5630	5051.213	Test	165	179.292	Train
88	5250	5123.027	Train	242	238.536	Train
89	4260	4343.466	Train	185	188.937	Train
90	4600	4625.126	Train	162	183.471	Train
91	5540	5395.937	Train	289.71	296.978	Train
92	4650	4573.811	Train	208	196.063	Train
93	5620	5592.966	Train	213	218.768	Train
94	4700	4781.249	Train	204	214.023	Test
95	5038	5132.374	Train	186	196.36	Test
96	4920	4769.9	Train	235	215.746	Test
97	4668	5092.063	Test	228	215.211	Train
98	4750	4437.594	Test	229	213.968	Train
99	4740	5120.209	Test	251	219.923	Test

ANEXES

100	4500	4417.292	Train	243	253.021	Train
101	4425	4554.491	Train	261.99	251.328	Train
102	4420	4970.304	Test	200	209.363	Train
103	4248	4101.847	Train	219	217.983	Train
104	5169	5254.136	Train	222	217.542	Train
105	4765	4748.286	Train	221	207.939	Train
106	4400	4482.12	Train	213	230.7	Train
107	3950	4028.74	Train	239	228.259	Train
108	6550	6505.23	Train	264	252.046	Train
109	7500	7515.228	Train	254	260.734	Train
110	4260	4372.391	Train	258	247.092	Train
111	4740	4883.87	Train	221	243.031	Train
112	4540	4457.056	Train	254	250.325	Train
113	4070	4096.444	Train	253	240.251	Train
114	5220	5154.173	Train	324.8	315.086	Test
115	2778	2737.423	Train	218	199.217	Train
116	5500	5586.641	Train	219	242.856	Test
117	5690	5416.404	Test	230	226.888	Train
118	4600	4374.24	Test	208	225.898	Train
119	4360	4437.694	Train	220	233.834	Test
120	4320	4377.649	Test	221	213.665	Train
121			Train	270	250.829	Train
122	3958	4431.5	Test	304	305.726	Train
123	4000	3972.214	Train	291	295.524	Train
124	3880	3932.973	Train	210	224.347	Train
125	4980	4840.913	Train	241	237.236	Test

ANEXES

126	4020	4038.525	Train	238	235.722	Test
127	4100	4137.011	Train	234	244.118	Train
128	4210	4108.453	Test	239	240.496	Train
129	4000	3985.161	Test	258	268.544	Train
130	4410	4357.964	Train	267	263.71	Train
131	4207	3997.787	Train	224	235.949	Train
132	5190	5215.192	Train	293	272.674	Train
133	4060	4326.992	Train	292	277.69	Train
134	3700	4011.768	Train	239	254.037	Train
135	5150	4943.759	Train	238	255.68	Train
136	5208	5278.876	Train	282	259.905	Train
137	4004	3895.351	Train	286	272.566	Train
138	3880	3821.075	Train	285	270.377	Train
139	4020	4245.534	Train	300	300.96	Train
140	3900	3759.809	Train	249	258.872	Train
141	5610	5374.183	Train	255	259.558	Train
142	3796	3657.527	Train	259	262.443	Train
143	3640	3553.749	Train	267.51	301.606	Train
144	5420	5409.965	Train	273	257.44	Test
145	4414	4492.731	Train	274	269.511	Test
146	4295	4535.015	Train	275	269.731	Train
147	3972	3766.956	Test	270	264.498	Train
148	4188	4180.958	Test	280	261.426	Train
149	3640	3827.495	Train	270.64	261.009	Test
150	3871	3800.99	Train	303	280.798	Train
151	5210	4814.569	Test	305	285.448	Train

ANEXES

152	4020	4922.718	Train	327	316.683	Test
153	4770	5008.921	Train	318	307.524	Train
154	3960	3735.228	Test	309	289.84	Test
155	4150	4226.488	Train	301	290.969	Train
156	3710	3867.979	Test	312.6	296.583	Train
157	4215	4479.335	Train	293	291.776	Test
158	3840	3652.014	Train	349	328.13	Train
159	2047	1826.645	Test	461	470.666	Train
160	5660	5647.852	Train	252	237.892	Train
161	5630	5360.618	Train	254	261.809	Train
162	4170	3900.771	Train	277	280.601	Train
163			Train	245	257.204	Test
164	4800	4784.805	Train	258	268.39	Train
165	4600	4664.017	Train	342	342.498	Train
166	3580	3607.002	Train	310	298.433	Train
167	4520	4651.758	Test	260	267.329	Train
168	4510	4473.05	Train	293.4	291.728	Train
169	3560	3648.14	Train	292	296.984	Train
170	3640	3660.876	Train	293	289.942	Train
171	3660	3681.647	Train	292	290.083	Train
172	3447	3593.106	Train	292	291.581	Train
173	3420	3682.341	Train	305	287.679	Train
174	3530	3698.964	Train	288	273.474	Train
175	4900	4660.332	Train	321	319.793	Train
176	3672	3659.949	Train	336	313.886	Train
177	3740	3656.189	Train	310	325.333	Train

