

Université MUSTAPHA Stambouli

Mascara

Faculté des sciences exactes

Département de chimie

Laboratoire de Chimie Organique, Macromoléculaire et des Matériaux



جامعة مصطفى أسطبولي

معسكر

THESE de DOCTORAT de 3^{ème} cycle

Spécialité : matériaux émergents et environnement

Option : chimie

Intitulée

**Contribution aux méthodes d'additivité de groupes pour la
prédiction des propriétés d'inflammabilités des composés
organiques**

Présentée par : SERAT Fatima Zohra

Le 20/12/2017

Devant le jury :

Président	HACHEMAOUI Aicha	Pr	Université M. S. de Mascara
Examineur	REGUIG BENDOUKHA ABDELKRIM	MCA	Université M. S. de Mascara
Examineur	BOUSALEM Smain	Pr	Université d'Ain Témouchent
Examineur	BENABDELLAH Elhaj Toufik	MCA	Ecole nationale polytechnique d'Oran
Encadreur	BENKOUIDER Ali Mustapha	Pr	Université M. S. de Mascara

Année Universitaire : 2017-2018

Remerciements

Une minuscule goutte d'eau isolée, aussi vaillante soit-elle, ne pourrait tenir tête bien longtemps face aux pièges de la science ... Il n'y a donc que l'association des petites gouttelettes inexpertes, aux côtés des grandes gouttes sages, qui soit capable de rivaliser avec pareille mission.

Avant tout, je remercie ALLAH le tout puissant de m'avoir donné la force et la foi et de m'avoir permis d'arriver à ce stade.

Je tiens tout d'abord à exprimer ma profonde reconnaissance et gratitude au professeur **BENKOUIDER Ali Mustapha** pour m'avoir accepté dans son équipe et d'avoir dirigé cette thèse. Qu'il me soit permis de remercier pour son encadrement scientifique, ses conseils précieux. J'ai très apprécié la confiance que vous m'avez accordée durant mon travail. Toute ma reconnaissance pour cet excellent directeur pour son engagement et encouragement.

Ce travail a été réalisé au sein du Laboratoire de chimie Organique, Macromoléculaire et des Matériaux à l'Université de Mustapha Stambouli de MASCARA, je tiens à remercier très chaleureusement ici le professeur **YAHIAOUI Ahmed** directeur de laboratoire et doyen de la faculté de sciences exactes pour l'honneur qu'il me fait de m'avoir accueillie au sien son équipe de laboratoire.

J'exprime également toute ma gratitude au professeur **KESSAS Rachid** pour son aide tout au long de ce travail

Je tiens à adresser mes vifs remerciements à, Madame **HACHEMAOUI Aicha**, Professeur à l'Université de Mustapha Stambouli Mascara, qui m'a fait l'honneur d'accepter de présider le jury de cette thèse.

J'exprime également mes chaleureux remerciements aux membres de jury : Monsieur **BOUSALEM Smain**, monsieur **REGUIG Bendoukha Abdelkrim** et monsieur **BENABDALLAH EL HADJ Toufik** pour avoir accepté d'examiner ce travail.

Je voudrais remercier toute ma famille, particulièrement mes parents, ma sœur et mes frères (pour m'avoir toujours soutenue dans mes choix professionnels et personnels. Lesquels m'ont toujours fait confiance et transmis des bonnes et sacrées valeurs.

Enfin, je voudrai adresser mes vifs et sincères remerciements à ceux qui ont participé de près ou de loin à l'aboutissement de ce travail.

Sommaire

Remerciements	1
Sommaire	3
Liste des figures.....	6
Liste des Tableaux.....	8
Nomenclature	9
Introduction générale	12
Chapitre I: Synthèse bibliographique, concept théorique et outils de calculs	15
I.1 Introduction	15
I.2 Généralités sur les propriétés d'inflammabilité.....	16
I.2.1 Points d'éclair.....	16
I.2.2 Température d'auto-inflammation (AIT)	21
I.2.3 Limites d'inflammabilité.....	23
I.3 Revue bibliographique des méthodes d'estimation des propriétés d'inflammabilités	26
I.3.1 Introduction	26
I.3.2 Modèles empiriques.....	27
I.3.3 Méthodes de Relation Quantitative Structure à Propriété (QSPR).....	31
I.3.4 Méthodes de contributions de groupes.....	34
I.4 Description de la méthode de contributions des groupes.....	40
I.4.1 Introduction	40
I.4.2 Principe de base	40
I.4.3 Hiérarchie des groupes	41
I.5 Outils numériques de calculs	46
I.5.1 Programme de découpage automatique	47
I.5.2 Programme d'estimation des contributions	49
I.6 Conclusion	50
Chapitre II: Prédiction des points d'éclair : développement, résultats et discussion.....	40
II.1 Introduction	40
II.2 Banque de données des points d'éclair	40
II.2.1 Construction de la base de données des points d'éclair.....	41

II.2.2	Traitement et validation des données de FP	42
II.3	Construction des modèles pour la prédiction des points d'éclair	45
II.3.1	Modèle basé sur la température d'ébullition	45
II.3.2	Modèle basée uniquement sur la structure moléculaire.....	60
II.4	Comparaison du modèle proposé avec ceux de la littérature	73
II.5	Conclusion	74
Chapitre III:	Prédiction des points d'auto-inflammation (AIT) : développement, résultats et discussion	76
III.1	Introduction	76
III.2	Banque de données des points d'auto-inflammation.....	77
III.2.1	Construction de la base de données expérimentale.....	77
III.2.2	Traitement et validation de données expérimentales.....	79
III.3	Construction du modèle pour la prédiction des points d'auto-inflammation.....	80
III.3.1	Fragmentation en groupes des structures moléculaires	80
III.3.2	Définition de la fonction du modèle	81
III.3.3	Recherche des paramètres du modèle par optimisation paramétrique	82
III.3.4	Résultats et discussions.....	85
III.3.5	Comparaison du modèle proposé avec ceux de la littérature	89
III.3.6	Exemples d'applications illustratifs.....	90
III.4	Conclusion	95
Chapitre IV:	Prédiction des limites d'inflammabilité : développement, résultats et discussion	96
IV.1	Introduction	96
IV.2	Banque de données des limites d'inflammabilité.....	97
IV.2.1	Construction d'une base de données expérimentales	97
IV.2.2	Traitement et validation de données expérimentales.....	100
IV.3	Construction du modèle pour la prédiction des limites d'inflammabilité	103
IV.3.1	Fragmentation en groupes des structures moléculaires	103
IV.3.2	Définition des fonctions du modèle	104
IV.3.3	Recherche des paramètres du modèle par optimisation paramétrique	105
IV.3.4	Résultats et discussions.....	109
IV.3.5	Exemples d'applications illustratifs.....	117
IV.4	Conclusion	123
Conclusion générale.....		125
Bibliographie		128
Annexe A : Points d'éclair		136

Annexe B: Points d'auto-inflammations	170
Annexe C : Limites d'inflammabilité	193

Liste des figures

Figure I-1 : Diagramme d'inflammabilité avec la courbe de pression de vapeur.	17
Figure I-2 : Domaine d'inflammabilité	24
Figure I-3 : Exemple de division de molécule d'éthanol a fragments atomique et bande et groupement structurel[77].	43
Figure I-4 : 1,9-nonadiol	45
Figure I-5 : N-Phenyl-1,4-benzenediamine	46
Figure I-6 : illustre la représentation du code SMILES de la molécule ; acide 1-cyclopropyl-6- fluoro-4-oxo-7-piperazin-1-yl-quinoline-3-carboxylique.	48
Figure I-7: Programme de recherche automatisée des groupes.	49
Figure II-1 : description des familles chimique dans la base de données FP	42
Figure II-2 : Tracé de FP en fonction du nombre de carbone	43
Figure II-3 : Schéma représentatif de la division des données de FP.....	44
Figure II-4 : Rapport FP/NBP pour 1660 composés dans l'ordre croissant	47
Figure II-5 : Rapport FP/NBP en fonction du nombre de carbones.	47
Figure II-6 : Corrélation entre les FP prédites et expérimentales en utilisant le premier modèle.	55
Figure II-7 : Répartition des composés en fonction de l'intervalle de l'EMR.....	56
Figure II-8 : Tracé de FP en fonction du nombre de carbone	62
Figure II-9 : Valeurs prédites par rapport aux valeurs de DIPPR du point d'éclair (modèle sans NBP).....	66
Figure II-10 : Répartition des composés en fonction de l'intervalle des EMR (modèle sans NBP).	66
Figure II-11 : Tracé de FP en fonction du nombre de carbone des n-alcanes.....	67
Figure II-12 : Tracé de FP en fonction du nombre de carbone dans les n-alcool.....	68
Figure III-1 : description des familles chimique dans la base de données d'AIT.....	78
Figure III-2 : Tracé de la température d'AIT en fonction du nombre de carbone.....	80
Figure III-3 : Schéma représentative de la division de la base des données des AIT	80
Figure III-4 : Erreurs de prédiction des températures d'AIT	88
Figure III-5 : Valeurs Prédites par rapport aux valeurs de DIPPR de l'AIP.....	88
Figure III-7 : Répartition des composés en fonction de l'intervalle EMR de AIT.....	89
Figure IV-1 : Description des familles chimiques dans la base de données des LII.....	97
Figure IV-2 : Incertitudes de données des LII.....	98
Figure IV-3 : Description des familles chimiques dans la base de données des LSI.....	99

Figure IV-4 : Incertitudes de données des LII.....	100
Figure IV-5 : Division des deux bases des données : LLI et LSI.....	101
Figure IV-6 : Tracé de LII en fonction du nombre de carbone.	102
Figure IV-7 : Tracé de LSI en fonction N carbone.....	103
Figure IV-8 : Valeurs Prédites par rapport aux valeurs de DIPPR de LII.	111
Figure IV-9 : Erreurs de prédiction des limites d’LII.....	112
Figure IV-10 : Répartition des composés en fonction de l’intervalle d’EMR de LII.....	113
Figure IV-11 : Valeurs Prédites par rapport aux valeurs de DIPPR de la LSI.....	115
Figure IV-12 : Erreurs de prédiction des limites d’LSI.....	116
Figure IV-13 : Répartition des composés en fonction de l’intervalle d’EMR de LSI.....	116

Liste des Tableaux

Tableau I-1 : Méthodes de mesure du point d'éclair.....	20
Tableau I-2 : Dérivations AIT pour certains matériaux dans différentes sources.....	22
Tableau I-3 : Découpage de la molécule de 1,9-nonadiol en groupes.....	45
Tableau I-4 : Découpage de la molécule de N-Phenyl-1,4-benzenediamine en groupes.....	46
Tableau II-1 : Incertitude des données des températures d'éclair.....	41
Tableau II-2 : Valeurs de contributions de groupes du premier ordre donnant FP.....	49
Tableau II-3: Performance statistique du premier modèle donnant FP.....	54
Tableau II-4 : Performance statistique du premier modèle donnant FP par classe de famille : ...	54
Tableau II-5 : Performance statistique du modèle développé (modèle sans NBP).	64
Tableau II-6 : Performance statistique du modèle développé par famille chimique (modèle sans NBP).....	64
Tableau II-7 : Comparaison entre les modèles proposés et ceux de la littérature.....	74
Tableau III-1 : Exactitude de données d'AIP de data base DIPPR.	78
Tableau III-2 : Valeurs de contributions de groupes du premier ordre donnant AIP.....	82
Tableau III-3 : Paramètres statistique du model donnant AIP.....	86
Tableau III-4 : Performance statistique du model donnant AIP par classe de famille :.....	86
Tableau III-5 : Comparaison du model développé avec celle de littératures.	90
Tableau IV-1 : Valeurs de contributions de groupes du premier ordre donnant la LII.....	105
Tableau IV-2 : Paramètres statistique du model donnant LII.....	109
Tableau IV-3 : Performance statistique du premier modèle donnant LII par classe de famille :	110
Tableau IV-4 : Comparaison entre le modèle LII proposés et ceux de la littérature.....	113
Tableau IV-5 : Paramètres statistique du model donnant LSI.....	114
Tableau IV-6 : Comparaison entre le modèle LSI proposés et ceux de la littérature.....	117

Nomenclature

FP: le point d'éclair en (K).

AIT: la température d'auto-inflammation en (K).

LII: la limite inférieure d'inflammabilité en (%).

LSI: la limite supérieure d'inflammabilité en (%).

t_{AIT}: délai d'inflammation.

K: conductivité thermique.

ρ: Densité.

C: capacité calorifique spécifique du mélange.

q: flux de chaleur

T₀: Température initiale.

C_{g,n}: la plus grande concentration de carburant dans les oxydants qui sont non inflammables.

C_{L,n}: la plus petites concentration de carburant dans les oxydants qui sont non inflammables.

C_{g,f}: La plus grande concentration de carburant dans les oxydants qui sont inflammables.

C_{L,f}: La plus petites concentration de carburant dans les oxydants qui sont inflammables.

X_{st}: Concentration stœchiométrique.

δ_i: Nombre d'atomes.

°C, G_i: l'atome et la contribution de groupe.

T_b: Température d'ébullition.

NBP: Température d'ébullition normale.

SG: Gravité spécifique.

Δ_{vap}H[°]: Enthalpie standard de vaporisation.

1X : Indice de connectivité moléculaire.

$\sqrt[3]{Gb}$: Racine cubique de l'indice gravitationnel.

HDCA : Zone de surface accessible aux solvants chargée par un donneur d'hydrogène.

MR : Poids moléculaire divisé par le nombre d'atomes dans la molécule.

m_i, m_j : Masses atomiques des liens les atomes.

r_{ij} : Désignent les longueurs de liaison respectives.

N_i, M_j, E_k : Occurrence de chacun groupe dans la molécule.

C_i, D_j, O_k : Contribution de premier, second et troisième ordre de découpage.

$C_{p\text{ prod}}$: Capacité calorifique des produits de combustion.

T_{ad} : Flamme adiabatique température.

ΔH_c° : Chaleur de combustion.

$C_{p\text{ flue-air}}$: Capacité calorifique du composé et de l'air.

Υ : Constante linéaire spécifique composée de T_{ad} .

$C_{p\text{ carburant}}$: capacité calorifique d'un spécifique composé.

T_{ref} : Température de référence.

$C_{p\text{ air}}$: Capacité calorifique de l'air à la référence température T_{ref} .

n_i, ϕ_i : Nombre et la contribution du groupe fonctionnel.

k^{LFL} : Constante de proportionnalité spécifique.

α : Exposant empirique.

rms : écart du carré moyen.

γ_i : Les coefficients activités,

x_i : fraction molaire du composé.

θ_i : fraction surfacique, Φ_i : fraction volumique

r_i : volume moléculaire de Van der Waals.

q_i : surface moléculaire.

τ_{ji} : paramètres binaires ajustables évalués à partir de données expérimentales d'équilibre de phase.

\hat{F}_n : Prédiction de la propriété de la nième molécule.

$F_{n(EXP)}$: Valeur expérimentale de la propriété de la nième molécule.

N : Nombre total de molécule utilisée dans la recherche des valeurs de contribution de groupes.

a, b : Paramètres ajustables.

N_i, M_j, E_k : Nombres d'occurrences de contributions de groupe individuelle.

C_i : Contribution de groupe de premier ordre de type *i*.
D_j : Contribution de groupe de deuxième ordre de type *j*.
O_k : Groupe de troisième ordre des contributions du type *k*.
EMR : Erreur moyenne relative.
EAM : Erreur absolue moyenne.
ET : Ecart type.
EQM : Erreur quadratique moyenne.
DMAX : Déviation maximale.
R²: Coefficient de détermination.
(K) : Kelvin.
(°C): Degree Celsius.
(kJ/mol) : kilojoules par mole.
(g) : gramme.

Introduction générale

Aux conditions ambiantes normales, les composés inflammables peuvent libérer assez de vapeur ou de gaz pour former des mélanges combustibles avec l'air, ce qui peut provoquer de graves risques d'incendie. Les feux de composés inflammables brûlent rapidement en libérant beaucoup de chaleur et souvent, de dense nuages de fumée toxique. De plus, les composés combustibles dont la température dépasse le point d'éclair dégagent assez de gaz ou de vapeur pour former des mélanges combustibles avec l'air. Les composés combustibles chauds peuvent former un risque d'incendie aussi grave que les composés inflammables.

En plus des dangers d'incendie ou d'explosion que peuvent causer ces composées, s'ajout certaines autres effets indésirables qui peuvent être dangereuses pour un organisme. Ces substances peuvent également provoquer des problèmes de santé suivant leurs natures et de la voie d'exposition (contact avec les yeux, inhalation de vapeur, ou ingestion, ou la peau). Certains composés combustibles et inflammables sont corrosifs et beaucoup d'entre eux peuvent être soumis à des réactions chimiques dangereuses au contact de produits chimiques incompatibles tels que les matières comburantes.

Aujourd'hui, dans les industries chimiques et pétrochimiques, les composés inflammables et combustibles sont très répandus utilisés dans différents conditions, y compris différentes températures, diverses pressions, quantités et concentrations d'oxygène, etc... Cependant, pour éviter les risques liés à de tels composés sur les lieux de travail, une connaissance détaillée et précise des propriétés d'inflammabilité est nécessaire.

Parmi les propriétés physico-chimiques permettant de contribuer à l'évaluation des risques associés aux substances inflammables ou combustibles sont les propriétés d'inflammabilités à savoir le point d'éclair, les limites d'inflammabilité inférieures et supérieures et le point d'auto-inflammation. Ces propriétés jouant un rôle capital dans le domaine de la sécurité industrielle des installations chimiques et leur détermination est essentielle voir inévitable.

Ces propriétés d'inflammabilités peuvent être déterminées expérimentalement par différentes méthodes, donnant des données précises et fiables. Cependant, quelle que soit la méthode expérimentale employée, ces mesures restent longues et coûteuses à effectuer, en particulier, si un composé est métastable, toxique ou à d'autres propriétés dangereuses. De plus, l'écart important entre le nombre de composés enregistrés et les valeurs expérimentales disponibles des propriétés d'inflammabilités, augmente constamment.

Il est, donc intéressant de disposer de méthodes prédictives permettant d'obtenir les propriétés d'inflammabilités par un calcul entièrement prédictif pour une large gamme de composés organiques.

Le but de cette thèse est de développer de nouvelles méthodes prédictives permettant de calculer avec précision les propriétés d'inflammabilités des composés organiques appartenant aux différentes familles chimiques. Les méthodes proposées sont totalement prédictives assurant la prédiction à partir uniquement des structures moléculaires des composés. Ces méthodes ont à la fois un large intervalle de prédiction avec un important pouvoir prédictif. L'approche de contribution de groupes d'ordre trois est principalement adoptée pour le développement des méthodes proposées.

Ce travail de recherche a été réalisé au sein du Laboratoire de Chimie Organique Macromoléculaire et Matériaux de l'Université de Mustapha Stambouli de Mascara. Il repose sur quatre chapitres principaux qui sont :

Le premier chapitre, intitulé synthèse bibliographique, concept théorique et outils de calculs, est formé de trois parties. La première présente des généralités sur les propriétés d'inflammabilités, et la seconde partie décrit une revue bibliographique sur les différentes méthodes prédictives proposées dans la littérature. Nous y abordons au passage, le choix des méthodes de contributions de groupes pour le développement de

nos modèles prédictifs. La dernière partie mettra la lumière sur les outils de calculs numérique développés dans le cadre de cette thèse.

Nous proposons dans le deuxième chapitre deux méthodes de contributions de groupes d'ordre trois pour la prédiction des points d'éclair. La première méthode est basée sur la structure moléculaire et la température d'ébullition d'un composé donné. En revanche, la deuxième méthode est totalement prédictive utilisant uniquement la structure moléculaire comme source d'information. Les résultats de prédiction obtenus sont discutés, analysés et comparés.

Le troisième chapitre sera dédié à la température d'auto-inflammation où une nouvelle méthode de contributions de groupes d'ordre trois est développée. Les résultats de la prédiction obtenus sont discutés, analysés et comparés à la fois aux valeurs expérimentales existantes et aux valeurs calculées par des méthodes concurrentes issues de la littérature.

Le quatrième et dernier chapitre sera consacré à la proposition d'une méthode prédictive estimant les deux limites d'inflammabilité supérieure et inférieure. Pour chaque limite d'inflammabilité un modèle de contributions de groupes d'ordre trois est proposé. Les deux modèles sont totalement prédictifs basant uniquement sur la structure moléculaire comme source d'information. La qualité des prédictions des deux modèles est présentée, discutée et comparée avec des modèles concurrents les plus utilisés dans la littérature.

Il convient de noter que dans les trois derniers chapitres, une base de données expérimentale conséquente contenant plusieurs composées organiques appartenant à plus de 70 familles chimiques a été mise au point pour chaque propriété prédite.

Finalement, une conclusion générale synthétise l'ensemble des principaux résultats obtenus durant ces travaux de thèse ainsi que les perspectives envisagées

Chapitre I: Synthèse bibliographique, concept théorique et outils de calculs

I.1 Introduction

Les propriétés de la sécurité des composés chimiques ou biologiques dangereuses fournissent des informations indispensables pour l'évaluation des risques des produits chimiques dans les procédés industriels et domestiques. En particulier, les propriétés liées à l'inflammabilité telles que la limite d'inflammabilité inférieure et supérieure (LII et LSI), le point d'éclair (FP) et la température d'auto-inflammation (AIT) sont importantes voir capitales pour quantifier le risques d'incendie et d'explosion [1, 2].

Dans la phase de conception précoce des installations chimiques, une grande quantité de produits est généralement analysée, comparée et classée. Chaque fois que les valeurs expérimentales ne sont pas disponibles, les modèles de prédiction des propriétés deviennent un outil précieux.

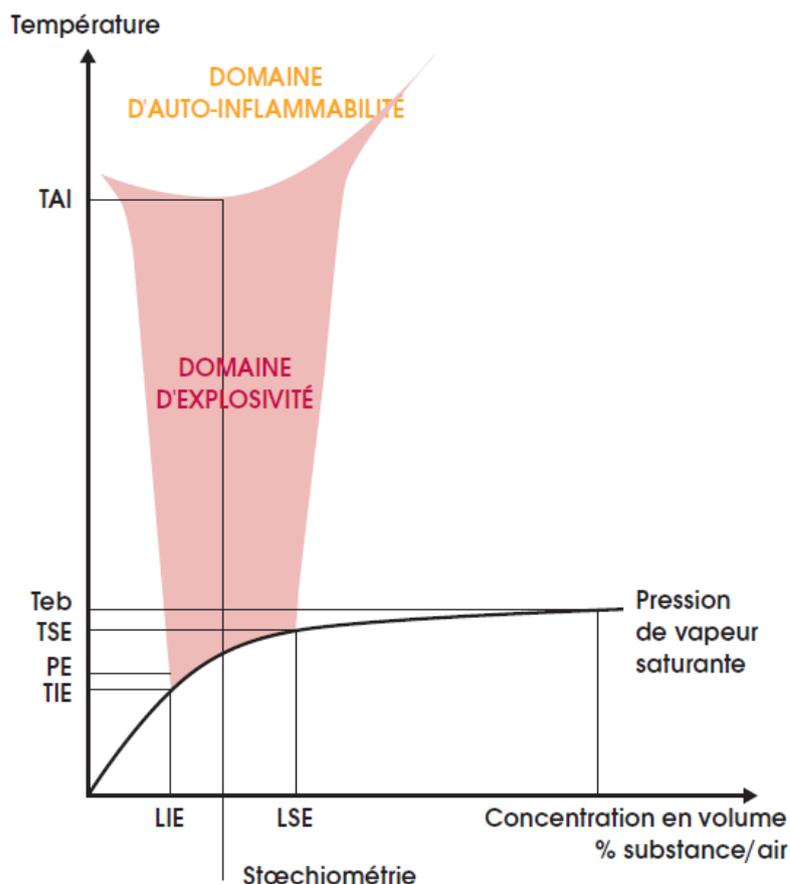
Dans cette section nous essayons de projeter la lumière d'un côté sur les généralités sur les propriétés d'inflammabilités (point d'éclair, point d'auto-inflammation, et les limites d'inflammabilités), et d'un autre côté sur une synthèse bibliographique des méthodes d'estimation des propriétés d'inflammabilités principalement les méthodes basées sur le concept de contributions des groupes. Enfin, les outils de calculs numériques développés dans le cadre de cette thèse seront présentés suivis par une conclusion.

I.2 Généralités sur les propriétés d'inflammabilité

Les propriétés d'inflammabilités des composés organiques sont parmi les propriétés physico-chimiques les plus importants jouant un rôle central dans les laboratoires et les usines chimiques. En effet, ces propriétés d'inflammabilités représentent un enjeu important voire capital dans la prévention des risques liés à la production, stockage et à l'utilisation des produits chimiques [1].

I.2.1 Points d'éclair

Le point d'éclair ou point d'inflammabilité (en anglais : flash point) est l'un des propriétés d'inflammabilités les plus importantes pour déterminer les risques d'incendie et d'explosion d'un liquide. Par définition, la température du point d'éclair est la température la plus basse à laquelle un liquide émet assez de vapeur pour former une vapeur d'air inflammable [3]. Généralement, plus la température du point d'éclair est faible, plus le risque d'incendie est important. Il est à noter que la définition du point d'éclair ne doit pas être confondu avec celle du la définition du « point de feu » ou « point de flamme » (*fire point* en anglais) qui est la température la plus basse pour laquelle, après chauffage supplémentaire au-delà du point d'éclair, l'échantillon supportera la combustion pendant 5 secondes [4]. Généralement, les mesures du point d'éclair de différents types sont utilisées comme mesure de l'inflammabilité des matériaux liquides. Le point d'éclair est également lié à la limite inférieure d'inflammabilité, qui est la concentration minimale du matériau dans un mélange combustible / air qui produira une flamme. La Figure I-1 montre l'interrelation des propriétés d'inflammabilité graphiquement en ce qui concerne la pression de vapeur des composés.



TIE : température pour laquelle la pression de vapeur saturante permet d'atteindre, après son mélange avec l'air, la LIE
 TSE : température pour laquelle la pression de vapeur saturante permet d'atteindre, après son mélange avec l'air, la LSE
 PE : point d'éclair
 Teb : température d'ébullition
 TAI : température d'auto-inflammation du mélange air-vapeurs.

Figure I-1 : Diagramme d'inflammabilité avec la courbe de pression de vapeur.

De nombreux procédés de fabrication impliquent des produits chimiques inflammables. Par conséquent, les points d'éclair et les limites d'inflammabilité sont essentiels pour évaluer la sécurité dans la conception des processus et les procédures opérationnelles. L'inflammabilité est un facteur important dans le développement de pratiques sûres pour la manipulation et le stockage des mélanges liquides. Les organismes de réglementation utilisent également les déterminations des points d'éclair pour classer les liquides inflammables et combustibles afin d'élaborer des règlements tels que ceux de l'EPA (Environmental Protection Agency) et du DOT (Department of Transportation).

Dans la littérature scientifique, de nombreuses études ont été consacrées à la propriété du point d'éclair, mais parallèlement peu de travaux ont été publiés sur le contexte théorique de cette propriété.

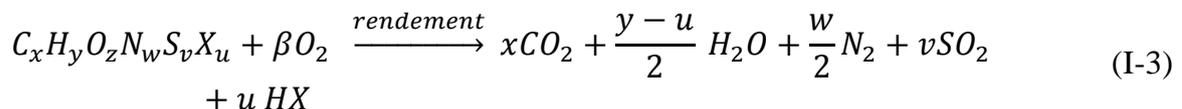
Généralement, la pression de vapeur des composés est un indicateur fort de la vitesse et de la quantité d'évaporation : plus la pression de vapeur est faible plus l'évaporation est faible. Le point d'éclair a une relation directe avec l'évaporation et la pression de vapeur : plus le taux d'évaporation est rapide, plus le point d'éclair est bas. Par conséquent, il existe une bonne relation entre le point d'éclair et la pression de vapeur. Physiquement, la concentration d'un produit chimique dans la phase vapeur au point d'éclair peut être modélisée par sa pression de vapeur à la température du point d'éclair. Si l'air et le composé sont supposés être modélisés par la loi de gaz idéale, l'équation ci-dessous s'appliquera.

$$\frac{P_{sat}(T_{FP})}{1 \text{ atm}} = \text{fraction molaire en phase vapeur} \quad (\text{I-1})$$

Selon Rowley [5, 6], des modèles tels que celui proposé par Leslie et Geniesse [7], qui repose sur cette relation physique entre le point d'éclair et la pression de vapeur, se sont révélés extrêmement précis lorsqu'ils prédisent les valeurs des points d'éclair pour les 1062 produits chimiques signalés dans la base de données DIPPR © 801 [8].

$$\frac{P_{sat}(T_{FP})}{1 \text{ atm}} = \frac{1}{8 \cdot \beta} \quad (\text{I-2})$$

Ils ont constaté qu'il y avait une relation entre la pression de vapeur, point d'éclair et le coefficient stœchiométrique d'oxygène, β , nécessaires pour brûler complètement le matériau. La quantité de moles d'oxygène nécessaire pour brûler complètement une mole d'une molécule organique est décrite par l'équation de réaction chimique équilibrée donnée ci-dessous [5],



Avec

$$\beta = x + v + (y-u)/4 - z/2 \quad (\text{I-4})$$

Avec cette information la formulation d'une concentration stœchiométrique de carburant dans l'air nécessaire à la combustion est possible.

I.2.1.A Détermination expérimentale du point d'éclair

Dans la littérature scientifique, il existe plusieurs composés chimiques dont les valeurs expérimentales du point d'éclair sont rares ou trop chères à obtenir. D'autre part, la détermination expérimentale des valeurs de point d'éclair des composés volatils, toxiques, explosifs et radioactifs est plus difficile. Par conséquent le développement des méthodes de prédiction des points d'éclair est incontournable [9].

Généralement la détermination expérimentale du point d'éclair implique un chauffage lent du liquide mis en contact avec l'air, l'application d'une source d'ignition et l'enregistrement de la température correspondante. D'une manière expérimentale, il existe généralement deux façons pour déterminer le point d'éclair d'un produit chimique [1, 2]:

- Vase ouvert (Open cup)
- Vase fermé (Closed cup)

Fondamentalement, les mesures des vases fermés sont conservatrices car toutes les vapeurs sont disponibles et aucune ne s'échappe. Généralement, les méthodes utilisant des vases fermés peuvent être classées en deux catégories : ceux dont les vapeurs au-dessus du liquide ne sont pas en équilibre de température avec le liquide, tels que la méthode de Pensky-Martens [10] (voir tableau ci-dessous), et ceux dont l'équilibre liquide vapeur est réalisé au-dessus du liquide, comme la méthode de Tag (voir tableau ci-dessous). Les mesures des vases fermés sont réalisées en présence des substances ayant des faibles valeurs de FP. Ces méthodes affichent des faibles valeurs par rapport à celles obtenues par les méthodes utilisant la technique de vase ouvert. Dans les dispositifs à vase ouvert, l'échantillon est contenu dans une coupe ouverte qui est chauffée et, à intervalles réguliers, une flamme sur la surface est provoquée. Le point d'éclair mesuré varie effectivement avec la hauteur de la flamme au-dessus de la surface du liquide. L'exemple de méthode le plus connu est la Cleveland Open Cup (voir tableau ci-dessous).

Diverses méthodes de mesures standardisées ont été développées en se basant sur les deux techniques expérimentales (vase ouvert et vase fermé), et leur description est présentée dans plusieurs manuels de normes techniques tels que celui d'ASTM International (American Section of the International Association for Testing Materials) [10], ISO (Organisation internationale de normalisation) [11]. Ces

méthodes de mesures sont associées à des intervalles de température variables. Le tableau (I-1) présente ces méthodes de mesures ainsi que leurs normes et les températures associées :

Tableau I-1 : Méthodes de mesure du point d'éclair

Type	Norme	T° (°C)	Remarques
Abel, Abel-Pensky, Pensky-Martens, Tag	ISO 1516	5–65	Flash / Non Flash
Abel, Abel-Pensky, Pensky-Martens, Tag	ISO 1523	-30–110	Norme Allemande DIN 53213
Abel, Abel-Pensky, Pensky-Martens	EN 924	-30–370	Colles sans et avec solvants
Tag, Pensky-Martens	ASTM D 3941	-18–370	
Abel-Pensky	DIN 53213	<65	Peintures, vernis, gommes et similaires avec solvants
Rapid-Tester	ISO 3680	-30–300	Flash / Non Flash avec 2 ml
Rapid-Tester	ISO 3679	-30–300	Peinture sans solvants
Rapid-Tester	DIN EN 456	<110	modifiée d'ISO 3679
Rapid-Tester	ASTM D 3278	0–110	
Abel	ISO 13737	-30–70	
Tag	ASTM D 56	-18–93	
Pensky-Martens	ISO 2719 EN 22719	40–370	
Pensky-Martens	ASTM D 93	40–370	
Cleveland Coupe Ouverte	ISO 2592 ASTM D 92	79–400	Point de feu
ppm Minicup (Petrotest)		-30–370	2 à 15 ml de solvant
Grabner Miniflash	ASTM D 6450 ASTM D 7094	-25–400	1 ml de solvant
Sustain Combustion Test (*)	ISO 9038 ASTM D 4206	0–110	

Il est à noter que les mesures des points d'éclair dépendent relativement de l'équipement instrumental, la technique de mesure et l'environnement de l'instrument de mesure.

1.2.2 Température d'auto-inflammation (AIT)

La température d'auto-inflammation (AIT), également appelée point d'auto-inflammation, température d'inflammation spontanée, température d'inflammation autogène, température d'auto-inflammation ou point d'ignition minimale, est la température la plus basse d'une surface chaude à laquelle une substance ou un mélange de matériau combustible s'auto-enflamme spontanément dans une atmosphère normale sans source d'inflammation externe, comme une flamme ou une étincelle.

Habituellement, l'AIT est bien élevée que le point d'ébullition et le point d'éclair du matériau. L'interrelation entre AIT et les propriétés d'inflammabilité est montrée graphiquement sur la Figure I-1. Contrairement aux points d'éclair, la température AIT n'a pas besoin d'une source d'allumage. L'AIT est principalement lié à la structure chimique de la molécule et non à son point d'ébullition et elle n'y a pas de lien avec le point d'éclair [2, 12, 13].

Si les pourcentages des gaz d'un mélange sont compris dans le domaine d'inflammabilité et le mélange atteint une température critique appelée la température d'auto-inflammation, le mélange peut s'enflammer sans source locale d'énergie. C'est le phénomène d'auto-inflammation. La température d'auto-inflammation est la température minimale pour laquelle l'auto-inflammation se produit. Pour qu'il y ait une auto inflammation, la température d'un volume est supposée uniforme dans le temps et l'espace. Le délai entre le moment où le mélange atteint les conditions d'inflammation (température, pression) et celui où une flamme visible apparaît est appelé délai d'inflammation est noté t_{AIT} . Ce délai dépend physiquement à la conductivité thermique k , densité ρ , capacité calorifique spécifique c du mélange, flux de chaleur q'' dont le mélange est exposé et à sa température initiale T_0 . Ce temps t_{AIT} nécessaire pour qu'un matériau atteigne sa température d'auto-inflammation est donnée par l'équation suivante :

$$t_{AIT} = \frac{\pi}{4} k \rho c \left[\frac{AIT - T_0}{q''} \right] \quad (I-5)$$

1.2.2.A Détermination expérimentale du point d'auto-inflammation

La mesure de la température AIT est une tâche pénible, très coûteuse et parfois très difficile notamment si le composé concerné est métastable, toxique, ou il possède d'autres propriétés dangereuses. Également, la mesure de AIT est fortement liée à la méthode de mesure. Certaines des variables expérimentale affectant la mesure de AIT sont la composition du mélange de vapeur-air, la forme, la taille et la configuration de l'appareil, le matériel superficiel chaud, le type et la réactivité d'autres matériels, le taux et la durée de chauffage et la pression atmosphérique. Chen et al.[14] a comparé les valeurs expérimentales des températures d'AIT de plusieurs matériels purs et a constaté des écarts qui sont parfois importantes atteignant les 300 K. Egolf et Jurs [15] a mentionné que même des valeurs d'AIP enseignées dans la base de données DIPPR étaient parfois entachées d'erreurs et parfois non évaluées avec la conséquence que l'incertitude expérimentale de ces AIP reste peu claire (Tableau I-2).

Tableau I-2 : Dérivations AIT pour certains matériaux dans différentes sources.

Ingrédients	Minimum AIT/K	Maximum AIT/K
Diethylene Glycol	502[16]	637[17]
Methanol	658 [18]	737 [18, 19]
hexadecanoic acid	488[20]	650[21]
Phenol	878[20]	988 [21]
2-methyl-2,4-pentanediol	579 [21]	698[20]

Dans la littérature scientifique, il existe un nombre important de données AIT déclarées obtenues par la norme d'essai ASTM D286 ou ASTM D2155 (American Society for Testing and Matériau) [22]. Selon ces méthodes, une petite quantité de liquide inflammable est introduite dans un flacon en verre qui est uniformément chauffé avec de l'air sans externe source d'ignition. Si l'inflammation se produit, alors la température AIT est la température de la paroi du flacon. Le temps d'ignition après l'introduction de l'échantillon est noté. Les tests sont répétés avec différentes températures de la paroi du clapet pour déterminer la température la plus basse à laquelle l'ignition se produit en moins de 10 minutes. Un inconvénient majeur de ces méthodes est l'observation visuelle de l'ignition par flamme. En conséquence ces dernière années, les deux méthodes (ASTM D286 et D2155) ont été retirées par l'ASTM et remplacées par les normes d'essai actuelles ASTM D2883 et ASTM E659

qui utilisent également la technique du ballon en verre chauffé. Cependant, ces tests utilisent maintenant la détection de flamme par la thermoélectrique (méthodologie qui détecte également des réactions non lumineuses). Similaire aux méthodes d'essai standard ASTM la norme européen DIN 51794 (2003-05) prescrit la même configuration expérimentale et la même procédure expérimentale pour la détermination de l'AIT, selon lequel le principe est identique: les températures d'auto-inflammation sont déterminées par l'insertion d'un petit échantillon d'essai dans un ballon chauffé contenant de l'air à une température prédéterminée. Alors que la DIN 51794 (2003-05) prescrit l'utilisation d'une fiole Erlenmeyer de 200 ml dans un réchauffeur électrique, la norme ASTM prescrit l'utilisation d'une ampoule en verre sphérique de 500 ml. Malheureusement, dans la norme DIN 51794, la détermination de l'AIT est très limitée par les capacités humaines puisque la détection de l'apparition soudaine d'une flamme à l'intérieur de Erlenmeyer n'est pas automatisé. En outre, les écarts sous pression, la propreté, la pureté de l'échantillon et le rapport combustible/oxygène peut modifier significativement les valeurs AIT. Selon la norme DIN 51794, on peut énoncer les AIT déterminés, dans différents laboratoires ou par différentes personnes crédibles, si la différence n'est pas supérieure à 10 K.

À côté de ces incertitudes, il faut toutefois souligner que la température AIT n'est pas relativement une propriété fondamentale et invariable appartenant aux substances. Il s'agit plutôt de résultats empiriques, obtenus par des tests de laboratoire, qui peuvent varier en fonction de l'équipement utilisé, de la méthode choisie et de l'environnement dans lequel il se déroule.

Cependant, la procédure de développement d'un modèle prédictif de la température AIT doit tenir compte de ces remarques et constatations. Les données expérimentales des températures AIT doivent être analysées et validées méticuleusement.

1.2.3 Limites d'inflammabilité

La concentration de vapeurs inflammables joue un rôle clé dans l'éventualité d'un incendie [1, 2]. La plupart des vapeurs inflammables ou gaz en mélange avec l'air sont susceptibles d'enflammer dans certaines conditions. Les limites d'inflammabilité d'un gaz ou d'une vapeur combustible, dans l'air ou dans tout autre comburant définissent le domaine pour lequel la propagation de la flamme est possible.

Si le mélange (combustible + air) est trop pauvre en combustible, l'inflammation ne se produit pas. Le pourcentage est alors au-dessous de la limite inférieure d'inflammabilité (LII). Au-dessus de ce seuil, le mélange combustible-comburant pourra brûler tant que l'on n'aura pas dépassé un taux maximum de combustible au-delà duquel le mélange serait trop pauvre en comburant ; ce second seuil est la limite supérieure d'inflammabilité (LSI). L'intervalle entre la limite inférieure et la limite supérieure d'inflammabilité s'appelle « domaine d'inflammabilité » ou « intervalle d'inflammabilité ». Celui-ci varie fortement selon les gaz ou vapeurs combustibles, la température, le taux d'oxygène ou la pression. Une matière combustible sous forme gazeuse ou de vapeur ne peut exploser que si elle est mélangée à l'air avec une concentration comprise entre LII et LSI. Ces valeurs sont généralement exprimées en pourcentage du volume de gaz inflammable dans le volume total du mélange.

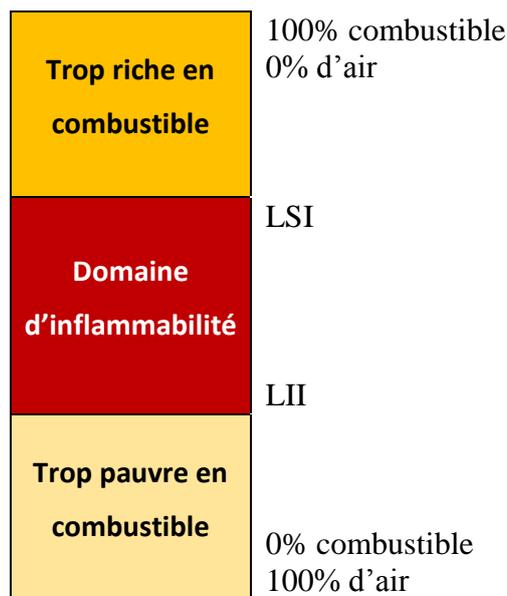


Figure I-2 : Domaine d'inflammabilité

Les limites d'inflammabilité se réfèrent parfois aux limites d'explosion définies comme la plage de concentration dans laquelle la substance inflammable peut produire un incendie ou une explosion lorsque la source d'allumage est présente.

Habituellement, les limites sont expérimentalement obtenues en déterminant les compositions de mélange limitant entre des mélanges inflammables ou non inflammables [23] :

$$LII_{T,P} = \frac{1}{2} (C_{g,n} + C_{l,f}) \quad (I-6)$$

$$LSI_{T,P} = \frac{1}{2} (C_{g,f} + C_{l,n}) \quad (I-7)$$

Ou $LII_{T,P}$ et $LSI_{T,P}$ sont les limites inférieure et supérieure d'inflammabilité à une température et pression données. $C_{g,n}$ et $C_{l,n}$ sont la plus grande et la plus petites concentration de carburant dans les oxydants qui sont non inflammables. $C_{l,f}$ et $C_{g,f}$ sont la plus grande et la plus petites concentration de carburant dans les oxydants qui sont inflammable.

I.2.3.A Détermination expérimentale des limites d'inflammabilité

Auparavant, les limites d'inflammabilité étaient déterminées par l'identification ou la détection visuelle de la propagation de la flamme du point d'inflammabilité à une certaine distance. Aujourd'hui cette détection est automatisée.

Depuis longtemps les méthodes de mesure des limites d'inflammabilité des composés organiques existées, et de nombreuses tentatives ont été faites pour uniformiser les méthodes de mesure afin d'améliorer la compatibilité des données d'inflammabilité.

Aux États-Unis, la Société américaine pour les essais et les matériaux (ASTM) a adopté trois méthodes pour mesurer les limites d'inflammabilité des gaz et des vapeurs :

- ASTM E 681[24], en utilisant une sphère de verre de 5 L pour déterminer les limites d'inflammabilité des substances dans l'air à 1atm ou pression inférieure et à une température inférieure à 150 °C. Cette méthode d'essai est basée sur l'allumage électrique et les observations visuelles de la propagation de la flamme. Les utilisateurs peuvent rencontrer des problèmes si les flammes sont difficiles à observer (par exemple, propagation irrégulière ou luminescence insuffisante dans le spectre visible), si le matériau d'essai nécessite une grande énergie d'allumage ou si le matériau a de grandes distances de trempe.
- ASTM E 2079 [25], nécessitant un récipient proche sphérique de 4 L placé dans un four de chauffage avec une source d'allumage de 10 J. L'inflammabilité est déterminée à partir de l'augmentation de la pression

produite. Le critère d'inflammabilité est une augmentation de pression supérieure ou égale à 7% de la pression d'essai initiale. Le but du test est uniquement d'établir le MOC (minimum oxygen concentration), de sorte que diverses concentrations d'oxygène sont fournies par essai et erreur jusqu'à ce que la valeur minimale soit trouvée.

- ASTM 918 [26], nécessitant un récipient minimum de 1 L et de diamètre de 76 mm dans un four isolé avec un allumeur à fusible près du fond du récipient. Le critère d'inflammabilité est une augmentation de pression supérieure ou égale à 7% de la pression d'essai initiale à une température élevée (jusqu'à 200 ° C) et une pression maximale de (1,38 Mpa). En Europe, les méthodes standard actuelles pour la détermination de la limite d'inflammabilité sont DIN 51649 et EN 1839 (subdivisées en EN 1839 T et EN 1839 B). La méthode d'essai DIN 51649 utilise un cylindre de verre de 6 cm de diamètre et 30 cm ouvert au sommet avec un allumeur (0,5 s, 10 W) en bas. Le critère d'inflammabilité est un signe visuel de détachement de flamme de la source d'allumage. La méthode EN 1839 utilise un cylindre en verre ouvert de 8 cm de large, 30 cm de hauteur, avec étincelle en bas (0,2 s et 10 W). Le critère d'inflammabilité est la propagation d'une flamme de 10 cm verticalement au-dessus d'ignition ou de 12 cm dans la direction horizontale à n'importe quel point du chemin de flamme. EN 1839 B permet l'utilisation d'un cylindre ou d'un récipient sphérique d'au moins 5 L et d'un fusible explosif (0,2 s, 10-20 J) au centre. Le critère d'inflammabilité est une augmentation de pression minimale de 5% après l'ignition [27].