ANEXES

178	3800	3579.225	Train	267.01	283.51	Test
179	3758	4060.639	Train	350	329.303	Test
180	3630	3680.428	Train	311.6	343.185	Test
181	3688	3679.068	Test	340	319.778	Train
182	3473	3663.719	Test	345	319.85	Train
183	3362	3625.193	Test	339	323.094	Train
184	3432	3762.6	Train	345	325.991	Train
185	3360	3364.921	Train	352	339.232	Train
186	3881	3830.998	Train	336	334.461	Train
187	3290	3242.32	Train	356	359.248	Train
188	3352	3523.135	Train	313	314.918	Train
189	3370	3374.361	Train	306	312.479	Train
190	3380	3341.753	Train	307	318.233	Train
191	3196	3225.951	Train	326	319.029	Train
192	3897	3863.246	Train	326	309.702	Train
193	3700	3797.794	Train	329	307.557	Test
194	3940	4100.958	Train	324	323.634	Train
195	3710	3617.176	Train	329	295.913	Train
196	3930	4116.306	Test	327	324.595	Train
197	3870	3701.226	Train	339	318.32	Train
198	3370	3413.696	Train	329	329.696	Train
199	3286	3502.327	Train	325	320.267	Train
200	3714	3751.361	Train	335	342.249	Train
201	3273	3107.164	Train	563	589.553	Train
202	1802	1686.922	Train	351	343.552	Train
203	4070	4025.557	Train	351	342.225	Train

ANEXES

204	4070	4160.742	Train	308	294.06	Train
205	4519	4670.041	Train	351	341.672	Train
206	4519	4687.684	Train	349	319.935	Train
207	4400	4305.841	Train	256	262.659	Train
208	4895	4879.984	Train	229	221.541	Train
209	6130	5987.457	Train	293	270.278	Train
210	5630	5581.048	Train	335	310.973	Train
211	4600	4844.895	Train	320	313.472	Train
212	4660	4864.985	Train	326	292.176	Train
213	4660	4904.119	Train	315	293.783	Train
214	4535	4850.034	Train	291	299.575	Test
215	4350	4430.559	Train	311	309.142	Test
216	4000	4590.275	Test	355	342.954	Train
217	3410	3405.32	Test	308	311.447	Train
218	4080	4140.535	Train	319	319.38	Test
219	3790	3681.083	Train	348	347.65	Test
220	3210	3415.964	Test	345	349.271	Train
221	3220	3372.714	Test	322	285.807	Train
222	4260	4955.185	Test	377	372.76	Train
223	3300	3341.401	Train	378	372.58	Train
224	3320	3556.099	Train	374	370.414	Train
225	3270	3231.728	Train	364	348.932	Train
226	3120	3286.119	Train	408	382.815	Train
227	3308	3489.098	Train	403	381.228	Train
228	2950	3053	Train	389	374.931	Train
229	3060	3219.028	Train	410	385.541	Train

ANEXES

230	3040	3332.431	Test	389	383.215	Train
231	3090	3135.92	Train	389	392.503	Train
232	3010	3242.295	Train	389	383.687	Train
233	3125	3226.458	Train	453	425.518	Train
234	3166	3073.864	Train	371	376.363	Train
235	3025	3108.025	Train	368	372.214	Train
236	3040	3164.318	Train	368	368.528	Test
237	3120	3189.958	Train	358	366.411	Train
238	3100	3059.072	Test	361	369.463	Train
239	3150	3144.429	Train	382	381.161	Train
240	3446	3418.787	Train	385	375.435	Test
241	3311	3421.207	Train	383	369.745	Test
242	3360	3739.297	Test	380	374.523	Test
243	3450	3950.666	Test	380	362.132	Train
244	3470	3301.364	Test	386	374.258	Train
245	2880	3171.646	Train	382	370.474	Train
246	3028	3067.955	Train	402	389.347	Train
247	3220	3073.114	Train	390	378.28	Test
248	3040	3317.92	Test	402	399.204	Train
249	3140	3173.508	Train	472	465.15	Train
250	1610	1464.591	Train	657.7	664.435	Train
251	4030	4251.253	Train	383	382.042	Test
252	4215	4479.832	Train	313.2	292.375	Train
253	4650	4802.645	Test	324	284.466	Test
254	3910	4119.741	Train	360	340.113	Train
255	4108	4162.815	Test	316	322.489	Train

ANEXES

256	4250	4283.643	Train	337	307.384	Train
257	4330	4830.201	Train	335	302.509	Train
258	5010	4895.794	Train	282	287.599	Train
259	4560	4740.345	Train	312	278.658	Train
260	5150	4859.299	Train	277	287.344	Train
261	3750	4035.316	Train	373	358.299	Train
262	2910	3181.729	Train	428	424.331	Train
263	3820	3777.719	Train	353	358.598	Train
264	3480	3529.047	Train	369	372.205	Train
265	3400	3414.37	Train	375	370.797	Test
266	3445	3334.473	Test	360	381.248	Test
267	3445	3334.807	Train	360	381.257	Train
268	2920	3170.416	Test	402	400.622	Train
269	2800	2933.4	Train	442	450.968	Train
270	3043	3113.722	Train	466	460.586	Test
271	2840	3032.529	Test	442	437.803	Train
272	2720	2997.712	Train	442	447.473	Test
273	2840	3108.354	Train	442	449.972	Train
274	2760	2879.691	Test	442	440.343	Train
275	2740	2941.733	Train	428	428.15	Test
276	2740	2921.903	Test	421	412.664	Test
277	2810	3112.167	Test	404	413.819	Test
278	2890	2924.014	Test	416	411.135	Test
279	2770	2993.391	Train	416	401.019	Train
280	2910	3260.39	Test	393	401.849	Test
281	2740	2878.612	Train	418	399.78	Test