I.3 Revue bibliographique des méthodes d'estimation des propriétés d'inflammabilités

I.3.1 Introduction

Les méthodes expérimentales pour la mesure des propriétés d'inflammabilités sont très coûteuses et parfois très difficiles surtout en présence d'un composé métastable, toxique, ou possédant d'autres propriétés dangereuses. Cependant, il est nettement plus intéressant de disposer des méthodes permettant de les obtenir par un calcul prédictif. Les méthodes donnant des propriétés d'inflammabilités dans un large

domaine d'applications suscitent de plus en plus d'intérêt de nos jours [1], à l'image de la méthode de contributions des groupes.

Dans la littérature, différents modèles ont été présentés pour la prédiction des propriétés d'inflammabilités (points d'éclair, températures d'auto-inflammation, limites d'inflammabilités) de composés organiques purs et des mélanges. Ces modèles peuvent être classés en trois grandes catégories: les modèles de contribution de groupe (GC) [9, 28-33] , les modèles relation quantitative structure à activité (QSPR ; quantitative structure-property relationship) [34-37] et les corrélations empiriques [38-40]. Cependant, une comparaison directe entre ces méthodes semble être difficile. Ceci est dû à plusieurs facteurs tels que la précision, la simplicité et l'intervalle d'applicabilité du modèle.

Sur la base de la simplicité et de la précision, l'approche de contributions des groupes pour la prédiction des propriétés d'inflammabilités des composés chimiques purs est plus convaincante que les autres approches. Cette approche, largement utilisée pour prédire et estimer des propriétés thermodynamiques et d'autres propriétés, nécessite principalement des groupes tabulés (fragments moléculaires) où l'on suppose que la valeur de la propriété d'une molécule est fonction de la contribution de tous les groupes constituant la molécule et que la valeur de la propriété de tout groupe a la même contribution dans toutes les molécules [41-48]. Également, l'approche de contributions des groupes ne nécessite pas de logiciel spécialisé à mettre en œuvre (une procédure simple pour calculer les groupes à partir d'un SMILES d'une structure chimique) et a l'avantage d'être très rapide, simple et facile à appliquer sans la nécessité à la puissance informatique significative.

1.3.2 Modèles empiriques

Les corrélations ou modèles empiriques sont largement utilisés pour la modélisation des propriétés d'inflammabilités (limite d'inflammabilité inférieure et supérieure, le point d'éclair et la température d'auto-inflammation). Un modèle empirique à l'avantage d'être simple et de réduire considérablement les coûts et le temps de développement d'un modèle prédictive.

Un modèle empirique donnant une propriété d'inflammabilité nécessite au moins une des autres propriétés physico-chimiques comme entrée du modèle telles que le point

d'ébullition normal, la densité, la pression de vapeur, les propriétés critiques et l'enthalpie de vaporisation, ...

Malheureusement, la précision de ces types de corrélations empiriques dépend directement de la précision des autres propriétés physico-chimiques et des méthodes numériques utilisées pour leurs développements. Egalement, ces corrélations empiriques peuvent inclure certains inconvénients. Par exemple, si seulement une des propriétés précitées n'est pas disponible, il n'est pas possible d'estimer une propriété d'inflammabilité.

Dans cette partie nous citons quelques exemples des méthodes les plus utilisées et les plus précises basées sur les corrélations empiriques :

1.3.2.A Méthode de Prugh

Prugh [49] a introduit une méthode empirique de prédiction de point d'éclair. Sa méthode consiste à prédire les points d'éclair des composés organiques uniquement en fonction de leurs points d'ébullition et de leurs structures chimiques. La méthodologie de cette méthode est la suivante :

- Calculer la concentration stœchiométrique, X_{st} de la vapeur dans l'air en utilisant l'équation suivante :

$$X_{st} = \frac{83.8\%}{4(C) + 4(S) + H - X - 2(O) + 0.84} \text{ vol } \% \quad (\text{I-8})$$

où C, S, H, X et O sont respectivement le nombre d'atomes de carbone, de soufre, d'hydrogène, d'halogène et d'oxygène dans la substance.

- Calculer le point d'éclair à partir du point d'ébullition comme :

$$\frac{T_b}{FP} = 1.3611 - 0.0697 \ln(X_{st}) \quad \text{Alcools} \quad (\text{I-9})$$

$$\frac{T_b}{FP} = 1.4420 - 0.08512 \ln(X_{st}) \quad \text{Tous les autres} \quad (\text{I-10})$$

1.3.2.B Méthode de Satyarayana et Rao

Dans cette méthode une corrélation exponentielle non linéaire a été proposée par Satyarayana et Rao [50] pour l'estimation des composés organiques et des fractions

pétrolières en tant que fonction de leur température d'ébullition. Cette corrélation a été testée pour 1221 composés et elle a affichée une erreur absolue moyenne inférieure à 10%. La corrélation résultante est :

$$FP = \alpha + \frac{b\left(\frac{c}{T_b}\right) e^{-c/T}}{(1 - e^{-c/T})^2} \quad (\text{I-11})$$

où FP désigne la température du point d'éclair dans K; T_b est le point d'ébullition dans K, et a, b et c sont des constantes.

1.3.2.C Méthode de Metcalfe

Metcalfe a proposé en 1992 [51] une autre relation linéaire entre le FP, le NBP et la poids spécifique (PS). La relation suivante représente le modèle présenté par Metcalfe pour la prédiction de point d'éclair :

$$FP = -84.794 + 0.6208NBP + 37.8127 PS \quad (\text{I-12})$$

Ce modèle a rapporté un coefficient de corrélation de 0,9732 entre les valeurs de PF prédites et expérimentales.

1.3.2.D Méthode de Hshieh

Hshieh [52] a développé deux corrélations utilisant les points d'ébullition des composés organiques pur pour estimer les points d'éclair de la vase fermée. La première corrélation, spécifique aux composés de silicone, a été développée en utilisant les données de 207 composés.

$$FP = -51.2385 + 0.4994 T_b + 0.00047 T_b^2 \quad (\text{I-13})$$

Où FP et T_b sont en °C. Le coefficient de corrélation de cette corrélation est de 0,967 et l'erreur-type d'estimation est de 11,06 °C.

La seconde corrélation, plus générale estimant des composés organiques, a été développée en utilisant des données pour 494 composés comprenant 250 composés organiques, 207 composés de silicone, 31 composés soufrés et 6 composés phosphoreux. L'équation donnant les points d'éclair est la suivante :

$$FP = -54.5377 + 0.5883T_b + 0.00022 T_b^2 \quad (\text{I-16})$$

où FP et T_b sont en °C. Le coefficient de corrélation est de 0,966 et l'erreur-type d'estimation est de 11,66 °C. Il peut être constaté que, les deux corrélations (silicone et composés organiques) sont très semblables.

1.3.2.E Méthode de Laurent Catoire et Valerie Naudet

Laurent Catoire et Valerie Naudet[53] ont présenté une équation empirique simple pour l'estimation des points d'éclair de vase fermée pour les liquides organiques purs. Les données nécessaires à l'estimation d'un point éclair (FP) sont ; le point d'ébullition normal, l'enthalpie standard de vaporisation à 298,15 K à du composé et le nombre d'atomes de carbone (n) dans la molécule. Les limites pour cette équation sont: $-100 \leq FP (^{\circ}C) \leq +200$; $250 \leq Teb (K) \leq 650$; $20 \leq$

$$\Delta vap H_{(298,15 K)}^{\circ} \left(\frac{kJ}{mol} \right) < 110; 1 \leq n \leq 21.$$

L'équation présentée dans cette étude permet de prédire avec précision modeste les points d'éclair pour une variété de composés, quel que soient leurs groupes chimiques (composés monofonctionnels et composés polyfonctionnels) et quel que soit leur structure (linéaire, ramifié, cyclique). Les valeurs prédites de ce modèle sont comparées aux données expérimentales pour plus de 600 composés. Les résultats affichent une déviation absolue moyenne d'environ 3°C, un écart-type d'environ 2°C, et un écart absolu maximal de 10°C.

1.3.2.F Méthode de Rowley

Rowley et son équipe de chercheurs [5] ont développé une méthode corrélatrice prévoyant le point d'éclair de 1062 composés organiques fondés sur des contributions structurales. La corrélation proposée, basée sur l'équation de Clausius-Clapeyron et la relation de Leslie Geniessee, entraîne une erreur absolue moyenne et un écart de 2,84% et 9,8 K, respectivement. La somme des 62 contributions de groupes structuraux atomiques est utilisée pour prédire le paramètre de point d'ébullition pour la corrélation développée. Bien que cette méthode soit suffisamment précise, les définitions et les restrictions des groupes structurels rendent la méthode difficile à pratiquer.

En 2011 Rowley[6] a développé une autre corrélation pour prédire le point d'éclair du même ensemble de composés organiques purs fondés sur le point d'ébullition et l'enthalpie de vaporisation au point d'ébullition normal avec une moyenne absolue et

un écart de 1,32% et 4,65 K respectivement. La méthode nécessite la connaissance d'autres propriétés physico-chimiques qui sont incommodes. En outre, des erreurs significatives ont été signalées pour les acides carboxyliques.

1.3.2.G Méthode de Gharagheizi

En 2011[54] a développé une simple corrélation empirique pour prédire le FP en utilisant le point d'ébullitions et le nombre de carbone. Bien que le modèle proposé puisse prédire le FP pour 1471 composés organiques purs avec une déviation moyenne absolue de 2,4% et un coefficient de corrélation de 0,979, il nécessite un point d'ébullition normal pour prédire le point d'éclair qui n'est pas toujours disponible ou pratique.

1.3.3 Méthodes de Relation Quantitative Structure à Propriété (QSPR)

L'approche Relation Quantitative Structure à Propriété (*en anglais : Quantitative structure-property relationship ou QSAR*) est largement utilisée dans le domaine de la prédiction des propriétés physico-chimiques, thermodynamiques et même pour l'estimation des propriétés d'inflammabilités.

Le QSPR est une approche pour trouver des relations mathématiques quantitatives entre la structure moléculaire intrinsèque et les propriétés observables des composés chimiques. Dans la partie qui suit, une présentation est avancée de quelques exemples de l'approche QSPR pour l'estimation des propriétés d'inflammabilités.

1.3.3.A Méthode de Tetteh

En 1996 Tetteh [55] et son équipe de chercheurs ont proposé un modèle de prédiction de température d'auto-inflammation utilisant la méthode QSPR et un réseau neurales. Ce modèle a été construit en utilisant une base de données de 235composes organiques dont 85 composés ont été utilisés pour la recherche des paramètres numériques et 150 composés pour la validation du modèle.

En 1999 [56] ont développé un autre modèle QSPR-réseau neurones de fonction radiaux (RBF) pour estimer les FP de 400 composés basés sur 25 groupes fonctionnels en plus de l'indice de connectivité moléculaire en tant que descripteur moléculaire. Le modèle produit en outre des écarts moyens absolus de 10 à 12 K pour

les ensembles de validation et d'essai, respectivement. Par comparaison aux autres modèles, ce modèle affiche des erreurs plus élevées que les autres modèles.

1.3.3.B Méthode de Katritzky

Katritzky avec son équipe [57, 58] ont effectué une étude de relation quantitative structure à propriété (QSPR) du point d'éclair d'un ensemble de 271 composés. La corrélation à trois paramètres obtenue est :

$$FP = (44.50 \pm 0.99)^3 \sqrt[3]{Gb} + (16731 \pm 574.45)HDCA + (4.95 \pm 0.73)MR - (117.70 \pm 9.14) \quad (\text{I-147})$$

Où $\sqrt[3]{Gb}$ est la racine cubique de l'indice gravitationnel; *HDCA* est une zone de surface accessible aux solvants chargée par un donneur d'hydrogène; et *MR* est le poids moléculaire divisé par le nombre d'atomes dans la molécule.

L'indice gravitationnel explique les masses atomiques et leur répartition dans l'espace moléculaire. *HDCA* représente la somme de la surface superficielle accessible au solvant des atomes donneurs H-liaison. Le premier descripteur est lié à la dispersion et aux effets de formation de la cavité dans les liquides (indice gravitationnel) et le second avec la capacité de liaison hydrogène des composés. L'indice gravitationnel sur tous les atomes liés *i, j* dans la molécule est défini comme :

$$G_b = \sum_{ij} \left(\frac{m_i m_j}{r_{ij}^2} \right) \quad (\text{I-15})$$

où m_i et m_j sont les masses atomiques des liens des atomes et r_{ij} désignent les longueurs de liaison.

Cette méthode prédit les points d'éclair avec des incertitudes de ± 11 K.

1.3.3.C Méthode de Li et Liu

Liu et Liu [59] ont recommandé l'utilisation des modèles QSPR couplés avec des réseaux de neurones artificiels comme technique de modélisation en raison de leur propriété non-linéaire, de leur haute précision et de leur potentiel d'application étendue. Ils ont utilisé dans leur méthode l'équation d'Antoine pour corrélérer la pression de vapeur et le point d'éclair, et ont également fourni une revue complète

des méthodes de prédiction du point d'éclair en fonction de la pression de vapeur, de la structure moléculaire et du point d'ébullition.

I.3.3.D Méthode de Khajeh et Modarress

Khajeh et Modarress [60] ont développé un modèle QSPR pour prédire le point d'éclair de 151 d'alcools en utilisant l'approximation de la fonction génétique et en utilisant quatre descripteurs moléculaires. Les résultats obtenus ont affiché un coefficient de corrélation de 0,931. Cependant, la méthode proposée est limitée seulement aux alcools.

I.3.3.E Méthode de Gharagheizi

Gharagheizi et Alamdari [31] ont utilisé un modèle de QSPR et une méthode de régression linéaire multi-variable à base d'algorithme génétique pour sélectionner quatre descripteurs moléculaires pour prédire le FP de 1030 composés organiques avec un coefficient de corrélation de 0,9669 et un écart moyen de 12,691 K. Gharagheizi et al. [31] ont également utilisé 79 groupes structurels dans un réseau neuronal ayant neuf couches cachées pour prédire le FP de 1378 composés organiques avec un coefficient de corrélation de 0,9757, et une déviation absolue moyenne et une erreur maximale de 8,1 K et 26%, respectivement. Les quatre descripteurs moléculaires et les 79 groupes structurels sont à la fois complexes et difficiles à déterminer ce qui pose des difficultés à l'applicabilité de la méthode proposée.

I.3.3.F Méthode de Saldana

Une méthode pour prédire les points d'éclair de 437 hydrocarbures, alcools et esters en utilisant la technique de QSPR a été proposée par Saldana et al [61]. Des approches variées ont été étudiées à partir d'une modélisation linéaire telle que l'approximation de la fonction génétique et les moindres carrés partiels à des méthodes non-linéaires telles que les réseaux de neurones artificiels et les réseaux neuronaux de régression. Aucun des modèles n'était significativement plus précis que les autres. Les résultats de prédiction obtenus ont affiché un coefficient de corrélation de 0,922 et une erreur et un écart de moyenne absolu respectivement de 3,2% et de 10,4 K.

1.3.4 Méthodes de contributions de groupes

1.3.4.A Méthode de Rowley

Rowley et ces collègues [62] ont comparé une grande variété de méthodes développées pour estimer LFL à une température de 298K (prédiction à un seul point). La comparaison contient principalement des méthodes de GC. Rowley a proposé un nouveau modèle en améliorant la loi modifiée de Burgess-Wheeler en tenant compte de la dépendance à la température de la température de la flamme adiabatique et en la reliant au nombre d'atomes de carbone. Il a fourni une méthode GC qui est basée sur la relation entre LFL, les enthalpies de la substance et la température de la flamme adiabatique. Le modèle est basé sur le bilan énergétique suivant du processus de combustion:

$$\begin{aligned} LII(T)(-\Delta H_c^\circ) + C_{p \text{ flue-air}}(T - 298K) \\ = C_{p \text{ prod}}(T_{ad} - 298K) \end{aligned} \quad (\text{I-16})$$

où ΔH_c° est la chaleur de combustion, $C_{p \text{ flue-air}}$ la capacité calorifique du composé et de l'air, $C_{p \text{ prod}}$ est la capacité calorifique des produits de combustion et T_{ad} est la flamme adiabatique température.

Rowley encore supposé que :

- 1) $C_{p \text{ flue-air}}$ est approximativement égal à $C_{p \text{ prod}}$
- 2) la température de la flamme adiabatique T_{ad} est linéairement diminuant avec l'augmentation de la température:

Cela mène à la généralisation de la loi Burgess-Wheeler [63]:

$$LII(T) = LFL(T_{ref}) + \frac{(1 - \gamma) C_{p \text{ carburant-air}}}{(-\Delta H_c^\circ)} (T - T_{ref}) \quad (\text{I-17})$$

où $C_{p \text{ carburant-air}}$ est supposé être :

$$\begin{aligned} C_{p \text{ carburant-air}} \\ = LII(T_{ref}) \cdot C_{p \text{ carburant}} \\ + (100\% - LII(T_{ref})) \cdot C_{p \text{ air}} \end{aligned} \quad (\text{I-18})$$

γ est la constante linéaire spécifique composée de T_{ad} , $C_{p \text{ carburant}}$ est la capacité calorifique d'un composé à la température de référence T_{ref} et $C_{p \text{ air}}$ la capacité calorifique de l'air à la référence température T_{ref} .

La méthode proposée a été validée sur un ensemble de 500 composés organiques en affichant un écart absolu moyen de plus de 10,7%.

I.3.4.B Méthode de Alibakhshi

Un modèle simple pour prédire les points d'éclair des composés organiques purs de diverses familles a été proposé par Alibakhshi [64]. La technique de contributions des groupes d'ordre 1 et le point d'ébullition ont été utilisés afin de développer son modèle. Les 42 groupes fonctionnels prédéfinis de la méthode Joback [65] ont été calculés dans l'équation linéaire suivante.

$$FP = 12.14 + 0.73 NBP + \sum n_i \phi_i \quad (I-19)$$

où n_i , ϕ_i et NBP respectivement sont l'occurrence de chacun groupe dans la molécule, la contribution de ième groupe et la température d'ébullition normale.

Le modèle a été développé et validé en utilisant uniquement 740 données expérimentales des composés organiques purs. Le modèle a affiché des résultats modestes.

En utilisant la même méthodologie de modélisation Alibakhshi [3] a proposé un autre modèle pour prédire les points flash des composés organiques mais cette fois-ci en utilisant un ensemble de données de 1533 composés organiques purs de la base de données DIPPR [8]. L'évaluation du modèle a montré une déviation absolue moyenne, une erreur relative absolue moyenne et un coefficient de corrélation de 5,83 K, 1,61 et 0,992, respectivement.

La méthode de Joback de contribution de groupes d'ordre 1 a déjà été appliquée pour prédire les propriétés d'inflammabilités [3, 66, 67].

I.3.4.C Méthode de Jérôme Frutiger

Frutiger et son équipes ont présenté [68] des nouveaux modèles de contribution de groupe (GC) pour la prédiction des limites d'inflammabilité inférieure et supérieure (LII et LSI), Point d'éclair (FP) et Température d'auto-inflammation (AIT) des produits chimiques organiques appliquant la méthode Marrero/Gani [69]. Les auteurs ont proposé une nouvelle méthodologie pour évaluer les incertitudes sur les paramètres et sur les prédictions. Les fonctions suivantes ont été proposées pour LII, LSI et FP pour un composé spécifique :

$$\begin{aligned}
 f(LII) &= \log \left(\frac{LII}{LII_{const}} \right) \\
 &= \sum_j N_j C_j + \sum_k M_k D_k + \sum_l O_l E_l
 \end{aligned}
 \tag{I-20}$$

$$\begin{aligned}
 f(LSI) &= \log \left(\frac{LSI}{LSI_{const}} \right) \\
 &= \sum_j N_j C_j + \sum_k M_k D_k + \sum_l O_l E_l
 \end{aligned}
 \tag{I-21}$$

$$f(FP) = FP - FP_{const} = \sum_j N_j C_j + \sum_k M_k D_k + \sum_l O_l E_l
 \tag{I-22}$$

LII_{const} , LSI_{const} et FP_{const} sont des constantes universelles qui sont déterminées par la régression paramétriques. Pour la prédiction des données de AIT une équation plus complexe impliquant deux sommations a été proposée:

$$\begin{aligned}
 AIT &= AIT_{const1} + \left(\sum_j P_j X_j + \sum_k O_k Y_k + \sum_l R_l Z_l \right) \\
 &\quad + AIT_{const2} \times 10^{(\sum_j N_j C_j + \sum_k M_k D_k + \sum_l O_l E_l)}
 \end{aligned}
 \tag{I-23}$$

Equation. (I-26) et l'équation (I-27) sont les modèle proposer par Hukkerikar [70]. Dans cette étude des données expérimentales sont pris en compte et une méthodologie complète pour estimer les paramètres et analyser les incertitudes est appliquée pour estimer les contributions des groupes. Equation (I-25) a été déjà suggérée par le même auteur Frutiger [71], mais aucune analyse approfondie des paramètres et aucune analyse d'incertitude n'a été réalisée. Dans cette étude, chaque valeur de propriétés estimées liées à l'inflammabilité est rapportée avec son intervalle de confiance de 95%. L'erreur relative moyenne et le coefficient de corrélation sont de 11,5% et 0,99 pour LII, 15,9% et 0,91 pour LSI, 2,0% et 0,99 pour FP, ainsi que 6,4% et 0,76 pour AIT.

1.3.4.D Méthode de Mathieu

Mathieu [72] a proposé une simple méthode pour la prédiction des points d'éclair en utilisant un ensemble de données de 287 molécules organiques simples. Cette méthode a été validée sur un autre ensemble autre que le précédent de 488 composés et a affiché une erreur absolue moyenne de 8,6 K et une erreur maximale d'environ 50 K. Les performances globales de la méthode sont remarquables étant donné sa

simplicité et le petit nombre de paramètres impliqués. En outre, ce modèle fournit un aperçu durable de l'influence des groupes fonctionnels individuels sur les températures du point d'éclair. FP est obtenu selon une simple expression :

$$FP = f^\alpha \quad (\text{I-31})$$

où $\alpha < 1$ est un exposant empirique et f est une quantité obtenue comme une somme de contributions additive associées à des fragments moléculaires et des caractéristiques structurelles :

$$f = \sum_i n_i f_i = \sum_i n_i t_i^{1/\alpha} \quad (\text{I-32})$$

Ces équations ont été obtenues sur la base de simples considérations concernant la dépendance de FP de la taille moléculaire. En effet, pour les petits composés, le FP doit augmenter avec la taille moléculaire car les molécules importantes nécessitent des températures plus élevées pour se vaporiser et d'un autre côté pour de très grandes molécules, FP doivent être moins dépendantes de la taille moléculaire car les composés sont susceptibles de se décomposer avant d'entrer dans la phase vapeur.

1.3.4.E Méthode de Hukkerikar

Un ensemble de modèles de contributions des groupes ont été proposés par Hukkerikar [70] en utilisant la méthode Marrero/Gani [69] pour prédire plusieurs propriétés physico-chimiques y compris FP et AIT. Les auteurs ont proposé également, une analyse d'incertitude basée sur la matrice de covariance des paramètres et les critères de performance pour évaluer la qualité de l'estimation des paramètres. Les deux modèles donnant FP et AIT sont utilisés par Frutiger [68] qui sont déjà présentés dans la Section I.3.4.C .

1.3.4.F Méthode de SHI Jingjie

SHI Jingjie [73] a utilisé des fragments moléculaires comme des descripteurs moléculaires pour l'estimation des températures AIT. Le domaine d'application du modèle a été vérifié par le logiciel ISIDA (In Silico design and Data Analysis) pour vérifier la fiabilité de la prédiction. Les résultats ont montré que les prédictions sont en accord avec les données expérimentales. La valeur de R^2 est supérieure à 0,5. Cette méthode est basée sur la fragmentation d'un graphe moléculaire en fragments et

sur le calcul de leurs contributions. Lorsqu'un composé est divisé en fragments constitutifs, les contributions des fragments à l'AIT sont calculées en utilisant l'équation d'ajustement linéaire :

$$AIT = \alpha_0 + \sum_i \alpha_i N_i + \tau \quad (\text{I-24})$$

où, α_i est le fragment de contributions, N_i est le nombre de fragments de type i , le terme α_0 est le fragment indépendant.

1.3.4.G Méthode de Mohammad Hossein Keshavarz

Keshavarz et son équipe [29] ont développé une méthode d'estimation du point d'éclair de différents types d'amines inflammables. La corrélation qu'ils ont proposée est basée sur la contribution de certaines fractions moléculaires spécifiques et des groupes fonctionnels, qui peuvent facilement être utilisés pour tous types d'amines. Les forces intermoléculaires sont importantes dans cette nouvelle méthode, qui est comptées par deux paramètres croissants et décroissants. L'écart type des erreurs des prédictions est de 18 K pour différentes classes d'amines, y compris 133 composés divers.

1.3.4.H Méthode de Tareq A. Albahri

Albahri [30] a utilisé la méthode de contribution de groupe structurale pour déterminer la température du point d'éclair en utilisant deux approches de modélisation: régression non linéaire multi-variable et réseaux neurones artificiels.

Un ensemble de 37 groupes structurels d'ordre 1 a été élaboré pour prédire FP pour 375 composées organiques. Les paramètres d'entrée au modèle sont le nombre d'occurrences de chacun des 37 groupes structurels dans chaque molécule. Le modèle de réseau neurones a été le meilleur des deux techniques et peut prédire le point d'éclair des composés purs simplement à partir de la connaissance de la structure moléculaire avec un coefficient de corrélation global de 0,996 et des erreurs relatives moyennes et maximales globales de 1,12% et 6,62% respectivement

L'équation du premier modèle pour la prédiction du point d'éclair est :

$$FP = 180.594 + 23.3514 \left(\sum n_i (FPT)_i \right) \quad (\text{I-25})$$

où FP est la température du point d'éclair en kelvin, $(FPT)_i$ la contribution du groupe structurale de type i , n_i le nombre de groupes structurels dans la molécule.

1.3.4.1 Méthode Edna M. Valenzuela

Valenzuela et son équipe [74] ont d'abord vérifié que la relation entre la température du point d'éclair et la température d'ébullition tend à être constante. Ainsi, deux méthodes ont été proposées ; une approche heuristique et une autre utilisant les contributions des groupes. Cette étude, basée sur 611 espèces chimiques de familles diverses, a indiqué que un rapport entre AIT et la température d'ébullition est d'environ 0,75.

Le premier modèle est donné par l'équation suivante :

$$\frac{F_P}{T_b} = \beta_0 + \beta_1 \left(\frac{\Delta H_c}{\Delta H_v} \right) \quad (I-26)$$

où β_0 , β_1 sont des constantes, ΔH_c et ΔH_v sont des enthalpies de combustion et de vaporisation, respectivement.

Ce modèle à surmonter les difficultés à prédire les différences isométriques.

Une deuxième équation basée sur la méthode des contributions de groupe a été proposée. Cette méthode est en fait une combinaison de la méthode de contributions du groupe et l'équation précédente:

$$\frac{F_P}{T_b} = \beta_0 + \beta_1 \left(\frac{\Delta H_r}{\Delta H_v} \right) + \alpha_1 \sum n_1 + \alpha_2 \sum n_2 + \alpha_3 \sum n_3 + \alpha \sum n_4 \quad (I-27)$$

ou α_i sont des contribution de groupes et les n_i sont l'occurrence des groupes dans la structure moléculaire d'un composé.

Cependant, l'application de cette équation nécessite la connaissance des trois propriétés à savoir ; les enthalpies de combustion et de vaporisation et la température d'ébullition. En revanche, les deux équations affiches des erreurs faibles par rapports aux méthodes concurrentes.

1.3.4.J Méthode de Pan

Pan et al [75] ont développé un modèle de réseau neurones ayant 5 couches cachés utilisant la technique de contributions des groupes-liaisons afin de prédire FP pour 92 alcanes. Bien que le modèle ait été assez précis avec un coefficient de corrélation de 0,99 et un écart absolu de 4,8 K, il a été développé en utilisant un petit nombre de molécules ce qui limite son applicabilité à une seule famille chimique d'alcane.

1.3.4.K Conclusion

Cette étude bibliographique ne prétend pas être exhaustive compte tenu de la diversité des méthodes de prédictions des propriétés d'inflammabilités rencontrées dans la littérature. Néanmoins, elle permet de dégager des grandes lignes et d'orienter correctement notre travail.

1.4 Description de la méthode de contributions des groupes

1.4.1 Introduction

Les méthodes de contributions des groupes, appelées aussi méthodes additivités des groupes sont des méthodes prédictives pour calculer des propriétés physico-chimiques des composés organiques. Ces méthodes sont régulièrement sollicitées. Elles permettent un calcul rapide et simple de différentes grandeurs thermodynamiques de substances pures ou de mélanges.

En générale et à l'exception de la masse moléculaire d'un composé qui est égale la somme des masses atomiques de ses constituants, toutes les autres propriétés physiques, thermodynamiques, transport, optiques, électriques et toxiques sont affectées plus ou moins par leur constituants. Cependant, il est possible de dire qu'il y a des propriétés qui obéissent à la loi d'addition, c'est à dire, des propriétés presque additives toutes en dépendant du choix des constituants.

1.4.2 Principe de base

On rassemble sous le terme de « méthodes de contribution de groupes » l'ensemble des méthodes prédictives permettant d'évaluer une propriété quelconque en sommant des contributions relatives à des fragments de molécules.

En 1932, Parks et Huffmann [76] ont montré que certaines fonctions thermodynamiques de composés organiques pouvaient être calculées à partir des

paramètres liés aux structures moléculaires. Depuis, plusieurs auteurs ont cherché à mettre en place des méthodes prédictives, celles-ci étant le plus souvent appliquées au calcul des propriétés thermodynamiques en phase gazeuse.

Les méthodes de contributions des groupes nécessitent principalement des groupes tabulés (fragments moléculaires) où l'on suppose que la valeur de la propriété d'une molécule est fonction de la contribution de tous les groupes constituant la molécule et que la valeur de la propriété de n'importe quel groupe a la même contribution dans toutes les molécules. De plus, l'approche de contribution de groupe ne nécessite pas de logiciel spécialisé (simple procédure de calcul des groupes à partir du SMILES¹ d'une structure chimique) et présente l'avantage d'être très rapide, simple et facile à appliquer sans nécessiter de la puissance de calcul importante.

1.4.3 Hiérarchie des groupes

1.4.3.A Méthode de fragmentation d'ordre 0

Ce genre de découpages touche la composition élémentaire de la molécule, il consiste de citer le nombre des atomes constituant ce composé ; alors une propriété est ainsi considérée comme étant une somme de contributions atomiques.

1.4.3.B Méthode de fragmentation d'ordre 1

La fragmentation d'ordre un, consiste à donner le nombre de groupe qui composent la molécule, sans prendre en considération l'entourage de ce groupe. À titre d'exemple, ce groupe peut être C , CH , CH_2 , CH_3 . Les contributions (valeurs des paramètres) correspondent à ces groupes sont les mêmes et ne change pas avec le changement de leur entourage, c'est-à-dire un groupe de CH_2 au voisinage de la fonction alcool (OH) est similaire à celle qui est entouré par des groupes des carbone (C , CH , CH_2 , CH_3).

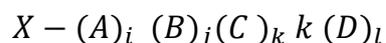
Les méthodes utilisant les contributions de groupes de premier ordre sont assez souvent employées vu qu'ils unissent à la fois la relative simplicité et une précision satisfaisante. Cependant, il est indispensable de souligner que certaines de ces méthodes ne sont pas fiables. En effet, l'estimation des enthalpies (grandeurs indispensables dans les études et les simulations de procédés) par des méthodes utilisant une fragmentation d'ordre 1, a souvent été remise en cause.

¹ Simplified Molecular Input Line Entry Specification

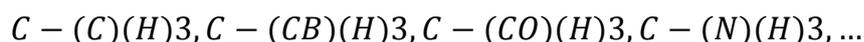
I.4.3.C Méthode de fragmentation d'ordre 2

L'aspect mathématique des méthodes de contribution de groupes consiste à comprendre la contribution de chaque groupe proposé. Généralement les corrélations d'estimation des propriétés, les plus simples, sont exprimées par la sommation des contributions de chaque groupe multiplié par l'occurrence de ce dernier. Le groupe a pour but de fournir des informations sur la structure moléculaire, qui est traduit à la suite par des corrélations mathématiques. La méthode la plus puissante est celle qui est capable de traduire une structure moléculaire en groupes pertinents décrivant correctement sa structure moléculaire et la majorité des effets électroniques et faire différencier entre les différentes conformations moléculaires. Les méthodes de contribution de groupes basés sur l'ordre zéro et premier ordre de découpages montre des erreurs inacceptables, et sa peut être justifié par la nature de groupe proposé [41, 42]. Souvent, les méthodes de contribution de groupes ne permettent pas de distinguer les différentes formes isométriques de composés similaires. Alors des scientifiques ont cherché d'autres solutions pour ce problème, par exemple ils ont introduit l'hybridation des différentes classes de découpages et qui comporte l'utilisation de deux genres de groupes, le premier et le deuxième ordre de fragmentations pour but à fournir plus d'information, et par conséquence l'amélioration du pouvoir prédictif de ces méthodes.

La fragmentation d'ordre deux, un groupe est composé d'un atome central de valence strictement supérieure à 1, et d'un ensemble des liaisons qu'il forme avec ses voisins. Un groupe est noté de la manière suivante :



où X représente l'atome central auquel sont liés i atome(s) A, j atome(s) B, k atome(s) C et un atome(s) D. On peut prendre pour exemple l'atome de carbone, C. Si ce dernier est un atome central, il peut former plusieurs groupes, tels que



En générale, les méthodes de second ordre montrent des bons résultats par rapport aux méthodes d'ordre zéro et du premier ordre, vu que ces méthodes de second ordre prennent en considération l'entourage de chaque groupe. Cette technique de second ordre permet d'augmenter la précision de la méthode grâce à la possibilité de fournir plus d'information sur les liaisons et les différentes interactions possibles.

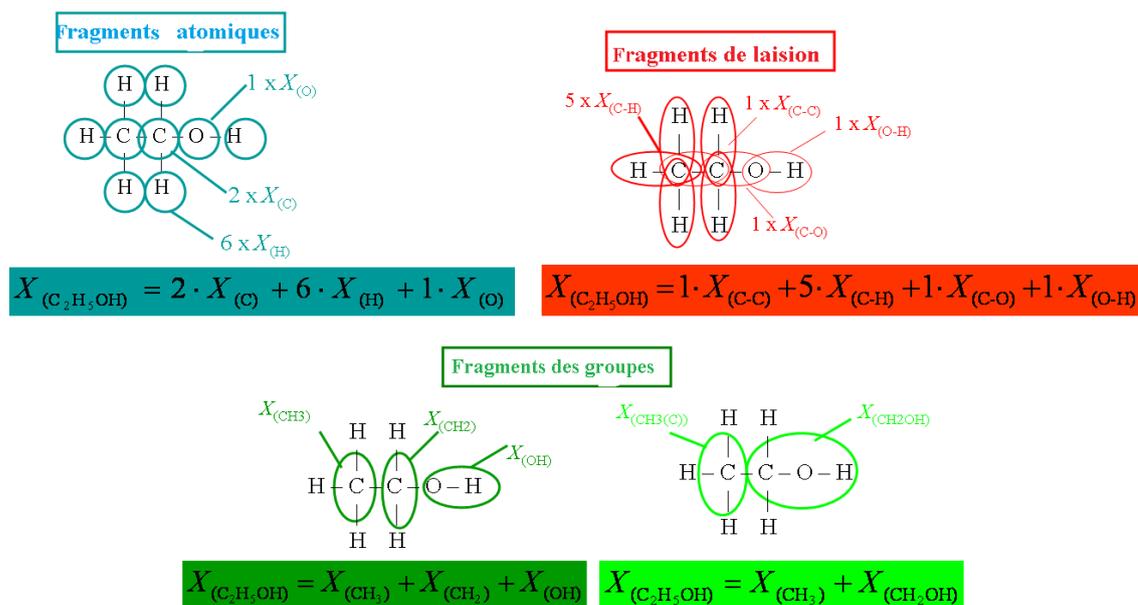


Figure I-3 : Exemple de division de molécule d'éthanol a fragments atomique et bande et groupement structurel[77].

1.4.3.D Méthode de fragmentation d'ordre 3

La méthode la plus utilisée dans le domaine de méthodes de contributions des groupes et ayant l'un des meilleurs schémas de découpage des structures moléculaires est celle d'ordre trois développé par Marrero et Gani [69] pour estimer les propriétés physico-chimiques et thermodynamiques avec une large gamme d'applications et traiter à la fois des simples molécules et des grandes molécules multifonctionnelles voire même complexes.

La technique de fragmentation d'ordre 3 d'une structure moléculaire est considérée comme un ensemble de trois types de groupes: les groupes de premier ordre, des groupes de second ordre et de groupes de troisième ordre.

1.4.3.D.1 Groupes de premier ordre

Les groupes de premier ordre sont des groupes simples nombreux qui permettent de décrire une grande variété de composés organiques, y compris les hydrocarbures aromatiques et aliphatiques, les alcools, les phénols, les cétones, les aldéhydes, les acides, les esters, les éthers, les amines, les anilines et beaucoup d'autres classes de composés organiques. Cet ensemble de groupes doit également décrire les composés polyfonctionnels, grands, complexes et hétérocycliques.

L'ensemble des groupes de premier ordre devrait permettre la distinction entre les groupes qui apparaissent dans les structures cycliques, aromatiques et acycliques. A titre d'exemple les groupes de premier ordre fait la distinction entre les atomes de carbone partagés par différents noyaux aromatiques dans un même système fusionné (ex. naphthalène), des atomes de carbone partagés par des noyaux aromatiques et non aromatiques dans un même système fusionné (ex. indane) et tout autre carbone aromatique substitué qui n'appartient pas dans les catégories précédentes, (ex. biphényle).

Les groupes de premier ordre doivent décrire la molécule entière. En d'autres termes, il ne devrait pas y avoir de fragment d'une molécule donnée qui ne puisse être représentée par des groupes de premier ordre.

Toutefois, les groupes de premier ordre proposés décrivent partiellement les effets de proximité et la différence entre les isomères. Pour cette raison, l'ensemble de groupes de premier ordre est destiné à traiter des composés simples et monofonctionnels et d'autres niveaux de groupes sont nécessaires pour fournir des estimations plus précises pour les complexes plus complexes.

1.4.3.D.2 Groupes de deuxième ordre

Les groupes de deuxième ordre permettent une meilleure description des composés polyfonctionnels et la différenciation entre les isomères. Ces groupes ont pour but de décrire uniquement des fragments moléculaires qui ne peuvent pas être décrits de manière adéquate par des groupes de premier ordre, ce qui donne une mauvaise estimation au premier niveau. Dans ce cas, le deuxième niveau utilise des groupes qui permettent une meilleure représentation des composés polyfonctionnels. Par exemple, des groupes tels que $OH - CH_n - COO$, $CH_m (NH_n) - COOH$ ou $NH_2 - CH_m - CH_n - COOH$ ont été définis pour fournir une meilleure description des lactates et des acides aminés, ce qui entraîne généralement de mauvaises estimations en utilisant uniquement des groupes de premier ordre. D'autres fragments moléculaires qui ne sont pas complètement décrits par des groupes de premier ordre, sont les substituants alicycliques pour lesquels des groupes tels que $CH_{cyc} - OH$, $CH_{cyc} - NH_2$, $CH_{cyc} - COO$, $CH_{cyc} - COOH$ ou $CH_{cyc} - SH$ ont été inclus dans l'ensemble de second ordre.

Comme il a été suggéré ci-dessus, l'ensemble des groupes de second ordre devrait permettre la différenciation entre les isomères. En conséquence, des groupes spécifiques sont prévus avec cet objectif en tête. Ces groupes permettent la distinction des isomères non seulement en alcènes, alcènes et autres structures à chaîne ouverte, mais aussi en composés aromatiques pour lesquels des groupes spéciaux tels que AROMARING_{s₁s₂}, AROMARING_{s₁s₃} ont été ajoutés.

Les groupes du second ordre proposés sont cependant incapables de fournir une bonne représentation des composés contenant plus d'un cycle ainsi que, dans certains cas, des composés polyfonctionnels à chaîne ouverte ayant plus de quatre atomes de carbone dans la chaîne principale. Pour cette raison, un niveau supplémentaire est requis pour permettre une meilleure description de ces types de composés.

1.4.3.D.3 Groupes de troisième ordre

Ces groupes permettent une représentation assez détaillée des systèmes de noyaux aromatiques fusionnés, des systèmes d'anneaux aromatiques et non aromatiques fusionnés, et des systèmes d'anneaux non fusionnés reliés par des chaînes dans lesquelles peuvent apparaître différents groupes fonctionnels. Les critères utilisés pour l'identification des groupes de troisième ordre sont analogues à ceux utilisés pour les groupes de second ordre.

Afin d'illustrer les différents découpages évoqués plus haut, deux exemples illustratifs sont donnés.



Figure I-4 : 1,9-nonadiol

Tableau I-3 : Découpage de la molécule de 1,9-nonadiol en groupes

Method	Group	Number of contribution
Ordre 1	OH CH ₂	2 9
Ordre 2	Aucun group de second ordre	0
Ordre 3	HO-(CH _n) _m -OH (m > 2)	1

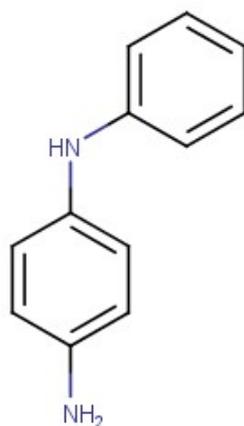


Figure I-5 : N-Phenyl-1,4-benzenediamine

Tableau I-4 : Découpage de la molécule de N-Phenyl-1,4-benzenediamine en groupes.

Methode	Groupe	Nombre de contribution
Ordre 1	aC	8
	aC	1
	aC-NH ₂	1
	aC-NH	1
		1
Ordre 2	AROMARINGS1s4	1
Ordre 3	aC-NH-aC (different rings)	1

I.4.3.E Groupe hybride

Ces types de méthodes utilisent principalement des groupes d'ordre un et parfois d'ordre deux voire trois suivant un schéma de découpage spécifique. Également, des corrections de cycles et des corrections d'interactions moléculaires sont ajoutées afin de pallier le manque d'information sur la molécule et ainsi diminuer les erreurs des prédictions [42, 78, 79].

I.5 Outils numériques de calculs

Les outils informatiques jouent un rôle important dans le génie chimique allant d'un simple calcul de la pression de vapeur en utilisant par exemple l'équation d'Antoine à la simulation dynamique des usines de produits chimiques. Dans le cadre de ce

travail, nous avons développé nos propres outils de calculs afin d'aboutir à nos fins. Ces outils représentent une pièce maîtresse pour notre travail.

Les programmes développés dans le cadre de ce travail sont divisés en trois types d'ensembles. Le premier concerne les programmes permettant le découpage automatique des molécules à partir de leurs codes SMILES, c'est de fournir d'une manière automatique les corrections proposées constituant une molécule. Le deuxième programme est développé sur Excel qui consiste à trouver la structure moléculaire (codes SMILES) d'une molécule à partir de sa nomenclature, en utilisant une connexion par internet à un server de molécules. Également, les bases de données expérimentales établie dans le cadre de cette thèse sont présentées et discutées. Le troisième programme développé permet de rechercher les paramètres d'une fonction mathématique en utilisant le principe de régression et l'optimisation.

1.5.1 Programme de découpage automatique

Les méthodes de contributions de groupes sont basées sur la fiabilité du découpage suivant une règle bien déterminée. Cette partie peut être fastidieuse et source d'erreurs notamment dans le cas de bases de données importantes (plus de 1000 molécules) ou la présence des molécules complexes ou des macromolécules dont la structure est très complexe.

Dans le cadre de ce travail, nous avons développé un programme de découpage automatique, sous Matlab de Mathworks©, permettant d'assurer l'obtention des groupes d'ordre trois selon la méthode de Marrero et Gani. Le programme de découpage automatique utilise uniquement le code SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry Specification) comme information d'entrée. Ce code est une description symbolique standardisée de la structure des molécules chimiques sous forme de chaînes de caractères ASCII (alphanumériques) [80]. Les chaînes SMILES peuvent être importées de la plupart des éditeurs de structures moléculaires pour être reconverties en représentation 2D ou en modèle 3D.

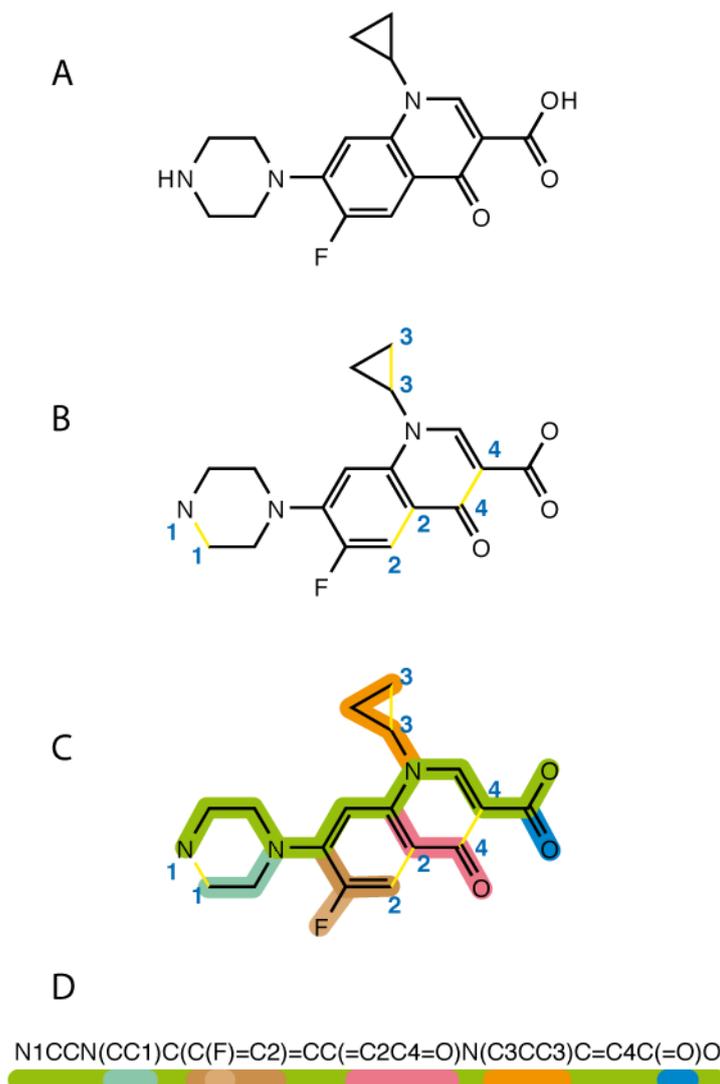


Figure I-6 : illustre la représentation du code SMILES de la molécule ; acide 1-cyclopropyl-6-fluoro-4-oxo-7-piperazin-1-yl-quinoline-3-carboxylique.

Le principe du programme développé est de parcourir toute les chaînes de caractères du code SMILES en commençant par le premier caractère jusqu'au dernier. Le balayage des caractères se fait par un programme appelé Parser_Smiles. Ce dernier permet de définir la table de connexion de la molécule. Dans le cas des molécules ramifiées, le programme Parser appelle un autre sous-programme pour faire la correspondance des connexions entre les atomes. Nous avons également développé un autre sous-programme appelé Ring_Arom permettant de reconnaître les atomes appartenant à un cycle ou plusieurs cycles toute en déterminant la nature des cycles : Aromatiques ou non. Dans le cas des atomes aromatiques polycycliques (exemple : Naphtalène, Pyrène, Coronène) le programme Ring_Arom permet de détecter avec

succès les cycles aromatiques et les atomes situés entre plusieurs cycles aromatiques. Ce succès n'est pas le même pour les deux logiciels commerciaux à savoir CHETAH V.9 et Artist 2011. Ce programme permet aussi de définir à la fois les corrections cycliques à utiliser (Cyclohexane, Cyclopentane, Cyclopropane...), les corrections répulsives engendrées par les atomes d'hydrogène des groupes méthyles et les corrections concernant les interactions entre les groupes fonctionnels dans le cas des composés multifonctionnels.

Par conséquent, notre programme de découpage automatique explore la chaîne de caractère du code SMILES de la molécule en question afin de déterminer la nature de chaque atome de la molécule ainsi que ses connexions avec son environnement (les liaisons et les atomes voisins). A ce stade, le programme principal détermine la nature de chaque groupe suivant le type de méthode considérée (1 ordre, 2ordre, hybride ...).

La Figure I-7 schématise le programme de découpage automatique des molécules suivant trois blocs principaux.

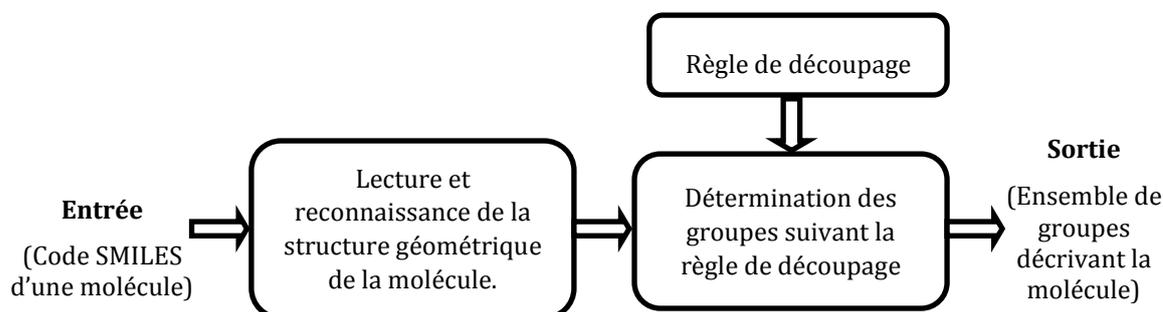


Figure I-7: Programme de recherche automatisée des groupes.

1.5.2 Programme d'estimation des contributions

Dans le cadre de notre travail, nous avons développés un programme permettant de faciliter la recherche d'une fonction prédictive pour l'estimation des propriétés d'inflammabilités en utilisant des contributions de groupes selon la méthode de découpage choisie.

L'ensemble des équations et leurs optimisations ont été programmés sous Matlab en profitant des avantages de cet outil de programmation. Pour l'optimisation de la fonction prédictive, la méthode LSQNONLIN (least-squares non linear solve) fournie

par Matlab de Mathworks© a été utilisée. Ce type de méthode permet de résoudre un problème d'équations non linéaire destiné à l'optimisation avec des contraintes en utilisant l'algorithme de Levenberg-Marquardt [81].

La recherche des valeurs de paramètres de la fonction de prédiction consiste à minimiser une fonction objective. Dans notre cas, la fonction objective du problème est définie par les sommes des carrées des erreurs entre les valeurs prédites et expérimentales. Elle donnée comme suit :

$$J = \frac{1}{N} \sum_n^N (\hat{P}_n - P_{n(exp)})^2 \quad (I-28)$$

\hat{P}_n : Prédiction de la propriété d'inflammabilité de la nième molécule.

$P_{n(exp)}$: Valeur expérimentale de la propriété d'inflammabilité de la nième molécule.

N : Nombre total de molécule utilisée dans la recherche des valeurs de contributions des groupes.

L'étape de recherche des paramètres de la fonction de prédiction consiste à effectuer plusieurs tests de minimisation de la fonction objective, où dans chaque test, l'algorithme d'optimisation réinitialise aléatoirement les paramètres initiaux de la fonction de prédiction. Ceci permet à l'algorithme d'optimisation d'éviter d'être bloqué dans un optimum local au lieu de chercher un optimum global.

1.6 Conclusion

Une synthèse bibliographique sur les méthodes de prédictions des propriétés d'inflammation a été avancée précédée par des généralités sur les propriétés d'inflammabilités.

Nous avons constaté à travers cette analyse bibliographique que les méthodes de prédictions des propriétés d'inflammabilités des composés organique pur peuvent être classées en trois catégories principales à savoir ; les méthodes de Relation Quantitative Structure à Activité (QSAR), les corrélations empiriques et les méthodes de contribution des groupes.

Il a été constaté que sur la base de la simplicité et de la précision, l'approche de contributions des groupes pour la prédiction des propriétés d'inflammabilités des composés organiques est plus convaincante que les autres approches. Cette approche,

largement utilisée pour prédire et estimer des propriétés thermodynamiques et d'autres propriétés.

La dernière partie met la lumière sur les outils de calculs numérique développés dans le cadre de cette thèse.

Chapitre II: Prédiction des points d'éclair : développement, résultats et discussion

II.1 Introduction

Au cours de chapitre précédent, nous avons pu constater que le point d'éclair est l'une des principales propriétés d'inflammabilité utilisées pour déterminer les risques d'incendie et d'explosion des liquides. Les points d'éclair jouant un rôle central dans la manipulation et le stockage des produits chimiques. En effet, cette propriété représente un enjeu important dans le domaine de la prévention des risques chimiques et la combustion. Les données expérimentales des points d'éclair et leurs méthodes d'estimation associées sont essentielles voir capitales pour évaluer, manipuler des liquides inflammables et établir des règles de sécurité.

Dans ce chapitre, nous abordons dans premier temps la mise au point d'une base de données expérimentale des points d'éclair. Le traitement et la validation de données expérimentales sera discutées. Dans un deuxième temps, la méthodologie de développement de deux modèles, fiable pour la prédiction des points d'éclair, est détaillée suivie par la présentation et la discussion des résultats de prédiction. Une conclusion est avancée à la fin de ce chapitre.

II.2 Banque de données des points d'éclair

L'exactitude et la fiabilité des modèles pour l'estimation des propriétés chimiques et physiques dépendent directement de la qualité et la précision de la base de données appliquée pour leurs développements, en particulier si la base de données contient de nombreuses données expérimentales. Afin d'atteindre cet objectif, nous avons

délicatement définit et analysé notre base des données suivant les deux étapes que nous discutons ici :

II.2.1 Construction de la base de données des points d'éclair

En général, la mise au point d'un modèle prédictif débute par la collecte de données expérimentales précises, fiables, et en nombre conséquent.

Afin de développer un modèle fiable et précis avec une large gamme d'applications, les données des points d'éclair et la température d'ébullition ont été extraites de la base de données DIPPR (The Design Institute for Physical Properties) 801[8]. Cette base de données est l'une des meilleures sources connues dans le monde pour les données de propriétés physico-chimiques. Toutes les données évaluées et rapportées dans cette base de données ont des différents niveaux d'incertitude. <0,2%, <1%, <3%, <5%, <10%, <25%, <50%, inconnu et blanc (aucune entrée). Dans ce travail, les valeurs des points d'éclair ont été sélectionnées avec une précision supérieure à 10%, comme illustré dans le Tableau II-1. Les points d'éclair avec une incertitude de 25%, 50%, inconnue et non reportée ont été rejetés. Également, certains petits composés ont été rejetés dans lesquels leurs structures moléculaires peuvent être représentées entière par un groupe telle que le méthane, l'éthylène, le propadiène, l'acétylène, le formaldéhyde, le cyanure d'hydrogène et le cétène. Il convient de noter que, généralement, pour ces petites molécules, les modèles de contributions des groupes ne sont pas applicables [70, 82].

Tableau II-1 : Incertitude des données des températures d'éclair

Incertitude des valeurs de FP	Nombre des composés
Inférieur de 0.2%	11
Inférieur de 1%	476
Inférieur de 3%	1069
Inférieur de 5%	59
Inférieur de 10%	45
Total	1660

Les données sélectionnées comprennent les points d'éclair et les températures d'ébullition pour 1660 composées, et couvrent les familles les plus courantes de composés organiques purs comme c'est montré dans la Figure II-1. Cette figure montre un nombre limité de composés contenant l'atome P, I et Si. Cependant, il

convient de noter qu'il existe des composés multifonctionnels contenant ces atomes dans la base de données. Une analyse approfondie des composés inclus dans cette base de données montre que les valeurs de FP se situent entre 151 K (1, 1-difluoroéthylène) et 720 K (Dioléine) et les poids moléculaires varient entre 31,04 g (Méthylamine) et 902,08 g (Hexacosaméthyl dodécasiloxane). Tous les noms des composés étudiés ont été présentés dans l'Annexe A.

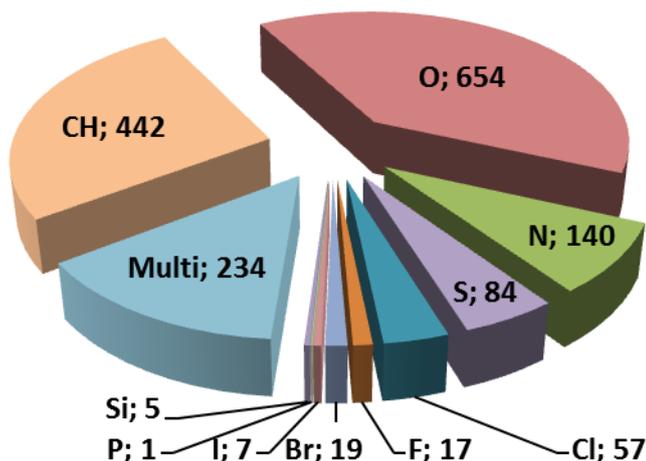


Figure II-1 : description des familles chimiques dans la base de données FP

CH : hydrocarbure ; O : oxygénés ; N : azotés ; S : contenant du soufre ; Cl : Chlorés ; F : fluorés ; Br : bromés ; I, iodé ; P : contenant du phosphore ; Si : contenant de la silice ; multiple : composés multifonctionnel.

II.2.2 Traitement et validation des données de FP

Une fois la collecte des données expérimentales fiables est achevée l'étape de leur validation s'impose. Des outils d'analyse de données peuvent être alors employés afin de valider les données collectées. Dans le cadre de notre thèse nous avons utilisé une démarche graphique afin de vérifier la tendance des valeurs expérimentales.

Nous avons examiné et évalué toutes les valeurs des points d'éclair et des températures d'ébullition disponibles dans la base de données DIPPR 801 sélectionné. Toutes les valeurs aberrantes sont analysées corrigées dans la mesure de possible ou isolées. Ceci permet d'améliorer la capacité prédictive et l'intervalle d'applications des modèles proposés.

Dans un premier temps, nous avons tracé l'évolution des points d'éclair en fonction du nombre de carbone croissant appartenant à différentes classes, tels que les n-alcanes, l'Alkyle-benzènes, les N-alcools, les N-alcènes, les Formates et autre familles chimiques. Nous citons dans les figures suivantes quelques exemples de quelques familles chimiques.

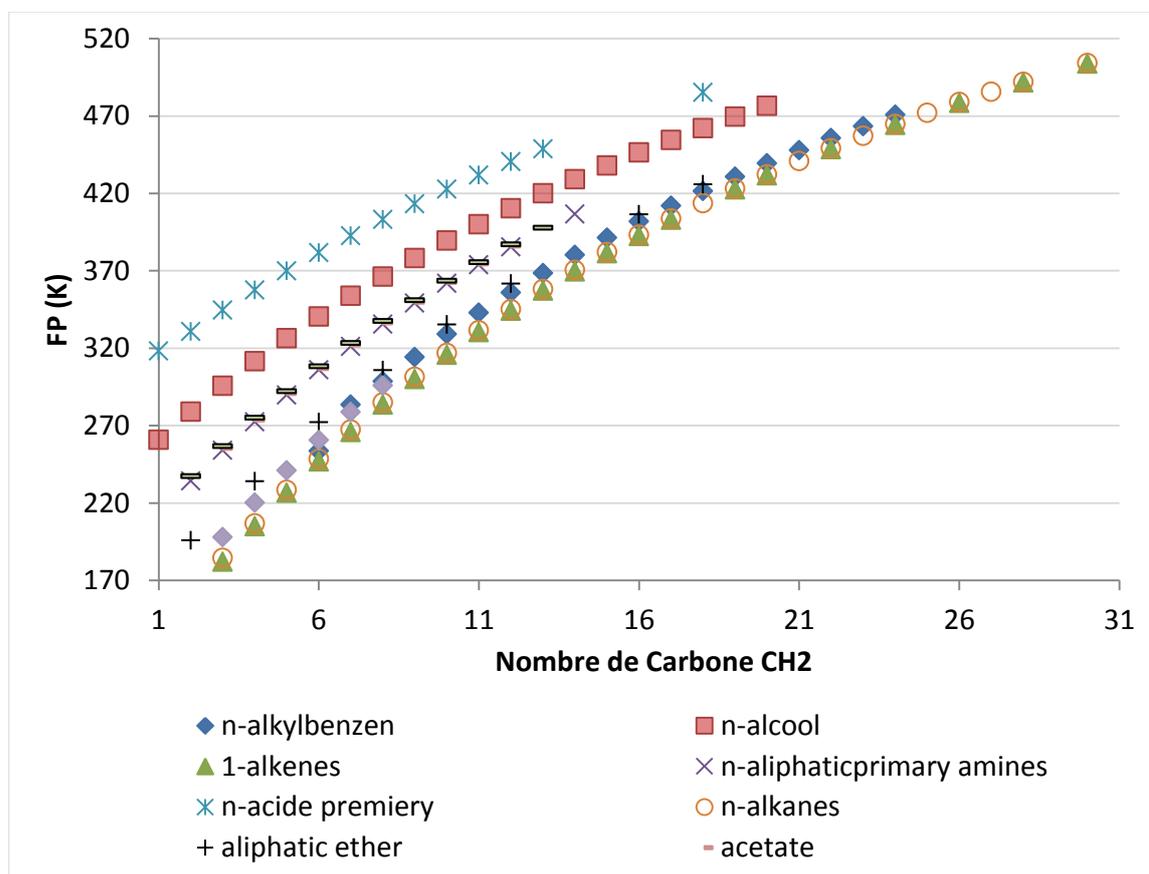


Figure II-2 : Tracé de FP en fonction du nombre de carbone

Pour chaque classe de familles, un tracé des températures d'éclair en fonction du nombre de carbones est établi. Ce type de figure nous permet également de voir un aperçu sur la relation entre FP et le nombre de carbone dans les composés.

Après avoir défini la base de données de contenant les points d'éclair, cette base de données devrait être divisée en deux nouvelles bases des données comprenant un ensemble d'apprentissage et un autre ensemble de tests. En effet, l'ensemble de données d'apprentissage est utilisé pendant le processus de développement ou de formation du modèle alors que l'ensemble de données de test est utilisé afin de valider et tester la capacité prédictive et la fiabilité du modèle proposé. La base de données est divisée semi-aléatoirement en un ensemble d'apprentissage contenant

environ 80% de la base de données complète (1328/1660 de composés) et un autre ensemble de test contenant environ 20% de toute la base de données (332/1660 de composés différents de l'ensemble d'apprentissage).

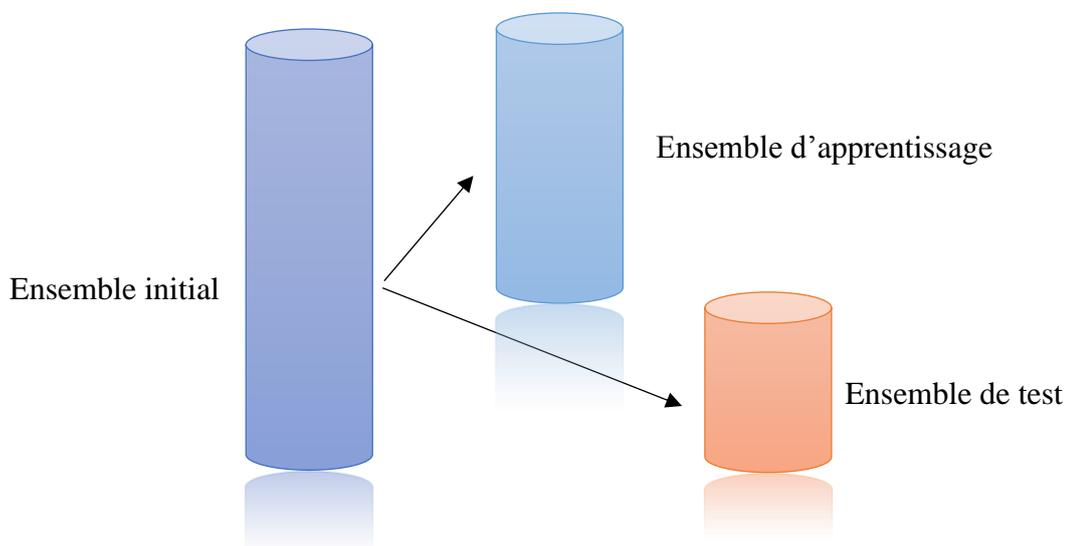


Figure II-3 : Schéma représentatif de la division des données de FP

Il est à noter que dans le cas des méthodes de contribution de groupe, le choix aléatoire d'un ensemble de test peut fausser la performance du modèle, car un tel choix peut exclure totalement ou certains paramètres du modèle (contributions des groupes) de l'étape de régression ou laisser un nombre limité de données pour qu'une contribution d'un group soit évaluée, ce qui affecte la plage d'application du modèle [41, 43].

Le principe de sélection semi-aléatoire pour choisir les composés de test à partir de la base de données complète est que nous essayons d'abord de choisir au hasard un composé. Ensuite, si ce composé est décrit par l'un des groupes ayant un nombre d'occurrences dans tous les composés de la base de données inférieure à quatre, ce composé est rejeté à partir de l'ensemble de tests [41-43]. Il est important de noter que, dans le développement de modèles de contribution de groupe, si la valeur de contribution de groupe est générée à partir de moins de quatre composés, cette contribution de groupe serait certainement plus inexacte que d'autres.

II.3 Construction des modèles pour la prédiction des points d'éclair

D'après l'analyse des revues bibliographiques faites au chapitre précédent (I.3), deux catégories de modèles peuvent être développées pour la prédiction des points d'éclair selon que le modèle est basé uniquement sur l'information de la structure moléculaire ou que d'autres propriétés thermodynamiques sont utilisées comme une information d'entrée.

Des modèles basés sur des autres propriétés, telles que, la température d'ébullition NBP [3, 64, 83], l'enthalpie de vaporisation [40, 74], la chaleur de combustion et de vaporisation [74], sont utilisées comme informations d'entrée. Une comparaison approfondie de ces deux catégories de modèles révèle que les modèles de contributions des groupes basés sur d'autres propriétés sont plus précis que ceux basés uniquement sur l'information de la structure moléculaire[9].

Dans le cadre de cette thèse nous avons choisi de proposer deux modèles : le premier utilise en plus de la structure moléculaire la température d'ébullition comme une information d'entrée, et le seconde modèle totalement prédictif, se basant uniquement sur la structure moléculaire. Le choix d'utilisation de la température d'ébullition comme une information d'entrée au détriment des autres propriétés thermodynamiques c'est parce que cette propriété NBP est généralement l'une des propriétés les plus facilement mesurable, disponible et fortement corrélée avec la température d'éclair.

II.3.1 Modèle basé sur la température d'ébullition

II.3.1.A Fragmentation en groupes structures moléculaires

La prochaine étape consiste à collecter des groupes structurels. Dans ce travail, le schéma de fragmentation de Marrero et Gani [44, 69] [70] est utilisé pour fournir les groupes structurels du troisième ordre de tous les structures chimiques des composés. Ce schéma est l'un des meilleurs schémas de fragmentation de contribution de groupe pour l'obtention des groupes structuraux à partir d'une structure moléculaire d'un composé. Les groupes Marrero et Gani sont divisés en trois types : les groupes du premier-ordre, du deuxième-ordre et du troisième-ordre. Ils peuvent décrire tous les

effets significatifs sur une propriété à prédire, ce qui permet de décrire une grande variété de composés organiques avec une distinction des isomères.

Après avoir examiné la totalité des molécules (1660 molécules), chaque molécule a été découpée en fragment moléculaire (groupe) suivant le schéma de fragmentation de Marrero et Gani [44, 69] [70]. Trois nouveaux groupes de premier ordre, à savoir: $>N$, $N=C=O$ et $C_{cyc}-N=C=O$, ont été ajoutés pour représenter les structures moléculaires de 2,2', 2' '- Nitriлотris-Acetonitrile (7327- 60-8) et certains composés isocyanates / diisocyanates. Finalement, en plus de la température d'ébullition, 155 groupes du premier ordre, 101 groupes du second ordre et 38 groupes du troisième ordre ont été collectés pour être utilisés comme paramètres d'entrée pour les modèles à développer.

II.3.1.B Définition de la fonction du modèle

La seconde étape pour définir le modèle consiste à analyser et étudier la tendance du FP et du NBP de tous les composés inclus dans la base de données. Cette étape permet à la fois de vérifier les incertitudes et des données et de mieux guider la sélection de la meilleure forme mathématique du modèle. Dans la littérature, les modèles de contribution de groupe utilisant NBP pour prédire FP sont divisés en deux catégories selon l'utilisation d'une fonction linéaire ou non-linéaire entre FP et NBP [9].

Afin de choisir judicieusement la forme mathématique de l'équation de notre modèle, nous avons tracé le rapport FP/NBP dans l'ordre croissant pour tous les composés inclus dans la base de données comme illustré sur la Figure II-4. Également sur la Figure II-5 le rapport FP/NBP a été tracé, cette fois-ci, en fonction de l'augmentation du nombre de carbones (nombre de groupes CH_2) dans certains composés appartenant aux différentes classes, tels que les n-alcane, les 1-alcènes, les n-alkylbenzènes, n -alcools, acides n-aliphatiques, aldéhydes, amines primaires n-aliphatiques.

La Figure II-4 montre que la température d'éclair n'est linéaire par rapport à la température d'ébullition, et cette remarque est confirmée par la Figure II-5. Sur cette dernière figure nous constatons que les contributions des groupes CH_2 ou l'augmentation du nombre de carbones dans certains composés est non-linéaire par rapport aux deux températures d'éclair et d'ébullition. Ces remarques expliquent

principalement le fait que les modèles linéaires aboutissent souvent à des écarts considérables. Suite à ces remarques le modèle proposé doit être non linéaire par rapport à la température d'ébullition et aux contributions des groupes.

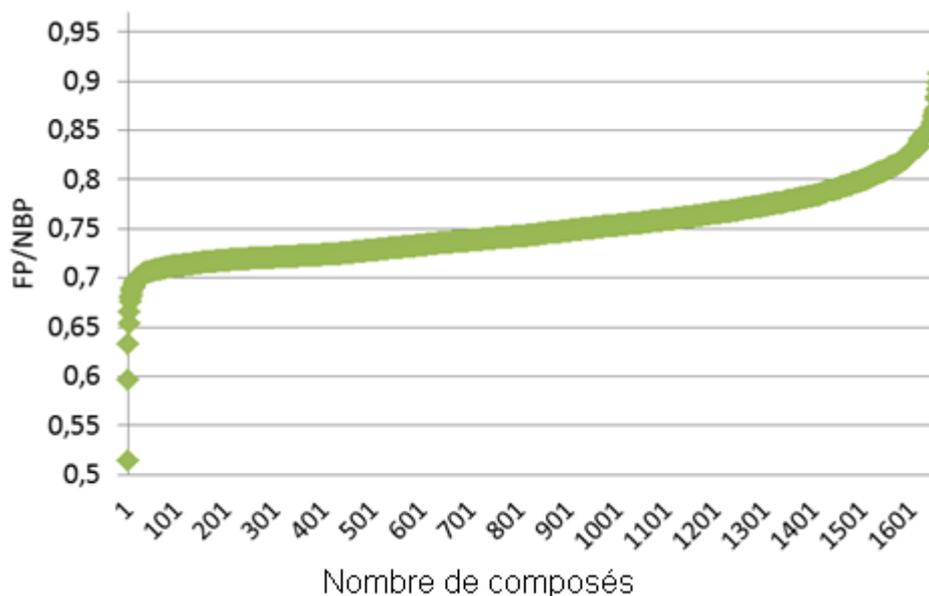


Figure II-4 : Rapport FP/NBP pour 1660 composés dans l'ordre croissant

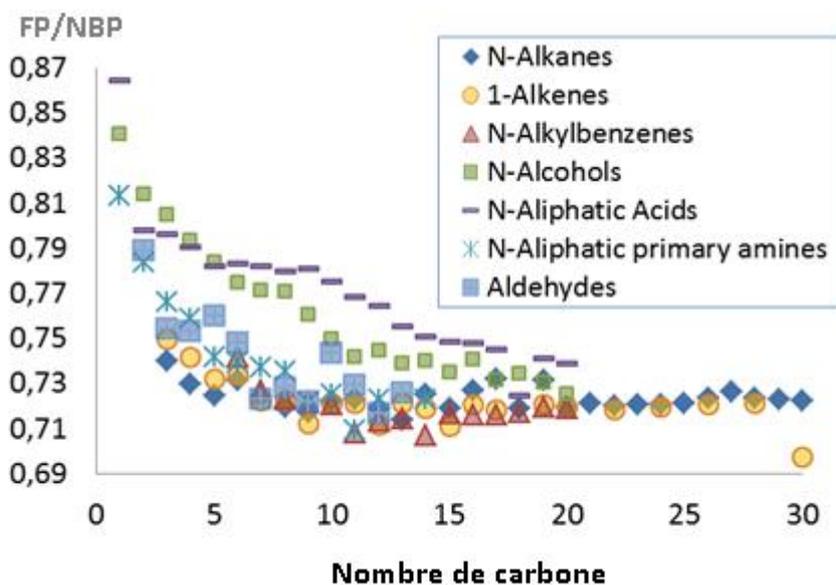


Figure II-5 : Rapport FP/NBP en fonction du nombre de carbones.

Dans l'étape suivante, la sélection de la meilleure forme du modèle est effectuée. Plusieurs fonctions non linéaires ont été construites et testées tout en tenant compte des remarques qui ont été déduites de la Figure II-4 et la Figure II-5. Dans cette étape,

l'ensemble de données est utilisé pour trouver la meilleure expression finale. Finalement, l'équation suivante a été retenue en raison de sa capacité d'extrapolation et de son pouvoir corrélatif :

$$FP = NBP \times b \times \left(\frac{a + A}{1 + |a + A|} \right) \quad (\text{II-1})$$

$$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k \quad (\text{II-2})$$

où

- NBP est le point d'ébullition normal en Kelvin (K),
- a et b sont des paramètres ajustables,
- N_i, M_j, E_k sont les nombres d'occurrences de contributions de groupe individuelle,
- C_i est la contribution de groupe de premier ordre de type i ,
- D_j est la contribution de groupe de deuxième ordre de type j
- O_k est le groupe de troisième ordre des contributions du type k .

Tous les paramètres, A , a et b sont sans dimension.

Le côté droit de cette équation (II-1) qui est entre parenthèses a été inspiré par la fonction de transfert sigmoïde d'Elliot utilisée dans les réseaux de neurones [84, 85]. L'avantage de cette fonction est la rapidité de calcul et lorsqu'elle est incorporé dans un réseau de neurones multicouches, elle permet d'imiter toute fonction continue.

II.3.1.C Régressions paramétriques

Les valeurs des contributions a , b et la contribution des groupes (C_i , D_j et O_k) ont été obtenus en minimisant la somme des carrés des erreurs entre les valeurs prédites et expérimentales (voir Section I.5.2) en utilisant l'algorithme de Levenberg Marquardt [86, 87]. Nous rappelons que dans cette étape uniquement les composés de l'ensemble d'apprentissage (80% de la totalité de la base de données) sont considérés.

Une régression simultanée est considérée en utilisant toutes les contributions des groupes de premier, deuxième et troisième ordre dans la phase d'apprentissage du modèle proposé. Cela empêche que les termes d'ordre supérieur absorbent les écarts des termes inférieurs [43].

Il est à noter que, les valeurs numériques des paramètres sont obtenues après plusieurs essais effectués, et dans chaque essai l'algorithme d'optimisation réinitialise

aléatoirement les paramètres initiaux des équations II-1 et II-2, ce qui permet d'éviter des solutions locales et obtenir la solution globale de notre système d'équations.

Les valeurs numériques des paramètres ajustables a et b après régression sont respectivement 0,33156 et 2.9513.

Les groupes structuraux du premier ordre, leurs contributions et leurs nombres d'occurrences dans les structures chimiques de chaque composé sont présentés dans le Tableau II-2. Pour alléger le manuscrit, les groupes d'ordre deux et trois sont reportés en Annexe A.

Tableau II-2 : Valeurs de contributions de groupes du premier ordre donnant FP

N°	Groupes	Occurrences	Paramètres avec NBP	Paramètres sans NBP
1	CH ₃	1090	0,0040	0,02813
2	CH ₂	793	-0,0012	0,03221
3	CH	236	-0,0075	0,01919
4	C	81	-0,0225	0,00878
5	CH ₂ =CH	107	0,0023	0,06929
6	CH=CH	67	-0,0021	0,09965
7	CH ₂ =C	46	-0,0059	0,08315
8	CH=C	18	-0,0133	0,11437
9	C=C	8	-0,0334	0,13085
10	CH ₂ =C=CH	3	-0,0017	0,09763
11	CH ₂ =C=C	1	-0,0053	0,09892
12	CH≡C	13	0,0008	0,06354
13	C≡C	6	0,0009	0,09200
14	aCH	440	-0,0005	0,03445
15	aC fused with aromatic ring	35	-0,0063	0,16170
16	aC fused with non-aromatic ring	44	-0,0009	0,09515
17	aC except as above	42	0,0029	0,03706
18	aN in aromatic ring	18	0,0065	0,08017
19	aC-CH ₃	98	0,0011	0,08583
20	aC-CH ₂	94	-0,0036	0,08431
21	aC-CH	33	-0,0013	0,04634
22	aC-C	28	-0,0214	0,02780
23	aC-CH=CH ₂	13	-0,0032	0,11968
24	aC-CH=CH	7	-0,0114	0,14933
25	aC-C=CH ₂	5	-0,0059	0,13712
26	aC-C≡CH	1	0,0007	0,11750
27	aC-C≡C	1	-0,0101	0,17480
28	OH	175	0,0230	0,17957
29	aC-OH	48	0,0184	0,20493

30	COOH	83	0,0241	0,31459
31	aC-COOH	19	0,0179	0,42528
32	CH ₃ CO	29	0,0150	0,13050
33	CH ₂ CO	20	-0,0007	0,13922
34	CHCO	3	0,0023	0,13391
35	aC-CO	9	0,0062	0,19419
36	CHO	45	0,0133	0,13538
37	aC-CHO	13	0,0072	0,19993
38	CH ₃ COO	35	0,0125	0,15956
39	CH ₂ COO	41	0,0016	0,16013
40	CHCOO	11	-0,0057	0,12072
41	CCOO	2	-0,0198	0,09437
42	HCOO	17	0,0121	0,12782
43	aC-COO	35	0,0033	0,17041
44	aC-OOC	2	0,0571	0,25975
45	COO except as above	36	0,0112	0,14707
46	CH ₃ O	41	0,0074	0,07111
47	CH ₂ O	71	0,0001	0,07350
48	CH-O	7	-0,0027	0,06567
49	C-O	5	-0,0212	0,03400
50	aC-O	14	0,0039	0,12760
51	CH ₂ NH ₂	39	0,0102	0,13696
52	CHNH ₂	7	0,0066	0,10615
53	CNH ₂	2	-0,0095	0,07982
54	CH ₃ NH	3	0,0182	0,10810
55	CH ₂ NH	17	0,0010	0,09602
56	CHNH	1	0,0004	0,08216
57	CH ₃ N	8	-0,0018	0,07567
58	CH ₂ N	9	-0,0133	0,04637
59	aC-NH ₂	24	0,0109	0,22650
60	aC-NH	9	0,0016	0,19927
61	aC-N	4	-0,0084	0,15581
62	NH ₂ except as above	9	0,0278	0,10325
63	CH ₂ CN	24	0,0079	0,27623
64	CHCN	4	-0,0107	0,17821
65	CCN	1	-0,0159	0,13638
66	aC-CN	2	-0,0022	0,19882
67	CN except as above	15	0,0306	0,10640
68	CH ₂ NCO	2	0,0156	0,20449
69	aC-NCO	6	0,0112	0,17837
70	CH ₂ NO ₂	3	0,0150	0,24384
71	CHNO ₂	1	0,0114	0,22635
72	aC-NO ₂	29	0,0100	0,26162

73	NO ₂ except as above	1	0,0483	0,27005
74	CONH ₂	8	0,0308	0,43365
75	CONHCH ₃	1	0,0329	0,44683
76	CON(CH ₃) ₂	1	0,0140	0,33240
77	aC-CONH ₂	1	0,0226	0,46213
78	aC-NH(CO)H	1	0,0212	0,40925
79	aC-NHCO	3	-0,0122	0,31292
80	NHCONH	1	0,0266	0,56843
81	NH ₂ CONH	1	0,0514	0,73171
82	CH ₂ Cl	41	0,0148	0,13031
83	CHCl	8	0,0036	0,10006
84	CCl	1	-0,0112	0,08334
85	CHCl ₂	5	0,0368	0,18515
86	CCl ₃	5	0,0592	0,23618
87	CH ₂ F	6	0,0162	0,06836
88	CHF ₂	6	0,0253	0,06968
89	CF ₂	2	0,0076	0,03636
90	CF ₃	10	0,0326	0,04032
91	CCl ₂ F	1	0,0479	0,15957
92	CClF ₂	1	0,0343	0,09322
93	aC-Cl	32	0,0116	0,12558
94	aC-F	3	0,0056	0,03758
95	aC-I	1	0,0076	0,20450
96	aC-Br	5	0,0073	0,15347
97	-I except as above	6	0,0240	0,18510
98	-Br except as above	15	0,0166	0,13505
99	-F except as above	18	0,0261	0,01146
100	-Cl except as above	49	0,0186	0,07082
101	CHNOH	1	0,0384	0,28074
102	CNOH	1	0,0247	0,26973
103	OCH ₂ CH ₂ OH	27	0,0142	0,25871
104	OCHCH ₂ OH	5	0,0083	0,22178
105	OCH ₂ CHOH	19	0,0052	0,24014
106	-O-OH	13	0,0375	0,25340
107	CH ₂ SH	21	-0,0024	0,14831
108	CHSH	2	-0,0059	0,11597
109	CSH	3	-0,0150	0,10552
110	aC-SH	1	0,0070	0,16984
111	-SH except as above	4	0,0232	0,10426
112	CH ₃ S	11	0,0043	0,13646
113	CH ₂ S	20	-0,0059	0,12832
114	CHS	2	-0,0185	0,10862

115	CS	3	-0,0250	0,09347
116	aC-S-	2	0,0067	0,16482
117	SO	1	0,0176	0,36508
118	SO ₂	2	-0,0010	0,33586
119	aC-P	1	-0,0207	0,11552
120	C ₂ H ₃ O	7	0,0158	0,15619
121	C ₂ H ₂ O	1	0,0107	-0,16061
122	CH ₂ (cyclic)	206	-0,0007	0,03411
123	CH (cyclic)	131	-0,0015	0,02719
124	C (cyclic)	31	-0,0040	-0,26759
125	CH=CH (cyclic)	47	-0,0012	0,06630
126	CH=C (cyclic)	42	-0,0033	0,10116
127	C=C (cyclic)	6	-0,0020	0,13550
128	CH ₂ =C (cyclic)	6	0,0016	0,04660
129	NH (cyclic)	18	0,0126	0,13426
130	N (cyclic)	14	-0,0112	0,15569
131	CH=N (cyclic)	2	0,0122	0,15909
132	C=N (cyclic)	1	0,0140	0,11733
133	O (cyclic)	46	0,0117	0,06140
134	CO (cyclic)	26	0,0108	0,20454
135	S (cyclic)	32	0,0067	0,10795
136	SO ₂ (cyclic)	3	0,0217	0,47208
137	>NH	4	0,0176	0,06573
138	-O-	4	-0,0409	-0,03734
139	-S-	1	0,4630	-0,18595
140	>CO	4	0,0102	0,15611
141	SiHO	1	-0,0079	0,05024
142	SiO	27	-0,0092	0,01541
143	SiH ₂	3	0,0064	0,02848
144	SiH	4	-0,0045	0,01921
145	Si	24	-0,0260	0,00212
146	C _{cyclic} =N-	1	-0,0082	0,07416
147	C _{cyclic} =CH-	1	-0,0168	0,04734
148	C _{cyclic} =C	2	-0,0143	0,08122
149	N=N2	1	-0,0065	0,15355
150	C=NH	1	-0,0239	0,52943
151	>C=S	1	-0,0047	0,34998
152	HCONH	2	0,0270	0,38621
153	SiH ₃	1	0,0074	0,02315
154	CH=C=CH	1	-0,0025	0,11068
155	OP(=S)O	1	-0,0186	0,18155

II.3.1.D Résultats et discussions

La validation du modèle développé est une étape essentielle durant le développement d'un modèle. Cette étape a pour but d'interpréter, d'évaluer et d'analyser les résultats de prédiction. Le pouvoir prédictif du modèle et sa faiblesse fait l'objet de cette partie.

Nous avons prédit les températures d'éclair des deux ensembles de composés ; ensemble d'apprentissage ayant servi dans le développement du modèle et de l'ensemble de test de nouvelles molécules autres que ceux déjà utilisées pour le développement ou la construction du modèle. Le second ensemble de molécules permet d'évaluer correctement les performances de prédiction du modèle développé et son pouvoir prédictif.

Les performances de prédiction des modèles développés dans le cadre de cette thèse sont évaluées en utilisant les indicateurs statistiques suivants : Erreur moyenne absolue (*EMA*), Erreurs moyennes relatives (*EMR*), Écart-Type (*ET*) et Coefficient de détermination (R^2). Ces indicateurs sont donnés par les équations suivantes :

$$EMA = \frac{1}{N} \sum_j |(X_j^{exp} - X_j^{pred})| \quad (II-3)$$

$$EMR = \frac{1}{N} \sum_j |(X_j^{exp} - X_j^{pred})| / X_j^{exp} \times 100 \quad (II-4)$$

$$ET = \sqrt{\frac{\sum_j (X_j^{exp} - X_j^{pred})^2}{N}} \quad (II-5)$$

$$R^2 = 1 - \left[\frac{\sum_j (X_j^{pred} - X_j^{exp})^2}{\sum_j (X_j^{pred} - \mu^{exp})^2} \right] \quad (II-6)$$

Le modèle développé affiche des prédictions précises expliquées par les paramètres statistiques à savoir ; *EMA*, *EMR*, *ET*, R^2 , comme c'est présenté sur le Tableau II-3. Cette constatation est valable aussi bien pour l'ensemble d'apprentissage que pour celui du test.

Dans ce travail, l'écart-type est considéré car il permet de mesurer la dispersion des erreurs autour de leur moyenne. En effet, une faible valeur d'écart-type indique que les erreurs tendent à être très proches de la moyenne des erreurs de prédiction (théoriquement supposées être nulles) et vice-versa.

Les résultats de prédiction de la température d'éclair sont résumés dans le Tableau II-3 Tableau II-4 pour les deux ensembles d'apprentissage. Les données d'apprentissage ont été estimées avec une très bonne précision avec EMR de 1,52% et une faible valeur d'EMA de 5,35 K.

Tableau II-3: Performance statistique du premier modèle donnant FP

Ensembles de composés	N°	EMR (%)	EMA (K)	ET (K)	$D_{max}(K)$	R^2
Apprentissage	1328	1.52	5.35	6.15	50.03	0.9945
Test	332	1.62	5.7	7.61	83.93	0.9922
Total	1660	1.54	5.42	6.47	83.93	0.9941

Nous pouvons constater que le coefficient de régression linéaire est très proche de 1 pour les deux ensembles de composés. Les erreurs des prédictions maximales (D_{max}) restent modérées dans les deux bases de données d'apprentissage et de test ; 50.03 (acide téréphthalique) et 83.93 K (1,3-Dioleoylglycérol), respectivement.

Le pouvoir prédictive d'un modèle peut se déterminer dans la différence entre les déviations des deux ensembles. Si la différence est large, cela signifie que la méthode n'est pas performante pour la prédiction des températures d'éclair des nouveaux composés (des molécules n'ayant pas utilisées dans la construction du modèle). Les deux EMR dans les deux ensembles sont proches les uns des autres, et la même remarque est valable pour EMA. Ceci revient à dire que la méthode a un pouvoir prédictif très correct.

Tableau II-4 : Performance statistique du premier modèle donnant FP par classe de famille :

Classe des familles	N°	EMA (K)	EMR (%)	ET (K)	$D_{max}(K)$
Hydrocarbonés	442	4,38	1,33	4,40	32,87
O contenant	654	6,00	1,59	7,84	83,93
N contenant	140	4,62	1,38	4,49	28,52
S contenant	84	2,10	0,67	2,14	10,35
Cl contenant	57	6,03	2,00	4,61	22,72
F contenant	17	4,58	2,34	2,72	12,13
Br contenant	19	7,72	2,38	9,40	37,75
I contenant	7	8,68	2,75	6,73	16,32
P contenant	1	0,09	0,02	-	0,09

Si contenant	5	2,70	1,28	2,09	5,19
Multifonction	234	7,14	1,98	7,15	34,06
Total	1660	5.42	1.54	6.47	83.93

Le Tableau II-4 affiche en détaille les résultats de prédiction de la température d'éclair par classe individuelle de composés. Nous pouvons constater partir de ce tableau que le modèle présente une très bonne précision pour tous les types de composés. Également nous observons que pour les composés contenant F, Cl, Br et I, le modèle développé donne des *EMR* compris entre 2% et 2,75% qui sont relativement élevés par rapport au reste des familles chimiques. Cependant, ces *EMR* sont dans la plage d'incertitude de la base de données DIPPR 801 [8] (voir le Tableau II-1). Inévitablement, des températures d'éclair expérimentales supplémentaires sont nécessaires dans ces classes pour améliorer la prédiction et vérifier la qualité du modèle développé.

La Figure II-6 affiche la corrélation entre les données prédites et les données expérimentales aussi bien pour l'ensemble d'apprentissage que pour l'ensemble de test. Nous constatons que les données sont bien corrélées ce qui confirme les résultats et les remarques faites précédemment dans le Tableau II-3 et Tableau II-4.