ANEXES

282	2950	2925.74	Train	414	399.322	Train
283	2950	3031.96	Test	398	400.41	Train
284	3085	3159.216	Train	444	442.734	Train
285	3000	3273.583	Train	447	429.843	Train
286	1478	1327.375	Train	718.41	744.899	Train
287	3870	4158.79	Train	352	348.762	Train
288	4010	4053.552	Train	386	359.84	Train
289	3800	4061.053	Train	394	379.876	Train
290	3616	3463.625	Train	372	374.324	Train
291	3763	3658.879	Train	370	371.482	Train
292	3541	3463.651	Train	376	375.224	Train
293	3531	3684.919	Train	379	369.559	Train
294	4290	4490.687	Train	351	347.456	Train
295	4290	4217.226	Train	387	356.788	Train
296	4290	4209.173	Train	374	368.241	Test
297	4900	4671.386	Train	360	333.13	Train
298	4400	4618.005	Train	390	368.819	Train
299	4900	4582.159	Train	350	343.157	Train
300	4300	4607.668	Train	390	369.76	Train
301	3600	4097.105	Train	350	342.834	Train
302	3560	3752.323	Train			
303	2940	3136.761	Train	410	392.812	Train
304	2663	2831.172	Train	450	431.129	Train
305	2779	2678.701	Train	464	462.803	Train
306			Train	523	516.831	Train
307	2778	2789.887	Train	528	515.391	Train

ANEXES

308	2540	2605.799	Train	494	505.188	Train
309	2610	2857.834	Train	502	509.238	Train
310	2490	2671.726	Train	486	489.775	Train
311	2500	2645.535	Train	488	479.508	Train
312	2550	2620.542	Train	464	481.824	Test
313	2540	2638.143	Test	476	480.403	Train
314	2610	2744.394	Test	455	472.701	Test
315	2530	2571.253	Train	478	469.569	Train
316	2630	2856.6	Train	468	463.761	Train
317	2560	2783.351	Test	472	463.18	Test
318	2490	2672.316	Train	482	473.115	Test
319	2650	2774.269	Test	443	457.907	Train
320	2690	2877.621	Train	466	459.685	Train
321	2700	2887.494	Train	442	456.508	Train
322	2810	2690.013	Train	455	456.791	Train
323	2730	2721.081	Train	436	451.147	Train
324	2570	2573.429	Train	468	462.534	Train
325	2820	3045.856	Train	455	453.292	Train
326	2730	2739.104	Train	460	452.814	Train
327	2870	2744.609	Train	461	447.638	Train
328	2783	2767.949	Train	509	523.781	Train
329	2749	3017.023	Train	512	505.635	Test
330	2756	3038.325	Test	492	495.971	Test
331	2460	2480.728	Test	487	488.765	Train
332	2673	2862.283	Train	543	540.559	Train
333	2570	2641.888	Train	512	516.156	Train

ANEXES

334	1296	1329.888	Train	823	812.178	Test
335	4860	4749.912	Test	371	366.35	Train
336	3950	3890.836	Test	374	353.474	Test
337	3200	3120.876	Test	396	371.587	Test
338	3209	3335.163	Train	440	430.597	Train
339	3230	3256.016	Train	434	431.902	Train
340	3454	3513.232	Train	427	433.317	Train
341	3232	3529.408	Train	414	444.468	Train
342	3127	2995.023	Train	430	441.717	Train
343				433	452.838	Train
344	2428	2630.326	Train	524	546.855	Train
345	2514	2483.097	Train	584	571.372	Train
346	2355	2544.982	Train	570	566.392	Train
347	2290	2505.459	Train	551	567.855	Train
348	2310	2489.793	Train	541	556.21	Train
349	2350	2452.011	Train	519	530.467	Test
350	2330	2551.686	Test	519	516.497	Test
351	2741	2907.84	Test	478	478.549	Train
352	2600	2884.779	Test	490	474.886	Test
353	2490	2344.342	Test	504	488.001	Train
354	2720	2651.608	Train	493	488.3	Test
355	2527	2536.666	Test	576	588.284	Train
356	2541	2580.42	Train	577	578.018	Train
357	1172	1297.299	Train	893.2	896.531	Train
358	2760	2772.914	Train	529	510.621	Train
359	4050	3999.334	Train	407	390.951	Train

ANEXES

360	3650	3528.295	Train	408	431.199	Train
361	3437	3633.842	Train	441	455.884	Train
362	3522	3451.697	Train	440	458.101	Train
363	2890	2756.772	Train	497	490.254	Train
364	3050	2948.605	Train	478	493.303	Test
365	2803	2920.231	Test	497	499.961	Train
366	2800	3026.645	Train	497	499.86	Train
367	2900	2965.149	Train	482	511.61	Test
368	2950	3077.574	Test	497	495.711	Train
369	3200	3267.881	Train	480	477.493	Train
370	3200	3205.72	Train	480	479.639	Train
371	2223	2410.066	Train	584	609.358	Train
372	2280	2151.551	Train	639	636.133	Train
373	2110	2336.942	Train	617	632.029	Train
374	2320	2268.068	Train	577	569.998	Train
375	2510	2361.706	Train	557	538.688	Test
376	2190	2634.213	Test	584	563.669	Train
377	2308	2268.751	Train	645	652.469	Test
378	3600	3796.424	Test	465	484.44	Train
379	3500	3767.719	Train	465	484.19	Test
380	1950	2201.278	Test	685	696.441	Train
381	2119	2109.284	Train	715	720.034	Train
382	3380	3353.731	Train	497	487.369	Train
383	3230	3151.709	Train	600	577.36	Train
384	2300	2257.402	Test	593	656.33	Test
385	3000	2864.931	Test	570	638.012	Test