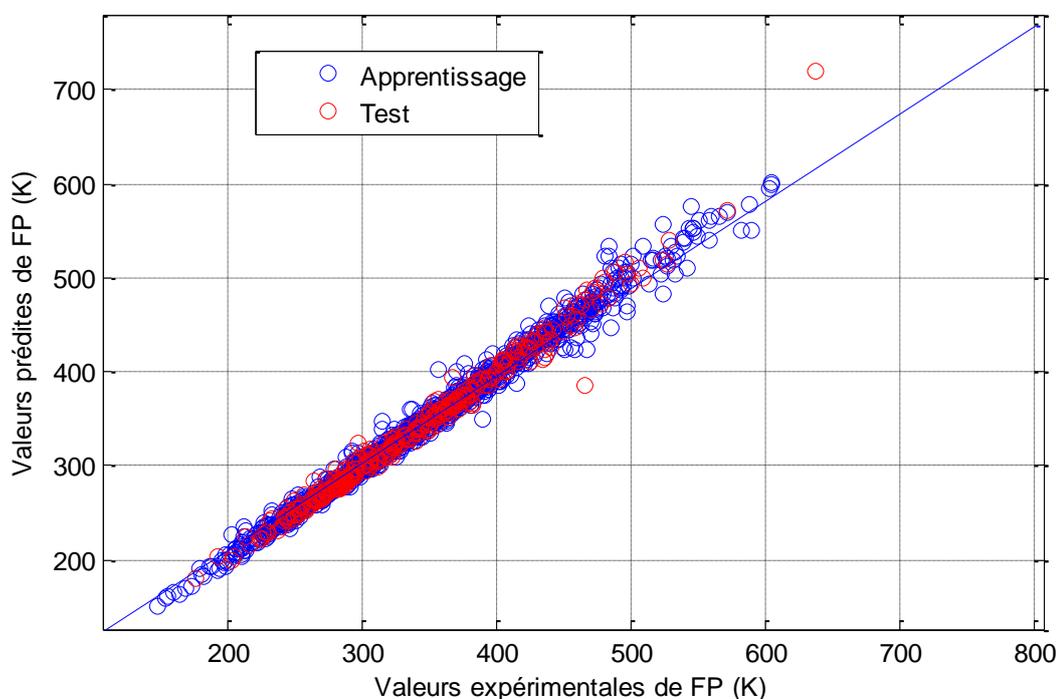


Figure II-6 : Corrélation entre les FP prédites et expérimentales en utilisant le premier modèle.

Afin de mieux d'analyser les résultats de prédiction du modèle proposé nous avons présenté la répartition des composés en fonction de l'intervalle d'*EMR*. Comme il peut être constaté que, l'erreur *EMR* de 764 composés (46% du nombre total de 1660 composés) est inférieure de 1%. En outre, il y a 87,4% de composés (voir les trois premiers intervalles) et 96% de composés (voir les cinq premiers intervalles) pour lesquels leur *EMR* est inférieur à 3% et 5%, respectivement.

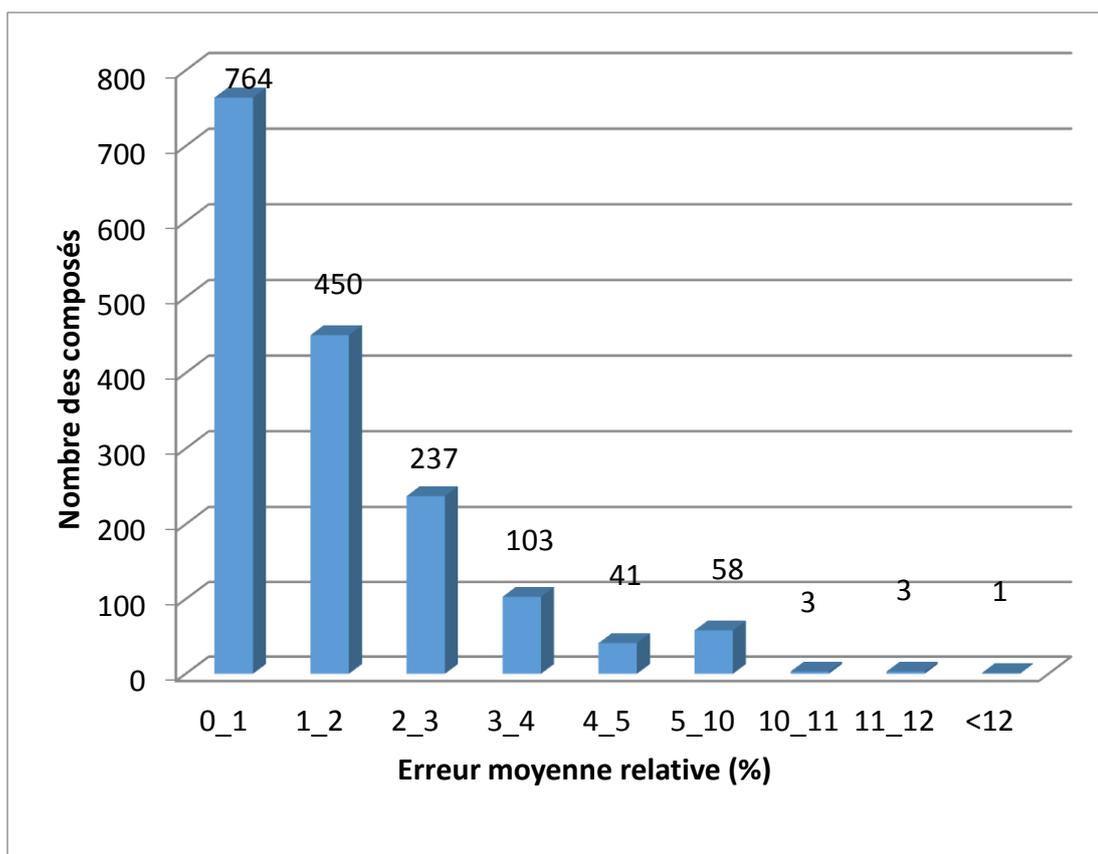
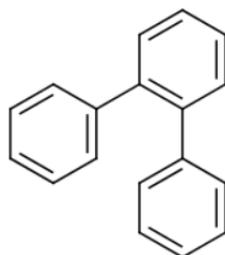


Figure II-7 : Répartition des composés en fonction de l'intervalle de l'*EMR*.

II.3.1.E Exemples d'applications illustratifs

II.3.1.E.1 Exemple 1 : O-Terphenyl (CAS N° : 84-15-1)

Les valeurs expérimentales de FP et NBP de ce composé, pris à partir de la base de donnée DIPPR, sont 436 K et 609,15 K, respectivement. Le tableau ci-dessous affiche les groupes structuraux utilisés pour représenter la structure de O-Terphenyl, leurs occurrences et leurs contributions.



Groupes 1 ^{er} Ordre	Occurrences	Contribution
aCH	14	-0.0005 ×14
aC except as above	4	0.0029 ×4
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
AROMRINGS1s2	1	-0.00269 ×1
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
aC-aC (different rings)	2	-0.00598 ×2
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = -0.01008$		

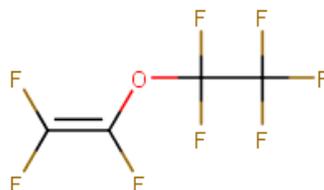
Sachant que $A = -0,01008$, $a = 0,33156$ et $b = 2,9513$, la température d'éclair est prédite en utilisant l'équation (II-1) comme suit:

$$FP = 609.15 \times 2.9513 \times \left(\frac{0.33156 - 0.01008}{1 + |0.33156 - 0.01008|} \right) = 437.36$$

Donc, la température d'éclair finale est de 437,36 K, et en conséquence l'EMR = 0.31 %.

II.3.1.E.2 Exemple 2: Ether de Trifluorovinyl de Pentafluoroéthyle (CAS N° : 10493-43-3)

Les valeurs expérimentales des températures d'éclair et d'ébullition de ce composé, prises à partir de la base de données DIPPR, sont 233 K et 281.15 K, respectivement. Le tableau ci-dessous affiche les groupes fonctionnels utilisés pour représenter la structure de ce composé, leurs occurrences et leurs contributions.



Groups 1 ^{er} Ordre	Occurrences	Contribution
C=C	1	-0.0334 ×1
C-O	1	-0.0212 ×1
CF ₃	1	0.0326 ×1
-F except as above	5	0.0261 ×5
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
CH _m -O-CH _n =CH _p (m,n,p in 0..3)	1	-0.0006 ×1
CH _m =CH _n -F (m,n in 0..2)	3	-0.0071 ×3
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
-	-	-
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = 0.0878$		

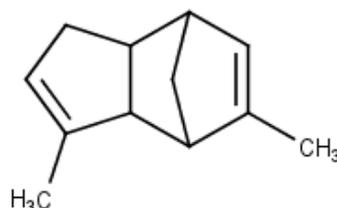
Sachant que $A = 0.0878$, $a = 0,33156$ et $b = 2,9513$, la température d'éclair est prédite en utilisant l'équation (II-1) comme suit :

$$FP = 609.15 \times 2.9513 \times \left(\frac{0.33156 - 0.0878}{1 + |0.33156 - 0.0878|} \right) = 245.15$$

Donc, la température d'éclair finale est de 245.15 K, et en conséquence l'EMR = 5.21%.

II.3.1.E.3 Exemple 3: Dimère Methylcyclopentadiène (CAS N° : 26472-00-4)

Les valeurs expérimentales des températures d'éclair et d'ébullition de ce composé, prises à partir de la base de données DIPPR, sont 326.15 K et 473 K, respectivement. Le tableau ci-dessous affiche les groupes fonctionnels utilisés pour représenter la structure de Dimère Methylcyclopentadiène, leurs occurrences et leurs contributions.



Groups 1 ^{er} Ordre	Occurrences	Contribution
CH3	2	0.0040 ×2
CH ₂ (cyc)	2	-0.0007 ×2
CH (cyc)	4	-0.0015 X4
CH=C (cyc)	2	-0.0033 ×2
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
CH _n =C)cyc-CH3 (n in 0..2)	2	-0.0058 ×2
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
CH _{multiring}	4	0.0018 ×4

$$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = -0.01026$$

Sachant que $A = 0.01026$, $a = 0,33156$ et $b = 2,9513$, la température d'éclair est prédite eu utilisant l'équation (II-1) comme suit:

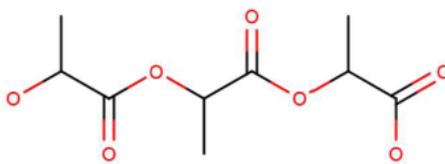
$$FP = 609.15 \times 2.9513 \times \left(\frac{0.33156 - 0.01026}{1 + |0.33156 - 0.01026|} \right) = 339.47$$

Donc, la température d'éclair finale est de 339.47 K, et en conséquence l'EMR = 4.08%.

II.3.1.E.4 Exemple 4: Acide Trilactique (CAS N° : 78024-33-6)

Les valeurs expérimentales des températures d'éclair et d'ébullition de ce composé, prises à partir de la base de données DIPPR, sont 499 K et 619 K, respectivement. Le

tableau ci-dessous affiche les groupes fonctionnels utilisés pour représenter la structure de l'Acide Trilactique, leurs occurrences et leurs contributions.



Groups 1 ^{er} Ordre	Occurrences	Contribution	
CH ₃	3	0.0040	×3
CH	1	-0.0075	×1
OH	1	0.0230	×1
COOH	1	0.0241	×1
CHCOO	2	-0.0057	×2
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
CHCOOH or CCOOH	1	0.0052	×1
OH-CH _n -COO (n in 0,,2)	1	0.0013	×1
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
CH multiring	4	0.0018	×4
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = 0.04679$			

Sachant que $A = 0.04679$, $a = 0,33156$ et $b = 2,9513$, la température d'éclair est prédite en utilisant l'équation (II-1) comme suit :

$$FP = 609.15 \times 2.9513 \times \left(\frac{0.33156 - 0.04679}{1 + |0.33156 - 0.04679|} \right) = 501.47$$

Donc, la température d'éclair finale est de 501.47 K, et en conséquence l'EMR = 0.5 %.

II.3.2 Modèle basée uniquement sur la structure moléculaire

Après avoir proposé un modèle prédictif donnant la température d'éclair à partir de la structure moléculaire et la température d'ébullition, nous proposons cette fois-ci un modèle totalement prédictif se basant uniquement sur la structure moléculaire comme information d'entrée. En effet, pour les composés n'ayant pas des valeurs

expérimentales de la température d'ébullition, ce dernier modèle est essentiel pour la prédiction de la température d'éclair.

La même base de données utilisée précédemment est utilisée dans cette section pour développer le nouveau modèle qui se base uniquement sur la structure moléculaire.

II.3.2.A Fragmentation en groupes des structures moléculaires

En utilisant la même base de données que précédemment (section II.2) nous obtenons les mêmes groupes structuraux du troisième ordre pour les 1660 composés (cf. Section II.3.1.A).

Nous rappelons que 155 groupes du premier ordre, 101 groupes du second ordre et 38 groupes du troisième ordre ont été collectés pour être utilisés comme paramètres d'entrée pour les modèles à développer.

Les groupes structuraux du premier ordre et leurs nombres d'occurrences dans les structures chimiques de chaque composé sont montrés dans le Tableau II-2. Pour alléger le manuscrit, les groupes d'ordre deux et trois sont reportés en Annexe A.

II.3.2.B Définition de la fonction du modèle

Dans la littérature scientifique plusieurs formes mathématiques ont été proposées qui peuvent être classées en deux catégories selon l'utilisation d'une fonction linéaire ou non-linéaire par rapport des contributions des groupes. À travers l'étude bibliographique établie précédemment il a été constaté que les modèles non-linéaires donnent des prédictions plus précises que les modèles linéaires.

Nous avons examiné l'effet d'additivité du

Pour sélectionner la forme mathématique de l'équation de notre modèle, nous avons examiné l'effet d'additivité du nombre de carbone² CH_2 sur la température d'éclair.

² Groupe ayant une occurrence importante sur l'ensemble des structures des composés de la base de données.

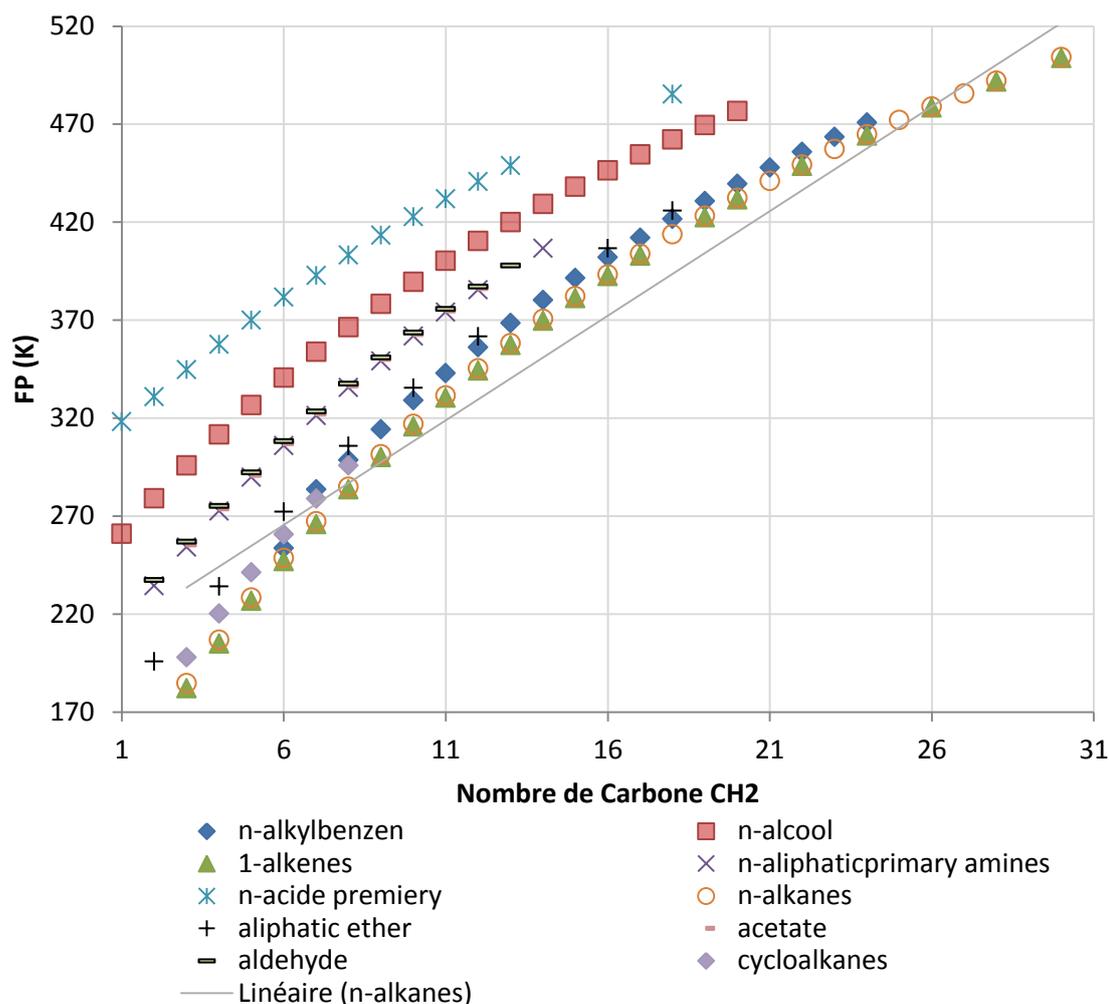


Figure II-8 : Tracé de FP en fonction du nombre de carbone

La figure montre le tracé l'évolution des points d'éclair en fonction du nombre de carbone croissant appartenant à différentes classes, tels que les n-alcane, l'Alkylbenzènes, les N-alcool, les N-alcènes, les Formates et autre familles chimiques. Sur cette figure, il peut être constaté que les contributions du groupe CH_2 ou l'augmentation du nombre de carbones dans certains composés est non-linéaire par rapport aux deux températures d'éclair. Par conséquent, le modèle proposé doit être non-linéaire par rapport aux additivités des groupes structurels.

Afin de choisir la meilleure forme mathématique du modèle, plusieurs fonctions non-linéaires ont été construites et testées en utilisant la totalité des données d'apprentissage et de test. Finalement, l'équation suivante a été maintenue :

$$FP = c + b \times \left(\frac{a+A}{1+|a+A|} \right) \quad (\text{II-7})$$

$$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k \quad (\text{II-8})$$

A, est obtenu pour chaque molécule par addition des contributions des groupes qui la compose dans l'équation.

- a, b et c sont des paramètres ajustables,
- N_i, M_j, E_k sont les nombres d'occurrences de contributions de groupe individuelle,
- C_i est la contribution de groupe de premier ordre de type i ,
- D_j est la contribution de groupe de deuxième ordre de type j
- O_k est le groupe de troisième ordre des contributions du type k .

II.3.2.C Recherche des paramètres du modèle par optimisation paramétrique

Pour estimer les paramètres du modèle, une régression simultanée est considérée en utilisant toutes les contributions des groupes de premier, deuxième et troisième ordre dans la phase d'apprentissage du modèle proposé. Cela évite que les termes d'ordre supérieur absorbent les erreurs des termes inférieurs. Ces paramètres sont obtenus en minimisant la somme des erreurs aux carrés en utilisant l'algorithme de Levenberg-Marquardt (cf. paragraphe I.4) et (section II.3.1.C) [81].

Les contributions des groupes du premier ordre, leurs contributions et leurs nombres d'occurrences dans les structures chimiques de chaque composé ont été présentés dans le Tableau II-2. Pour alléger le manuscrit, les groupes d'ordre deux et trois sont reportés en Annexe A.

Les valeurs numériques des paramètres ajustables a, b et c après régression sont respectivement $a = -0,05135$; $b = 732,97105$; $c = 163,04454$.

II.3.2.D Résultats et discussions

Après avoir défini notre modèle pour la prédiction des points d'éclair en utilisant seulement la structure moléculaire, il doit ensuite être validé et testé et ses. Les résultats de prédiction sont analysés et discutés.

Dans un premier temps, le modèle proposé est appliqué pour l'estimation des points d'éclair des molécules ayant servi dans la mise au point du modèle, c'est-à-dire les molécules de l'ensemble d'apprentissage. Ensuite le modèle proposé est appliqué sur

des nouvelles molécules qui n'ont pas servi dans sa mise en place afin de tester correctement son pouvoir prédictif et sa robustesse. Donc toutes les 1660 valeurs de FP évaluées dans la base de données DIPPR 801 sont considérées.

Les paramètres statistiques affichés par le modèle proposé sont donnés dans le Tableau II-5 et détaillés en fonction des familles chimiques dans le Tableau II-6.

Tableau II-5 : Performance statistique du modèle développé (modèle sans NBP).

Ensembles de composés	N°	EMR (%)	EMA (K)	ET (K)	$D_{max}(K)$	R^2
Apprentissage	1328	2,34	8,29	8,87	81,30	0,9877
Test	332	3,02	10,75	12,89	113,30	0,9757
Total	1660	2,68	9,52	10,88	97,30	0,9817

Les données de l'ensemble d'apprentissage ont été estimées avec une bonne précision affichant une EMR de 2,34% et une faible valeur d'EMA de 8,29 K. L'écart maximal D_{max} dans l'ensemble de test est de 113,30 K correspond au Dioleïn (1,3-Dioleoylglycérol) et dans l'ensemble d'apprentissage est de 81,301 K correspond à 4-carboxybenzaldehyde. Nous pouvons constater que les coefficients de régression linéaire sont très proches de 1 pour les deux ensembles de composés. Les deux EMR dans les deux ensembles sont relativement proches les uns des autres.

Ce nouveau modèle affiche des erreurs relativement supérieures aux erreurs affichées par le modèle précédent utilisant la température NBP comme information d'entrée (voir Tableau II-3). Cette constatation est justifiée par le fait que le modèle précédent utilise la température d'ébullition comme une information d'entrée en plus, par rapport au nouveau modèle. Cette information d'entrée est fortement corrélée à la température d'éclair (cf. Figure II-4 et Figure II-5).

Tableau II-6 : Performance statistique du modèle développé par famille chimique (modèle sans NBP).

Classe des familles	N°	EMR (%)	EMA (K)	ET (K)	$D_{max}(K)$
Hydrocarbonés	442	1,95	6,30	5,71	63,58
O contenant	654	2,68	10,23	11,48	113,30
N contenant	140	3,01	10,12	12,60	68,23
S contenant	83	1,63	5,24	4,16	23,97
Cl contenant	57	2,34	7,36	7,22	49,61

F contenant	17	3,16	6,51	4,68	16,49
Br contenant	19	1,85	6,03	5,41	21,08
I contenant	7	3,76	11,92	9,82	31,50
P contenant	1	0	0,00	-	0,00
Si contenant	5	3,1	8,02	9,77	23,97
Multifonction	235	2,94	10,70	10,55	52,21
Total	1660	1,89	7,49	8,14	42,18

Sur le Tableau II-7 le modèle proposé affiche une bonne précision pour tous les types de composés. Pour les composés contenant N, F, I et Si, le modèle développé donne des *EMR* compris entre 3,01% et 3,76% qui sont relativement élevés par rapport au reste des familles chimiques. Toutefois, ces *EMR* restent dans la plage moyenne des incertitudes affichées dans la base de données DIPPR 801. Il a noté que 64.4% des valeurs expérimentales des températures d'éclair (1069 composés) utilisées pour le développement du modèle ont une incertitude de plus de 3% (cf. Tableau II-1).

La Figure II-9 affiche la régression entre les températures d'éclair issues du modèle proposé et ceux d'expérimentation pour les deux ensembles de composés d'apprentissage de test. Sur cette figure, il peut être constaté une régression pratiquement parfaite entre les valeurs expérimentales et les valeurs prédites aussi bien pour l'ensemble d'apprentissage que celui du test, ce qui revient à dire que la prédiction est fortement liée à la valeur expérimentale.

La Figure II-10 représente un histogramme de la répartition des composés en fonction de l'intervalle d'*EMR*. Il y a 483 composés (30 % du nombre total de 1660 composés) affichent une *EMR* inférieure à 1%. Ainsi que 72 % de la totalité des molécules leurs températures d'éclair sont prédites avec une *EMR* inférieur à 3% et 87 % de la totalité des molécules leurs températures d'éclair sont prédites avec une *EMR* inférieur à 5%. Finalement 13% des composés leurs températures d'éclair sont prédites avec une *EMR* supérieur à 5%.

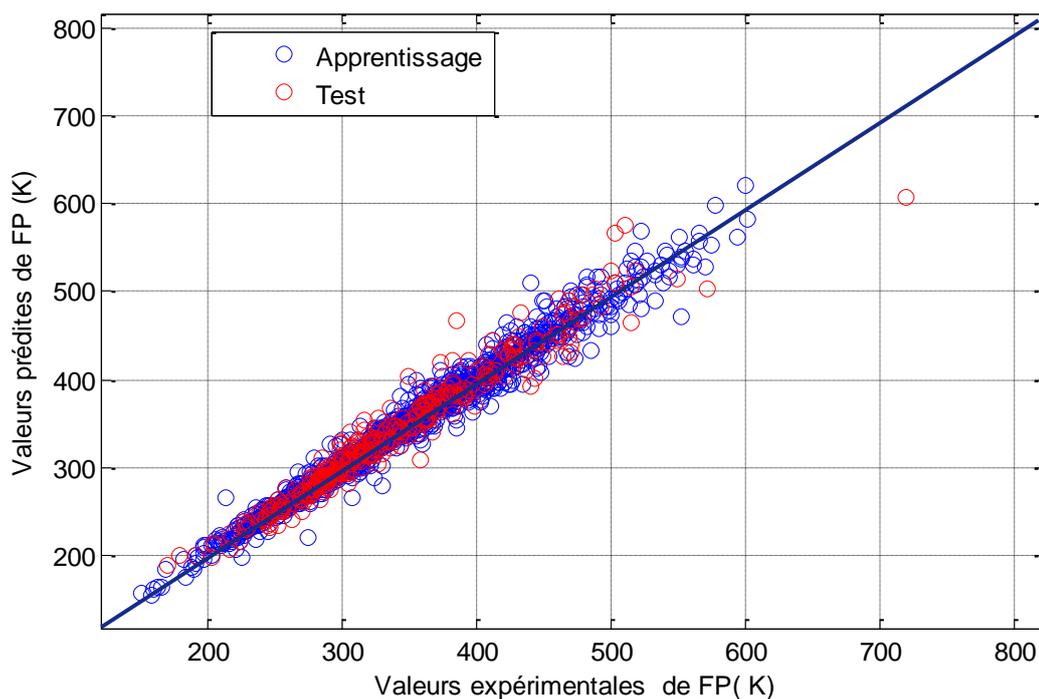


Figure II-9 : Valeurs prédites par rapport aux valeurs de DIPPR du point d'éclair (modèle sans NBP).

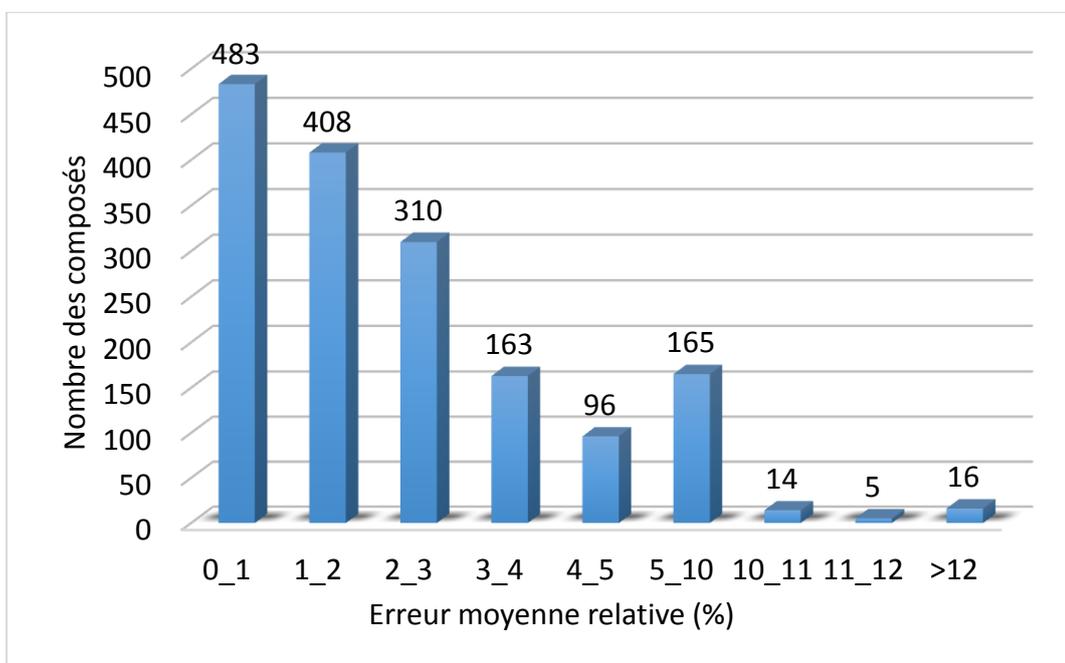


Figure II-10 : Répartition des composés en fonction de l'intervalle des EMR (modèle sans NBP).

Pour tester la capacité prédictive du deuxième modèle développé pour la FP, nous avons tracé les valeurs expérimentales et prédites du FP de diverses classes de composés organiques en fonction de leur nombre de carbone. À titre d'exemple, et pour des raisons de présentation, nous présentons dans la Figure II-11 et la Figure II-12 ces tracés concernant la famille n-alcanes et celle de n-alcools, respectivement.

Nous observons à partir de ces deux figures que le modèle proposé prédit correctement les FP malgré une extrapolation de nombre de carbone CH_2 de 100% sans divergences. Nous constatons également, que les valeurs prédites de FP sont en bon accord avec les valeurs mesurées expérimentalement et que ce deuxième modèle développé pour FP peut être utilisé pour une extrapolation sûre avec confiance.

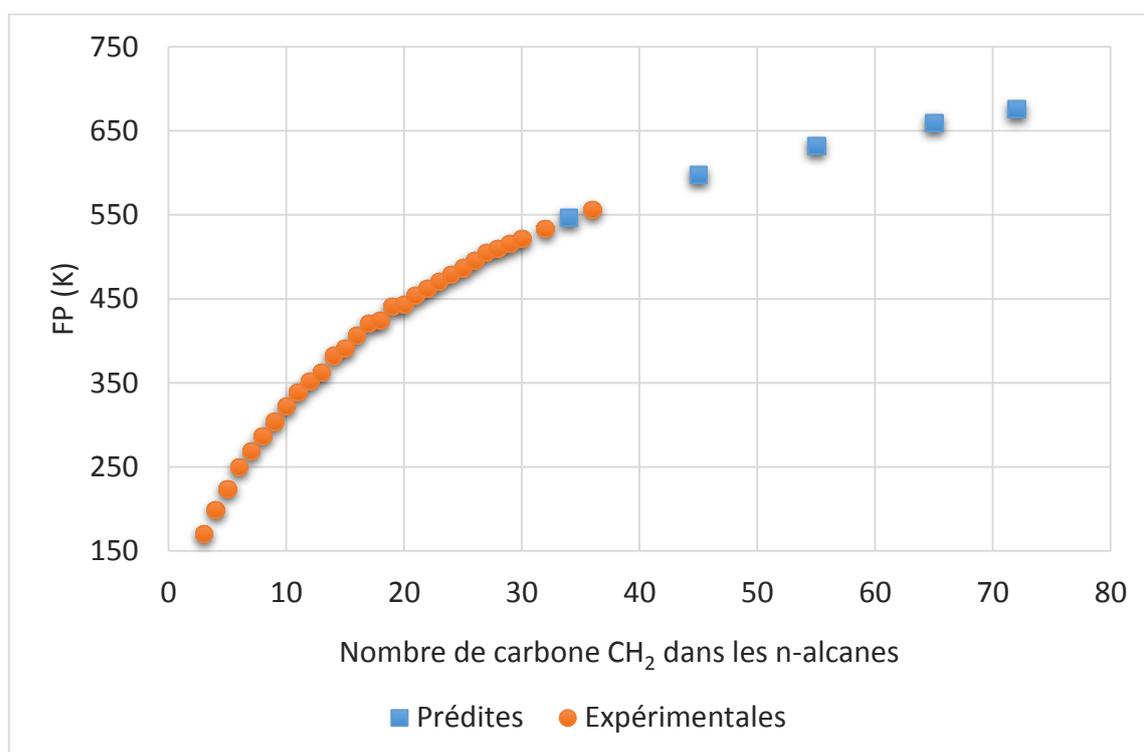


Figure II-11 : Tracé de FP en fonction du nombre de carbone des n-alcanes

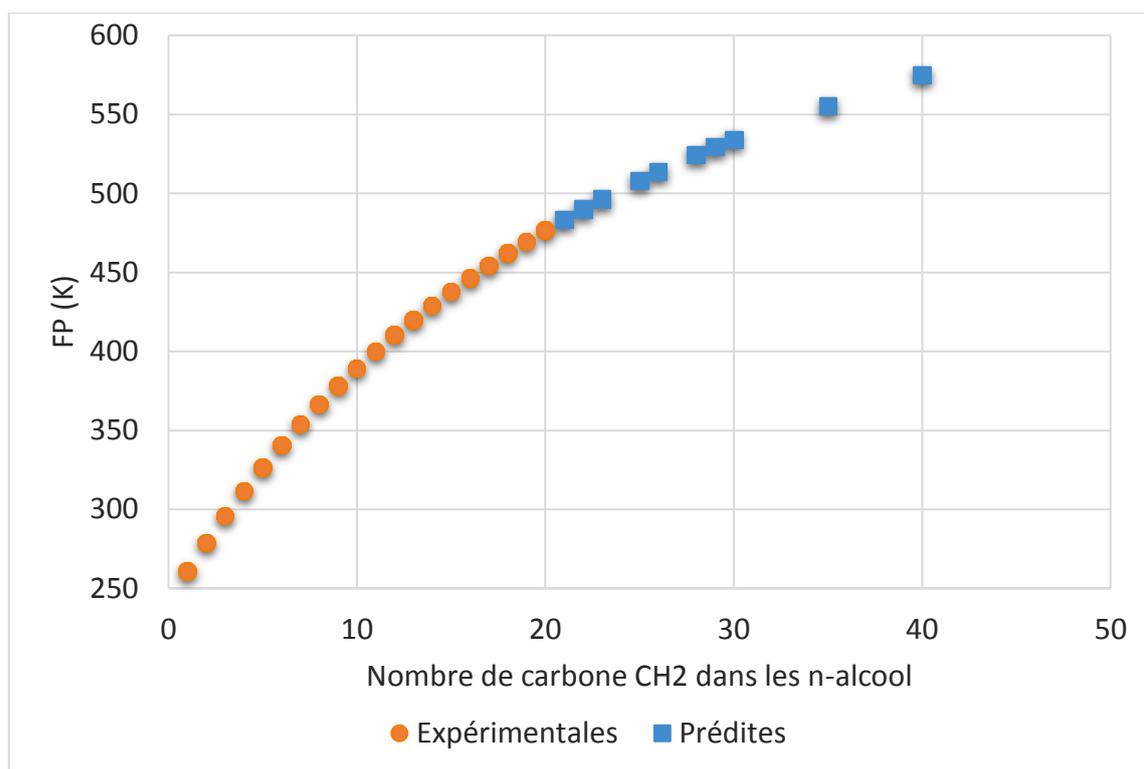
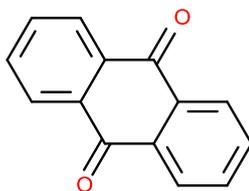


Figure II-12 : Tracé de FP en fonction du nombre de carbone dans les n-alcool

II.3.2.E Exemples d'applications illustratifs

II.3.2.E.1 Exemple 5 : Anthraquinone (CAS : 84-65-1)

La valeur expérimentale de température d'éclair de ce composé, prise à partir de la base de données DIPPR, est 470 K. Le tableau ci-dessous affiche les groupes fonctionnels utilisés pour représenter la structure de l'Anthraquinone, leurs occurrences et leurs contributions.



Groupes 1 ^{er} Ordre	Occurrences	Contribution
aCH	8	-0.0005 ×8
aC fused with non-aromatic ring	4	0.0029 ×4
CO (cyclic)	2	0,20454 ×2
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
-	-	-
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
aC-CO _{cyc} (fused rings)	4	-0,02551 ×4
AROM.FUSED [2]	2	-0,09630 ×2
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = 0,77065$		

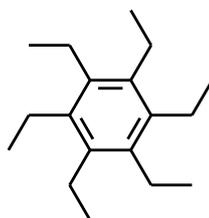
Sachant que $a = -0,05135$, $b = 732,9710$ et $c = 163,0445$, la température d'éclair est prédite en utilisant l'équation (II-7) comme suit :

$$FP = 163,04454 + 732,97105 \times \left(\frac{-0,05135 + 0,77065}{1 + |-0,05135 + 0,77065|} \right) = 469,696$$

Donc, la température d'éclair finale est de 469,696 K, et en conséquence l'EMR = 0,04 %.

II.3.2.E.2 Exemple 2 : Hexa-Ethylbenzène (CAS N° : 604-88-6)

La valeur expérimentale de température d'éclair de ce composé, prise à partir de la base de données DIPPR, est 413 K. Le tableau ci-dessous affiche les groupes fonctionnels utilisés pour représenter la structure de Hexa-Ethylbenzène, leurs occurrences et leurs contributions.



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution
CH ₃	6	0,02813 x6
aC-CH ₂	6	0,08431 x6
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
-	-	-
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
-	-	-
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k =$		0,67466

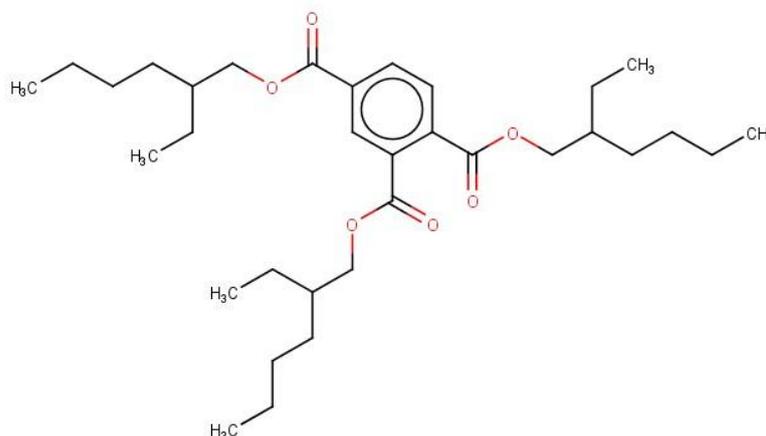
Sachant que $a = -0,05135$, $b = 732,9710$ et $c = 163,0445$, la température d'éclair est prédite en utilisant l'équation (II-7) comme suit :

$$FP = 163,04454 + 732,97105 \times \left(\frac{-0,05135 + 0,67466}{1 + |-0,05135 + 0,67466|} \right) = 444,487$$

Donc, la température d'éclair finale est de 444,487 K, et en conséquence l'EMR = 7,62%.

II.3.2.E.3 Exemple 3: Trioctyl Trimellitate (CAS N° : 3319-31-1)

La valeur expérimentale de température d'éclair de ce composé, prise à partir de la base de données DIPPR, est 523K. Le tableau ci-dessous affiche les groupes fonctionnels utilisés pour représenter la structure de Trioctyl Trimellitate, leurs occurrences et leurs contributions.



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution	
CH ₃	6	0,02813	x6
CH ₂	15	0,03221	x15
CH	3	0,01919	x3
aCH	3	0,03445	x3
aC-COO	3	0,17041	x3
Groupes 2 ^{eme} ordre		Occurrences	Contribution
AROMRINGS ^{1s²s⁴}		1	-0,03824 x1
Groupes 3 ^{eme} ordre		Occurrences	Contribution
-		-	-

$$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = 1,28581$$

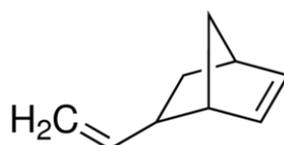
Sachant que $a = -0,05135$, $b = 732,9710$ et $c = 163,0445$, la température d'éclair est prédite en utilisant l'équation (II-7) comme suit :

$$FP = 163,04454 + 732,97105 \times \left(\frac{-0,05135 + 1,28581}{1 + |-0,05135 + 1,28581|} \right) = 567,985$$

Donc, la température d'éclair finale est de 567,985K, et en conséquence l'EMR = 8,57%.

II.3.2.E.4 Exemple 4 : Vinyle Norbornene (CAS N° : 3048-64-4)

La valeur expérimentale de température d'éclair de ce composé, prise à partir de la base de données DIPPR, est 295,15K. Le tableau ci-dessous affiche les groupes fonctionnels utilisés pour représenter la structure de Vinyle Norbornene, leurs occurrences et leurs contributions.



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution	
CH ₂ (cyclic)	2	0,03411	x2
CH (cyclic)	3	0,02719	x3
CH=CH (cyclic)	1	0,06630	x2
CH ₂ =CH	1	0,06929	x1
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
CH _{cyc} -CH=CH _n (n in 1..2)	1	-0,00899	x1
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
CH multiring	2	0,00647	x2
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k =$		0,28934	

Sachant que $a = -0,05135$, $b = 732,9710$ et $c = 163,0445$, la température d'éclair est prédite en utilisant l'équation (II-7) comme suit :

$$FP = 163,04454 + 732,97105 \times \left(\frac{-0,05135 + 0,3642}{1 + |-0,05135 + 0,3642|} \right) = 303,950$$

Donc, la température d'éclair finale est de 303,950 K, et en conséquence l'EMR = 2,98%.

II.4 Comparaison du modèle proposé avec ceux de la littérature

Les résultats des modèles proposés sont comparés à ceux des modèles de contribution de groupe récemment publiés et/ou les plus utilisés dans la littérature. Les résultats de cette comparaison sont présentés dans le Tableau II-7. Ces résultats montrent que la base de données des températures d'éclair utilisée dans ce travail est la plus grande en la comparant aux ceux utilisées par les autres méthodes. Le modèle basé sur la température d'ébullition proposé dans cette thèse est le plus précis dans tous les modèles de la littérature. Le second modèle basé uniquement sur la structure moléculaire est le plus précis dans sa catégorie de modèles, utilisant uniquement la structure moléculaire, proposés par Mathieu [88, 89], Albahri [30], Rowly [5] et Wong [67]. Cela rend les modèles proposés dans le cadre de cette thèse plus souhaitable pour ceux qui ont besoin de précision et un large intervalle d'applicabilité.

En outre, nous constatons que notre premier modèle proposé est plus précis que celui récemment publié par Alibakhshi [3] avec une grande base de données similaire à la nôtre (1660 contre 1533 utilisée dans la méthode d'Alibakhshi). Il convient de noter que, dans les deux modèles récents de Alibakhshi [3], certains composés disponibles dans la base de données d'origine (DIPPR 2014) ont été supprimés sans aucun commentaire ou discussion.

Comme on peut le constater dans cette comparaison, certains modèles développés par Albahri [30], Jia et al [90], et Valenzuela et al.[91] montrent dans une certaine mesure une meilleur EMR et/ou EMA. Cependant, cette comparaison est déséquilibrée en faveur de ces modèles précédents car leurs résultats de prédiction sont basés sur un ensemble de composés beaucoup plus petit et parfois des composées appartenant à une même famille chimique comme le cas du modèle de Valenzuela et al.[91] proposé uniquement pour prédire FP des alcanes. En outre, tous ces modèles affichant des erreurs faibles que ceux affichés par les modèles proposés, à l'exception du modèle d'Albahri [30], ont utilisé la totalité des données expérimentales dans l'étape de régression de paramètres.

Tableau II-7 : Comparaison entre les modèles proposés et ceux de la littérature

Modèle	No. base	Méthode prédictives	Année	EMA(K) (Apprentissage /test)	EMR (%) (Apprentissage/ test)	Rapport de l'ensemble test (%)
Ce travail	1660	GCM + NPB	2017	5.35/5.7	1.52/1.62	20%
Ce travail	1660	GCM	2017	8,29/10,75	2,34/3,02	20%
Alibakhshi [3]	1533	GCM + NPB	2015	5.83/-	1.61/-	0%
Mathieu [88]	1457	GCM	2014	6.7/13.3	-/3.7	80%
Gharagheizi[31]	1378	GCM+ANN	2008	7.898/9.94	-/-	10%
Rowley[5]	1000	GCM	2010	9.80/-	2,84/-	0%
Lee[83]	792	CGM+NPB	2012	5.49/8.43	-/-	20%
Alibakhshi[64]	740	GCM + NPB	2017	4.066/-	1.225/-	0%
Hukkerikar[70]	512	GCM	2012	10.66/-	3.27/-	0%
Lazzús[32]	505	GCM+ANN	2011	5,9/6,9	1,7/1,9	30%
Tetteh[56]	400	CGM+CI+ANN	1999	8,7/11,2	-/-	33%
Albahri[30]	375	GCM+ANN	2015	3.59/3.25	1.12/0.97	10%
Albahri[30]	375	GCM	2015	14/-	4,3/-	0%
Jia[90]	287	GCM	2012	3.77/-	1,16/-	0%
Mathieu[89]	230 ^a	GCM	2012	11,15/12,4	-/-	20%
Wang[67]	230 ^a	GCM	2011	8,91/11,15	2,8/3,66	20%
Valenzuela[91]	48 ^b	GCM+NPB+ $\Delta_c H$ + $\Delta_{vap} H$	2011	4,33/-	1,63/-	0%

II.5 Conclusion

Dans ce chapitre, deux modèles non-linéaires de contributions de groupes d'ordre trois sont proposés pour la prédiction des températures d'éclair des composés organiques. Le premier modèle est basé à la fois sur la structure moléculaire et la température d'ébullition d'un composé. En revanche, le deuxième modèle est totalement prédictif utilisant uniquement la structure moléculaire comme source d'information.

Les deux modèles proposés dans ce chapitre ont été validés et testés correctement, et comparés à ceux proposés dans la littérature, et ont montré davantage de précision, de fiabilité et de supériorité notamment dans le cas du premier modèle pour la prédiction des températures d'éclair utilisant la température d'ébullition comme information d'entrée.

Une base de données des températures d'éclair a été mise au point contenant 1660 molécules organiques appartenant à plusieurs familles chimiques. Cette

banque de données est la plus conséquente parmi les méthodes concurrentes proposées dans la littérature scientifique.

Chapitre III: Prédiction des points d'auto-inflammation (AIT) : développement, résultats et discussion

III.1 Introduction

Le point d'auto-inflammation ou la température d'auto-inflammation (AIT), est définie comme la température la plus basse à laquelle une substance produira un allumage à flamme chaude dans l'air à la pression atmosphérique sans l'aide d'une énergie extérieure. Cependant, l'AIT est l'une des spécifications de sécurité les plus importantes utilisées pour caractériser les potentiels de risque d'une substance chimique et pour spécifier les conditions de stockage et de manipulation des matériaux chimiques

À l'AIT, la vitesse de la chaleur dégagée par la réaction d'oxydation exothermique entraîne un déséquilibre de la vitesse à laquelle la chaleur est perdue dans l'environnement et provoque l'inflammation. L'AIT dépend non seulement des propriétés chimiques et physiques de la substance, mais également de la méthode et de l'instrument utilisés pour la déterminer, tels que le volume et le matériau du récipient utilisé, la pression d'essai et la concentration en oxygène [1]. La mesure de la température AIT est une tâche pénible, très coûteuse et parfois très difficile notamment si le composé concerné est métastable, toxique, ou il possède d'autres propriétés dangereuses. De ce fait, il est beaucoup plus essentiel de posséder des méthodes pour obtenir des AIT par un calcul prédictif.

L'objectif de ce chapitre est de développer une méthode prédictive précise simple à utiliser avec un large intervalle d'application. En effet, seule la connaissance de la

structure moléculaire d'un composé donné et la maîtrise de la méthode de découpage de la structure moléculaire sont essentiels à l'estimation de la température AIT. Les détails relatifs au développement, test et validation de la méthode dans ce chapitre seront mentionnés.

III.2 Banque de données des points d'auto-inflammation

L'influence de la structure chimique des composés sur l'AIT est importante car divers paramètres tels que la longueur de chaîne, l'addition de groupes méthyle, la ramification de chaîne, les structures cycliques et aromatiques peuvent élever les valeurs AIT. Ce comportement peut nous conduire à une meilleure compréhension des valeurs expérimentales des AIT.

La mesure de l'AIT est fortement liée à la méthode expérimentale de mesure. Parmi les variables expérimentales affectant la mesure de AIT sont la composition du mélange de vapeur-air, la forme, la taille et la configuration de l'appareil, le matériel superficiel chaud, le type et la réactivité d'autres matériels, le taux et la durée de chauffage et la pression atmosphérique [92]. Cependant, la mise au point d'une large base de données expérimentales précise et riche en information est une étape très importante et cruciale.

III.2.1 Construction de la base de données expérimentale

Dans ce travail, nous avons proposé une base de données expérimentale de plus de 1196 molécules contenant différentes substances chimiques. Les données sont prises à partir de la base de données du projet DIPPR® 801 de l'Institut Américain des Ingénieurs Chimistes (AIChE) [93]. Le DIPPR® 801 est l'une des bases de données les plus utilisées dans la modélisation moléculaire et dans l'industrie chimique [9]. L'Annexe 2 résume la totalité de la base des données d'AIT où pour chaque composé nous affichons son code SMILE, valeur prédite, Nom, formule brute, et son numéro de CAS. L'ensemble des données d'AIT extraites de la base de données DIPPR enregistrent différents niveaux d'incertitude à savoir : <0.2 %, <1 %, <3 %, <5 %, <10 %, <25 %, <50 % et Inconnus entrée. Dans le cadre de cette thèse nous avons considéré tous les niveaux d'incertitude et cela est dû au nombre limité des données ayant une précision inférieure de 10% et plus, nous avons considéré les données dont

la précision est inconnue et inférieure de 25% et 50%. Le Tableau III-1 illustre le nombre des composés en fonction des incertitudes des valeurs des températures AIT.

Tableau III-1 : Exactitude de données d'AIP de data base DIPPR.

Incertitude des valeurs de AIT	Nombre des composés
Inférieur de 0.2%	3
Inférieur de 1%	8
Inférieur de 3%	11
Inférieur de 5%	47
Inférieur de 10%	50
Inférieur de 25%	658
Inférieur de 50%	6
Inconnus	412
Total	1196

Cette banque de données englobe des molécules de différentes familles chimiques telles que les Alcanes, les Alcènes, les Aromatiques, les Acides, Cétones et autre familles qui peuvent être utiles dans plusieurs domaines industriels comme la synthèse des molécules pharmaceutiques et énergétiques, et des composés contenant les atomes O, N, S, des Halogènes et des composés multifonctionnels contenant ces atomes. Une analyse minutieuse des composés de cette base de données montre que les valeurs d'AIP se varient entre 317,15 K (dichlorosilane) et 1282,15 K (acide citrique). La figure suivante montre les différentes familles présentées dans cette base des données.

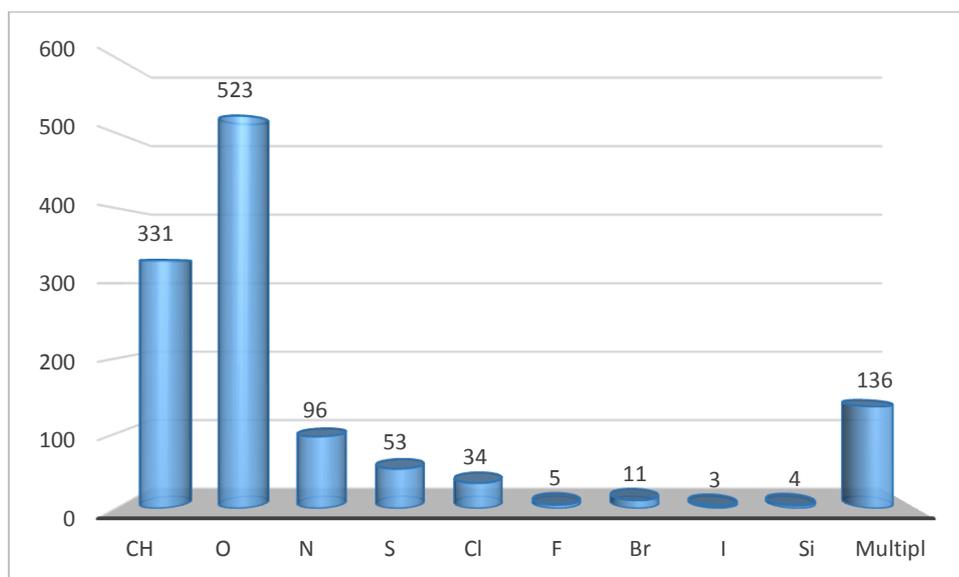


Figure III-1 : description des familles chimique dans la base de données d'AIT.

CH : hydrocarbure ; O : oxygénés ; N : azotés ; S : contenant du soufre ; Cl : Chlorés ;
 F : fluorés ; Br : bromés ; I, iodé ; P : contenant du phosphore ; Si : contenant de la
 silice ; multiple : composés multifonctionnel.

La Figure III-1 montre un nombre limité de composés contenant l'atome F, Br, I et Si. Cependant, il convient de noter qu'il existe des composés multifonctionnels contenant ces atomes dans la base de données.

III.2.2 Traitement et validation de données expérimentales

La meilleure façon d'améliorer la qualité d'un modèle prédictif est d'utiliser des données expérimentales plus nombreuses et de meilleure qualité pour le construire. Les données expérimentales des AIT ont été analysées, évaluées et validées.

Dans la première étape dans cette analyse nous avons tracé les évolutions des points d'auto-inflammations en fonction de nombre de carbone croissant appartenant à différentes classes, tels que les n-alcanes, les n-alcools, les n-alcènes, cyclo-alcènes et autre familles. Ce type de tracé nous permet de détecter l'existence des valeurs aberrantes par rapport à l'évolution de la température AIT de différentes classes. Nous citons dans les figures suivantes quelques exemples de quelques familles chimiques.

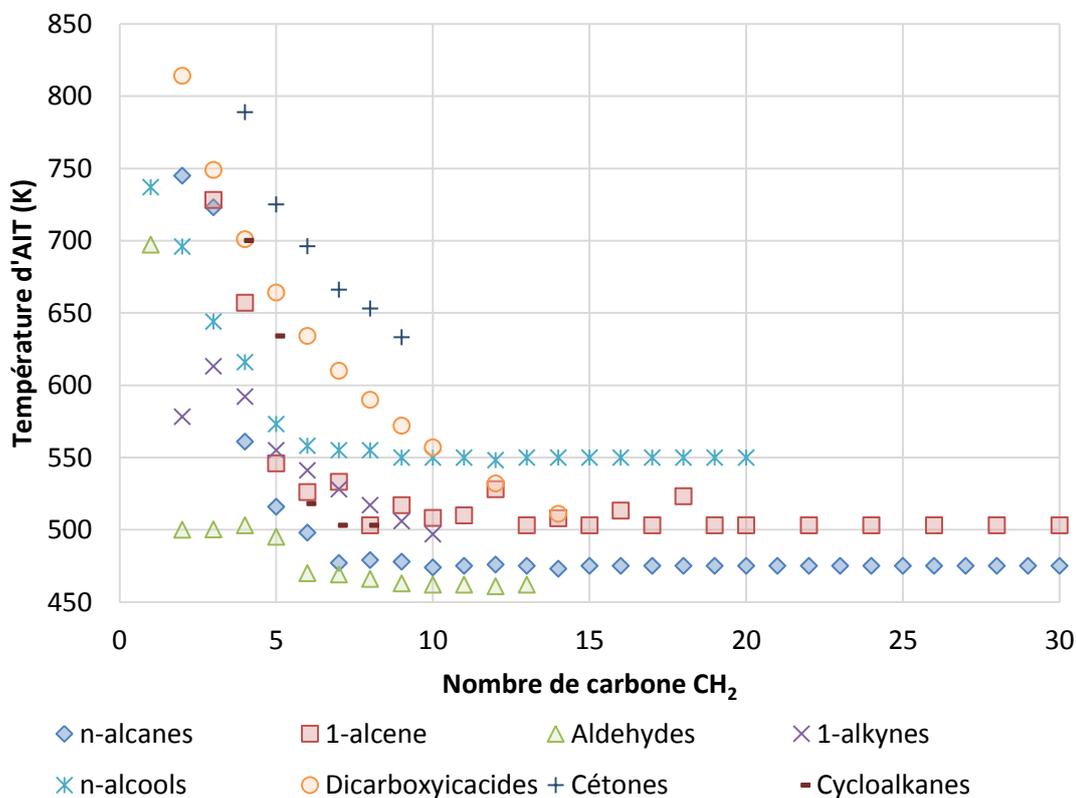


Figure III-2 : Tracé de la température d'AIT en fonction du nombre de carbone

La banque de composées est divisée en deux parties, ensemble d'apprentissage et un autre de test. La base d'apprentissage contient 957 composés (80%) et l'ensemble de test contenant environ 20% de toute la base de données (239 composés).



Figure III-3 : Schéma représentative de la division de la base des données des AIT

Cette partition est effectuée en utilisant un choix semi-aléatoire. Comme discuter précédemment dans la section précédente (cf. Section II.2), une division aléatoire peut exclure certains groupes de l'étape d'apprentissage et affecte directement les performances du modèle, et une contribution de groupe ne peut être calculée qu'à partir d'au moins quatre points de données.

III.3 Construction du modèle pour la prédiction des points d'auto-inflammation

Après avoir achevé la définition et la validation de la base de données expérimentale des points auto-inflammation, l'étape de la construction du modèle est entamée.

Dans cette partie nous avons développé un modèle de contributions de groupes d'ordre trois totalement prédictif basant uniquement sur la structure moléculaire.

III.3.1 Fragmentation en groupes des structures moléculaires

La première étape de la construction du modèle de prédiction des températures d'AIT est de fragmenter la totalité de molécules (1196 molécules) en groupes fonctionnels suivant un schéma de découpage d'ordre trois selon Marrero et Gani [69] (cf. Section II.3.1.A). Cette étape fournit un ensemble de 138 groupes du premier ordre, 87 groupes du second ordre et 26 groupes du troisième ordre. L'ensemble de ces groupes fonctionnels permet de décrire tous les effets significatifs sur la température d'AIT des composés inclus dans la base de données et d'une grande variété de composés

organiques avec une distinction des isomères. La totalité des groupes collectés seront utilisés comme des informations d'entrées pour le modèle à proposer.

III.3.2 Définition de la fonction du modèle

La définition de la fonction mathématique du modèle est précédée. Pour choisir correctement la forme mathématique de l'équation du modèle, nous avons tracé l'évolution des températures d'AIT en fonction de l'additivité du nombre de carbone CH_2 appartenant aux différentes classes, tels que les n-alcanes, les n-alcools, les n-alcènes, cyclo-alcènes et autre familles (voir la Figure III-2).

Nous constatons à partir de ces graphes que la relation entre l'additivité du nombre de carbone CH_2 et la température d'AIT est non linéaire.

Après avoir analysé les structures des molécules et leurs températures d'AIT et essayé plusieurs fonctions mathématiques reliant les groupes moléculaires et le point d'auto-inflammation, une fonction non linéaire est proposée. En effet, il a été constaté que la contribution d'un groupe dans une molécule est toujours non linéaire par rapport à sa valeur d'auto-inflammation.

La meilleure forme mathématique du modèle obtenue est la suivant :

$$AIP = c + b \times \left(\frac{a + A}{1 + |a + A|} \right) \quad (III-1)$$

$$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k \quad (III-2)$$

A , est obtenu pour chaque molécule par addition des contributions des groupes qui la compose dans l'équation.

- a, b et c sont des paramètres ajustables,
- N_i, M_j, E_k sont les nombres d'occurrences de contributions de groupe individuelle,
- C_i est la contribution de groupe de premier ordre de type i ,
- D_j est la contribution de groupe de deuxième ordre de type j
- O_k est le groupe de troisième ordre des contributions du type k .

III.3.3 Recherche des paramètres du modèle par optimisation paramétrique

Une fois la forme mathématique du modèle est définie, l'étape suivante consiste à rechercher les meilleures contributions des groupes permettant la meilleure prédiction des températures d'AIT. Une régression simultanée est considérée en utilisant toutes les contributions des groupes du premier, deuxième et troisième ordre. La recherche des valeurs de contributions de groupes A est obtenu en minimisant la somme des erreurs aux carrés en utilisant l'algorithme de Levenberg-Marquardt (cf. paragraphe I.4) et (section II.3.1.C) [81].

Le Tableau III-2 affiche la totalité des groupes d'ordre un, leurs contributions et leurs nombres d'occurrences dans les structures chimiques de chaque composé. Afin de décharger le présent manuscrit, les groupes d'ordre deux et trois sont reportés en Annexe B.

Les valeurs numériques des paramètres ajustables a , b et c après régression sont respectivement $a = -0,7017$; $b = 250,5454$; $c = 680,763$.

Tableau III-2 : Valeurs de contributions de groupes du premier ordre donnant AIP

N°	Groupes	Occurrence	Paramètres
1	CH ₃	857	-0,3234
2	CH ₂	657	-0,1327
3	CH	191	0,1426
4	C	63	0,7669
5	CH ₂ =CH	89	-0,6186
6	CH=CH	54	-0,5443
7	CH ₂ =C	35	-0,4384
8	CH=C	9	-0,6513
9	C=C	3	0,3864
10	CH≡C	12	-0,9384
11	CH≡C	5	-0,6821
12	aCH	257	0,0406
13	aC fused with aromatic ring	18	0,0728
14	aC fused with non-aromatic ring	23	0,7215
15	aC except as above	15	-0,4361
16	aN in aromatic ring	9	-0,4838
17	aC-CH ₃	69	-0,0228
18	aC-CH ₂	52	0,0636
19	aC-CH	22	0,2072

20	aC-C	9	0,6253
21	aC-CH=CH ₂	7	-0,2232
22	aC-CH=CH	3	0,2447
23	aC-C=CH ₂	2	-0,0562
24	aC-C≡CH	1	-0,4162
25	OH	136	-0,2410
26	aC-OH	32	0,6378
27	COOH	63	-0,1283
28	aC-COOH	9	0,0789
29	CH ₃ CO	28	-0,1427
30	CH ₂ CO	17	0,2926
31	CHCO	2	0,5218
32	aC-CO	6	0,4846
33	CHO	37	-2,5004
34	aC-CHO	8	-1,9053
35	CH ₃ COO	28	-0,0267
36	CH ₂ COO	39	0,5719
37	CHCOO	9	0,4401
38	CCOO	2	0,4881
39	HCOO	6	-0,1979
40	aC-COO	32	0,7596
41	aC-OOC	1	0,3865
42	COO except as above	24	0,6432
43	CH ₃ O	33	-1,0856
44	CH ₂ O	60	-1,6443
45	CH-O	4	-0,3528
46	aC-O	7	-0,8504
47	CH ₂ NH ₂	31	-0,7991
48	CHNH ₂	2	-0,1309
49	CNH ₂	1	0,4060
50	CH ₃ NH	2	-0,9660
51	CH ₂ NH	15	-0,4245
52	CHNH	1	-0,2982
53	CH ₃ N	8	-0,8373
54	CH ₂ N	4	-1,3646
55	aC-NH ₂	16	0,1980
56	aC-NH	6	-0,0158
57	aC-N	2	-0,4318
58	NH ₂ except as above	4	-14,6620
59	CH ₂ CN	13	0,1903
60	CCN	1	408,3932
61	aC-CN	1	-1,6972
62	CN except as above	7	2,1106

63	CH ₂ NCO	2	-0,2059
64	aC-NCO	2	-0,6603
65	CH ₂ NO ₂	3	-0,5147
66	CHNO ₂	1	-0,0504
67	aC-NO ₂	10	-0,3949
68	NO ₂ except as above	1	-0,5072
69	ONO ₂	1	-0,5993
70	CONH ₂	3	0,1361
71	CON(CH ₃) ₂	1	-0,6505
72	aC-CONH ₂	1	538,8927
73	aC-NHCO	2	-0,1170
74	NHCONH	1	-0,8733
75	NH ₂ CONH	1	-0,9662
76	CH ₂ Cl	24	-0,1253
77	CHCl	4	0,1817
78	CHCl ₂	3	0,1977
79	CCl ₃	1	0,6896
80	CH ₂ F	1	-0,0189
81	CHF ₂	2	-0,2201
82	CF ₂	2	0,2264
83	CF ₃	5	-0,1908
84	HCClF	2	5,7868
85	CClF ₂	1	8,1370
86	aC-Cl	12	0,1741
87	aC-F	1	406,9402
88	aC-Br	2	0,6333
89	-I except as above	3	-1,0025
90	-Br except as above	9	-0,2541
91	-F except as above	4	-2,9744
92	-Cl except as above	32	-0,4308
93	CNOH	1	-0,5088
94	OCH ₂ CH ₂ OH	22	-1,2732
95	OCHCH ₂ OH	3	-1,0932
96	OCH ₂ CHOH	17	-0,7504
97	-O-OH	6	-101,6266
98	CH ₂ SH	15	-1,5722
99	CHSH	1	-1,0312
100	CSH	1	-1,2491
101	CH ₃ S	5	-2,3404
102	CH ₂ S	13	-2,1869
103	CHS	1	-1,5395
104	CS	3	-1,6705

105	aC-S-	1	-1,9956
106	SO	1	-3,3797
107	SO ₃ (Sulfonate)	2	-0,9087
108	SO ₄ (Sulfate)	3	-1,0890
109	PO ₄ (Phosphate)	1	0,8984
110	aC-PO ₄	1	1,2025
111	CO ₃ (Carbonate)	1	-0,2071
112	C ₂ H ₃ O	7	1,7828
113	C ₂ H ₂ O	1	-1,4937
114	CH ₂ (cyclic)	144	-0,2402
115	CH (cyclic)	98	2,1571
116	C (cyclic)	27	-0,8604
117	CH=CH (cyclic)	23	-0,2138
118	CH=C (cyclic)	26	-0,3093
119	C=C (cyclic)	4	-0,3237
120	CH ₂ =C (cyclic)	4	-1,2319
121	NH (cyclic)	11	0,1477
122	N (cyclic)	11	2,7706
123	CH=N (cyclic)	1	-1,3650
124	O (cyclic)	37	-0,3444
125	CO (cyclic)	20	0,1948
126	S (cyclic)	23	-0,6998
127	SO ₂ (cyclic)	1	-1,7741
128	>NH	1	-0,3646
129	-O-	3	0,2158
130	-S-	1	-0,5403
131	>CO	2	1,2820
132	SiHO	1	-14,1226
133	SiO	27	0,5077
134	SiH ₂	2	-657,7900
135	SiH	4	-1,3340
136	Si	20	0,7077
137	C _{cyclic} =C	1	1,2869
138	SiH ₃	1	-742,8805

III.3.4 Résultats et discussions

Dans cette partie les performances du modèle proposé pour la prédiction des températures d'auto-inflammabilité ont été évaluées, analysées et interprétées. Dans le cas d'un grand ensemble de données, il est nécessaire d'examiner en détail les résultats du modèle proposé.

Dans cette partie, le modèle proposé est évalué en utilisant les mêmes indicateurs de performances statistiques définis précédemment dans la section II.3.1.D (voir équations II-3, II-4, II-5 et II-6), à savoir : l'erreur moyenne absolue (*EMA*), l'erreur moyenne relative (*EMR*), l'écart-Type (*ET*) et le coefficient de détermination (R^2). Les indicateurs statistiques affichés par le présent modèle sont donnés dans le Tableau III-3 suivant :

Tableau III-3 : Paramètres statistique du model donnant AIP

Ensembles de composés	N°	EMR (%)	EMA (K)	ET (K)	$D_{max}(K)$	R^2
Apprentissage	957	5,91	36,62	39,52	407,91	0,89
Test	239	7,07	43,03	39,85	240,36	0,83
Total	1196	6,49	39,82	39,69	324,13	0,86

L'erreur moyenne relative et l'écart type de l'ensemble de composés de la base d'apprentissage et celui du test sont 5.91, 39.52, 7.07 et 39.85 K, respectivement. L'analyse de ces résultats montre l'efficacité de notre modèle à la prédiction des températures d'AIT aussi bien pour les composés utilisés durant son développement que pour les composés de test (239 composés nouveaux par rapport au modèle proposé). L'écart maximal D_{max} dans l'ensemble de test est de 240.36 K correspond au Diolein (1,3-Dioleoylglycérol) et dans l'ensemble d'apprentissage est de 407,91 K correspond à 4-carboxybenzaldehyde. Il peut est constaté sur le Tableau III-4 que les indicateurs statistiques obtenus pour l'ensemble d'apprentissage sont relativement proches de ceux de l'ensemble de test. Ceci confirme le pouvoir prédictif du nouveau modèle proposé.

Tableau III-4 : Performance statistique du model donnant AIP par classe de famille :

Classe des familles	N°	EMR (%)	EMA (K)	ET (K)	$D_{max}(K)$	R^2
Hydrocarbure	331	6,13	6,85	34,00	267,70	0,879
Oxygénés	524	6,46	39,87	42,05	407,91	0,862
Azotés	96	4,20	27,29	32,48	166,00	0,933
Soufrés	53	2,91	15,53	14,14	62,20	0,941
Chlorés	34	9,09	68,92	53,53	200,86	0,641
Florès	5	3,77	30,11	22,06	61,22	0,914
Bromés	11	5,16	33,39	31,13	99,18	0,930

Iodés	3	1,23	6,68	5,96	11,75	1,000
Contenant Si	4	15,59	85,50	18,61	103,65	0,549
Multifonctions	136	6,95	42,47	47,31	224,65	0,867
Total	1196	6,49	39,82	39,69	324,13	0,86

Les résultats de prédiction des températures d'AIT sont détaillés dans le Tableau III-4 en fonction de chaque classe chimiques. Nous constatons que le modèle proposé affiche des résultats très satisfaisants pour les hydrocarbures (EMA = 6.85 K) et les composés iodés (EMA = 6.68 K). En revanche, le modèle proposé affiche des résultats acceptables pour les composés contenant du Silicium avec un EMA de 85,5 K et un EMR de 15.59 %. Probablement, cette remarque est due au fait que des températures d'AIT expérimentales supplémentaires sont nécessaires pour les composés du Silicium afin d'améliorer la prédiction et vérifier la qualité du modèle développé pour cette catégorie de composés.

Une comparaison graphique entre les valeurs prédites et expérimentales des températures d'AIT, dans le cas des deux ensembles d'apprentissage et de test, est illustrée sur la Figure III-4 et la Figure III-5.

La Figure III-4 Figure IV-9 donne un aperçu global comparatif des erreurs de prédiction des températures d'AIT pour les deux ensembles d'apprentissage et de test. Comme il paraît dans la Figure IV-9 les valeurs d'erreurs des deux ensembles sont uniformes³, centrées autour du zéro et comprises entre 267,70 K et 407,91 K.

³ Les unes par rapport aux autres.

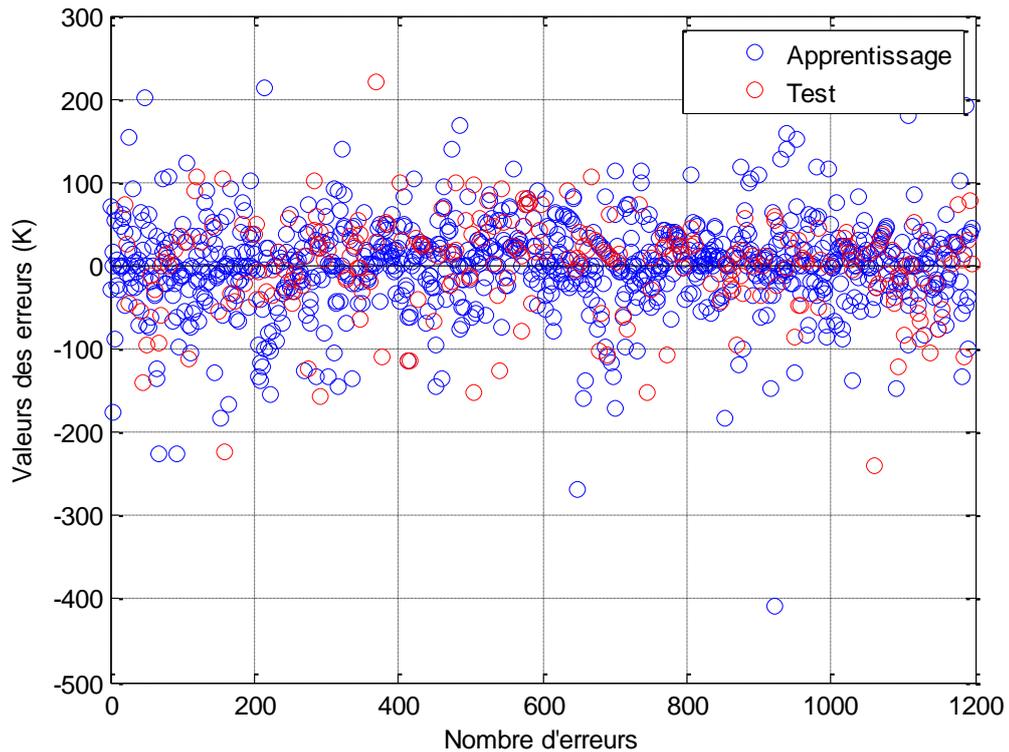


Figure III-4 : Erreurs de prédiction des températures d'AIT.

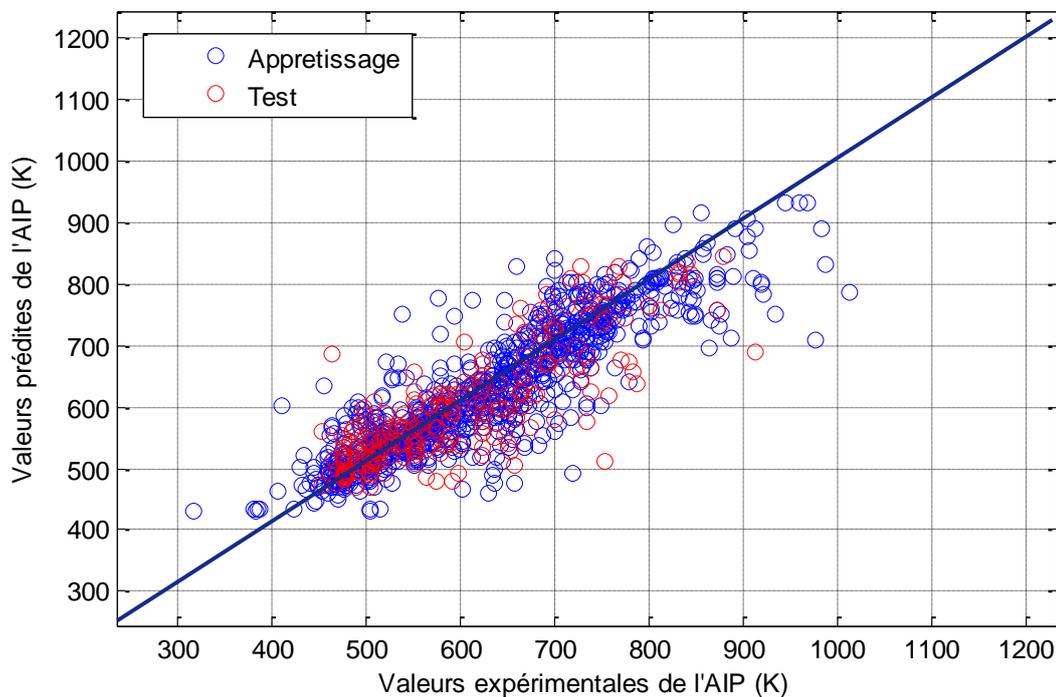


Figure III-5 : Valeurs Prédites par rapport aux valeurs de DIPPR de l'AIP.

Sur la Figure III-5, nous constatons une régression et une affinité entre les valeurs expérimentales et les valeurs prédites quasi parfaite pour les deux ensembles

d'apprentissage et de test. En effet nous avons obtenu un coefficient de corrélation $R^2=0,858$ pour la totalité de la base de données (1196 molécules). Ceci revient à dire que la prédiction est fortement liée à la valeur expérimentale.

Pour plus de lisibilité sur les résultats de prédiction des températures d'AITD nous présentons sur la Figure III-6 une répartition des composés en fonction de leur intervalle d'EMR. Nous constatons que l'EMR de 190 composés (environ de 16 % du nombre total de 1196 composés) est inférieur à 1%. Plus de 37 % des composés (dans les trois premiers intervalles) et 55 % des composés (dans les cinq premiers intervalles) pour lesquels leur EMR est inférieur à 3% et 5%, respectivement. En conséquence, cela signifie que le modèle proposé prédit les températures d'AIP avec une bonne précision.

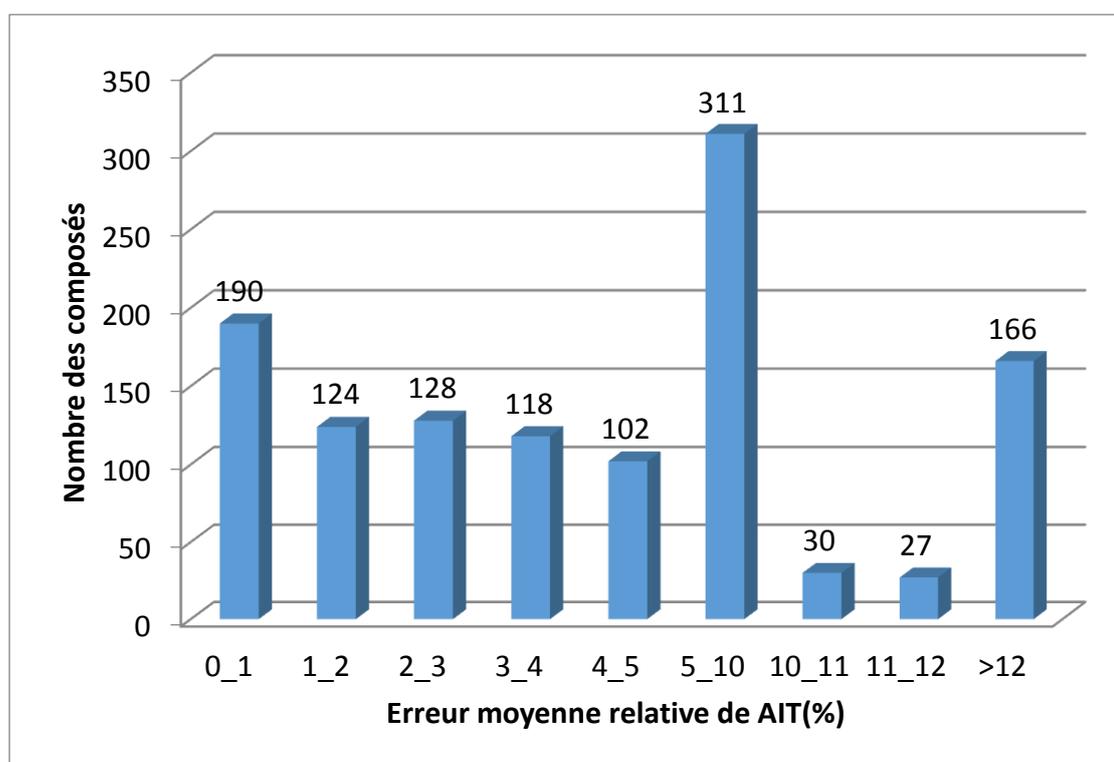


Figure III-6 : Répartition des composés en fonction de l'intervalle EMR de AIT

III.3.5 Comparaison du modèle proposé avec ceux de la littérature

Comme il est déjà présenté dans le chapitre 1, certains auteurs ont développé des modèles pour prédire la température d'AIP des composés organiques purs. Les résultats de prédiction de notre modèle sont comparés à leurs résultats.

Sur le Tableau III-5, nous constatons que la base de données proposée dans le cadre de cette thèse est la plus importante parmi les autres bases de données des méthodes concurrentes proposées dans la littérature.

Il est à noter que cette comparaison entre notre modèle et ceux des autres modèles est déséquilibrée en faveur des modèles concurrents car d'un côté notre base de données contient plus de deux fois de molécules que les autres bases de données, et d'un autre côté notre méthode est testée d'avantage sur des composés de test qui n'ont pas été utilisées dans l'étape de régression de paramètres. Dans les autres modèles, tous les composés de la base de données sont considérés dans l'étape de régression ou la recherche des paramètres, acceptation faite dans les méthodes de Pan et al. [94], Chen et al. [92] avec 17% et Albahri et George [95] avec 4% ensemble de test.

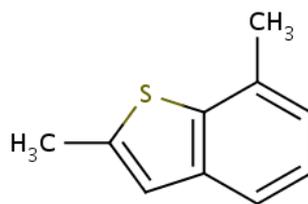
Tableau III-5 : Comparaison du model développé avec celle de littératures.

Model	N° de données	Méthode prédictive	Année	EMA (K) (Apprentissage /test)	Rapport de l'ensemble test (%)
Ce travail	1196	GC	2017	36,61 / 43, 02	20%
Frutiger [68]	513	GC	2016	6,4	0%
Hukkerikar [70]	750	GC	2012	6,8	0%
Pan [96]	446	GC	2007	35.96	-
Pan [94]	118	GC-ANN	2008	21.6	20%
Albahri [97]	131	GC	2003	28	0
Albahri et George [95]	490	GC-ANN	2003	17.8/16.7	4%
Chen [92]	483	GC	2009	32/69.7	17%

III.3.6 Exemples d'applications illustratifs

III.3.6.A Exemple 1: 2,7-Diméthyl Benz- thiophène (CAS : 16587-40-9)

La valeur expérimentale du point d'auto-inflammation de ce composé est de 573,00 K. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution
CH ₃	1	-0,32336281 ×1
aCH	3	0,04063313 ×3
aC fused with non-aromatic ring	2	0,72147544 ×2
aC-CH ₃	1	-0,02277854 ×1
CH=C _(cyclic)	1	-0,3092668 ×1
S _(cyclic)	1	-0,6997767 ×1
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
(CH _n =C) _{cyc} -CH ₃ (n in 0..2)	1	0,1188891 ×1
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
aC-(CH _n =CH _m) _{cyc} (fused rings) (n,m in 0..1)	1	0,09807294 ×1
aC-S _{cyc} (fused rings)	1	-1,50936371 ×1
AROM.FUSED[2]s ¹	1	-0,35963797 ×1
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = -1,44237419$		

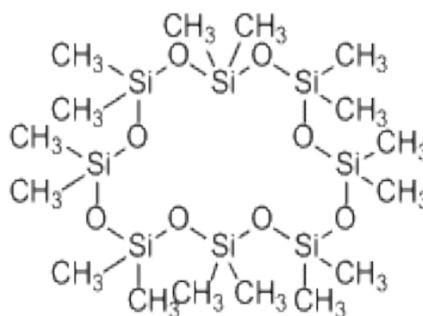
Sachant que $a = 0,70170306$, $b = 250,545434$ et $c = 680,762988$, le point d'auto-inflammation est prédit en utilisant l'équation (III-1) comme suit :

$$AIP = 680,762 + 250,545 \times \left(\frac{0,701703061 + -1,442374199}{1 + |0,701703061 + -1,442374199|} \right) = 574,153$$

Donc, le point d'auto-inflammation final est de 574,15 K, et en conséquence l'EMR = 0,20%.

III.3.6.B Exemple 2 : Hexa-deca-méthylcyclooctasiloxane (CAS : 556-68-3)

La valeur expérimentale du point d'auto-inflammation de ce composé est de 656,00 K. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution	
CH ₃	16	-0,32336281	×16
SiO	8	0,50772467	×8
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
/	/	/	/
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
/	/	/	/
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = -1,11200759$			

Sachant que $a = 0,70170306$, $b = 250,545434$ et $c = 680,762988$, le point d'auto-inflammation est prédit en utilisant l'équation (III-1) comme suit :

$$AIT = 680,762 + 250,545 \times \left(\frac{0,701703061 + -1,112007585}{1 + |0,701703061 + -1,112007585|} \right)$$

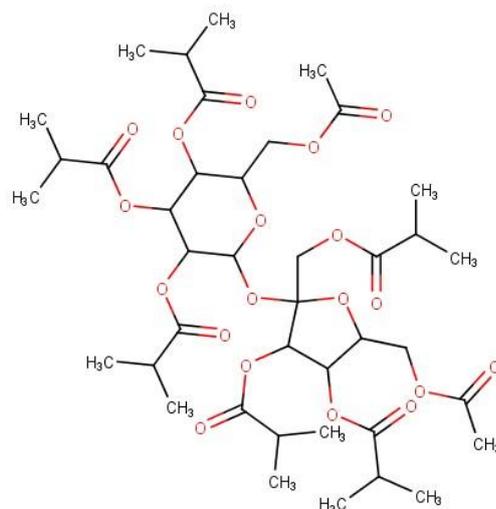
$$= 607,87$$

Donc, le point d'auto-inflammation final est de 607,87 K, et en conséquence l'EMR = 7,34%.

III.3.6.C Exemple3 : Acétate de Saccharose Isobutyrate (CAS N° : 126-13-6)

La valeur expérimentale du point d'auto-inflammation de ce composé est 672,15 K.

La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution	
CH ₃	12	-0,32336281	×12
CH ₂	3	-0,1326777	×3
CH ₃ COO	2	-0,02668582	×1
CHCOO	6	0,44010139	×6
CH (cyclic)	8	2,15712661	×8
C (cyclic)	1	-0,86035855	×1
O (cyclic)	2	-0,34436523	×2
-O-	1	0,21583319	×1
Groupes 2 ^{eme} ordre			
(CH ₃) ₂ CH	6	0,08334524	×6
CH _{cyc} -CH ₂	2	-2,23227791	×2
CH _{cyc} -O-	1	-0,94417085	×1
CH _{cyc} -OOC	5	-2,11475721	×5
C _{cyc} -CH ₂	1	0,5208629	×1
Groupes 3 ^{eme} ordre			
/	/	/	/

$$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = -0,72897137$$

Sachant que $a = 0,70170306$, $b = 250,545434$ et $c = 680,762988$, le point d'auto-inflammation est prédit en utilisant l'équation (III-1) comme suit :

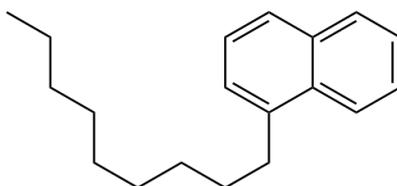
$$AIT = 680,762 + 250,545 \times \left(\frac{0,701703061 + -0,728971378}{1 + |0,701703061 + -0,728971378|} \right)$$

$$= 674,11$$

Donc, le point d'auto-inflammation final est de 674,11, et en conséquence l'EMR = 0,29%.

III.3.6.D Exemple 4 : 1-n-Nonylnaphthalene (CAS N° : 26438-26-6)

La valeur expérimentale du point d'auto-inflammation de ce composé est 576,00 K. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution	
CH ₃	1	-0,32336281	×1
CH ₂	7	-0,1326777	×7
aCH	7	0,04063313	×7
aC fused with aromatic ring	2	0,07283049	×2
aC-CH ₂	1	0,0636303	×1
<hr/>			
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
/	/	/	/
<hr/>			
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
AROM.FUSED[2]	1	-0,33993865	×1
AROM.FUSED[2]s1	1	-0,35963797	×1
<hr/>			
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = -1,457960099$			

Sachant que $a = 0,70170306$, $b = 250,545434$ et $c = 680,762988$, le point d'auto-inflammation est prédit en utilisant l'équation (III-1) comme suit :

$$AIT = 680,762 + 250,545 \times \left(\frac{0,701703061 + -1,457960099}{1 + |0,701703061 + -1,457960099|} \right)$$

$$= 572,876$$

Donc, le point d'auto-inflammation final est de 572,87 K, et en conséquence l' $EMR = 0,54\%$.

III.4 Conclusion

Un modèle non-linéaire de contributions de groupes d'ordre trois a été proposé pour la prédiction de la température d'auto-inflammation (AIT) des composés organiques purs. Le modèle proposé est totalement prédictif basant uniquement sur la structure moléculaire.

Un grand ensemble de données impliquant 1196 composés organiques a été mis au point. Afin de mieux valider et tester judicieusement le modèle proposé, la base de données est divisée semi-aléatoirement en deux sous-ensembles ; un ensemble d'apprentissage et un autre de test.

Le présent modèle affiche des résultats prometteurs clarifiés par les indicateurs statistiques EMA , EMR et ET qui sont respectivement de 39.82 K, 6.49% et 39.69 K. De même pour le coefficient de régression linéaire, il présente une bonne capacité de prédiction avec une valeur de 0,86.

Chapitre IV: Prédiction des limites d'inflammabilité : développement, résultats et discussion

IV.1 Introduction

La connaissance des limites d'inflammabilité à tous les conditions est nécessaire pour un fonctionnement sécurisée de certains procédés chimiques. Cette information peut être nécessaire pour démarrer un réacteur sans passer par une gamme inflammable, pour faire fonctionner des procédures chimique, ou pour stocker et expédier des produits chimiques en toute sécurité. La connaissance de ces limites n'est pas seulement importante pour la sécurité des procédés chimique mais également pertinent pour la stabilité des brûleurs ou pour le fonctionnement efficace des moteurs à combustion interne.

Les objectifs de ce chapitre est de développer une méthode de prédiction basée sur l'approche de contributions de groupes pour l'estimation des limites d'inflammabilité (limites inférieures et supérieures d'inflammabilité). Ce développement va se passer par trois étapes essentielles pour chaque limite : premièrement la collection et l'analyse d'une base de données expérimentales de limite d'inflammabilité. Ensuite, la présentation d'une méthodologie de développement d'un modèle pour la prédiction de cette propriété, suivie par la présentation et la discussion des résultats de prédiction.

IV.2 Banque de données des limites d'inflammabilité

Pour développer et valider des modèles prédictifs fiables, la taille et la précision des données ont une importance cruciale. Donc il est important de construire minutieusement une base de données aussi large que possible.

Dans ce travail, après avoir consulté plusieurs bases de données des propriétés physico-chimiques, nous avons extrait les données de limites d'inflammabilité à partir de la base de données du projet DIPPR[®] 801 de l'Institut Américain des Ingénieurs Chimistes (AIChE) [93]. Comme c'est déjà mentionné, cette base de données est l'une des meilleures sources connues dans le monde pour les données de propriétés physico-chimiques.

IV.2.1 Construction d'une base de données expérimentales

IV.2.1.A Limites inférieures d'inflammabilité (LII)

Une base de données comprenant des limites LII pour 1663 composés est considérée afin de mettre au point une méthode prédictive. Cette banque de composés englobe les familles chimiques les plus courantes comme c'est illustré dans la figure suivante. Cette figure montre la diversité des familles présentées dans notre base des données.

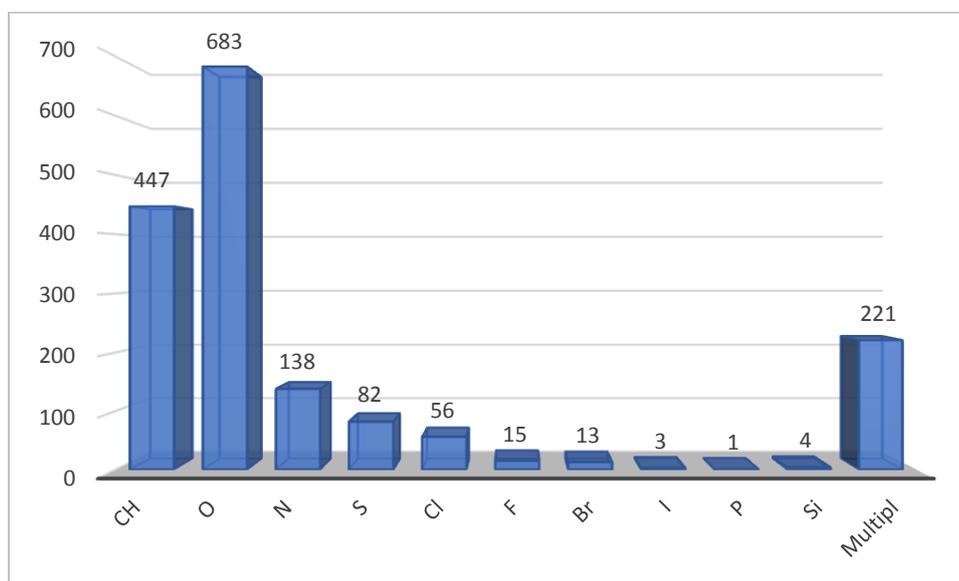


Figure IV-1 : Description des familles chimiques dans la base de données des LII

CH : hydrocarbure ; O : oxygénés ; N : azotés ; S : contenant du soufre ; Cl : Chlorés ; F : fluorés ; Br : bromés ; I, iodé ; P : contenant du phosphore ; Si : contenant de la silice ; multiple : composés multifonctionnel.