ANEXES

386	1888	2094.719	Test	725	739.598	Test
387	1930	1926.484	Train	767	748.374	Train
388	1820	2023.358	Test	755	762.473	Test
389	1954	1902.799	Train	787	785.636	Train
390	2923	3146.012	Train	561.6	552.881	Train
391	1680	1886.129	Train	826	830.359	Test
392	1810	1731.244	Train	860	855.072	Train
393	3250	3148.331	Train	554	550.984	Test
394	2900	3141.514	Train	554	545.398	Train
395	2300	2330.461	Train	732	742.945	Train
396	1570	1721.667	Train	897	900.296	Train
397	1682	1589.233	Train	933	926.542	Train
398	2930	2958.781	Train	677	684.316	Train
399	1480	1580.441	Train	969	971.297	Train
400	1569	1438.643	Train	1010	998.817	Train
401	1373	1433.25	Train	1040	1044.279	Train
402	1570	1742.18	Train	863	837.05	Train
403	1468	1323.229	Train	1080	1071.515	Train
404	1288	1307.509	Train	1120	1117.195	Train
405	1377	1207.5	Train	1160	1144.812	Train
406	2990	2876.197	Train	731	712.08	Train
407	2480	2738.708	Train	724	712.691	Train
408	2990	2870.239	Train	729	717.863	Train
409	1330	1395.448	Train	1140	1151.804	Train
410	1212	1182.294	Train	1189.23	1191.291	Train
411	1295	1258.876	Train	1230	1228.575	Train

ANEXES

412	1143	1091.681	Train	1260	1265.275	Test
413	1220	1206.134	Test	1310	1300.797	Train
414	1081	1001.616	Train	1340	1340.209	Train
415	1154	1181.079	Test	1380	1371.368	Test
416	1026	955.551	Train	1410	1415.67	Train
417	975	919.107	Train	1490	1491.574	Train
418	929	924.259	Train	1570	1564.553	Train
419	887	950.838	Train	1650	1633.755	Train