Les valeurs de LII se situent entre 0,02% (Téréphtalate de Mono-méthyle) et 14,40% (Chlorofluorométhane).

Les données évaluées rapportées dans cette base de données ont différents niveaux d'incertitude, à savoir : <1%, <3%, <5%, <10%, <25%, <50% et des valeurs inconnues.

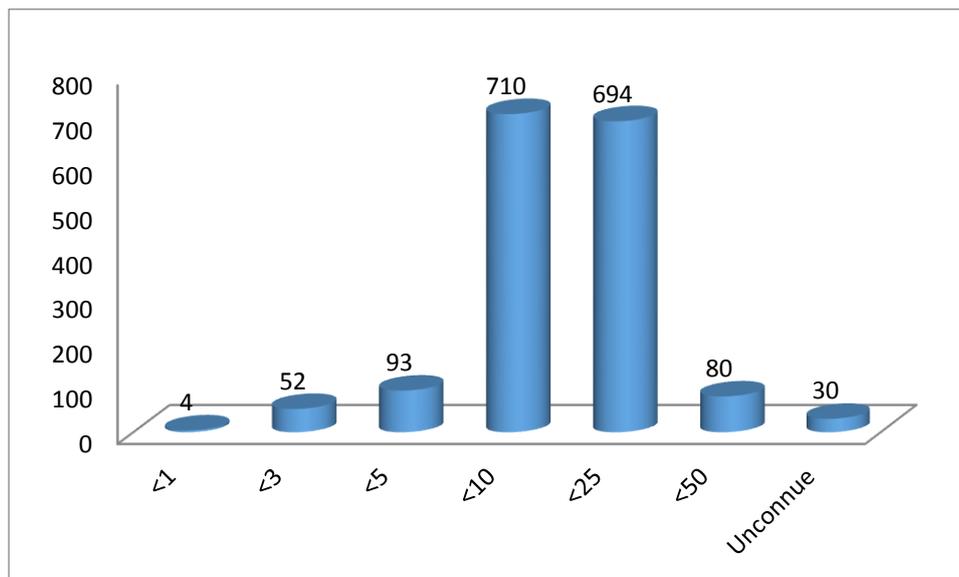


Figure IV-2 : Incertitudes de données des LII

Comme c'est indiqué dans Figure IV-2, les données des LII ont principalement une incertitude entre 10 et 25%. Cette remarque confirme que la mesure des limites LII est une tâche pénible entachée d'erreurs.

Pour plus de détail sur la présente base de données, nous l'avons reporté intégralement dans l'Annexe C, où pour chaque molécule nous affichons son code SMILE, valeur prédite, Nom, formule brute, fon numéro de CAS et les indicateurs statistiques de prédiction.

IV.2.1.B Limites supérieures d'inflammabilité (LSI)

Dans cette partie, nous avons proposé une base de données des LSI pour 1411 composés molécules appartenant aux différentes familles chimiques. La majorité des données sont prises à partir de la base de données du projet DIPPR® 801 de l'Institut Américain des Ingénieurs Chimistes (AIChE) [93].

La Figure IV-3 représente les différentes familles de la base de données. Comme il peut être constaté, il y a un nombre limité des composés contenant l'atome I ou Si, toutefois il existe des composés multifonctionnels contenant ces atomes dans la base de données.

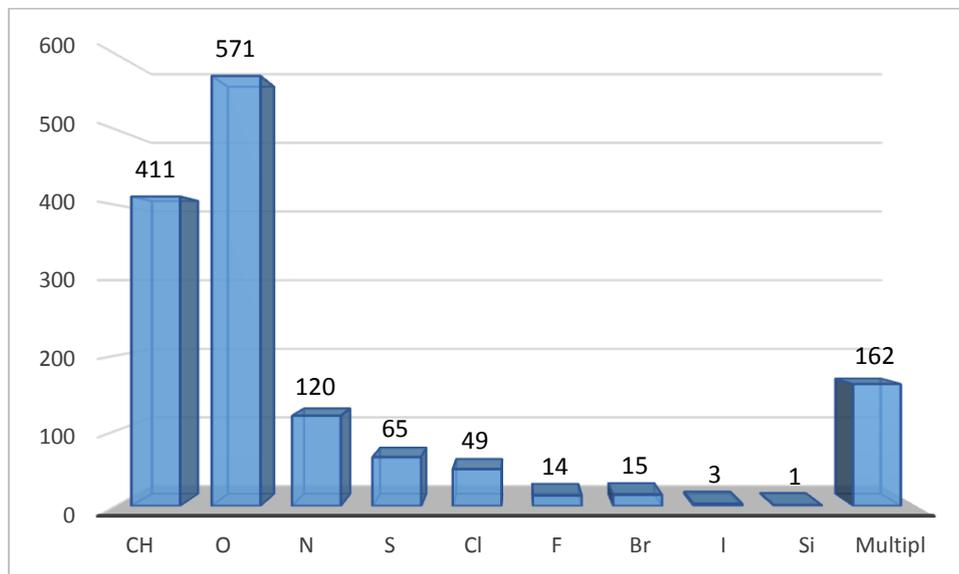


Figure IV-3 : Description des familles chimiques dans la base de données des LSI

CH : hydrocarbure ; O : oxygénés ; N : azotés ; S : contenant du soufre ; Cl : Chlorés ;
F : fluorés ; Br : bromés ; I, iodé ; Si: contenant de la silice ; multiple : composés multifonctionnel.

Dans cette base de données les valeurs de LSI se situent entre 2,30 % (Di-n-undecyl Phtalate) et 100% (Chlorure de propargyle). Les valeurs des LSI évaluées rapportées dans cette base de données ont différents niveaux d'incertitude à savoir : <1 %, <3 %, <5 %, <10 %, <25 %, <50 %, et inconnus. La Figure IV-4 représente la répartition des incertitudes dans la base des données des LSI. Comme il peut être constaté sur cette figure, 950 composés ont la valeur de LSI mesurée avec une incertitude de moins de 25%.

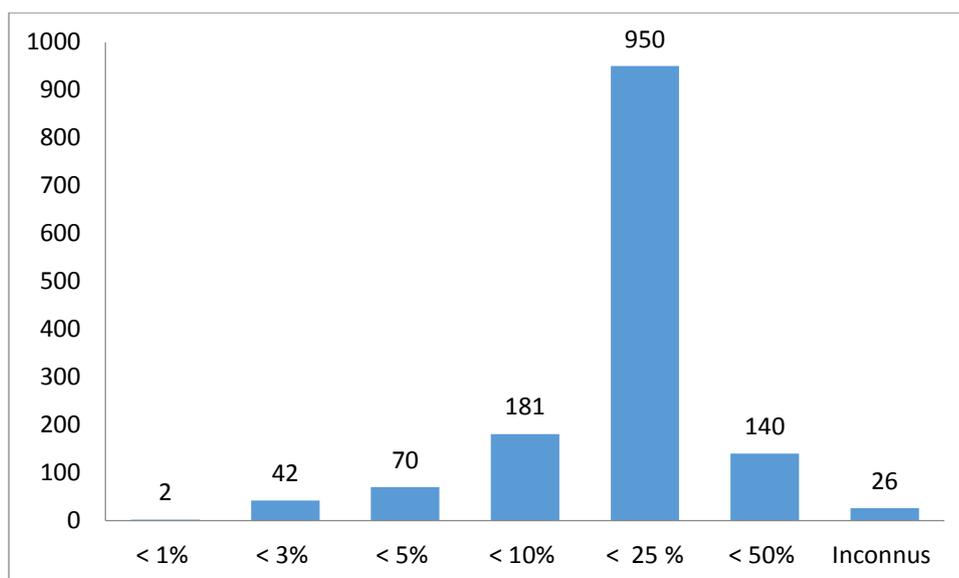


Figure IV-4 : Incertitudes de données des LII

Pour plus de détail sur la base de données des LSI nous l'avons reporté intégralement dans l'Annexe C, où pour chaque molécule nous affichons son code Smile, valeur prédite, Nom, formule brute, fon numéro de CAS et les indicateurs statistiques de prédiction.

IV.2.2 Traitement et validation de données expérimentales

Les données de limites d'inflammabilités collectées dans les deux bases de données sont traitées et validées en utilisant une démarche graphique afin de vérifier la tendance des valeurs expérimentales et détecter l'existence des valeurs aberrantes. Les valeurs expérimentales de chaque limite d'inflammabilité sont tracées en fonction de l'augmentation du nombre de carbone CH_2 appartenant à différentes classes, tels que les n-alcanes, l'alkyle-benzènes, les n-alcools, les n-alcènes, les formates et autre familles chimiques. Cela permet d'améliorer la capacité prédictive des modèles proposés ainsi que leur intervalle d'applications.

Les deux banques de composées contenant les données de LII et LSI sont divisées en deux nouvelles bases des données comprenant un ensemble d'apprentissage et un autre ensemble de tests. L'ensemble de données d'apprentissage est utilisé pendant le processus de développement ou de formation du modèle, alors que l'ensemble de données de test est utilisé afin de valider et tester la capacité prédictive et la fiabilité du modèle proposé. Le processus de division est effectué par un choix semi-aléatoire (*cf. Section II.2.2*).

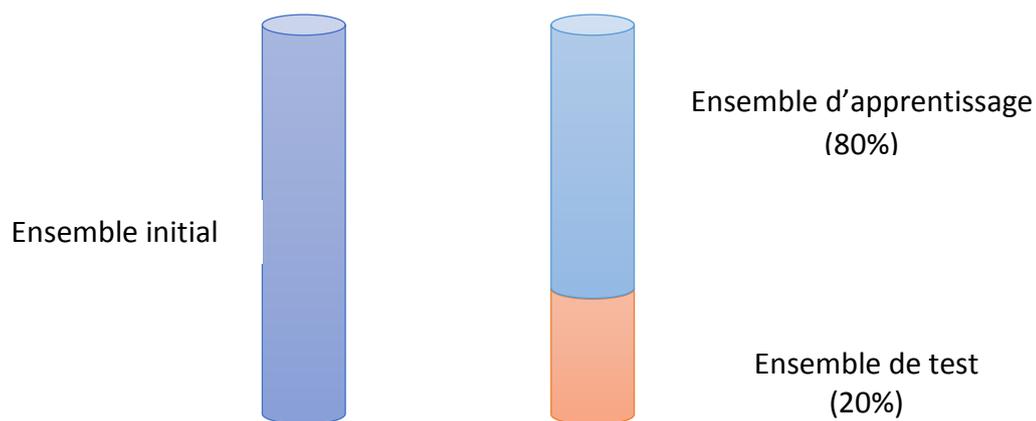


Figure IV-5 : Division des deux bases des données : LLI et LSI

IV.2.2.A Limites inférieure d'inflammabilité (LII)

La base de données des LII est divisée semi-aléatoirement en deux sous-ensembles ; un d'apprentissage contenant environ 80% de la totalité de la base de données, soit 1330/1663 de composés, et un autre sous-ensemble de test contenant environ 20% de la totalité de la base de données, soit 333/1663 de composés, qui contient des composés différents de l'ensemble d'apprentissage.

Les valeurs expérimentales de LII sont tracées sur la Figure IV-6 en fonction de l'augmentation du nombre de carbone CH_2 appartenant à différentes classes.

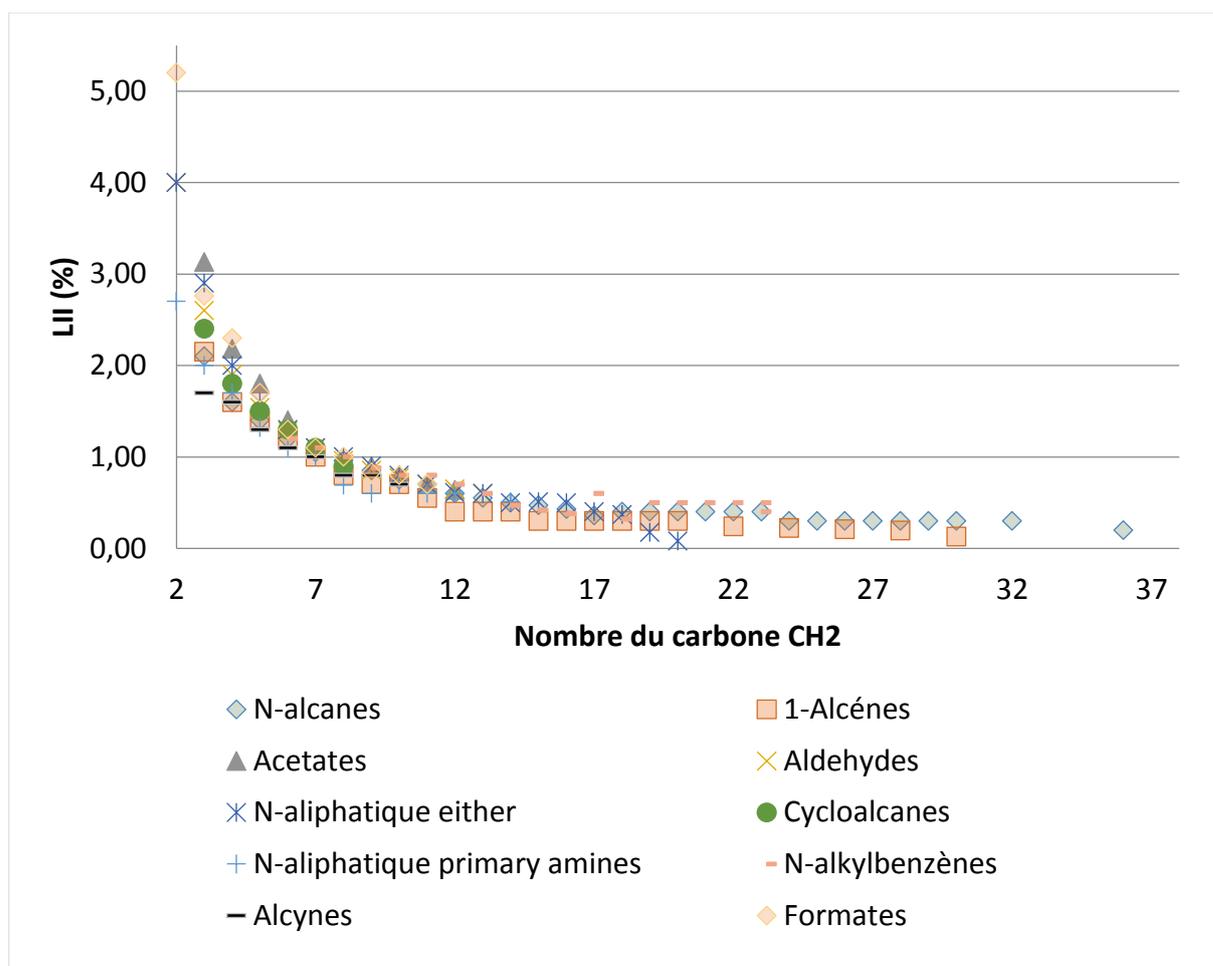


Figure IV-6 : Tracé de LII en fonction du nombre de carbone.

Sur cette figure, nous constatons que les données expérimentales de LII sont cohérentes sans aucune apparition d'une valeur aberrante. Nous constatons également que la relation entre LII et le nombre de carbones dans les composés est non-linéaire.

IV.2.2.B Limites supérieures d'inflammabilité (LSI)

Comme précédemment, sur la Figure IV-7 les valeurs expérimentales de LSI sont tracées en fonction de l'augmentation du nombre de carbones CH_2 appartenant à différentes classes. Les mêmes constatations faites précédemment dans LII (cf. Figure IV-6) est valable pour LSI (cf. Figure IV-7).

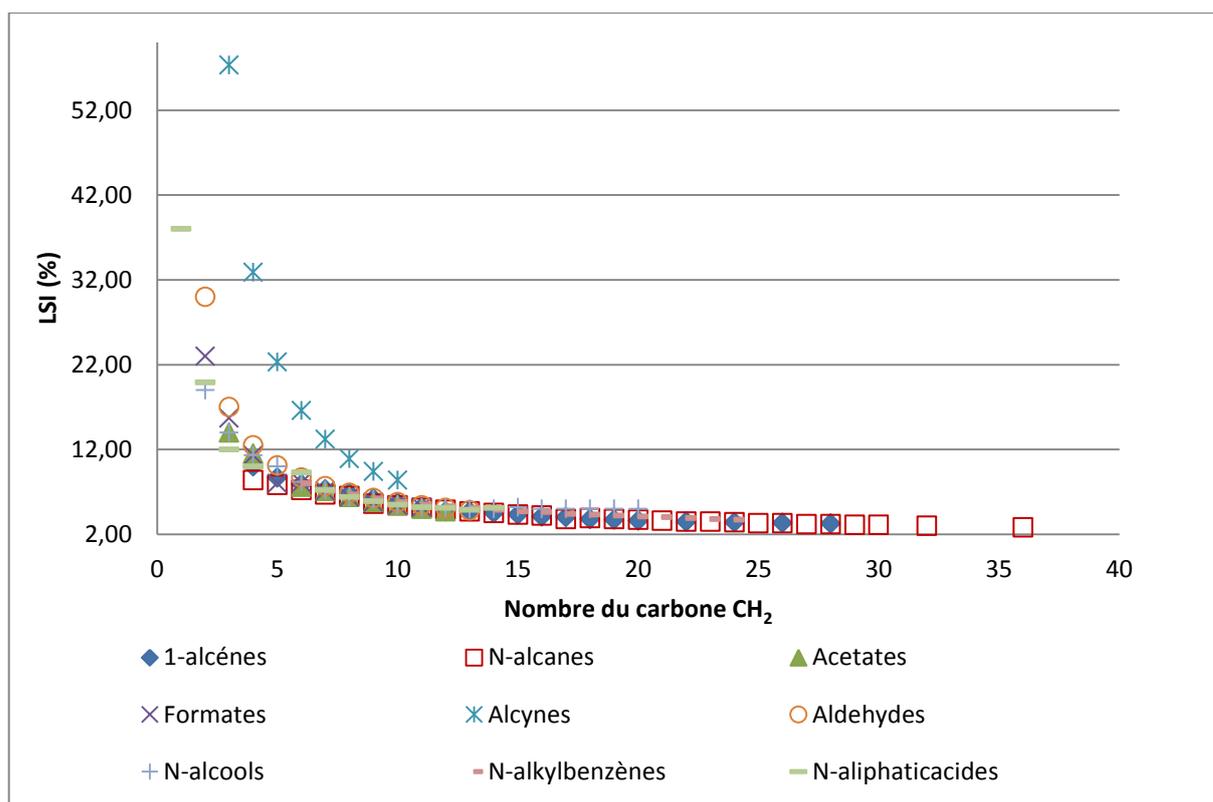


Figure IV-7 : Tracé de LSI en fonction N carbone

Également, la base de données des LSI est divisée semi-aléatoirement en deux sous-ensembles ; un d'apprentissage contenant environ 80% de la totalité de la base de données, soit 1129/1411 de composés, et un autre sous-ensemble de test contenant environ 20% de la totalité de la base de données, soit 1129/1411 de composés, qui contient des composés différents de l'ensemble d'apprentissage.

IV.3 Construction du modèle pour la prédiction des limites d'inflammabilité

IV.3.1 Fragmentation en groupes des structures moléculaires

Après l'étape de collection et de traitement des données expérimentales des limites d'inflammabilité, l'étape de fragments des composés suivant le même schéma de découpage d'ordre trois de Marrero et Gani [69] est effectuée. Chaque molécule dans les deux bases de données LII et LSI a été découpée en fragment moléculaire (groupes fonctionnels).

Pour la première base de données LII, les groupes fonctionnels déterminés sont ; 160 groupes du premier ordre, 101 groupes du second ordre, 34 groupes du troisième

ordre. Quant à la propriété de LSI, les groupes fonctionnels déterminés sont ; 148 groupes du premier ordre, 95 groupes du second ordre, 34 groupes du troisième ordre.

IV.3.2 Définition des fonctions du modèle

La définition de la forme mathématique est une étape importante dans le processus de développement d'un modèle de prédiction. Pour les deux limites d'inflammabilité nous avons choisi une forme non-linéaire puisque nous avons constaté que l'évolution des deux limites LII et LIS par rapport à l'additivité du nombre de carbone CH_2 est non-linéaire. De plus, ce choix a été confirmé après avoir essayé plusieurs fonctions mathématiques linéaire et non-linéaire reliant les groupes fonctionnels et les limites d'inflammabilité.

Finalement, nous avons obtenu la meilleure forme mathématique du modèle donnée par l'équation suivante. Cette équation permet de modéliser à la fois les deux limites d'inflammabilité LII et LIS.

$$LI = a \times \left(\frac{A}{1 + |A|} \right) + b \quad (IV-1)$$

$$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k \quad (IV-2)$$

LI est la limite d'inflammabilité inférieure ou supérieure suivant le choix des paramètres A , a et b .

A , est obtenu pour chaque molécule par addition des contributions des groupes qui la compose dans l'équation.

- a et b sont des paramètres ajustables,
- N_i, M_j, E_k sont les nombres d'occurrences de contributions de groupe individuelle,
- C_i est la contribution de groupe de premier ordre de type i ,
- D_j est la contribution de groupe de deuxième ordre de type j
- O_k est le groupe de troisième ordre des contributions du type k .

IV.3.3 Recherche des paramètres du modèle par optimisation paramétrique

Pour chaque limite d'inflammabilité, LII et LSI, la recherche des meilleures contributions des groupes permettant la meilleure prédiction est effectuée en utilisant la optimisation paramétrique. Une régression simultanée est considérée en utilisant toutes les contributions des groupes du premier, deuxième et troisième ordre. La recherche des valeurs de contributions de groupes A et les paramètres ajustables a et b , est obtenu en minimisant la somme des erreurs aux carrés en utilisant l'algorithme de Levenberg-Marquardt (cf. paragraphe I.4) et (section II.3.1.C) [81].

Pour limite d'inflammabilité LII, la totalité des groupes d'ordre 1, leurs contributions et leurs nombres d'occurrences dans les structures chimiques de chaque composé sont données dans le Tableau IV-1 . Quant à la propriété de LSI, les groupes d'ordre 1, leurs contributions et leurs nombres d'occurrences sont reportés en Annexe C, et cela pour des raisons de présentation du présent manuscrit. Idem pour chaque limite d'inflammabilité, LII et LSI les groupes d'ordre deux et trois sont reportés en Annexe C.

Les valeurs numériques des paramètres ajustables a et b après régression sont :

- Pour la limite inférieure d'inflammabilité (LII) : $a = -9,9227$; $b = 9,9255$
- Pour la limite supérieure d'inflammabilité (LSI) : $a = 10785,5$; $b = 10786,64$

Tableau IV-1 : Valeurs de contributions de groupes du premier ordre donnant la LII

N°	Groupes	Occurrences	Paramètres
1	CH ₃	1102	0,819
2	CH ₂	812	1,350
3	CH	242	2,542
4	C	82	2,758
5	CH ₂ =CH	109	2,112
6	CH=CH	71	1,403
7	CH ₂ =C	44	1,801
8	CH=C	18	1,203
9	C=C	7	2,271
10	CH ₂ =C=CH	3	3,943
11	CH ₂ =C=C	1	3,575
12	CH≡C	14	2,798

13	CH≡C	6	3,507
14	aCH	435	0,935
15	aC fused with aromatic ring	35	3,358
16	aC fused with non-aromatic ring	41	3,540
17	aC except as above	43	0,826
18	aN in aromatic ring	18	-0,148
19	aC-CH ₃	99	2,338
20	aC-CH ₂	95	3,152
21	aC-CH	33	3,210
22	aC-C	27	3,922
23	aC-CH=CH ₂	13	4,721
24	aC-CH=CH	7	3,059
25	aC-C=CH ₂	5	3,315
26	aC-C≡CH	1	2,615
27	aC-C≡C	1	3,068
28	OH	183	-0,576
29	aC-OH	51	1,049
30	COOH	89	0,118
31	aC-COOH	19	2,171
32	CH ₃ CO	32	1,338
33	CH ₂ CO	19	2,364
34	CHCO	3	2,688
35	aC-CO	10	2,351
36	CHO	46	0,340
37	aC-CHO	13	1,978
38	CH ₃ COO	37	1,376
39	CH ₂ COO	43	1,691
40	CHCOO	12	2,532
41	CCOO	3	2,805
42	HCOO	17	0,109
43	aC-COO	36	2,724
44	aC-OOC	2	2,774
45	COO except as above	34	0,646
46	CH ₃ O	43	0,669
47	CH ₂ O	76	1,163
48	CH-O	8	3,442
49	C=C	4	2,482
50	aC-O	14	1,295
51	CH ₂ NH ₂	40	1,599
52	CHNH ₂	7	2,248
53	CNH ₂	2	2,532
54	CH ₃ NH	3	1,667
55	CH ₂ NH	17	2,901

56	CHNH	1	2,697
57	CH ₃ N	8	2,136
58	CH ₂ N	9	2,232
59	aC-NH ₂	24	1,273
60	aC-NH	8	1,114
61	aC-N	4	1,726
62	NH ₂ except as above	9	0,044
63	CH ₂ CN	23	1,929
64	CHCN	4	5,744
65	CCN	1	5,613
66	aC-CN	2	2,809
67	CN except as above	14	0,314
68	CH ₂ NCO	2	2,822
69	aC-NCO	6	3,374
70	CH ₂ NO ₂	3	1,117
71	CHNO ₂	1	1,571
72	aC-NO ₂	22	0,939
73	NO ₂ except as above	1	-0,459
74	CONH ₂	8	0,832
75	CONHCH ₃	1	2,320
76	CON(CH ₃) ₂	1	3,702
77	aC-CONH ₂	1	2,036
78	aC-NHCO	3	2,794
79	NHCONH	1	1,797
80	NH ₂ CONH	1	1,294
81	CH ₂ Cl	40	0,470
82	CHCl	8	0,973
83	CCl	1	1,859
84	CHCl ₂	5	-0,002
85	CCl ₃	4	0,075
86	CH ₂ F	5	0,837
87	CHF ₂	6	-0,136
88	CF ₂	2	-0,463
89	CF ₃	8	-0,243
90	CCl ₂ F	1	-0,716
91	CClF ₂	1	-0,218
92	aC-Cl	28	0,314
93	aC-F	2	-0,098
94	aC-Br	4	0,216
95	-I except as above	3	1,430
96	-Br except as above	9	-1,214
97	-F except as above	14	-1,330
98	-Cl except as above	41	-0,979

99	CHNOH	1	0,939
100	CNOH	1	1,242
101	OCH ₂ CH ₂ OH	29	2,398
102	OCHCH ₂ OH	5	2,935
103	OCH ₂ CHOH	21	1,827
104	-O-OH	12	-0,440
105	CH ₂ SH	21	1,830
106	CHSH	3	3,089
107	CSH	3	3,714
108	aC-SH	1	2,615
109	-SH except as above	3	0,348
110	CH ₃ S	11	2,335
111	CH ₂ S	19	2,071
112	CHS	1	3,221
113	CS	3	3,869
114	aC-S-	2	2,588
115	SO	1	1,182
116	SO ₃ (sulfite)	1	0,874
117	SO ₃ (Sulfonate)	2	-0,534
118	SO ₄ (Sulfate)	3	0,168
119	P (Phospine)	1	1,399
120	PO ₃ (Phosponate)	1	0,640
121	PO ₄ (Phospate)	2	0,803
122	aC-PO ₄	2	4,423
123	aC-P	1	3,280
124	CO ₃ (Carbonate)	2	0,649
125	C ₂ H ₃ O	7	2,351
126	C ₂ H ₂ O	1	-0,837
127	CH ₂ (cyclic)	207	1,202
128	CH (cyclic)	135	1,422
129	C (cyclic)	33	-2,325
130	CH=CH (cyclic)	47	2,141
131	CH=C (cyclic)	42	1,569
132	C=C (cyclic)	6	1,681
133	CH ₂ =C (cyclic)	6	2,502
134	NH (cyclic)	15	-0,897
135	N (cyclic)	15	2,729
136	CH=N (cyclic)	3	0,952
137	C=N (cyclic)	1	1,643
138	O (cyclic)	54	-0,589
139	CO (cyclic)	30	0,808
140	S (cyclic)	30	0,906
141	SO ₂ (cyclic)	1	0,313

142	>NH	4	0,390
143	-O-	6	0,554
144	-S-	1	0,853
145	>CO	4	0,395
146	SiHO	1	0,982
147	SiO	25	1,287
148	SiH ₂	2	3,015
149	SiH	4	3,325
150	Si	21	2,892
151	C _{cyclic} =N-	1	1,213
152	C _{cyclic} =CH-	1	3,539
153	C _{cyclic} =C	2	2,845
154	P=O	1	2,474
155	N=N	1	2,528
156	C=NH	1	1,011
157	>C=S	1	2,017
158	HCONH	2	0,788
159	SiH ₃	1	0,490
160	CH=C=CH	1	3,575

IV.3.4 Résultats et discussions

Après avoir mis au point un modèle de prédiction des limites inférieure d'inflammabilité, le modèle proposé est validé et testé en utilisant les mêmes indicateurs de performances statistiques définis précédemment dans la section II.3.1.D (voir équations II-3, II-4, II-5 et II-6), à savoir : l'erreur moyenne absolue (*EMA*), l'erreur moyenne relative (*EMR*), l'écart-Type (*ET*) et le coefficient de détermination (R^2).

IV.3.4.A Limites inférieures d'inflammabilité (LII)

Les indicateurs statistiques affichés par le modèle donnant LII sont affichés dans le tableau suivant :

Tableau IV-2 : Paramètres statistique du model donnant LII

Ensembles de composés	N°	EMR (%)	EMA (%)	ET (%)	D_{max} (%)	R^2
Apprentissage	1330	19,51	0,14	0,25	2,64	0,982
Test	333	11,65	0,15	0,25	2,82	0,965
Totale	1663	15,58	0,145	0,25	2,82	0,973

Le modèle développé pour les LII affiche des prédictions précises expliquées par les paramètres statistiques comme présenté sur le Tableau IV-2 . Nous pouvons constater que les valeurs prédites sont fortement corrélées aux valeurs expérimentales puisque le coefficient de régression linéaire R^2 est très proche de 1. Les erreurs des prédictions maximales (D_{max}) restent modérées dans les deux bases de données d'apprentissage et de test ; 2,64 % (Sulfure de Diallyle) et 2,82 % (1-Chloro-2-Propanol), respectivement. Le pouvoir prédictive du présent modèle peut se déterminer dans la faible différence entre les paramètres statistiques des deux ensembles.

Afin de mieux apercevoir les résultats de prédiction en fonction de différentes familles chimiques nous affichons dans le tableau suivant les performances statistiques du modèle donnant LII par classe de famille.

Tableau IV-3 : Performance statistique du premier modèle donnant LII par classe de famille :

Classe des familles	N°	EMA (K)	EMR (%)	ET (K)	$D_{max}(K)$	R^2
Hydrocarbures	447	11,02	0,08	0,08	0,80	0,950
Oxygénés	683	4,14	0,12	0,18	1,77	0,973
Azotés	138	11,18	0,15	0,23	1,65	0,948
Soufrés	82	11,47	0,15	0,33	2,64	0,780
Chlorés	56	12,42	0,37	0,49	2,26	0,970
Florès	15	12,14	0,56	0,43	1,55	0,973
Bromés	13	26,50	0,55	0,58	1,72	0,928
Iodés	3	0,23	0,00	0,00	0,01	1,000
Phosphorés	1	0,04	0,00	-	0,50	-
Contenant Si	4	21,59	0,37	0,41	0,94	0,922
Multifonctionnelles	221	21,09	0,23	0,39	2,82	0,982
Totale	1663	13,80	0,23	0,31	1,51	0,942

Nous pouvons constater sur le Tableau II-4 que le modèle affiche des prédictions précises pour toutes les familles des composés, exception faite pour les composés oxygénés, bromés, multifonctionnels et les composés contenant du Si.

La corrélation entre les valeurs prédites et expérimentales est représentée graphiquement sur la Figure IV-8 en présence de l'ensemble de molécules d'apprentissage et du test. Cette figure affiche une bonne régression du modèle et l'affinité entre les valeurs des LII expérimentales et celles prédites par le modèle et ceci pour les deux ensembles d'apprentissage et de test.

La Figure IV-9 montre la dispersion des erreurs de prédiction autour de l'axe des zéro pour les deux ensembles d'apprentissage et de test. La dispersion des déviations (EMA) sont compris entre -2,64 et 2,82 %. D'après cette figure nous constatons que plus de 98% de l'ensemble des molécules sont entre 1 et -1 %.

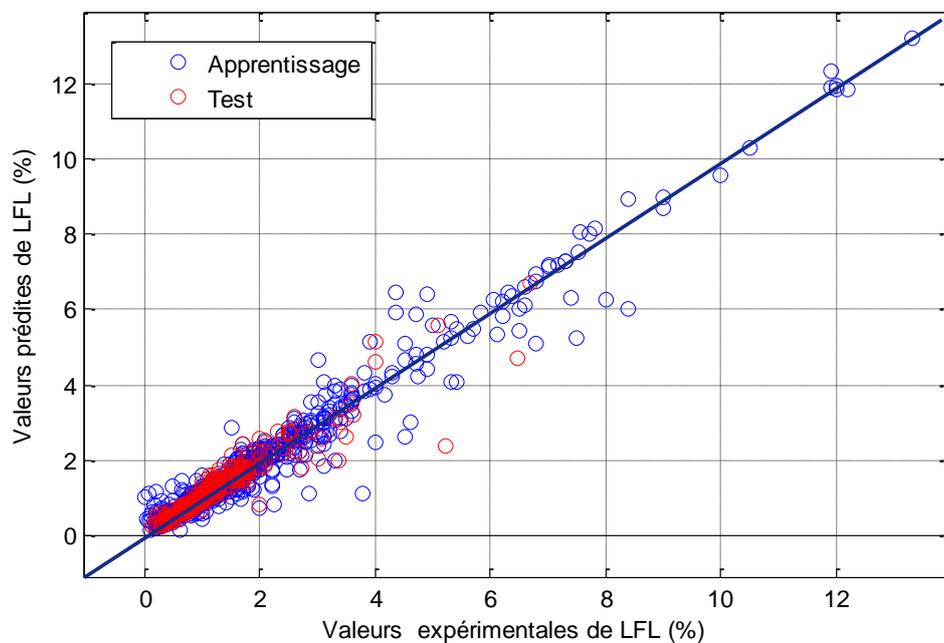


Figure IV-8 : Valeurs Prédites par rapport aux valeurs de DIPPR de LII.

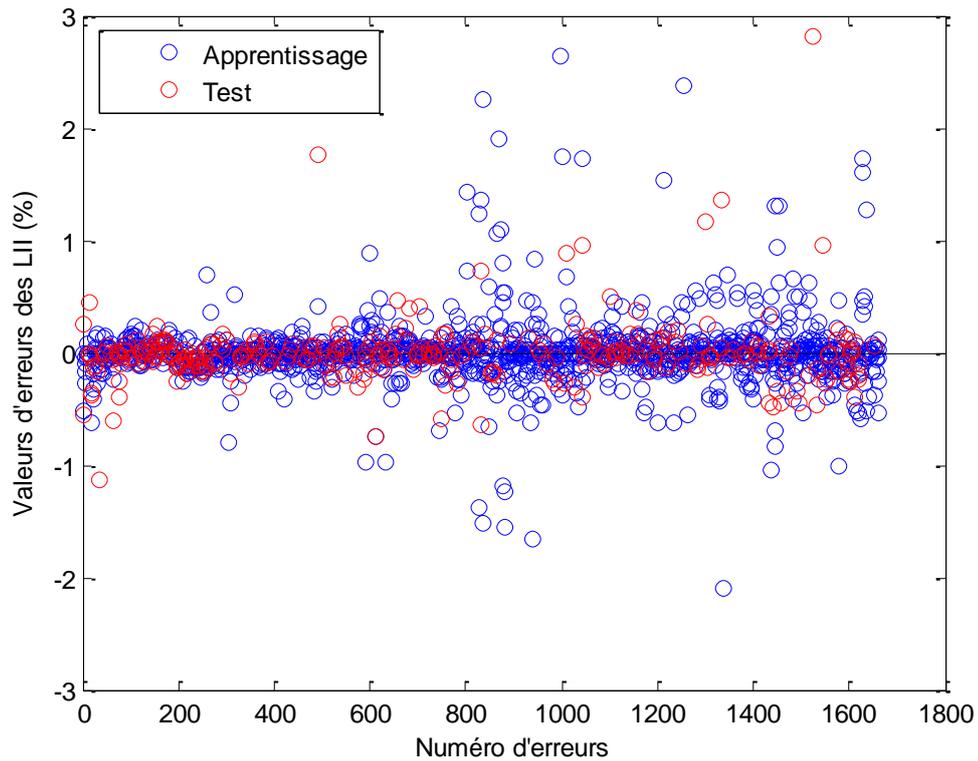


Figure IV-9 : Erreurs de prédiction des limites d'LII

D'autre part, la répartition des composés en fonction de l'intervalle des erreurs EMR est présentée dans la Figure IV-10. Nous constatons d'après cette figure que l'EMR de 11 % des composés sont inférieures à 1%. Il y a 33 % des composés ont des EMR (les cinq premiers intervalles) inférieures à 5%. En revanche, plus de 36% des composés ont des EMR (le dernier intervalle) supérieur à 12%.

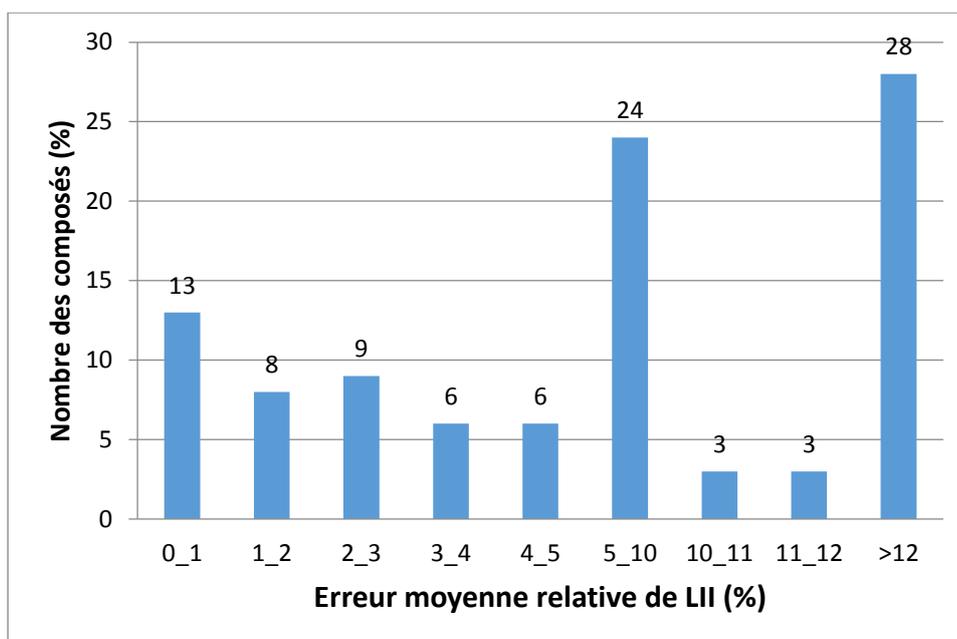


Figure IV-10 : Répartition des composés en fonction de l'intervalle d'EMR de LII

Les résultats du modèle de prédictions des LII sont comparés à ceux des modèles de contributions de groupes récemment publiés et/ou les plus utilisés dans la littérature. Les résultats de cette comparaison sont présentés dans le tableau suivant.

La comparaison n'a pu être faite qu'en fonction de l'erreur moyenne absolue (EMA) du fait que la plupart des autres méthodes concurrentes n'apportent que les EMA comme indicateur statistique.

Tableau IV-4 : Comparaison entre le modèle LII proposés et ceux de la littérature

Modèle	N° de composés	L'année	EMR (%) (Apprentissage /test)	Rapport de l'ensemble test (%)
Ce travail	1663	2017	19,51/ 11,65	20%
Frutiger[68]	443	2016	11.5	0%
Rowely [62]	509	2011	11	0%
Albahri[30]	109	2003	10	0%
Kondo [98]	238	2001	24	0%
Seaton [99]	152	1991	16	0%
Solovev [100]	152	1960	25	0%

Dans ce tableau, les méthodes concurrentes montrent des erreurs EMR faibles par rapport à ceux données par le modèle proposé. Toutefois, cette comparaison est fortement déséquilibrée en faveur des méthodes concurrentes car plusieurs points peuvent être considérés :

- Le modèle proposé est développé en utilisant la plus grande base des données, ceci qui permet d'augmenter son intervalle d'application.
- Toutes les méthodes concurrentes considèrent tous les composés dans la phase de régression des paramètres, alors que dans notre travail, l'ensemble de données a été divisé en deux ensembles, un ensemble d'apprentissage (80%) et un autre de test (20%).

IV.3.4.B Limites supérieures d'inflammabilité (LSI)

Les indicateurs statistiques affichés par le modèle donnant LSI sont affichés dans le tableau suivant :

Tableau IV-5 : Paramètres statistique du model donnant LSI

Ensembles de composés	N°	EMR (%)	EMA (%)	ET (%)	D_{max} (%)	R^2
Apprentissage	1129	10,49	1,05	1,24	12,65	0,980
Test	282	10,65	0,95	0,91	6,25	0,975
Total	1411	10,52	1,00	1,07	9,45	0,978

Les résultats de prédiction sont résumés dans le Tableau IV-5. Les paramètres statistiques dans le dernier tableau reflètent l'efficacité de notre modèle à la prédiction des limites d'inflammabilité aussi bien pour les composés utilisés durant son développement que pour les composés de test.

L'écart absolu moyen (EMA), l'écart moyen relatif (EMR) et l'écart-type (ET) de l'ensemble d'apprentissage sont de 1,053, 10,49 et 1,24342713 %, respectivement, et de l'ensemble de test sont de 0,948, 10,65 et 0,90794561 % respectivement.

Il convient de signaler que, les erreurs EMR affichées par le modèle proposé restent dans la plage d'incertitude de la base de données DIPPR 801 [8] (*cf. Figure IV-4*).

Les erreurs de prédiction affichées par le modèle LSI sont affichées en fonction des familles chimiques dans le tableau suivant.

Ensembles de composés	N°	EMR (%)	EMA (%)	ET (%)	D_{max} (%)	R^2
Hydrocarbures	411	9,94	0,74	0,93	8,54	0,968
Oxygénés	571	11,75	1,131	1,13	8,41	0,957
Azotés	120	10,78	1,075	1,18	9,51	0,962
Soufrés	65	7,07	0,721	0,78	3,37	0,963
Chlorés	49	12,43	1,537	1,56	9,02	0,988
Florès	14	7,9	1,432	0,77	2,43	0,989
Bromés	15	13,64	1,531	1,24	5,00	0,989

Iodés	3	5,11	0,396	0,30	0,70	1,000
Contenant Si	1	10,15	8,426	-	74,57	-
Multifonctionnelles	162	8,31	1,248	1,61	12,65	0,988
Totale	1411	9,708	1,8237	1,05	13,42	0,978

Nous pouvons constater à partir de ce tableau que le modèle présente une bonne précision pour tous les types de composés avec des indicateurs statistiques faibles.

La Figure IV-11 donne un aperçu sur la corrélation entre les valeurs expérimentales et prédites des LSI pour l'ensemble de composés d'apprentissage (1129 composés) et du test (282 composés). Cette figure montre l'affinité entre les valeurs expérimentales et estimées pour les deux ensembles d'apprentissage et de test.

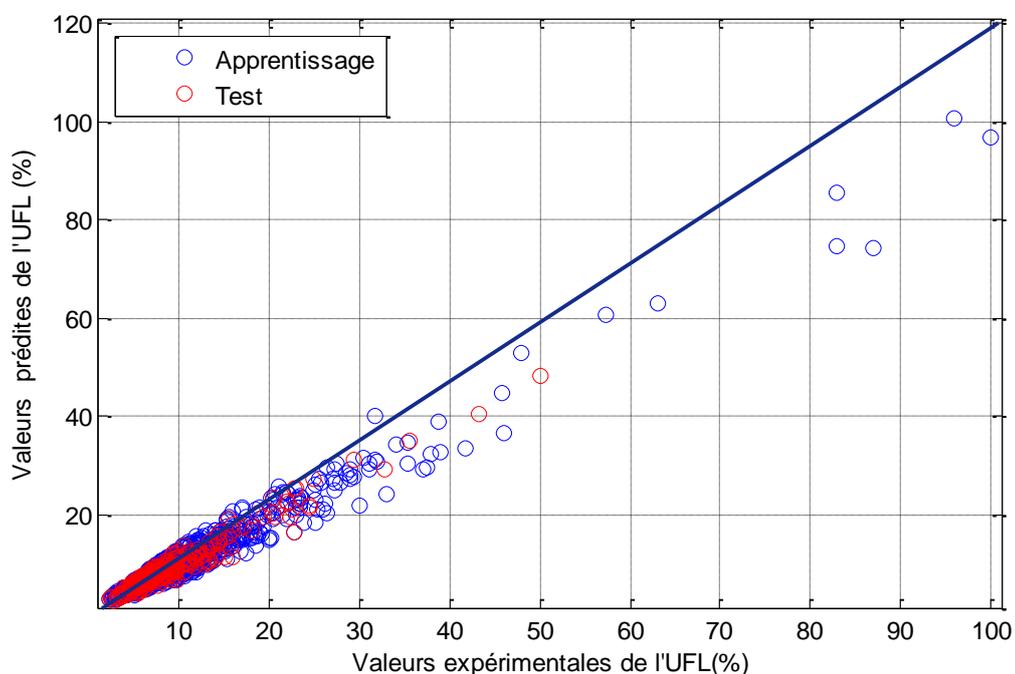


Figure IV-11 : Valeurs Prédites par rapport aux valeurs de DIPPR de la LSI.

Nous présentons dans la Figure IV-12 la dispersion des erreurs de prédiction des limites LSI pour les molécules des deux ensembles d'apprentissage et de test. D'après cette figure les déviations sont comprises entre -10 et 10 %. À noter que la majorité des erreurs des prédictions des LSI pour les 1411 molécules sont inférieures de $\pm 5\%$.

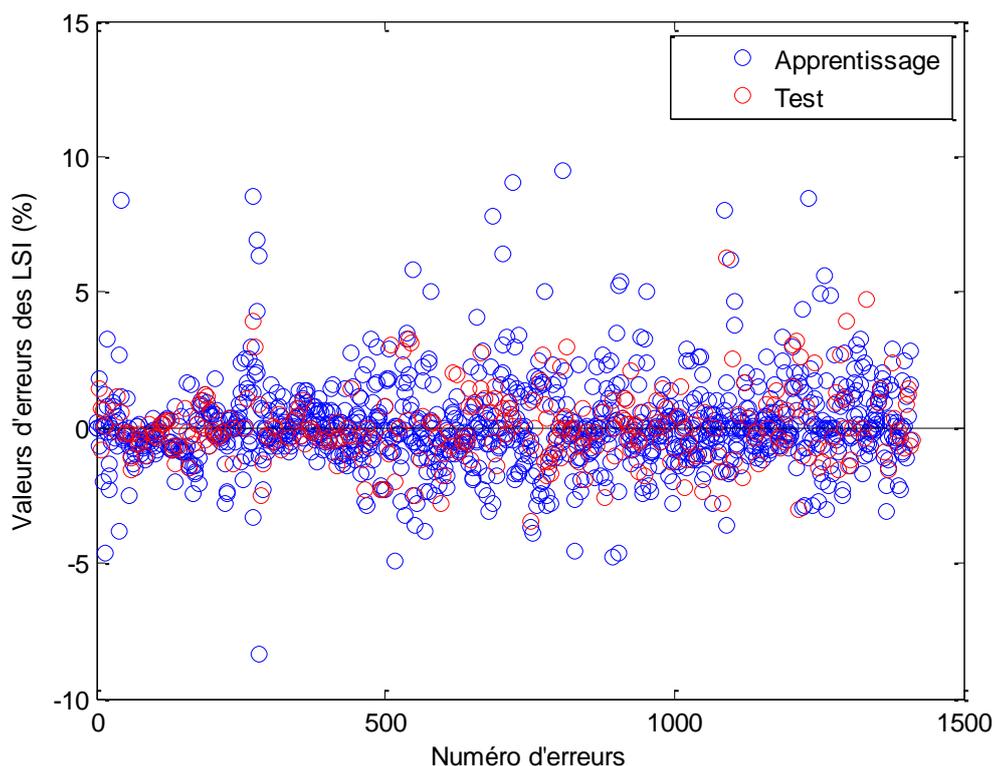


Figure IV-12 : Erreurs de prédiction des limites d'LSI

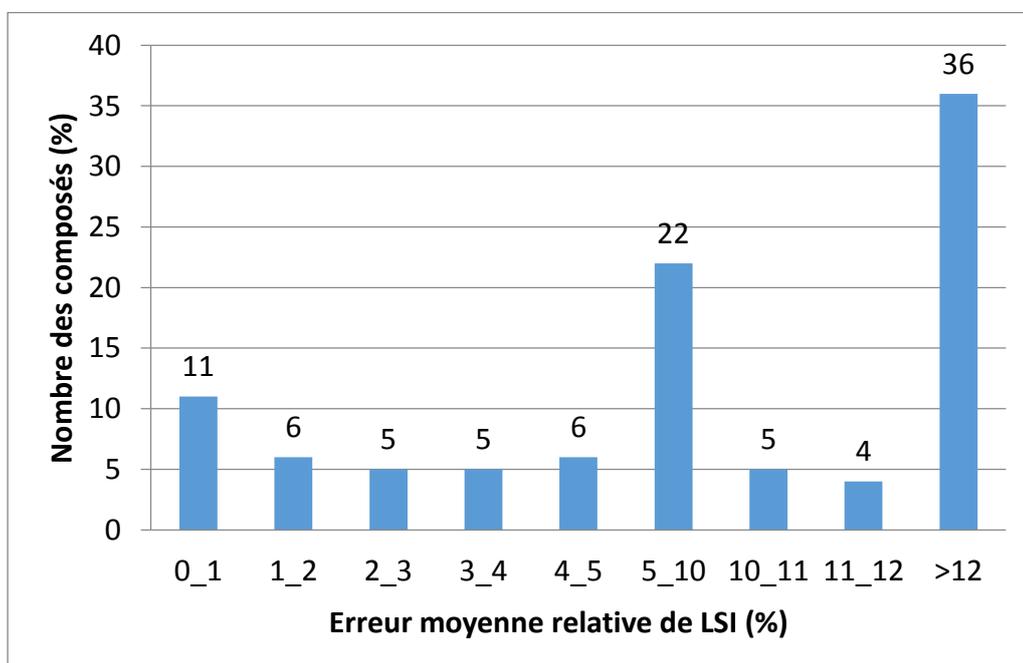


Figure IV-13 : Répartition des composés en fonction de l'intervalle d'EMR de LSI

Pour mieux apercevoir les résultats de prédiction du modèle proposé, la figure 19 est avancée. Cette figure visualise la classification ou la répartition des composés en fonction de l'intervalle des erreurs EMR.

Nous constatons d'après cette figure que l'EMR de 11 % des composés sont inférieures à 1%. Il y a 33 % des composés ont des EMR (les cinq premiers intervalles) inférieures à 5%. En revanche, plus de 36% des composés ont des EMR (le dernier intervalle) supérieur à 12%.

Les performances du nouveau modèle sont comparées à ceux des méthodes de contributions de groupes existantes pour l'estimation de LSI disponibles dans la littérature. Tous les résultats obtenus, par le modèle proposé, y compris l'ensemble des composés de la base d'apprentissage et de celle de test, sont utilisés dans cette comparaison.

Tableau IV-6 : Comparaison entre le modèle LSI proposés et ceux de la littérature

Modèles	N° de composés	Année	EMR(%) (Apprentissage /test)	Rapport de test base (%)
Ce travail	1411	2017	10,49/ 10,65	20%
Frutiger [68]	351	2016	15.9	0%
Albahri [97]	464	2003	11.8	0%
High [101]	181	1987	26	0%
Seaton [99]	152	1991	20	0%

À partir du Tableau IV-6 nous pouvons constater que le modèle proposé affiche une faible EMR par rapport à ceux des méthodes proposées dans la littérature malgré le déséquilibre en faveur des méthodes concurrentes en termes de nombre de données de LSI.

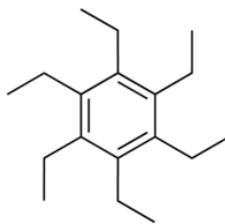
En ce qui concerne le critère d'intervalle d'application, notre méthode est plus générale que celles des autres méthodes rivales vues que le modèle proposé est développé en utilisant une importante base de données.

IV.3.5 Exemples d'applications illustratifs

IV.3.5.A Limites inférieures d'inflammabilité (LII)

IV.3.5.A.1 Exemple 1 : Hexaéthylbenzène (CAS N° : 604-88-6)

La valeur expérimentale de la limite inférieure d'inflammabilité de ce composé, est de 0,40%. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution	
CH ₃	6	0,819	×6
aC-CH ₂	6	3,152	×6
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
/	/	/	/
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
/	/	/	/

$$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = 23,8282909$$

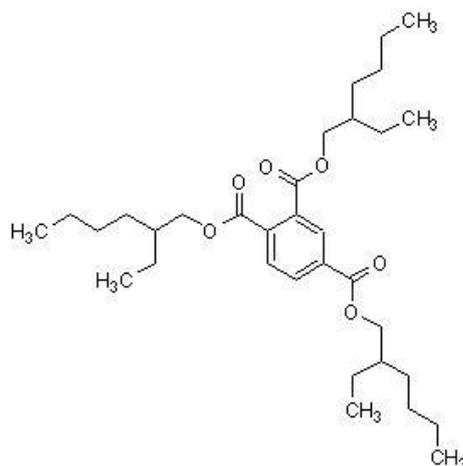
Sachant que $a = -9,9227$ et $b = 9,9255$, la limite inférieure d'inflammabilité est prédite eu utilisant l'équation (IV-1) comme suit :

$$LII = -9,9227 \times \left(\frac{23,82829093}{1 + |23,82829093|} \right) + 9,9255 = 0,40247$$

Donc, la limite inférieure d'inflammabilité finale est de 0,40247%, et en conséquence l'EMR = 0,62%.

IV.3.5.A.2 Exemple2 : Trioctyl Trimellitate (CAS N° : 3319-31-1).

La valeur expérimentale de la limite inférieure d'inflammabilité de ce composé, est de 0,26%. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution	
CH ₃	6	0,819	×6
CH ₂	15	1,350	×15
CH	3	2,542	×3
aCH	3	0,935	×3
aC-COO	3	2,724	×3
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
AROMRINGS ^{1s2s4}	1	-1,077	×1
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
/	/	/	/
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = 42,69466435$			

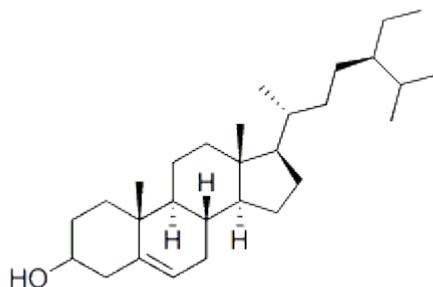
Sachant que $a = -9,9227$, et $b = 9,9255$, la limites inferieure d'inflammabilité est prédite eu utilisant l'équation (IV-1) comme suit :

$$LII = -9,9227 \times \left(\frac{42,69466435}{1 + |42,69466435|} \right) + 9,9255 = 0,229912007$$

Donc, la limite inferieure d'inflammabilité finale est de 0,23 % et en conséquence l'EMR = 11,57%.

IV.3.5.A.3 Exemple3 : Sitostérol (CAS N° : 83-46-5)

La valeur expérimentale de la limite inferieure d'inflammabilité de ce composé, est de 0,30%. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution	
CH ₃	6	0,819	×5
CH ₂	3	1,350	×3
CH	3	2,542	×2
OH	1	-0,576	x1
CH ₂ cyc	8	1,202	x8
CH cyc	5	1,422	x5
C _{cyc}	2	-2,325	x2
CH=C _{cyc}	1	1,569	x1
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
(CH ₃) ₂ CH	1	-0,236	x1
CH _{cyc} -OH	1	0,161	x1
CH _{cyc} -CH	1	-1,271	x1
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
CH _{multiring}	3	-0,151	x3
C _{multiring}	2	4,387	×2
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = 36,638477$			

Sachant que $a = -9,9227$, et $b = 9,9255$, la limites inferieure d'inflammabilité est prédite eu utilisant l'équation (IV-1) comme suit :

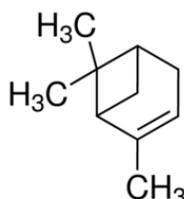
$$LII = -9,9227 \times \left(\frac{36,63847705}{1 + |36,63847705|} \right) + 9,9255 = 0,266452025$$

Donc, la limite inferieure d'inflammabilité finale est de 0,27 %, et en conséquence l'EMR = 11,18%.

IV.3.5.B Limites supérieures d'inflammabilité (LSI)

IV.3.5.B.1 Exemple 1 : Alpha-Pinene (CAS N° : 80-56-8)

La valeur expérimentale de la limite supérieure d'inflammabilité de ce composé, est de 4,50 %. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution
CH ₃	3	-343,613 ×3
CH ₂ (cyclic)	2	-151,046 ×2
CH (cyclic)	2	-350,301 ×2
C (cyclic)	1	876,371 ×1
CH=C (cyclic)	1	187,521 ×1
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
C _{cyc} -CH ₃	2	-885,377 ×2
(CHn=C) _{cyc} -CH ₃ (n in 0..2)	1	-463,369 ×1
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution
CH multiring	2	-59,714 ×2

$$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = -3323,1926$$

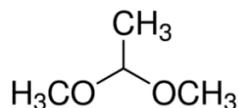
Sachant que $a = 10785,543$, et $b = 10786,639$, la limite supérieure d'inflammabilité est prédite en utilisant l'équation (IV-2) comme suit :

$$LSI = 10785,543 \times \left(\frac{-3323,192602}{1 + |-3323,192602|} \right) + 10786,639 = 0,402473$$

Donc, la limite supérieure d'inflammabilité finale est de 4,341 %, et en conséquence l'EMR = 3,52%.

IV.3.5.B.2 Exemple 2 : 1,1-Dimethoxyethane (CAS N° : 534-15-6).

La valeur expérimentale de la limite supérieure d'inflammabilité de ce composé, est de 19,10%. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution	
CH ₃	1	-343,613	×1
CH	1	-41,774	×1
CH ₃ O	2	-167,890	×2
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
/	/	/	/
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
/	/	/	/
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = -721,1655949$			

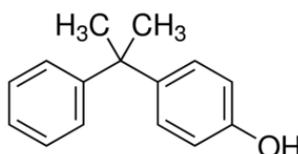
Sachant que $a = 10785,543$, et $b = 10786,639$, la limite supérieure d'inflammabilité est prédite en utilisant l'équation (IV-2) comme suit :

$$LSI = 10785,543 \times \left(\frac{-721,1655949}{1 + |-721,1655949|} \right) + 10786,639 = 16,03186977$$

Donc, la limite supérieure d'inflammabilité finale est de 16,032 %, et en conséquence l'EMR = 16%.

IV.3.5.B.3 Exemple 3 : 1,5-p-Cumylphenol (CAS N° : 599-64-4).

La valeur expérimentale de la limite supérieure d'inflammabilité de ce composé, est de 4,00 %. La décomposition en groupes est donnée dans le tableau suivant :



Groupes 1 ^{er} ordre	Occurrences	Contribution	
CH ₃	2	-343,613	×2
aCH	9	-194,652	×9
aC except as above	1	283,121	×1
aC-OH	1	-165,185	×1
aC-C	1	-131,186	×1
Groupes 2 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
AROMRINGS ^{1,4}	1	-144,922	×1
Groupes 3 ^{eme} ordre	Occurrences	Contribution	
aC-CH _m -aC (different rings) (m in 0..2)	1	-44,542	×1
$A = \sum_i N_i C_i + \sum_j M_j D_j + \sum_k E_k O_k = -2641,808167$			

Sachant que $a = 10785,543$, et $b = 10786,639$, la limite supérieure d'inflammabilité est prédite en utilisant l'équation (IV-2) comme suit :

$$LSI = 10785,543 \times \left(\frac{-2641,808167}{1 + |-2641,808167|} \right) + 10786,639 = 5,177962345$$

Donc, la limite supérieure d'inflammabilité finale est de 5,178 %, et en conséquence l'EMR = 29%.

IV.4 Conclusion

Deux modèles de contributions de groupes d'ordre trois ont été proposés pour la prédiction des limites inférieures et supérieures d'inflammabilité des composés organiques purs. Pour chaque limite d'inflammabilité un modèle est associé. Les deux modèles sont totalement prédictifs basant uniquement sur la structure moléculaire comme source d'information.

Pour les limites inférieures d'inflammabilité, une base de données de plus de 1663 molécules a été mise au point lors du développement de la méthode. Un ensemble d'apprentissage de 80 % de cette base a été utilisée pour la mise en place du modèle et le reste des molécules (ensemble de test) sont utilisées pour tester et valider le modèle proposé. Le modèle proposé affiche des indicateurs statistiques satisfaisants à savoir ; EMR, EMA et ET de 19,51 %, 0,14 % et 0,25% respectivement en présence

de l'ensemble d'apprentissage, et 11,65%, 0,15% et 0,24932194 %, respectivement, en présence de l'ensemble de test.

En ce qui concerne, les limites supérieures d'inflammabilité une base de données de plus de 1411 molécules a été mise au point. Cette base de données est divisée en deux ensembles d'apprentissage (80%) et de test (20%). Le modèle proposé affiche des indicateurs statistiques acceptables à savoir ; *EMR*, *EMA* et *ET* de 10,49 %, 1,05% et 1,24 % respectivement en présence de l'ensemble d'apprentissage, et 10,65%, 0,95 % et 0,91%, respectivement en présence de l'ensemble de test.

Conclusion générale

Une connaissance détaillée et précise en matière des propriétés d'inflammabilité est nécessaire afin de maîtriser les risques liés aux substances inflammables et combustibles sur les lieux de travail.

Les travaux de recherche menés dans le cadre de cette thèse s'inscrivent dans la démarche de la prévention des risques chimiques, en apportant une contribution à la l'évaluation des propriétés d'inflammabilité des produits chimiques.

Plusieurs techniques ont été proposées dans littérature scientifique pour estimer les propriétés d'inflammabilité des composés purs. La majorité de ces méthodes ne s'appliquent qu'à de petites familles de composés spécifiques, ce qui les rend inutilisables à des fins d'extrapolation et la plupart d'entre elles affichent des erreurs de prédiction relativement élevées. Le but de cette thèse est de proposer des nouveaux modèles permettant de prédire avec précision les propriétés d'inflammabilité des composés organiques tout en ayant un large intervalle de prédiction. Les modèles proposés ne nécessitent pas la connaissance d'autres informations autres que la structure géométrique moléculaire.

Le premier chapitre de ce manuscrit est consacré dans un premier temps à la présentation des notions de base et des compréhensions théoriques sur les propriétés d'inflammabilité. Cette présentation est suivie par une revue bibliographique sur les différentes méthodes prédictives proposées dans la littérature. Ces deux parties ont permis d'orienter notre travail et de bien choisir les techniques de développement des modèles prédictifs. La dernière partie est consacrée à la description des outils de calculs numériques développés dans le cadre notre thèse. Ces derniers représentent une pièce maîtresse pour notre travail

car ils permettent de faciliter les tâches répétitives de traitement des bases de données des composées et d'assurer une analyse efficace des résultats obtenus.

Chaque propriété parmi les trois propriétés d'inflammabilité étudiées, à savoir point d'éclair, point d'auto-inflammation et limites d'inflammabilité, fait l'objet de chapitre II, III et IV, respectivement. Dans chaque chapitre, une base de données expérimentales est mise au point. Celle-ci est divisée en deux sous-ensembles ; un d'apprentissage et un autre de test en utilisant une technique de division semi-aléatoire.

Dans le deuxième chapitre, deux méthodes de contributions de groupes d'ordre trois sont proposées pour la prédiction des points d'éclair des composés organiques purs. La première méthode assure la prédiction en se basant à la fois sur la température d'ébullition et la structure moléculaire. En revanche, la seconde méthode permet la prédiction du point d'éclair en se basant uniquement sur la structure moléculaire comme information d'entrée sans faire recours à d'autres propriétés physico-chimiques. Un ensemble d'apprentissage de 1328 composés appartenant à différentes familles chimiques a été utilisé dans le développement des deux méthodes proposées. Les méthodes proposées ont été testées et validées sur un autre ensemble de composés différent du précédent contenant 332 composés. Des résultats très encourageant ont été obtenus dans les deux cas de méthodes tout en affichant des erreurs de prédiction faibles aussi bien sur l'ensemble d'apprentissage que celui du test. La première méthode a affiché des prédictions plus précises que la seconde.

Le troisième chapitre, quant à lui, présente une nouvelle méthode de prédiction des points d'auto-inflammation des composés organiques. La technique de contributions de groupes d'ordre trois est utilisée. La méthode proposée est simple à mettre en œuvre et nécessite uniquement la connaissance de la formule développée d'un composé donné pour l'appliquer sans faire recours à d'autres propriétés thermodynamiques. Une équation non-linéaire a été développée. La méthode a été développée en utilisant un ensemble de 1196 molécules organiques de différentes classes chimiques. Les valeurs des contributions de groupes ont été calculées à partir d'un ensemble d'apprentissage contenant 957 molécules, et la méthode proposée a été validée et testée sur un autre ensemble de molécules constitué de 239 nouvelles molécules.

Le dernier chapitre est consacré pour la prédiction des limites d'inflammabilité. Une nouvelle méthode de contributions de groupes d'ordre 3 pour la prédiction des limites

d'inflammabilité inférieures et supérieures est proposée en se basant uniquement sur la structure moléculaire. Après une analyse détaillée des données expérimentales des limites d'inflammabilité, il a été constaté que la contribution d'un groupe dans une molécule est toujours non-linéaire par rapport à ses valeurs de limites d'inflammabilité. En conséquence, une équation non linéaire est proposée permettant d'estimer à la fois les deux limites d'inflammabilité inférieure et supérieure. Deux bases de données expérimentales des limites d'inflammabilité supérieure et inférieure sont mises au point, contenant respectivement 1663 et 1411 composés appartenant aux différentes familles chimiques. Chaque banque de données est divisée en deux parties, un ensemble d'apprentissage (80% de la totalité des composées) et un autre de test (20% de la totalité des composées). Des résultats très encourageants ont été obtenus sur l'ensemble des données expérimentales d'apprentissage et de test. En outre, la méthode développée a été comparée aux autres méthodes les plus concurrentes, et a montré plus de précision, de fiabilité et de supériorité.

Les résultats obtenus, dans les trois chapitres, sont très encourageants et peuvent, à notre avis, être complétés et enrichis en testant d'avantage les méthodes proposées sur des nouveaux composés. Il serait très intéressant d'exploiter d'autres techniques de modélisation telles que les réseaux de neurones et les Relations Quantitative Structure à propriété (quantitative structure-property relationship ou QSPR).

Bibliographie

1. Chakrabarty, A., S. Mannan, and T. Cagin, *Front Matter*, in *Multiscale Modeling for Process Safety Applications*. 2016, Butterworth-Heinemann: Boston. p. iii.
2. Crowl Daniel A. and L.J. F., *Chemical Process Safety: Fundamentals with Applications, 3rd Edition*. Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences ed. 2011: Prentice Hall International Series in the Physical and Chemical Engineering Sciences.
3. Alibakhshi, A., H. Mirshahvalad, and S. Alibakhshi, *A Modified Group Contribution Method for Accurate Prediction of Flash Points of Pure Organic Compounds*. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2015. **54**(44): p. 11230-11235.
4. Northern, T.a.T.I.L.S., 2011.
5. Rowley, J.R., R.L. Rowley, and W.V. Wilding, *Estimation of the flash point of pure organic chemicals from structural contributions*. *Process Safety Progress*, 2010. **29**(4): p. 353-358.
6. Rowley, J.R., R.L. Rowley, and W.V. Wilding, *Prediction of pure-component flash points for organic compounds*. *Fire and Materials*, 2011. **35**(6): p. 343-351.
7. WASHBURN, E.W., ed. *International Critical Tables -9 Volumes (International Critical Tables of Numerical Data, Physics, Chemistry and Technology)*. Vol. 2. 1927, McGraw-Hill Book Company: New York.
8. DIPPR, *Project 801, Evaluated process design data, Public Release Documentation, in: Design Institute for Physical Properties (DIPPR) (Ed.), American Institute of Chemical Engineers (AIChE), New York*. 2014.
9. Serat, F.Z., et al., *Nonlinear group contribution model for the prediction of flash points using normal boiling points*. *Fluid Phase Equilibria*, 2017. **449**(Supplement C): p. 52-59.

10. ASTM, E. *Standard Test Method for Selection and Use of ASTM Standards for the Determination of Flash Point of Chemicals by Closed Cup Methods*. 2013; Available from: <https://www.astm.org/Standards/E502.htm>.
11. ISO. *Détermination du point d'éclair — Méthode Pensky-Martens en vase clos*. 2002; Available from: <https://www.iso.org/obp/ui/#iso:std:iso:2719:ed-3:v1:fr>.
12. Grynko, S., *Material Properties Explained*. 2012: CreateSpace Independent Publishing Platform.
13. Zabetakis, M., *Flammability characteristics of combustible gases and vapours, U.S. Department of Mines, Bulletin 627*. 1965.
14. Chen, C.-C., et al., *Autoignition Temperature Data for Methanol, Ethanol, Propanol, 2-Butanol, 1-Butanol, and 2-Methyl-2,4-pentanediol*. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2010. **55**(11): p. 5059-5064.
15. Egolf, L.M. and P.C. Jurs, *Estimation of autoignition temperatures of hydrocarbons, alcohols, and esters from molecular structure*. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 1992. **31**(7): p. 1798-1807.
16. MEGlobal, E., GmbH, *DIETHYLENE GLYCOL HIGH PURITY Safety Data Sheet*. 2013: p. 1-69.
17. Carbide, U., Corporation, *Ethylene Glycol Product Guide*, U.C. Corporation, Editor. 2000.
18. Garrison, G., *Operating Instructions Methanol*. 2015.
19. AIChE, *DIPPR data base*. 1987.
20. AIChE, *DIPPRO, DIPPR*. 1996.
21. Hazardous, C., Database. 2015; Available from: <http://ull.chemistry.uakron.edu/erd/index.html>.
22. American, P., Institute, *Ignition Risk of Hydrocarbon Liquids and Vapors by Hot Surfaces in the Open Air*, in *Safety and Fire Protection*, A.P. Institute, Editor. 2003.
23. Zabetakis, R., *La détermination et la présentation graphique des limites d'inflammabilité des hydrocarbures complexes à basse température et pression*. Williams & Wilkins 1953: p. 121-126.
24. ASTM, E.-. *Méthode d'essai standard pour les limites de concentration d'inflammabilité des produits chimiques*, in 2001.
25. ASTM, E.-. *Méthodes d'essai standard pour limiter la concentration d'oxygène (oxydant) dans les gaz et les vapeurs*, in 2001.
26. ASTM, E.-. *Pratique standard pour déterminer les limites d'inflammabilité des produits chimiques à température et pression élevées*, in 1999.

27. Schroder, V., Molnarne, M., *Inflammabilité des mélanges gazeux Partie 1: Potentiel d'incendie*. Journal of Hazardous Materials, 2005(A121): p. 37-44.
28. Keshavarz, M.H., et al., *A simple and reliable method for prediction of flash point of alcohols based on their elemental composition and structural parameters*. Process Safety and Environmental Protection, 2016. **102**: p. 1-8.
29. Keshavarz, M.H. and M. Ghanbarzadeh, *Simple method for reliable predicting flash points of unsaturated hydrocarbons*. Journal of Hazardous Materials, 2011. **193**: p. 335-341.
30. Albahri, T.A., *MNLR and ANN structural group contribution methods for predicting the flash point temperature of pure compounds in the transportation fuels range*. Process Safety and Environmental Protection, 2015. **93**(Supplement C): p. 182-191.
31. Gharagheizi, F., R.F. Alamdari, and M.T. Angaji, *A New Neural Network-Group Contribution Method for Estimation of Flash Point Temperature of Pure Components*. Energy & Fuels, 2008. **22**(3): p. 1628-1635.
32. Lazzús, J.A., *Neural network/particle swarm method to predict flammability limits in air of organic compounds*. Thermochemica Acta, 2011. **512**(1): p. 150-156.
33. Keshavarz, M.H., et al., *Reliable method for prediction of the flash point of various classes of amines on the basis of some molecular moieties for safety measures in industrial processes*. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2013. **26**(4): p. 650-659.
34. Bagheri, M., et al., *Nonlinear molecular based modeling of the flash point for application in inherently safer design*. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2012. **25**(1): p. 40-51.
35. Katritzky, A.R., et al., *QSPR modeling of flash points: An update*. Journal of Molecular Graphics and Modelling, 2007. **26**(2): p. 529-536.
36. Khajeh, A. and H. Modarress, *QSPR prediction of flash point of esters by means of GFA and ANFIS*. Journal of Hazardous Materials, 2010. **179**(1-3): p. 715-720.
37. Bagheri, M., T.N.G. Borhani, and G. Zahedi, *Estimation of flash point and autoignition temperature of organic sulfur chemicals*. Energy Conversion and Management, 2012. **58**(Supplement C): p. 185-196.
38. Gharagheizi, F., *Determination of normal boiling vaporization enthalpy using a new molecular-based model*. Fluid Phase Equilibria, 2012. **317**(0): p. 43-51.
39. Gharagheizi, F., O. Babaie, and S. Mazdeyasna, *Prediction of Vaporization Enthalpy of Pure Compounds using a Group Contribution-Based Method*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2011. **50**(10): p. 6503-6507.

40. Fujii, A. and E.R. Hermann, *Correlation between flash points and vapor pressures of organic compounds*. Journal of Safety Research, 1982. **13**(4): p. 163-175.
41. Argoub, K., et al., *Prediction of standard enthalpy of formation in the solid state by a third-order group contribution method*. Vol. 380. 2014. 121–127.
42. Benkouider, A.M., et al., *Estimation of the enthalpy of vaporization of organic components as a function of temperature using a new group contribution method*. Journal of Molecular Liquids, 2014. **194**(Supplement C): p. 48-56.
43. Guella, S., et al., *Artificial Neural Network-Group Contribution Method for Predicting Standard Enthalpy of Formation in the Solid State: C–H, C–H–O, C–H–N, and C–H–N–O Compounds*. International Journal of Thermophysics, 2015. **36**(10): p. 2820-2832.
44. Mondejar, M.E., et al., *Prediction of properties of new halogenated olefins using two group contribution approaches*. Fluid Phase Equilibria, 2017. **433**: p. 79-96.
45. Khalifa, M. and L. Lue, *A group contribution method for predicting the solubility of mercury*. Fluid Phase Equilibria, 2017. **432**: p. 76-84.
46. Haley, J.D. and C. McAbe, *Predicting the phase behavior of fluorinated organic molecules using the GC-SAFT-VR equation of state*. Fluid Phase Equilibria, 2017. **440**(Supplement C): p. 111-121.
47. Randová, A. and L. Bartovská, *Group contribution method: Surface tension of linear and branched alkanes*. Fluid Phase Equilibria, 2016. **429**(Supplement C): p. 166-176.
48. Farzi, R. and F. Esmailzadeh, *Prediction of densities of pure ionic liquids using Esmailzadeh-Roshanfekar equation of state and critical properties from group contribution method*. Fluid Phase Equilibria, 2016. **423**(Supplement C): p. 101-108.
49. Prugh, R.W., *Estimation of flash point temperature*. Journal of Chemical Education, 1973. **50**(2): p. A85.
50. Satyanarayana, K. and P.G. Rao, *Improved equation to estimate flash points of organic compounds*. Journal of Hazardous Materials, 1992. **32**(1): p. 81-85.
51. Metcalfe, E. and A.E.M. Metcalfe, *Communication: On the correlation of flash points*. Fire and Materials, 1992. **16**(3): p. 153-154.
52. Hshieh, F.-Y., *Note: Correlation of closed-cup flash points with normal boiling points for silicone and general organic compounds*. Vol. 21. 1997. 277-282.
53. Catoire, L., *A Unique Equation to Estimate Flash Points of Selected Pure Liquids Application to the Correction of Probably Erroneous Flash Point Values*. Vol. 33. 2004.

54. Gharagheizi, F., et al., *Empirical Method for Representing the Flash-Point Temperature of Pure Compounds*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2011. **50**(9): p. 5877-5880.
55. Tetteh, J., E. Metcalfe, and S.L. Howells, *Optimisation of radial basis and backpropagation neural networks for modelling auto-ignition temperature by quantitative-structure property relationships*. Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems, 1996. **32**(2): p. 177-191.
56. Tetteh, J., et al., *Quantitative Structure–Property Relationships for the Estimation of Boiling Point and Flash Point Using a Radial Basis Function Neural Network*. Journal of Chemical Information and Computer Sciences, 1999. **39**(3): p. 491-507.
57. *NIST Standard Reference Database Number 69*.
58. Katritzky, A.R., et al., *QSPR analysis of flash points*. Vol. 41. 2001. 1521-30.
59. Liu, X. and Z. Liu, *Research Progress on Flash Point Prediction*. Journal of Chemical & Engineering Data, 2010. **55**(9): p. 2943-2950.
60. Khajeh, A. and H. Modarress, *Quantitative Structure–Property Relationship for Flash Points of Alcohols*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2011. **50**(19): p. 11337-11342.
61. Saldana, D.A., et al., *Flash Point and Cetane Number Predictions for Fuel Compounds Using Quantitative Structure Property Relationship (QSPR) Methods*. Energy & Fuels, 2011. **25**(9): p. 3900-3908.
62. Rowley, J.R., R.L. Rowley, and W.V. Wilding, *Estimation of the lower flammability limit of organic compounds as a function of temperature*. Journal of Hazardous Materials, 2011. **186**(1): p. 551-557.
63. Rowley, J., *Flammability Limits, Flash Points, and Their Consanguinity: Critical Analysis, Experimental Exploration, and Prediction*. 2010.
64. Alibakhshi, A., H. Mirshahvalad, and S. Alibakhshi, *Prediction of flash points of pure organic compounds: Evaluation of the DIPPR database*. Process Safety and Environmental Protection, 2017. **105**(Supplement C): p. 127-133.
65. Joback, K.G. and R.C. Reid, *Estimation of Pure-Component Properties from Group-Contributions*. Chemical Engineering Communications, 1987. **57**(1-6): p. 233-243.
66. Stefanis, E., L. Constantinou, and C. Panayiotou, *A Group-Contribution Method for Predicting Pure Component Properties of Biochemical and Safety Interest*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2004. **43**(19): p. 6253-6261.
67. Wang, G.-B., et al., *Prediction of Flash Points of Organosilicon Compounds by Structure Group Contribution Approach*. Vol. 50. 2011. 12790–12796.

68. Frutiger, J., et al., *Group-contribution based property estimation and uncertainty analysis for flammability-related properties*. Journal of Hazardous Materials, 2016. **318**(Supplement C): p. 783-793.
69. Marrero, J. and R. Gani, *Group-contribution based estimation of pure component properties*. Fluid Phase Equilibria, 2001. **183–184**(0): p. 183-208.
70. Hukkerikar, A.S., et al., *Group-contribution+ (GC+) based estimation of properties of pure components: Improved property estimation and uncertainty analysis*. Fluid Phase Equilibria, 2012. **321**(0): p. 25-43.
71. Frutiger, J., J. Abildskov, and G. Sin, *Outlier treatment for improving parameter estimation of group contribution based models for upper flammability limit*. Vol. 37. 2015. 503-508.
72. Mathieu, D., *Power Law Expressions for Predicting Lower and Upper Flammability Limit Temperatures*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2013. **52**(26): p. 9317-9322.
73. Jingjie, S., C. Liping, and C. Wanghua, *Prediction on the Auto-ignition Temperature Using Substructural Molecular Fragments*. Procedia Engineering, 2014. **84**(Supplement C): p. 879-886.
74. M. Valenzuela, E., et al., *Prediction models for the flash point of pure components*. Vol. 24. 2011. 753-757.
75. Pan, Y., J. Jiang, and Z. Wang, *Quantitative structure–property relationship studies for predicting flash points of alkanes using group bond contribution method with back-propagation neural network*. Journal of Hazardous Materials, 2007. **147**(1): p. 424-430.
76. Parks, G.S., H.M. Huffman, and S.B. Thomas, *THERMAL DATA ON ORGANIC COMPOUNDS. VI. THE HEAT CAPACITIES, ENTROPIES AND FREE ENERGIES OF SOME SATURATED, NON-BENZENOID HYDROCARBONS I*. Journal of the American Chemical Society, 1930. **52**(3): p. 1032-1041.
77. Kolská, Z., V. Růžička, and R. Gani, *Estimation of the Enthalpy of Vaporization and the Entropy of Vaporization for Pure Organic Compounds at 298.15 K and at Normal Boiling Temperature by a Group Contribution Method*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2005. **44**(22): p. 8436-8454.
78. Nannoolal, Y., J. Rarey, and D. Ramjugernath, *Estimation of pure component properties. Part 4: Estimation of the saturated liquid viscosity of non-electrolyte organic compounds via group contributions and group interactions*. Fluid Phase Equilibria, 2009. **281**(2): p. 97-119.
79. Cordes, W. and J. Rarey, *A new method for the estimation of the normal boiling point of non-electrolyte organic compounds*. Fluid Phase Equilibria, 2002. **201**(2): p. 409-433.

80. Constantinou, L., S.E. Prickett, and M.L. Mavrovouniotis, *Estimation of Properties of Acyclic Organic Compounds Using Conjugation Operators*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 1994. **33**(2): p. 395-402.
81. Pujol, J., *The solution of nonlinear inverse problems and the Levenberg-Marquardt method*. GEOPHYSICS, 2007. **72**(4): p. W1-W16.
82. Hukkerikar, A.S., et al., *A method to estimate the enthalpy of formation of organic compounds with chemical accuracy*. Fluid Phase Equilibria, 2013. **348**: p. 23-32.
83. Lee, C.J., J.W. Ko, and G. Lee, *Flash point prediction of organic compounds using a group contribution and support vector machine*. Korean Journal of Chemical Engineering, 2012. **29**(2): p. 145-153.
84. Menon, A., et al., *Characterization of a Class of Sigmoid Functions with Applications to Neural Networks*. Neural Networks, 1996. **9**(5): p. 819-835.
85. Elliott, D.L., *A Better Activation Function for Artificial Neural Networks*. 1993.
86. Donald, W.M., *An Algorithm for Least-Squares Estimation of Nonlinear Parameters*. 1963: Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics. 11.
87. Levenberg, K., *A method for the solution of certain non-linear problems in least squares*. 1944: Quart. Appl. Math.
88. Mathieu, D. and T. Alaime, *Insight into the contribution of individual functional groups to the flash point of organic compounds*. Journal of Hazardous Materials, 2014. **267**: p. 169-174.
89. Mathieu, D., *Flash Points of Organosilicon Compounds: How Data for Alkanes Combined with Custom Additive Fragments Can Expedite the Development of Predictive Models*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2012. **51**(43): p. 14309-14315.
90. Jia, Q., et al., *Prediction of the Flash Point Temperature of Organic Compounds with the Positional Distributive Contribution Method*. Journal of Chemical & Engineering Data, 2012. **57**(12): p. 3357-3367.
91. Valenzuela, E.M., et al., *Prediction models for the flash point of pure components*. Journal of Loss Prevention in the Process Industries, 2011. **24**(6): p. 753-757.
92. Chen, C.-C., H.-J. Liaw, and Y.-Y. Kuo, *Prediction of autoignition temperatures of organic compounds by the structural group contribution approach*. Journal of Hazardous Materials, 2009. **162**(2-3): p. 746-762.
93. AIChE, A.I.o.C.E., *Evaluated process design data, Public Release Documentation, in: Design Institute for Physical Properties (DIPPR), A.I.o.C.E. (AIChE), Editor*. 2014: New York

94. Pan, Y., et al., *Prediction of auto-ignition temperatures of hydrocarbons by neural network based on atom-type electrotopological-state indices*. Journal of Hazardous Materials, 2008. **157**(2-3): p. 510-517.
95. Albahri, T.A. and R.S. George, *Artificial Neural Network Investigation of the Structural Group Contribution Method for Predicting Pure Components Auto Ignition Temperature*. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2003. **42**(22): p. 5708-5714.
96. Pan, Y., J. Jiang, and Z. Wang, *Prediction of the flash points of alkanes by group bond contribution method using artificial neural networks*. Frontiers of Chemical Engineering in China, 2007. **1**(4): p. 390-394.
97. Albahri, T.A., *Flammability characteristics of pure hydrocarbons*. Chemical Engineering Science, 2003. **58**: p. 3629–3641.
98. Kondo, T., *Experimental exploration of discrepancies in Fnumber correlation of flammability limits*. journal of Hazardous Materials, 2003. **100**: p. 27–36.
99. Seaton, *Group contribution method for predicting the lower and the upper flammable limits of vapors in air*. journal of Hazardous materials, 1991. **27**: p. 169–185.
100. Solovev, B., *Lower limit of flammability of hydrocarbon–air mixtures as a function of the molecular structure of the combustible component*. Journal of Physic Chemistry 1960. **34**: p. 1661–1670.
101. High, D., *Prediction of upper flammability limit by a group contribution method*. Industrial Engineering Chemical Researches, 1987. **26**: p. 1395–1399.