ANEXE

Tableau C.1.Poids et biais du meilleur modèle RQSP-RNA pour Tb

couche d'entrée – Couches cachées																									Couches cachées – Couche de sortie			
Poids																									Biais	Biais		
R5u	Sv	nCIC	nO	Qindex	SMTIV	Jhetv	Jhete	R2e	GGI4	IC1	TIC1	ATS1m	ATS2m	ATS3m	MATS1m	MATS4m	MATS6m	RDF080v	Mor15m	Mor19m	Mor20m	E1s	Hy	IPSA(NO)	b^i	W_{ij}^i	b^j	
W_{11}^i	W_{12}^i	W_{13}^i	W_{14}^i	W_{15}^i	W_{16}^i	W_{17}^i	W_{18}^i	W_{19}^i	W_{110}^i	W_{111}^i	W_{112}^i	W_{113}^i	W_{114}^i	W_{115}^i	W_{116}^i	W_{117}^i	W_{118}^i	W_{119}^i	W_{120}^i	W_{121}^i	W_{122}^i	W_{123}^i	W_{124}^i	W_{125}^i	b^i	W_{ij}^i	b^j	
-0.00475	-0.16634	0.01970	-0.79033	0.47127	-0.04259	-0.30753	0.23303	-0.26259	0.14892	-0.41206	0.07005	-0.48850	0.12963	-0.28801	-0.43240	0.12794	-0.15816	-0.02430	-0.31811	-0.28378	-0.17697	0.21941	-0.24020	-0.56286	0.16953	-0.50887	0.46274	
-0.25958	-0.07500	-0.61416	-1.05854	-0.36435	-0.04145	1.53610	-1.40175	0.69623	0.12508	-0.46325	-0.00397	1.34448	-0.89294	-0.36924	1.14927	-0.07910	0.07142	0.11510	0.17051	-1.06742	-0.54319	-1.10316	-0.21905	-0.61707	1.41361	-0.21944		
0.07313	0.34409	0.55881	0.17031	0.17405	-0.06516	0.03625	0.21103	-0.19746	0.22782	-0.02575	0.17434	0.10238	0.17509	0.35640	-0.06422	-0.11601	-0.03697	0.13658	-0.12662	-0.32675	-0.05625	-0.27776	0.08091	0.10640	-0.35555	0.46625		
-0.24630	-0.17823	-0.55515	2.02277	-0.23274	0.34398	-0.33836	0.00027	1.19924	0.24012	0.80756	-0.89854	-0.21431	-0.25689	0.03241	-0.16414	0.20794	0.01541	0.20156	-0.17331	-0.32956	0.19210	1.26976	-0.66226	-1.36265	-0.06725	0.23296		
-0.10074	0.10925	0.86311	0.26139	-0.02261	-0.16807	0.18669	0.00533	-0.43264	0.18788	-0.01662	-0.24755	0.15212	0.15726	0.12299	-0.01476	0.29957	0.07055	0.22538	-0.03188	-0.08591	-0.01735	-0.43052	0.02314	-0.08178	-0.23267	-0.05936		
0.26305	0.54285	0.17417	-0.15514	0.06211	-0.21288	0.60170	0.10487	-0.05110	0.26668	-0.15555	0.28457	0.05736	0.14362	0.21659	0.95188	-0.09441	-0.02937	0.32052	0.28590	-0.19013	0.40432	-0.35543	-0.65288	-0.45925	-0.81363	-0.32468		
0.05737	0.09095	-0.06626	-0.07500	0.04732	0.08432	0.02452	-0.01805	-0.04114	0.08847	-0.05818	0.14744	-0.00725	-0.02506	0.08001	0.06003	0.00898	-0.05619	0.05775	-0.05227	-0.09588	-0.11748	-0.08549	0.07179	-0.07577	-0.24374	0.25273		
-0.19820	-0.55288	-0.18333	1.58135	0.23815	0.12026	-0.59280	0.06014	-0.14142	0.36885	-0.39108	-0.04059	-0.05922	0.14032	0.50651	-0.03228	-0.35642	-0.19004	0.31706	-0.15891	0.19599	0.51539	0.15237	-1.20530	-0.14801	0.25651	-0.36083		
-0.03814	0.01448	-0.11748	-0.24348	-0.04789	0.02519	-0.05439	-0.13520	0.09302	-0.16508	-0.01531	0.09060	0.08818	-0.08066	0.00866	0.17991	0.00501	0.17387	-0.09489	0.10558	0.29421	0.03396	0.28288	0.00211	0.01499	0.40050	-0.25608		
-0.21022	-0.27069	0.28037	4.87188	-0.32398	0.49303	-0.75782	0.99467	-1.20380	0.43062	0.52419	-1.99772	1.29601	0.19949	-0.23467	-0.25715	-0.05011	0.01809	0.36978	-1.09931	-1.09462	-1.02490	0.56832	-1.73741	-2.54191	0.45539	-0.21237		
0.05902	0.07204	-0.16577	0.45433	-0.10316	0.13846	-0.01078	-0.04377	0.18506	0.13597	0.11334	-0.06638	0.12977	-0.02531	0.19211	-0.00258	-0.19065	0.06626	0.13411	0.22243	-0.09298	0.09071	-0.09950	0.19630	0.32483	0.01220	-0.14747		
-0.00494	0.69191	0.11839	-0.23217	-0.67726	0.18045	0.44690	-0.39946	-0.52863	-0.35874	-0.16079	-0.14187	0.74243	0.22369	-0.49110	0.03001	-0.11198	-0.10597	-0.17428	0.67697	0.02622	0.62539	0.33307	-1.55088	0.16791	-0.41133	0.47708		
0.02239	0.86795	-0.00890	0.32537	-1.06599	0.17696	0.92820	-0.25035	-0.31400	0.60544	-0.34832	-0.52268	0.15058	0.17536	0.73094	0.61825	-0.28945	0.13314	0.46769	-0.91302	-0.19261	-0.21901	-0.79287	0.53770	-0.61794	0.16539	0.32174		
-0.03583	0.01185	0.17255	0.21503	-0.09036	-0.05089	0.03675	-0.04339	-0.22547	0.07036	-0.09161	-0.22359	-0.07368	0.02577	-0.05157	-0.03478	0.08776	0.02673	0.06182	-0.13850	-0.19124	-0.17612	-0.31714	-0.12409	-0.06718	-0.39828	-0.00932		
-0.02571	-0.20599	-0.63166	-0.17447	-0.14746	-0.06055	0.06374	0.10878	0.23619	-0.14595	0.06722	-0.07149	-0.20350	-0.02943	-0.23228	0.17543	0.02337	-0.13223	-0.01017	0.00756	0.08296	-0.00416	0.33097	-0.29504	-0.28313	0.21479	-0.21612		
0.12718	-0.87512	-0.15249	-1.12248	-0.50490	0.09081	0.67007	0.67950	-0.07624	-0.76468	0.78303	-0.51863	-0.25633	0.10967	-0.53418	0.01950	0.08652	-0.00219	-0.37827	0.13804	-1.39079	0.13515	-0.20957	-0.32575	-0.69933	0.1934	-0.15318		
-0.73444	-0.81830	-0.99830	0.62707	0.30519	-0.04382	-0.98976	0.78859	0.44332	-0.89840	0.28194	-0.85021	-0.60072	0.45640	-0.60525	0.31452	0.62043	-0.86504	-0.37867	0.43459	0.99135	0.79833	0.08440	-0.48500	0.32167	-1.8682	0.09727		

ANEXE

Tableau C.2. Poids et biais du meilleur modèle RQSP-RNA pour Tc

couche d'entrée – Couches cachées																								Couches cachées – Couche de					
Poids																								Biais	Biais				
nCIC	Jhetv	Jhete	BLI	X3sol	IC1	TTC1	ATS1m	MATS4m	EEig01x	GATS4m	EEig05x	EEig05d	Mor15m	Mor18m	SMTIV	Mor19m	Mor20m	E1s	R4u	R2e	H-047	TPSA(NO)	Mor11u	ATS4m					
W'_{j_1}	W'_{j_2}	W'_{j_3}	W'_{j_4}	W'_{j_5}	W'_{j_6}	W'_{j_7}	W'_{j_8}	W'_{j_9}	$W'_{j_{10}}$	$W'_{j_{11}}$	$W'_{j_{12}}$	$W'_{j_{13}}$	$W'_{j_{14}}$	$W'_{j_{15}}$	$W'_{j_{16}}$	$W'_{j_{17}}$	$W'_{j_{18}}$	$W'_{j_{19}}$	$W'_{j_{20}}$	$W'_{j_{21}}$	$W'_{j_{22}}$	$W'_{j_{23}}$	$W'_{j_{24}}$	$W'_{j_{25}}$	b''	W'_{j_j}	b''		
1.49678	-0.26582	0.74413	-0.23843	2.09187	0.66525	1.04580	0.48394	0.02396	-0.32539	0.76437	1.86872	-0.16950	0.82001	0.24902	-0.05518	1.93367	0.75164	-0.83307	1.18569	-1.07215	-0.14641	2.47328	0.27367	1.11882	-0.76112	2.52295	-0.41343		
0.92330	0.46187	0.23858	0.03932	1.19755	0.60537	1.55683	0.04828	-0.09682	0.62143	0.57643	0.79686	0.22982	0.37657	0.41154	0.09353	0.24726	-0.02688	-0.12962	0.50470	-0.55796	0.39885	0.02267	0.39468	0.80239	0.75807	0.00624			
0.49952	-1.28861	0.94082	0.23450	0.85991	0.20061	0.75659	-1.69385	-0.77734	-0.25301	-0.81816	-0.12847	-0.65693	-0.51726	-0.01841	0.04013	-0.58019	0.32415	-0.10933	-0.06767	1.40760	-0.32704	-0.28009	0.24812	0.44898	0.64740	-1.97205			
-0.12060	1.00991	0.75143	1.56261	0.62388	1.01412	0.55250	2.03883	-0.41116	0.41762	0.31038	0.62846	0.11371	0.74864	-0.17981	0.00392	0.43491	0.43421	1.73191	1.00026	-0.00078	-0.02841	0.79419	-0.55281	0.45757	-0.87043	2.93418			
1.04794	1.61097	-0.75581	0.26543	1.77973	0.37375	1.98842	1.20204	-0.11080	0.34649	-0.41485	0.68301	0.35865	-0.41986	0.49626	0.34316	-0.21132	-1.32712	-0.46811	0.81465	0.47570	0.42675	0.22673	-1.69036	0.97605	1.33060	-2.11867			
1.18105	0.10168	-0.73640	0.31806	0.76864	-0.27192	0.83849	0.13221	-1.27361	-0.92860	-0.80321	-0.02370	-0.55808	0.03166	-0.06967	0.43703	-0.22734	0.02878	-0.63823	-0.16401	0.47349	-0.25665	-0.03330	0.15483	0.72480	0.46680	1.50096			
-0.86603	-0.55217	0.29555	0.20651	-1.10805	-0.58325	-1.30108	-0.63352	-0.02376	-0.47161	-0.78001	-0.76297	-0.38074	-0.23618	0.25514	-0.09509	0.19312	0.06036	0.15213	-0.29840	0.70573	-0.56173	-1.18681	0.53303	-1.04349	0.01355	0.79789			
-0.51578	0.40593	0.23347	0.17010	-1.21877	-0.75268	-0.29338	0.04686	-0.68422	-0.22204	0.75748	-0.28017	0.53486	0.39242	-0.09942	0.10196	0.51666	-0.32729	-0.97288	-0.68062	-0.09310	-0.21744	-0.64930	0.06751	0.21273	0.66137	-1.04917			
-1.07717	-0.08151	0.84338	-0.38427	-1.25231	-0.12269	-1.30264	0.51788	-0.93180	-0.00234	0.55079	-1.05426	-0.41617	-0.44711	-1.10886	-0.22368	-0.04436	1.79876	0.20305	-1.03842	0.18905	-0.26986	1.40168	-0.02871	-0.79149	-1.36910	3.77643			
0.16791	-0.95147	0.62165	-1.56078	0.27596	0.02337	0.21717	-1.06411	0.08587	0.24559	0.30793	-0.21982	-0.90499	-0.94106	0.79463	0.11523	-0.87512	-1.47074	2.24280	-1.70715	-2.97958	0.06979	0.61304	0.06000	0.17461	0.30002	-1.86371			
-0.96911	0.94196	-0.01859	0.50959	0.89935	0.39469	0.33531	0.15460	-0.88738	-0.73144	0.45724	0.81443	-0.18987	-0.25196	-0.04547	0.00070	1.44827	0.33652	-0.91049	-0.18293	1.40015	0.23572	2.32659	-0.03591	1.26371	-0.47157	1.11042			
0.84511	0.26876	0.14756	-0.03132	0.90991	-0.05936	0.78578	-0.21661	-0.04401	0.11091	-1.07321	0.67779	-0.07175	0.75970	-0.83078	0.19498	0.48896	-0.60327	0.74981	0.47266	-1.06773	0.97757	-0.26298	0.16255	-0.10233	-0.33474	-0.35470			
-0.25827	1.53699	1.40728	0.97732	-2.43107	-2.00539	1.09609	-1.10679	-1.56965	0.27399	-0.20733	0.40929	0.95173	-0.88360	2.46798	-0.56971	-0.56565	-0.03625	-2.58375	-0.60890	1.88706	-0.43424	-1.35774	0.70569	1.90621	1.40521	-2.63054			
-1.26512	1.35133	-1.23853	0.40114	-1.88698	0.21577	-0.07932	-1.14738	0.76347	-1.22794	-0.18498	-0.52728	0.68412	-0.61509	-0.28230	-0.09727	0.04190	-0.01832	-0.18825	0.94958	-0.05152	-0.19151	0.95233	-0.80430	-0.05252	0.12220	-1.28850			
-0.02571	-0.20599	-0.63166	-0.17447	-0.14746	-0.06055	0.06374	0.10878	0.23619	-0.14595	0.06722	-0.07149	-0.20350	-0.02943	-0.23228	0.17543	0.02337	-0.13223	-0.01017	0.00756	0.08296	-0.00416	0.33097	-0.29504	-0.28313	0.21479	-0.21612			
0.12718	-0.87512	-0.15249	-1.12248	-0.50490	0.09081	0.67007	0.67950	-0.07624	-0.76468	0.78303	-0.51863	-0.25633	0.10967	-0.53418	0.01950	0.08652	-0.00219	-0.37827	0.13804	-1.39079	0.13515	-0.20957	-0.32575	-0.69933	0.1934	-0.15318			
-0.73444	-0.81830	-0.99830	0.62707	0.30519	-0.04382	-0.98976	0.78859	0.44332	-0.89840	0.28194	-0.85021	-0.60072	0.45640	-0.60525	0.31452	0.62043	-0.86504	-0.37867	0.43459	0.99135	0.79833	0.08440	-0.48500	0.32167	-1.8682	0.09727			

ANEXE

Tableau C.3. Poids et biais du meilleur modèle RQSP-RNA pour Pc

couche d'entrée et couches cachées																								Couches cachées - Couche de		
RBN	nO	T11	Lop	X3sol	IDDE	Vindex	ATS1m	ATS3m	ATS2m	poids										Biais		Biais				
										ESpm03u	ESpm01d	EEig07d	BELm2	RDF055v	Mor09u	E1s	HATS0u	R2e	H0m	Hy	TPSA(NO)		MLOGP	po	bi	
W'_{j_1}	W'_{j_2}	W'_{j_3}	W'_{j_4}	W'_{j_5}	W'_{j_6}	W'_{j_7}	W'_{j_8}	W'_{j_9}	$W'_{j_{10}}$	$W'_{j_{11}}$	$W'_{j_{12}}$	$W'_{j_{13}}$	$W'_{j_{14}}$	$W'_{j_{15}}$	$W'_{j_{16}}$	$W'_{j_{17}}$	$W'_{j_{18}}$	$W'_{j_{19}}$	$W'_{j_{20}}$	$W'_{j_{21}}$	$W'_{j_{22}}$	$W'_{j_{23}}$	$W'_{j_{24}}$	b_j^H	W'_{1j}	b_0^0
0.13552	0.28506	0.74111	-0.12884	-0.61349	-0.28138	0.53747	-0.03128	-0.37447	-0.29352	-0.47349	0.19791	0.22587	0.37572	-0.10500	-0.07252	-0.71209	0.19832	0.17495	-0.07331	0.25474	-0.33714	1.18853	-0.11214	0.00632	0.19062	-0.16719
-1.91430	0.50642	1.08285	0.43822	0.92434	-0.34283	0.08602	0.65177	0.89361	-0.50300	-0.95286	-0.85329	-1.63352	-0.25797	-0.95086	-0.56125	-0.13284	0.18237	-0.56333	-0.62289	-0.610778	2.23676	1.06456	-1.88252	-0.37389	0.54459	
-0.23710	0.90029	0.51634	-0.75124	0.65398	-0.24139	-0.63945	-0.19813	-0.02328	0.83069	0.00175	-0.06863	-0.25022	-0.35751	0.01647	-0.78104	-0.91203	-1.37183	0.04790	0.47951	-0.30051	-0.54495	-0.99023	0.22246	-0.36262	-0.25783	
0.63041	-0.83691	0.03072	-1.33895	-0.58017	-0.02434	0.52387	-1.23395	0.52548	0.76974	-1.56148	-1.30006	-0.95436	-1.69823	-0.19037	0.17764	-0.16520	0.25926	-0.41407	1.06698	-1.594488	0.33423	2.09388	-2.07199	0.40192	-0.64453	
0.11283	-0.17597	0.67988	-0.29409	-0.72178	0.32730	0.11698	0.09042	0.48745	-0.24396	-0.64451	0.03850	0.10517	0.13888	0.00792	-0.43615	-0.97611	0.24454	0.33240	-0.55489	0.278487	-0.40094	0.36754	-0.13548	-0.27380	0.30525	
-0.43286	1.91381	0.29476	-0.07219	-0.64645	-0.18198	-0.38958	0.04331	-0.87584	1.54514	0.22896	-0.48540	-0.69000	0.01738	0.23802	-1.93243	-1.52360	-0.93522	-0.71081	1.86359	-0.71184	-0.70801	-0.45707	-0.69320	-0.11092	-0.16984	
0.11733	-0.10581	0.16178	-0.74602	-0.06412	-0.25533	0.03568	0.02992	-0.08704	0.33128	-0.17629	0.02682	-0.31167	-0.02962	-0.31014	-0.20629	-0.20229	0.05742	0.04558	0.05522	-0.451159	0.63573	-0.09718	-0.02608	-0.09108	0.62274	
-0.04224	-0.70832	-0.36060	-0.31942	-0.51720	0.31037	1.01575	-1.16885	0.34339	-0.04572	-1.56345	1.45396	0.94953	-0.19533	-1.61476	0.24551	-0.81758	0.42920	-0.44420	-0.34637	0.1154947	1.31329	-0.14101	-0.61566	0.42292	-0.20332	
-1.52576	1.10248	0.82075	-0.91354	-0.54181	-0.41653	-0.21207	0.96905	-0.45949	0.23084	-0.04830	-0.85440	0.02338	-0.62532	0.98913	0.00936	-0.29410	-0.87481	1.04058	0.95176	-0.585044	1.15022	-0.17445	-0.31544	-0.73107	0.15070	
-1.38002	0.00613	-0.02573	-0.04201	-0.17457	-0.15311	0.24521	0.84274	0.18827	-0.14275	-0.43380	0.02977	0.00395	-0.27332	-0.87818	-0.04941	-0.24087	0.03186	0.54372	0.21201	-0.199344	0.01900	-0.96036	-0.26242	-0.17513	0.10150	
-0.61953	0.28142	0.85908	-0.34730	0.58118	0.30691	0.05029	-0.76504	-0.23578	0.01116	0.15944	0.05363	-0.05564	-0.06601	0.58928	0.04593	-0.00359	-0.94598	-0.06807	0.26278	0.0981006	0.72817	0.53147	-0.33291	0.06694	0.04443	
-0.14127	-0.03401	-0.03461	0.27193	-0.33356	0.18891	0.40921	-0.08247	-0.04138	-0.23820	-0.51463	0.07121	0.51137	-0.03884	-0.04441	0.00754	-0.17238	0.20522	0.09105	0.34135	0.2331172	0.04739	-0.10968	-0.26022	0.10584	0.08524	
-1.80829	0.22617	0.42770	-0.16286	0.45802	0.61641	0.29149	0.89498	0.71870	0.00707	-0.20122	-0.25400	-0.77607	-0.95626	-0.46811	-0.73257	-0.78748	-0.23535	-0.53078	-0.53798	-0.930697	1.39264	0.02858	-1.79498	-0.02850	0.22310	
-0.32117	0.18441	0.05433	-0.29792	-0.40074	-0.05900	0.01831	-0.31155	-0.11632	-0.21743	-1.25265	0.25157	-0.05350	-0.23831	0.27268	-0.07201	0.56226	0.13211	0.18880	-0.02357	0.1822457	0.22186	0.28082	-0.56462	0.45389	-0.03906	
-0.98138	0.39990	0.12880	-0.34776	-0.88539	-0.14784	-0.00921	0.88746	1.11903	-0.31833	-0.49540	-0.01710	-0.27371	0.65294	0.42737	0.39225	-0.59860	0.21101	0.67142	-2.10383	-0.245124	2.22415	1.41135	0.00496	0.45139	-0.08122	
-0.61881	0.27418	-0.12506	-0.39178	-0.28057	-0.30316	0.28911	0.13784	-0.30815	-0.11173	-0.34767	0.15490	-0.00041	0.15750	-0.16377	-0.13553	-0.25188	-0.23623	0.56515	0.37054	-0.006196	0.22429	-0.13809	-0.28513	0.05943	-0.30227	

ANEXE

Tableau C.4. Poids et biais du meilleur

couche d'entrée et couches cachées																		Couches cachées		Couche de sortie		
poids																		Biais		Biais		
Sv	nCIC	RBN	nO	Wap	TI1	RDF045u	RDF040m	EEg06d	EEg08d	Mor25u	GATS4m	ESpm01d	H1m	J3D	H0v	nCp	MLOGP					
$W_{J_1}^I$	$W_{J_2}^I$	$W_{J_3}^I$	$W_{J_4}^I$	$W_{J_5}^I$	$W_{J_6}^I$	$W_{J_7}^I$	$W_{J_8}^I$	$W_{J_9}^I$	$W_{J_{10}}^I$	$W_{J_{11}}^I$	$W_{J_{12}}^I$	$W_{J_{13}}^I$	$W_{J_{14}}^I$	$W_{J_{15}}^I$	$W_{J_{16}}^I$	$W_{J_{17}}^I$	$W_{J_{18}}^I$	b_j^H	W_{1j}^I	b_1^0		
1.19574	0.58475	1.97079	-0.82849	1.90838	-2.31562	2.03853	0.99971	-0.73322	-0.44702	1.57999	0.75699	-0.64604	0.16889	1.28391	-0.84647	0.12268	0.67932	-1,55608	-0,16589	1,28954		
-8.36435	0.71104	-1.11882	0.51720	0.83182	0.54693	1.67553	-0.36431	-0.48818	-0.83672	1.29868	0.94773	-0.14894	-2.14859	-0.34613	-0.34153	-0.16615	-0.51915	-1,05067	-3,69631			
-2.72808	-0.11681	-1.17728	1.19717	-1.75754	2.98320	-1.10491	-0.15388	1.00050	-0.06298	0.92900	0.11419	0.11102	1.02184	4.09208	-0.77490	-1.44000	2.39527	1,14808	-3,89910			
0.43503	0.17212	-0.66605	-0.00619	0.75227	-0.97531	0.39910	0.38949	1.01555	0.10500	0.49436	-0.07939	-1.08485	-0.12797	1.73706	-1.09658	-0.54002	-0.16417	-0,28330	1,28954			
5.85495	-0.03172	1.33046	-0.42327	1.33536	-1.24410	1.33742	0.73006	1.25528	0.30471	1.12155	0.13599	-0.08087	-0.31110	0.81899	-0.79798	0.48814	-0.72326	0,47876	0,97286			
-4.92153	-1.35748	0.59030	-0.87194	0.81808	0.06399	-0.13406	1.29996	0.92025	-0.71757	1.88912	-0.43383	-0.03361	-0.15295	0.37674	-2.53581	1.70990	1.46705	-0,68714	-0,28940			
5.55638	1.17507	0.57046	-0.91906	-0.07789	0.17760	0.28645	-0.50632	-2.18849	0.15006	0.49055	0.06470	0.90644	-0.13444	2.52748	2.40670	-0.50108	-1.70659	1,15178	1,72210			
1.52907	-0.45164	0.50806	-0.09279	-0.09890	0.13726	-0.15427	-0.06322	-0.52252	-0.19977	-0.05808	0.01951	0.69475	0.28910	-1.07663	0.38827	0.52383	0.38653	0,02476	2,07663			
1.71276	0.45980	1.31562	-0.78764	0.98074	-0.66551	1.73948	0.76913	0.75068	0.13810	-0.87311	-1.18269	0.60746	1.06913	1.53456	1.22960	1.66415	1.63277	0,18904	-0,53489			
1.60912	0.26214	1.25212	-0.09790	-0.67964	-1.77724	0.13121	-0.71450	0.73476	0.59757	-0.21963	0.06519	-0.80384	-0.96034	-3.35415	0.78159	1.72595	-1.33869	-0,58169	2,88827			