Annexe A : Points d'éclair

A.1 Valeurs de contributions de groupes :

Tableau A.1 : Valeurs de contributions de groupes du deuxième ordre donnant FP :

N°	Groupes	Occurrences	Paramètres avec TB	Paramètres sans TB
1	(CH ₃) ₂ CH	123	-0,0014	0,00058
2	(CH ₃) ₃ C	59	0,0050	0,00261
3	CH(CH ₃)CH(CH ₃)	10	-0,0047	0,01378
4	CH(CH ₃)C(CH ₃) ₂	5	-0,0021	0,02399
5	C(CH ₃) ₂ C(CH ₃) ₂	4	0,0094	0,04897
6	CH _n =CH _m -CH _p =CH _k (k,m,n,p in 0,,2)	13	-0,0002	-0,01679
7	CH ₃ -CH _m =CH _n (m,n in 0,,2)	93	-0,0004	-0,01649
8	CH ₂ -CH _m =CH _n (m,n in 0,,2)	117	-0,0009	-0,01277
9	CH _p -CH _m =CH _n (m,n in 0,,2; p in 0,,1)	20	0,0030	-0,00400
10	CHCHO or CCHO	10	-0,0018	-0,01491
11	CH ₃ COCH ₂	18	-0,0165	0,01859
12	CH ₃ COCH or CH ₃ COC	3	-0,0104	0,01738
13	CHCOOH or CCOOH	13	0,0052	-0,02503
14	CH ₃ COOCH or CH ₃ COOC	8	0,0004	-0,00298
15	CO-O-CO	4	0,0029	0,01044
16	CHOH	40	0,0005	-0,02877
17	COH	9	0,0094	-0,05517
18	NCCHOH or NCCOH	3	0,0135	0,01456
19	OH-CH _n -COO (n in 0,,2)	4	0,0013	-0,01184
20	CH _m (OH)CH _n (OH) (m,n in 0,,2)	12	-0,0055	0,03261
21	CH _m (OH)CH _n (NH _p) (m,n,p in 0,,2)	6	0,0042	0,03722
22	CH _m (NH ₂)CH _n (NH ₂) (m,n in 0,,2)	2	0,0115	0,02649
23	CH _m (NH)CH _n (NH ₂) (m,n in 1,,2)	5	-0,0032	0,02415
24	CH _m (NH _n)-COOH (m,n in 0,,2)	3	0,0087	0,18054
25	HOOC-CH _n -COOH (n in 1,,2)	1	0,0039	0,13016

26	HOOC-CH _n -CH _m -COOH (n, m in 1,,2)	2	-0,0302	0,01521
27	HO-CH _n -COOH (n in 1,,2)	5	-0,0042	-0,04255
28	CH ₃ -O-CH _n -COOH (n in 1,,2)	1	0,0170	0,07909
29	HS-CH-COOH	1	0,0234	0,06363
30	HS-CH _n -CH _m -COOH (n, m in 1,,2)	1	-0,0215	-0,06045
31	NC-CH _n -CH _m -CN (n, m in 1,,2)	1	-0,0064	-0,00834
32	OH-CH _n -CH _m -CN (n, m in 1,,2)	1	0,0181	0,04750
33	HS-CH _n -CH _m -SH (n, m in 1,,2)	1	0,0193	0,02314
34	COO-CH _n -CH _m -OOC (n, m in 1,,2)	4	-0,0031	0,00720
35	OOC-CH _m -CH _m -COO(n, m in 1,,2)	2	0,0023	0,00160
36	NC-CH _n -COO (n in 1,,2)	2	0,0150	0,00997
37	COCH _n COO (n in 1,,2)	4	0,0111	-0,00236
38	CH _m -O-CH _n =CH _p (m,n,p in 0,,3)	5	0,0006	-0,01416
39	CH _m =CH _n -F (m,n in 0,,2)	8	-0,0071	-0,03102
40	CH _m =CH _n -Br (m,n in 0,,2)	1	0,0200	-0,05081
41	CH _m =CH _n -Cl (m,n in 0,,2)	14	0,0022	-0,01903
42	CH _m =CH _n -CN (m,n in 0,,2)	8	-0,0137	0,06626
43	CH _n =CH _m -COO-CH(m,n,p in 0,,3)	30	-0,0059	-0,02964
44	CH _m =CH _n -CHO (m,n in 0,,2)	6	0,0024	-0,01474
45	CH _m =CH _n -COOH (m,n in 0,,2)	6	0,0106	-0,00869
46	aC-CH _n -X (n in 1,,2) X: Halogen	3	-0,0097	0,01522
47	aC-CH _n -NH _m (n in 1,,2; m in 0,,2))	1	-0,0190	0,00542
48	aC-CH _n -O- (n in 1,,2)	10	0,0013	0,01748
49	aC-CH _n -OH (n in 1,,2)	8	-0,0002	-0,01130
50	aC-CH _n -CN (n in 1,,2)	1	-0,0220	0,09291
51	aC-CH _n -CHO (n in 1,,2)	1	-0,0171	0,00716
52	aC-CH _n -SH (n in 1,,2)	1	-0,0214	0,01628
53	aC-CH _n -COOH (n in 1,,2)	2	-0,0034	-0,04459
54	aC-CH _n -OOC-H (n in 1,,2)	2	-0,0049	0,02296
55	aC-CH _n -OOC (n in 1,,2)	2	-0,0010	0,01735
56	aC-CH _n -COO (n in 1,,2)	1	-0,0011	-0,01347
57	aC-CH(CH ₃) ₂	16	-0,0086	0,02273
58	aC-C(CH ₃) ₃	8	0,0046	0,01708
59	aC-CF ₃	5	-0,0478	-0,01298
60	(CH _n =C) _(cyc) -CHO (n in 0,,2)	1	-0,0012	-0,01068
61	(CH _n =C) _(cyc) -CH ₃ (n in 0,,2)	27	-0,0058	-0,04030
62	(CH _n =C) _(cyc) -CH ₂ (n in 0,,2)	9	-0,0031	-0,03593
63	(CH _n =C) _(cyc) -Cl (n in 0,,2)	1	-0,0117	-0,03551
64	CH _(cyc) -CH ₃	44	-0,0045	-0,00176
65	CH _(cyc) -CH ₂	25	-0,0045	-0,00183
66	CH _(cyc) -CH	9	0,0000	0,03324
67	CH _(cyc) -C	5	-0,0017	0,02868
68	CH _(cyc) -CH=CH _n (n in 1,,2)	3	-0,0057	-0,00899
69	CH _(cyc) -C=CH _n (n in 1,,2)	2	0,0006	0,00400
70	CH _(cyc) -OH	12	-0,0068	0,00145

71	CH _{cyc} -NH ₂	3	-0,0162	-0,01749
72	CH _{cyc} -NH-CH _n (n in 0,,3)	2	-0,0130	-0,00554
73	CH _{cyc} -SH	1	-0,0251	0,00470
74	CH _{cyc} -CN	1	-0,0197	0,09004
75	CH _{cyc} -COOH	3	0,0013	0,07948
76	CH _{cyc} -CO	1	0,0057	0,05564
77	CH _{cyc} -S-	1	-0,2343	0,15384
78	CH _{cyc} -CHO	2	-0,0105	-0,01366
79	CH _{cyc} -O-	3	-0,0049	0,00046
80	CH _{cyc} -OOCH	1	-0,0016	0,00748
81	CH _{cyc} -COO	1	-0,0092	-0,00310
82	CH _{cyc} -OOC	2	-0,0046	-0,02294
83	C _{cyc} -CH ₃	25	-0,0068	0,13748
84	C _{cyc} -CH ₂	5	-0,0026	0,14807
85	C _{cyc} -OH	4	-0,0028	0,09886
86	>N _{cyc} -CH ₃	4	0,0118	-0,08593
87	>N _{cyc} -CH ₂	8	0,0028	-0,12612
88	AROMRINGS ¹ s ²	58	-0,0027	-0,03218
89	AROMRINGS ¹ s ³	33	-0,0049	-0,01222
90	AROMRINGS ¹ s ⁴	73	0,0001	0,01169
91	AROMRINGS ¹ s ² s ³	13	-0,0065	-0,03401
92	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴	33	-0,0112	-0,03824
93	AROMRINGS ¹ s ³ s ⁵	11	-0,0053	-0,02714
94	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴	3	-0,0108	-0,03258
95	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁵	4	-0,0171	-0,08129
96	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴ s ⁵	4	-0,0070	-0,05384
97	PYRIDINES ²	1	-0,0004	-0,02442
98	PYRIDINES ³	3	0,0199	0,00444
99	PYRIDINES ⁴	1	0,0012	0,00292
100	PYRIDINES ² s ⁶	1	-0,0077	-0,06154
101	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴ s ⁵	2	-0,0111	-0,05170

A.4 Valeurs de contributions de groupes :

Tableau A.4 : Valeurs de contributions de groupes du troisième ordre donnant FP :

N°	Groupes	Occurrences	Paramètres avec TB	Paramètres sans TB
1	HOOC-(CH _n) _m -COOH (m>2, n in 0,,2)	5	-0,0295	-0,03683
2	NH ₂ -(CH _n) _m -OH (m>2, n in 0,,2)	1	0,0159	0,07492
3	OH-(CH _n) _m -OH (m>2, n in 0,,2)	5	-0,0061	0,03072
4	NH ₂ -(CH _n) _m -NH ₂ (m>2; n in 0,,2)	3	-0,0034	0,00502
5	NC-(CH _n) _m -CN (m>2)	2	-0,0001	0,01352
6	aC-(CH _n =CH _m) _{cyc} (fused rings) (n,m in 0,,1)	17	-0,0002	0,02254
7	aC-aC (different rings)	14	-0,0060	0,05583

8	aC-CH _{ncyc} (different rings) (n in 0,,1)	2	-0,0008	0,06606
9	aC-CH _{ncyc} (fused rings) (n in 0,,1)	20	-0,0039	0,00945
10	aC-(CHn) _m -aC (different rings) (m>1; n in 0,,2)	3	0,0005	-0,04754
11	CH _{cyc} -CH _{cyc} (different rings)	3	-0,0094	0,01182
12	CH _{multiring}	33	0,0018	0,00647
13	C _{multiring}	16	-0,0054	0,26475
14	aC-CH _m -aC (different rings) (m in 0,,2)	11	0,0027	0,03752
15	aC-(CH _m =CH _n)-aC (different rings) (m,n in 0,,2)	5	0,0040	0,03963
16	aC-CO-aC (different rings)	1	0,0769	0,33801
17	aC-CH _m -CO-aC (different rings) (m in 0,,2)	1	-0,0845	-0,31613
18	aC-CO _{cyc} (fused rings)	5	-0,0088	-0,02551
19	aC-Scyc (fused rings)	16	-0,0056	0,01663
20	aC-NH _{ncyc} (fused rings) (n in 0,,1)	3	-0,0011	0,05289
21	aC-NH-aC (different rings)	6	0,0004	0,03827
22	aC-(N=CH _n) _{cyc} (fused rings) (n in 0,,1)	1	-0,0048	-0,06659
23	aC-O-aC (different rings)	1	-0,0044	-0,01459
24	aC-CH _n -O-CH _m -aC (different rings) (n,m in 0,,2)	1	0,0462	0,04300
25	aC-O _{cyc} (fused rings)	4	-0,0092	-0,02606
26	AROM,FUSED[2]	58	0,0051	-0,09630
27	AROM,FUSED[2]s ¹	18	0,0025	-0,10155
28	AROM,FUSED[2]s ²	12	0,0046	-0,09653
29	AROM,FUSED[3]	3	0,0068	-0,15394
30	AROM,FUSED[4a]	3	0,0248	-0,03990
31	AROM,FUSED[4p]	4	0,0123	-0,12388
32	AROM,FUSED[4a]s ¹⁵	3	0,0021	-0,12268
33	PYRIDINE,FUSED[2-iso]	1	0,0056	-0,07624
34	PYRIDINE,FUSED[4]	1	0,0049	-0,16434
35	N _{multiring}	1	0,0208	-0,07323
36	>N-	1	0,0084	0,03240
37	N=C=O	2	0,0392	0,16134
38	Ccyc-N=C=O	1	-0,0227	-0,01048

A.3 Résultats de prédiction des points d'éclair.

N°	: Numéro de classement d'un composé
Name	: Nom chimique d'un composé
CAS	: Numéro d'enregistrement unique (Chemical Abstracts Service).
Set	: Ensemble de molécules d'apprentissage (training) ou de test.
EMA	: Erreur moyen absolu de prédiction en K.
Pred	: Prédiction de point d'éclair en K.
TB	: Température d'ébullition en K.

Tableau A.3 : Banque de données des points d'éclair pour les 1660 molécules.

N°	Name	Formula	N° CAS	TB	Sans TB			Avec TB		
					Set	Pred	EMA	Set	Pred	EMA
1	PROPANE	C3H8	74-98-6	231,11	Train	172,47	1,47	Test	189,286	18,29
2	ISOBUTANE	C4H10	75-28-5	261,43	Train	192,90	1,90	Test	200,2	9,20
3	n-BUTANE	C4H10	106-97-8	272,65	Test	202,93	3,78	Train	210,571	11,42
4	n-PENTANE	C5H12	109-66-0	309,22	Train	229,54	5,39	Train	230,612	6,46
5	ISOPENTANE	C5H12	78-78-4	300,99	Train	222,19	4,19	Test	220,484	2,48
6	NEOPENTANE	C5H12	463-82-1	282,65	Train	209,44	4,44	Test	214,311	9,31
7	n-HEXANE	C6H14	110-54-3	341,88	Test	253,11	2,96	Train	249,514	0,64
8	2-METHYLPENTANE	C6H14	107-83-5	333,41	Train	245,46	5,46	Test	239,958	0,04
9	3-METHYLPENTANE	C6H14	96-14-0	336,42	Train	248,46	5,46	Test	239,62	3,38
10	2,2-DIMETHYLBUTANE	C6H14	75-83-2	322,88	Test	235,92	4,92	Test	232,571	1,57
11	2,3-DIMETHYLBUTANE	C6H14	79-29-8	331,13	Train	239,82	1,82	Train	238,348	0,35
12	n-HEPTANE	C7H16	142-82-5	371,58	Train	274,36	5,36	Train	267,372	1,63
13	2-METHYLHEXANE	C7H16	591-76-4	363,2	Test	266,67	3,52	Train	258,34	4,81
14	3-METHYLHEXANE	C7H16	589-34-4	365	Train	268,84	5,69	Train	258,021	5,13
15	3-ETHYLPENTANE	C7H16	617-78-7	366,62	Train	270,04	6,04	Train	258,021	5,98
16	2,2-DIMETHYLPENTANE	C7H16	590-35-2	352,34	Test	256,74	3,74	Train	251,364	1,64
17	2,3-DIMETHYLPENTANE	C7H16	565-59-3	362,93	Train	262,98	1,98	Train	256,499	4,50
18	2,4-DIMETHYLPENTANE	C7H16	108-08-7	353,64	Train	258,19	4,19	Test	249,045	4,96
19	3,3-DIMETHYLPENTANE	C7H16	562-49-2	359,21	Test	258,72	1,72	Train	249,878	7,12
20	2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	C7H16	464-06-2	354,03	Train	255,26	3,26	Train	255,572	3,57
21	n-OCTANE	C8H18	111-65-9	398,83	Test	293,69	6,54	Train	284,27	2,88
22	2-METHYLHEPTANE	C8H18	592-27-8	390,8	Test	286,16	7,01	Train	275,72	3,43
23	3-METHYLHEPTANE	C8H18	589-81-1	392,08	Test	288,01	8,86	Test	275,418	3,73
24	4-METHYLHEPTANE	C8H18	589-53-7	390,86	Train	287,11	7,96	Train	275,418	3,73
25	3-ETHYLHEXANE	C8H18	619-99-8	391,69	Train	287,72	9,72	Train	275,418	2,58
26	2,2-DIMETHYLHEXANE	C8H18	590-73-8	379,99	Train	276,13	4,13	Train	269,121	2,88
27	2,3-DIMETHYLHEXANE	C8H18	584-94-1	388,76	Train	280,91	0,76	Train	273,978	6,17
28	2,4-DIMETHYLHEXANE	C8H18	589-43-5	382,58	Test	279,45	3,30	Test	266,618	9,53
29	2,5-DIMETHYLHEXANE	C8H18	592-13-2	382,26	Train	278,32	3,17	Test	266,928	8,22
30	3,3-DIMETHYLHEXANE	C8H18	563-16-6	385,12	Test	276,61	1,61	Test	267,716	7,28
31	3,4-DIMETHYLHEXANE	C8H18	583-48-2	390,88	Train	283,36	2,71	Train	273,674	6,98
32	2-METHYL-3-ETHYLPENTANE	C8H18	609-26-7	388,8	Train	283,99	5,99	Train	266,618	11,38
33	3-METHYL-3-ETHYLPENTANE	C8H18	1067-08-9	391,42	Test	281,13	5,13	Train	267,716	8,28
34	2,2,3-TRIMETHYLPENTANE	C8H18	564-02-3	383	Train	276,27	3,62	Train	272,797	0,15
35	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	C8H18	540-84-1	372,39	Test	269,05	4,05	Train	260,14	4,86
36	2,3,3-TRIMETHYLPENTANE	C8H18	560-21-4	387,92	Test	275,61	0,04	Train	271,714	3,94
37	2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	C8H18	565-75-3	386,62	Train	274,68	2,47	Train	272,531	4,62
38	2,2,3,3-TETRAMETHYLBUTANE	C8H18	594-82-1	379,44	Train	278,00	3,00	Train	279,674	1,33
39	n-NONANE	C9H20	111-84-2	423,97	Test	311,35	7,20	Train	300,283	3,87
40	2,2,5-TRIMETHYLHEXANE	C9H20	3522-94-9	397,24	Train	286,21	4,06	Train	277,423	4,73
41	3,3,5-TRIMETHYLHEPTANE	C10H22	7154-80-5	428,83	Train	305,48	1,48	Test	292,21	11,79
42	2,4,4-TRIMETHYLHEXANE	C9H20	16747-30-1	403,81	Train	287,52	4,37	Test	276,055	7,10
43	3,3-DIETHYLPENTANE	C9H20	1067-20-5	419,34	Train	300,34	6,34	Train	284,596	9,40
44	2,2,3,3-TETRAMETHYLPENTANE	C9H20	7154-79-2	413,44	Train	298,61	3,96	Train	294,638	0,01
45	2,2,3,4-TETRAMETHYLPENTANE	C9H20	1186-53-4	406,18	Train	287,24	3,24	Train	288,032	4,03
46	2,2,4,4-TETRAMETHYLPENTANE	C9H20	1070-87-7	395,44	Train	282,69	4,54	Test	270,86	7,29
47	2,3,3,4-TETRAMETHYLPENTANE	C9H20	16747-38-9	414,7	Train	290,55	3,60	Train	292,123	2,03
48	SQUALANE	C30H62	111-01-3	720	Train	486,40	3,60	Train	490,009	0,01
49	n-DECANE	C10H22	124-18-5	447,31	Test	327,60	4,75	Train	315,48	7,37
50	2,2,3,3-TETRAMETHYLHEXANE	C10H22	13475-81-5	433,46	Train	312,19	7,19	Train	310,12	5,12
51	2,2,5,5-TETRAMETHYLHEXANE	C10H22	1071-81-4	410,61	Test	292,70	3,70	Test	287,573	1,43
52	iso-BUTYLCYCLOHEXANE	C10H20	1678-98-4	444,45	Train	318,09	2,44	Train	310,959	4,69
53	tert-BUTYLCYCLOHEXANE	C10H20	3178-22-1	444,65	Train	317,79	2,64	Train	319,281	4,13
54	n-UNDECANE	C11H24	1120-21-4	469,08	Test	342,61	3,56	Train	329,92	9,13
55	n-DODECANE	C12H26	112-40-3	489,47	Test	356,52	4,52	Test	343,659	8,34
56	n-TRIDECANE	C13H28	629-50-5	508,62	Test	369,45	6,30	Test	356,747	6,40
57	n-TETRADECANE	C14H30	629-59-4	526,73	Train	381,55	0,90	Test	369,23	13,22
58	n-PENTADECANE	C15H32	629-62-9	543,84	Test	392,85	1,85	Train	381,147	9,85

59	n-HEXADECANE	C16H34	544-76-3	560,01	Train	403,40	3,65	Train	392,538	14,51
60	n-HEPTADECANE	C17H36	629-78-7	575,3	Test	413,25	7,90	Test	403,435	17,72
61	n-OCTADECANE	C18H38	593-45-3	589,86	Train	422,52	1,48	Train	413,87	10,13
62	n-NONADECANE	C19H40	629-92-5	603,05	Test	430,74	10,26	Train	423,873	17,13
63	2,2-DIMETHYLOCTANE	C10H22	15869-87-1	430,05	Train	310,78	3,78	Train	301,854	5,15
64	n-EICOSANE	C20H42	112-95-8	616,93	Train	439,41	4,59	Test	433,469	10,53
65	n-HENEICOSANE	C21H44	629-94-7	629,65	Train	447,19	6,82	Test	442,682	11,32
66	n-DOCOSANE	C22H46	629-97-0	641,75	Train	454,47	7,53	Test	451,536	10,46
67	n-TRICOSANE	C23H48	638-67-5	653,35	Test	461,35	9,65	Test	460,051	10,95
68	n-TETRACOSANE	C24H50	646-31-1	664,45	Train	467,83	11,17	Test	468,245	10,76
69	n-PENTACOSANE	C25H52	629-99-2	675,05	Train	473,91	13,09	Train	476,137	10,86
70	n-HEXACOSANE	C26H54	630-01-3	685,35	Test	479,74	16,26	Train	483,743	12,26
71	n-HEPTACOSANE	C27H56	593-49-7	695,25	Train	485,24	19,76	Train	491,079	13,92
72	n-OCTACOSANE	C28H58	630-02-4	704,75	Train	490,42	19,59	Train	498,158	11,84
73	n-NONACOSANE	C29H60	630-03-5	713,95	Test	495,34	20,66	Test	504,993	11,01
74	3-METHYLNONANE	C10H22	1465084	440,95	Test	322,15	3,00	Train	307,514	11,64
75	2-METHYLNONANE	C10H22	871-83-0	440,15	Train	320,53	6,53	Train	307,785	6,22
76	4-METHYLNONANE	C10H22	17301-94-9	438,85	Test	320,61	3,46	Train	307,514	9,64
77	5-METHYLNONANE	C10H22	15869-85-9	438,3	Train	320,21	8,21	Test	307,514	4,49
78	2,2,4,4,6,8,8-HEPTAMETHYLNONANE	C16H34	909554	519,5	Test	353,25	14,90	Train	352,772	15,38
79	3-METHYLOCTANE	C9H20	2216-33-3	417,38	Test	305,76	7,11	Train	291,892	6,76
80	4-METHYLOCTANE	C9H20	2216-34-4	415,59	Train	304,45	8,30	Train	291,892	4,26
81	3-ETHYLHEPTANE	C9H20	15869-80-4	416,35	Train	305,01	8,86	Test	291,892	4,26
82	2,2-DIMETHYLHEPTANE	C9H20	1071-26-7	405,84	Test	294,10	1,95	Train	285,926	6,22
83	3-METHYLUNDECANE	C12H26	1002-43-3	484,35	Train	351,92	6,92	Train	336,453	8,55
84	CYCLOPROPANE	C3H6	75-19-4	240,37	Test	175,83	4,17	Test	198,609	18,61
85	CYCLOBUTANE	C4H8	287-23-0	285,66	Train	208,63	2,37	Train	220,535	9,54
86	CYCLOPENTANE	C5H10	287-92-3	322,4	Train	235,10	0,90	Train	241,123	5,12
87	METHYLCYCLOPENTANE	C6H12	96-37-7	344,96	Train	250,79	1,79	Train	252,312	3,31
88	ETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	1640-89-7	376,62	Train	273,08	0,08	Test	269,977	3,17
89	1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	1638-26-2	361	Train	257,85	1,15	Train	257,952	1,05
90	cis-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	1192-18-3	372,68	Train	270,13	1,13	Train	263,125	5,88
91	trans-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	822-50-4	365,02	Test	264,58	1,58	Train	263,125	0,13
92	cis-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	2532-58-3	363,92	Test	263,78	1,78	Train	263,125	1,13
93	trans-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	1759-58-6	364,88	Train	264,48	1,48	Train	263,125	0,13
94	n-PROPYLCYCLOPENTANE	C8H16	2040-96-2	404,11	Test	292,20	2,20	Test	286,737	3,26
95	ISOPROPYLCYCLOPENTANE	C8H16	3875-51-2	399,58	Train	290,24	4,24	Train	295,995	10,00
96	1-METHYL-1-ETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	16747-50-5	394,67	Train	283,89	3,89	Train	280,871	0,87
97	1-cis-2-trans-3-TRIMETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	15890-40-1	390,35	Train	282,09	6,09	Train	273,58	2,42
98	1,1,3-TRIMETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	4516-69-2	378,04	Test	269,19	2,19	Train	268,578	1,58
99	1-cis-2-trans-4-TRIMETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	4850-28-6	389,88	Test	281,75	5,75	Test	273,58	2,42
100	1,1,2-TRIMETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	4259-00-1	386,88	Test	275,48	2,48	Train	268,578	4,42
101	n-BUTYLCYCLOPENTANE	C9H18	2040-95-1	429,75	Train	309,87	1,87	Train	302,623	5,38
102	CYCLOHEXANE	C6H12	110-82-7	353,87	Train	257,64	1,71	Train	260,494	4,56
103	METHYLCYCLOHEXANE	C7H14	108-87-2	374,08	Test	271,54	2,39	Train	271,036	1,89
104	ETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	1678-91-7	404,95	Train	293,15	2,00	Test	287,701	3,45
105	1,1-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	590-66-9	392,7	Train	280,04	0,11	Train	276,354	3,80
106	cis-1,2-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	112134	402,94	Test	291,61	3,46	Test	281,234	6,92
107	trans-1,2-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	6876-23-9	396,58	Test	287,00	4,00	Test	281,234	1,77
108	cis-1,3-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	638-04-0	393,24	Train	284,59	1,44	Train	281,234	1,92
109	trans-1,3-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	112195	397,61	Test	287,75	2,75	Train	281,234	3,77
110	cis-1,4-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	624-29-3	397,47	Test	287,65	3,39	Train	281,234	3,03
111	trans-1,4-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	112227	392,51	Train	284,06	0,20	Train	281,234	3,03
112	1-trans-3,5-TRIMETHYLCYCLOHEXANE	C9H18	1795-26-2	413,7	Train	298,49	6,34	Test	291,104	1,05
113	n-PROPYLCYCLOHEXANE	C9H18	1678-92-8	429,9	Train	310,35	2,20	Train	303,538	4,61
114	ISOPROPYLCYCLOHEXANE	C9H18	696-29-7	427,91	Train	310,33	2,18	Train	312,296	4,15
115	1,2,3,4-TETRAMETHYLCYCLOHEXANE	C10H20	3726-45-2	449,2	Test	323,11	1,11	Train	300,662	21,34
116	n-BUTYLCYCLOHEXANE	C10H20	1678-93-9	454,13	Train	326,93	1,28	Train	318,57	7,08
117	cis-DECAHYDRONAPHTHALENE	C10H18	493-01-6	468,97	Test	340,87	6,72	Train	327,331	6,82
118	trans-DECAHYDRONAPHTHALENE	C10H18	493-02-7	460,46	Test	334,69	7,54	Train	327,331	0,18

119	BICYCLOHEXYL	C12H22	92-51-3	512,19	Train	359,76	1,61	Train	355,471	2,68
120	1,1-DIETHYLCYCLOHEXANE	C10H20	78-01-3	449,82	Train	325,29	3,14	Train	318,17	3,98
121	n-DECYLCYCLOHEXANE	C16H32	1795-16-0	570,75	Test	403,93	3,07	Test	394,864	12,14
122	CYCLOHEPTANE	C7H14	291-64-5	391,94	Train	284,91	4,76	Test	278,752	1,40
123	CYCLOOCTANE	C8H16	292-64-8	424,29	Train	307,94	4,79	Test	295,99	7,16
124	trans-1,4-DIETHYLCYCLOHEXANE	C10H20	13990-93-7	449,4	Train	323,46	1,46	Test	312,674	9,33
125	2,6-DIMETHYLHEPTANE	C9H20	1072-05-5	408,36	Train	296,50	5,85	Test	283,85	6,80
126	2,2-DIMETHYL-3-ETHYLPENTANE	C9H20	16747-32-3	406,99	Train	294,19	5,19	Test	277,123	11,88
127	2,4-DIMETHYL-3-ETHYLPENTANE	C9H20	1068-87-7	409,87	Train	296,86	5,71	Test	274,986	16,16
128	PROPYLENE	C3H6	115-07-1	225,45	Train	167,88	1,12	Train	184,11	15,11
129	1-TRIACONTENE	C30H60	18435-53-5	721,15	Train	496,97	6,03	Train	510,828	7,83
130	1-BUTENE	C4H8	106-98-9	266,91	Train	197,99	0,01	Train	208,117	10,12
131	cis-2-BUTENE	C4H8	590-18-1	276,87	Train	205,84	0,84	Test	212,007	7,01
132	trans-2-BUTENE	C4H8	624-64-6	274,03	Test	203,73	0,73	Train	212,007	9,01
133	ISOBUTENE	C4H8	115-11-7	266,25	Train	196,26	0,78	Train	201,311	4,27
134	trans-2,2,4,6,6-PENTAMETHYL-3-HEPTENE	C12H24	27656-49-1	453,65	Test	318,44	4,44	Test	324,142	10,14
135	1-PENTENE	C5H10	109-67-1	303,22	Test	224,33	2,33	Train	228,3	6,30
136	cis-2-PENTENE	C5H10	627-20-3	310,08	Test	229,65	1,65	Train	234,199	6,20
137	trans-2-PENTENE	C5H10	646-04-8	309,49	Train	229,21	1,21	Train	234,199	6,20
138	2-METHYL-1-BUTENE	C5H10	563-46-2	304,31	Test	223,44	0,44	Train	224,191	1,19
139	3-METHYL-1-BUTENE	C5H10	563-45-1	293,21	Train	217,64	0,49	Test	223,554	6,40
140	2-METHYL-2-BUTENE	C5H10	513-35-9	311,71	Test	227,82	0,33	Test	228,43	0,28
141	1-HEXENE	C6H12	592-41-6	336,63	Test	248,38	1,23	Train	247,332	0,18
142	cis-2-HEXENE	C6H12	7688-21-3	342,03	Test	252,63	3,63	Train	252,901	3,90
143	trans-2-HEXENE	C6H12	4050-45-7	341,02	Train	251,88	3,88	Train	252,901	4,90
144	cis-3-HEXENE	C6H12	2097470	339,6	Train	250,53	3,53	Test	254,997	8,00
145	trans-3-HEXENE	C6H12	13269-52-8	340,24	Test	251,01	2,86	Train	254,997	6,85
146	2-METHYL-1-PENTENE	C6H12	763-29-1	335,25	Train	245,49	1,49	Test	243,454	0,55
147	3-METHYL-1-PENTENE	C6H12	760-20-3	327,33	Train	243,08	2,07	Train	242,519	2,63
148	4-METHYL-1-PENTENE	C6H12	691-37-2	327,01	Test	239,93	3,93	Train	237,71	1,71
149	2-METHYL-2-PENTENE	C6H12	625-27-4	340,45	Train	247,84	0,16	Train	249,586	1,59
150	3-METHYL-cis-2-PENTENE	C6H12	922-62-3	340,85	Train	248,13	1,98	Test	249,586	3,44
151	4-METHYL-1-HEXENE	C7H14	3769-23-1	359,88	Test	264,17	4,17	Train	255,895	4,11
152	4-METHYL-cis-2-PENTENE	C6H12	691-38-3	329,53	Train	244,21	5,21	Test	248,5	9,50
153	4-METHYL-trans-2-PENTENE	C6H12	674-76-0	331,75	Train	245,85	4,85	Train	248,5	7,50
154	2-ETHYL-1-BUTENE	C6H12	760-21-4	337,82	Train	247,07	0,08	Test	245,612	1,54
155	2,3-DIMETHYL-1-BUTENE	C6H12	563-78-0	328,76	Train	241,55	3,55	Train	238,922	0,92
156	3,3-DIMETHYL-1-BUTENE	C6H12	558-37-2	314,4	Test	231,01	10,14	Train	235,532	5,62
157	2,3-DIMETHYL-2-BUTENE	C6H12	563-79-1	346,35	Train	243,50	13,65	Train	245,106	12,04
158	2-ETHYL-1-PENTENE	C7H14	3404-71-5	367,15	Test	267,78	2,78	Train	263,683	1,32
159	1-HEPTENE	C7H14	592-76-7	366,79	Train	269,90	4,75	Test	265,309	0,16
160	cis-2-HEPTENE	C7H14	6443-92-1	371,56	Test	273,70	2,75	Test	270,575	0,38
161	2-METHYL-1-HEXENE	C7H14	1531866	364,99	Test	266,53	0,62	Train	261,644	5,51
162	3-ETHYL-1-PENTENE	C7H14	780984	357,26	Train	264,60	5,60	Train	260,76	1,76
163	3-METHYL-1-HEXENE	C7H14	3404-61-3	357,05	Train	264,44	2,71	Train	260,76	6,39
164	3-ETHYL-1-HEXENE	C8H16	3404-58-8	383,65	Test	283,38	7,38	Train	278,01	2,01
165	4-METHYL-1-HEPTENE	C8H16	13151-05-8	385,95	Test	282,54	5,54	Train	273,407	3,59
166	1-TETRACONTENE	C40H80	61868-18-6	796,15	Train	531,99	28,99	Test	566,584	63,58
167	cis-2-NONENE	C9H18	6434-77-1	423,9	Train	310,57	6,57	Train	303,16	0,84
168	trans-2-NONENE	C9H18	6434-78-2	423,2	Train	310,06	4,91	Train	303,16	1,99
169	2,3,3-TRIMETHYL-1-BUTENE	C7H14	594-56-9	351,04	Train	255,26	0,89	Test	250,364	5,79
170	cis-3-HEPTENE	C7H14	2097503	368,9	Test	271,42	5,42	Train	272,557	6,56
171	1-OCTENE	C8H16	111-66-0	394,41	Test	289,44	4,79	Train	282,316	2,33
172	trans-2-OCTENE	C8H16	13389-42-9	398,15	Train	292,50	5,35	Train	287,303	0,15
173	2,4,4-TRIMETHYL-1-PENTENE	C8H16	107-39-1	374,59	Train	269,14	0,04	Test	263,425	5,68
174	2,4,4-TRIMETHYL-2-PENTENE	C8H16	107-40-4	378,06	Test	272,53	0,38	Train	273,853	1,70
175	2-ETHYL-1-HEXENE	C8H16	1632-16-2	393,15	Test	285,96	3,96	Test	280,777	1,22
176	1-NONENE	C9H18	124-11-8	420,02	Train	307,40	8,25	Test	298,43	0,72
177	1-DECENE	C10H20	872-05-9	443,75	Test	323,88	3,73	Test	313,72	6,43
178	1-UNDECENE	C11H22	821-95-4	465,82	Train	339,05	2,90	Test	328,247	7,90

179	1-DODECENE	C12H24	112-41-4	486,15	Train	352,88	6,73	Train	342,067	4,08
180	1-TRIDECENE	C13H26	2437-56-1	505,99	Test	366,26	1,11	Train	355,23	9,92
181	1-TETRADECENE	C14H28	1120-36-1	524,25	Train	378,42	1,42	Train	367,782	9,22
182	1-PENTADECENE	C15H30	13360-61-7	541,61	Test	389,86	4,71	Train	379,764	5,39
183	1-HEXADECENE	C16H32	629-73-2	558,02	Train	400,55	1,60	Train	391,215	10,94
184	6-METHYL-1-HEPTENE	C8H16	5026-76-6	386,35	Train	281,93	3,93	Test	273,711	4,29
185	CYCLOPENTENE	C5H8	142-29-0	317,38	Test	231,51	12,49	Train	239,991	4,01
186	CYCLOHEXENE	C6H10	110-83-8	356,12	Train	259,37	3,22	Test	259,428	3,28
187	trans-2-EICOSENE	C20H40	42448-85-1	592	Test	420,61	4,39	Train	435,205	10,21
188	trans-2-PENTADECENE	C15H30	74392-36-2	537	Train	386,97	1,97	Train	383,298	1,70
189	CYCLOHEPTENE	C7H12	628-92-2	387,5	Test	281,78	1,13	Train	277,746	2,90
190	CYCLOOCTENE	C8H14	931-88-4	416,15	Train	302,14	3,99	Train	295,04	3,11
191	cis-2-OCTENE	C8H16	2097322	398,79	Train	292,97	2,32	Test	287,303	3,35
192	trans-3-OCTENE	C8H16	14919-01-8	396,45	Test	290,90	3,75	Train	289,181	2,03
193	cis-4-OCTENE	C8H16	7642-15-1	395,69	Test	290,34	4,69	Train	289,181	3,53
194	trans-4-OCTENE	C8H16	14850-23-8	395,41	Train	290,13	4,48	Test	289,181	3,53
195	cis-3-OCTENE	C8H16	14850-22-7	396,05	Test	290,60	0,60	Train	289,181	0,82
196	1-HEPTADECENE	C17H34	6765-39-5	573,48	Train	410,48	1,52	Train	402,169	9,83
197	1-NONADECENE	C19H38	18435-45-5	602,17	Train	428,58	5,43	Train	422,71	11,29
198	1-EICOSENE	C20H40	567040	615,54	Test	436,84	6,16	Train	432,352	10,65
199	VINYLCYCLOHEXENE	C8H12	100-40-3	401	Train	289,16	1,01	Train	287,632	0,52
200	1-METHYLCYCLOPENTENE	C6H10	693-89-0	348,64	Train	252,05	3,95	Test	253,057	2,94
201	3-METHYLCYCLOPENTENE	C6H10	1120-62-3	338,05	Train	245,85	1,15	Train	251,218	4,22
202	4-METHYLCYCLOPENTENE	C6H10	1759-81-5	338,82	Train	246,41	1,59	Train	251,218	3,22
203	2,3-DIMETHYL-1-HEXENE	C8H16	16746-86-4	383,65	Train	281,24	0,24	Train	274,492	6,51
204	d-LIMONENE	C10H16	5989-27-5	450,6	Train	323,33	2,33	Train	317,036	3,96
205	TERPINOLENE	C10H16	586-62-9	460	Train	327,72	1,43	Train	322,257	6,89
206	PROPENYL CYCLOHEXENE	C9H14	13511-13-2	431,65	Train	310,69	1,31	Train	304,468	7,53
207	1-DOCOSENE	C22H44	1599-67-3	640,15	Train	451,69	8,31	Test	450,505	9,50
208	1-TETRACOSENE	C24H48	10192-32-2	663,15	Test	465,20	11,80	Train	467,291	9,71
209	1-HEXACOSENE	C26H52	18835-33-1	684,15	Train	477,12	15,88	Test	482,857	10,14
210	1-OCTACOSENE	C28H56	18835-34-2	703,15	Test	487,47	19,53	Train	497,332	9,67
211	1,2-BUTADIENE	C4H6	590-19-2	284	Train	209,79	1,21	Train	213,814	2,81
212	1,3-BUTADIENE	C4H6	106-99-0	268,74	Train	199,44	2,29	Train	211,289	14,14
213	1,2-PENTADIENE	C5H8	591-95-7	318,01	Train	234,28	0,72	Train	233,668	1,33
214	cis-1,3-PENTADIENE	C5H8	1574-41-0	317,22	Train	235,03	1,03	Train	237,136	3,14
215	trans-1,3-PENTADIENE	C5H8	2004-70-8	315,17	Train	233,51	1,51	Train	237,136	5,14
216	1,4-PENTADIENE	C5H8	591-93-5	299,11	Train	220,54	0,54	Train	225,971	5,97
217	2,3-PENTADIENE	C5H8	591-96-8	321,4	Train	239,17	0,17	Train	239	0,00
218	ISOPRENE	C5H8	78-79-5	307,21	Train	225,66	0,66	Train	227,216	2,22
219	1,5-HEXADIENE	C6H10	592-42-7	332,61	Test	244,58	1,57	Test	245,134	1,02
220	3-METHYL-1,2-BUTADIENE	C5H8	598-25-4	314	Train	232,22	0,22	Train	232	0,00
221	METHYLCYCLOPENTADIENE	C6H8	26519-91-5	345,93	Test	250,18	4,82	Test	251,966	3,03
222	1,4-HEXADIENE	C6H10	592-45-0	338,15	Test	248,92	0,77	Test	250,741	2,59
223	trans,trans-2,4-HEXADIENE	C6H10	5194-51-4	355,05	Train	262,64	3,51	Train	261,102	5,05
224	CYCLOPENTADIENE	C5H6	542-92-7	314,65	Train	229,60	2,60	Test	238,856	11,86
225	DICYCLOPENTADIENE	C10H12	77-73-6	443	Train	323,70	5,55	Train	325,22	7,07
226	alpha-PHELLANDRENE	C10H16	99-83-2	448,15	Train	322,31	0,31	Train	320,926	1,07
227	beta-PHELLANDRENE	C10H16	555-10-2	447,15	Train	326,09	3,94	Train	317,164	4,99
228	2,3-DIMETHYL-1,3-BUTADIENE	C6H10	513-81-5	341,93	Train	248,57	2,58	Train	242,42	8,73
229	cis,trans-2,4-HEXADIENE	C6H10	5194-50-3	356,65	Train	263,82	2,33	Train	261,102	5,05
230	3-METHYL-1,4-PENTADIENE	C6H10	1115-08-8	326	Train	243,41	6,41	Test	245,392	8,39
231	1,5,9-CYCLODODECATRIENE	C12H18	706-31-0	514,65	Test	371,55	11,40	Train	353,969	6,18
232	2,5-DIMETHYL-1,5-HEXADIENE	C8H14	627-58-7	387,45	Train	278,99	1,01	Train	273,327	6,67
233	2,5-DIMETHYL-2,4-HEXADIENE	C8H14	764-13-6	408,41	Train	291,72	5,43	Train	288,831	8,32
234	1,3-CYCLOHEXADIENE	C6H8	592-57-4	353,49	Train	257,54	7,61	Train	258,359	6,79
235	1,4-CYCLOHEXADIENE	C6H8	628-41-1	360,15	Train	262,39	4,76	Train	258,359	8,79
236	1,5-CYCLOOCTADIENE	C8H12	111-78-4	423,27	Train	307,41	0,74	Train	294,087	14,06
237	trans-1,3-HEXADIENE	C6H10	20237-34-7	345,65	Train	255,11	0,96	Train	257,752	3,60
238	trans-2-METHYL-1,3-PENTADIENE	C6H10	926-54-5	349,15	Train	256,05	0,90	Train	251,896	3,25

239	1,9-DECADIENE	C10H18	1647-16-1	438,15	Train	318,69	4,54	Train	311,95	2,20
240	1,3,5,7-CYCLOOCTATETRAENE	C8H8	629-20-9	415,7	Train	302,12	2,86	Test	292,172	7,09
241	METHYLACETYLENE	C3H4	74-99-7	249,94	Train	185,67	6,33	Train	191,456	0,54
242	ETHYLACETYLENE	C4H6	107-00-6	281,22	Train	208,35	3,65	Train	212,613	0,61
243	DIMETHYLACETYLENE	C4H6	503-17-3	300,13	Train	225,03	3,97	Train	227,808	1,19
244	1-PENTYNE	C5H8	627-19-0	313,33	Train	231,52	0,48	Train	232,536	0,54
245	3-HEXYNE	C6H10	928-49-4	354,35	Train	264,29	5,29	Train	264,87	5,87
246	2-HEXYNE	C6H10	764-35-2	357,67	Train	266,77	4,62	Train	264,87	2,72
247	2-PENTYNE	C5H8	627-21-4	329,27	Train	246,23	3,23	Train	246,868	3,87
248	2-METHYL-1-BUTENE-3-YNE	C5H6	78-80-8	305,4	Train	223,66	0,66	Train	233,879	10,88
249	1-OCTYNE	C8H14	629-05-0	399,35	Train	292,70	3,55	Train	285,897	3,25
250	VINYLCACETYLENE	C4H4	689-97-4	278,25	Train	205,89	5,11	Train	218,271	7,27
251	3-METHYL-1-BUTYNE	C5H8	598-23-2	302,15	Train	222,02	0,99	Train	222,468	0,53
252	1-PENTENE-3-YNE	C5H6	646-05-9	332,4	Train	248,26	3,26	Train	251,975	6,98
253	1-PENTENE-4-YNE	C5H6	871-28-3	315,65	Train	232,45	1,45	Train	230,237	0,76
254	DIPHENYLACETYLENE	C14H10	501-65-5	573	Train	409,34	0,34	Train	409	0,00
255	1-NONYNE	C9H16	567104	423,85	Train	309,81	3,66	Train	301,826	4,32
256	1-DECYNE	C10H18	764-93-2	447,15	Train	325,95	10,30	Train	316,945	1,30
257	BENZENE	C6H6	71-43-2	353,24	Train	257,82	4,18	Train	261,608	0,39
258	TOLUENE	C7H8	108-88-3	383,78	Train	281,11	1,96	Train	288,617	9,47
259	ETHYLBENZENE	C8H10	100-41-4	409,35	Train	299,41	3,26	Train	301,725	5,58
260	o-XYLENE	C8H10	95-47-6	417,58	Train	305,07	0,08	Train	298,127	7,02
261	m-XYLENE	C8H10	108-38-3	412,27	Test	299,64	1,49	Train	307,703	9,55
262	p-XYLENE	C8H10	106-42-3	411,51	Train	302,58	3,58	Test	318,782	19,78
263	n-PROPYLBENZENE	C9H12	103-65-1	432,39	Test	315,40	3,25	Test	316,849	4,70
264	CUMENE	C9H12	98-82-8	425,56	Train	309,68	0,53	Test	307,877	1,27
265	o-ETHYLTOLUENE	C9H12	611-14-3	438,33	Test	319,78	3,63	Train	310,833	5,32
266	m-ETHYLTOLUENE	C9H12	620-14-4	434,48	Train	315,33	4,18	Test	320,009	8,86
267	p-ETHYLTOLUENE	C9H12	622-96-8	435,16	Test	319,52	7,37	Test	330,633	18,48
268	1,2,3-TRIMETHYLBENZENE	C9H12	526-73-8	449,27	Train	326,53	2,38	Train	321,352	2,80
269	1,2,4-TRIMETHYLBENZENE	C9H12	95-63-6	442,53	Test	318,15	0,50	Train	319,438	0,79
270	MESITYLENE	C9H12	108-67-8	437,89	Train	319,12	1,57	Train	324,431	6,88
271	n-BUTYLBENZENE	C10H14	104-51-8	456,46	Test	332,04	3,04	Train	331,222	2,22
272	ISOBUTYLBENZENE	C10H14	538-93-2	445,94	Train	322,53	2,62	Train	323,942	1,21
273	sec-BUTYLBENZENE	C10H14	135-98-8	446,48	Train	330,41	5,41	Test	312,315	12,69
274	tert-BUTYLBENZENE	C10H14	98-06-6	442,3	Train	319,74	2,59	Train	309,729	7,42
275	o-CYMENE	C10H14	527-84-4	451,33	Train	327,57	4,57	Train	316,798	6,20
276	m-CYMENE	C10H14	535-77-3	448,23	Train	323,63	1,63	Test	325,79	3,79
277	p-CYMENE	C10H14	99-87-6	450,28	Train	328,95	8,80	Test	336,204	16,05
278	o-DIETHYLBENZENE	C10H14	135-01-3	456,61	Train	332,64	2,27	Train	323,009	7,36
279	m-DIETHYLBENZENE	C10H14	141-93-5	454,29	Train	329,23	0,23	Train	331,811	2,81
280	p-DIETHYLBENZENE	C10H14	105-05-5	456,94	Train	335,04	5,04	Train	342,008	12,01
281	1,2,3,4-TETRAMETHYLBENZENE	C10H14	488-23-3	478,19	Train	345,38	1,77	Train	344,196	2,95
282	1,2,3,5-TETRAMETHYLBENZENE	C10H14	527-53-7	471,15	Train	335,21	5,79	Train	323,191	17,81
283	1,2,4,5-TETRAMETHYLBENZENE	C10H14	95-93-2	469,99	Train	342,42	3,73	Train	335,221	10,93
284	p-tert-BUTYL ETHYLBENZENE	C12H18	7364-19-4	485,25	Train	351,67	5,67	Train	348,97	2,97
285	1,4-DI-tert-BUTYLBENZENE	C14H22	1012-72-2	510,43	Train	365,54	0,54	Train	355,759	9,24
286	alpha-TOCOPHEROL	C29H50O2	59-02-9	787,8	Train	564,46	1,54	Train	566	0,00
287	1,3,5-TRI-tert-BUTYLBENZENE	C18H30	1460-02-2	529,8	Train	370,72	3,28	Train	377,176	3,18
288	1,3,5-TRIIISOPROPYLBENZENE	C15H24	717-74-8	511,15	Train	365,15	5,33	Train	372,801	12,98
289	PENTAMETHYLBENZENE	C11H16	700-12-9	504,55	Train	365,46	1,31	Train	357,278	6,87
290	1,2,4,5-TETRAISOPROPYLBENZENE	C18H30	635-11-0	534	Train	378,77	5,23	Train	395,725	11,73
291	m-DIISOPROPYLBENZENE	C12H18	99-62-7	476,33	Train	341,62	8,20	Train	342,797	7,02
292	p-DIISOPROPYLBENZENE	C12H18	100-18-5	483,65	Train	351,01	1,19	Test	352,605	2,79
293	1,2,4-TRIETHYLBENZENE	C12H18	877-44-1	491,15	Train	351,56	4,59	Train	353,515	2,64
294	HEXAMETHYLBENZENE	C12H18	87-85-4	536,6	Test	399,96	1,96	Train	395,22	2,78
295	1,2,3-TRIETHYLBENZENE	C12H18	42205-08-3	490,7	Test	355,11	0,11	Train	355,209	0,21
296	n-HEPTYLBENZENE	C13H20	1078-71-3	519,25	Train	374,59	3,94	Train	370,358	0,29
297	1,2,3,5-TETRAETHYLBENZENE	C14H22	38842-05-6	522	Train	369,19	10,81	Train	367,193	12,81
298	n-DECYLBENZENE	C16H26	104-72-3	571,04	Test	408,49	0,51	Test	404,421	4,58

299	PENTAETHYLBENZENE	C16H26	605-01-6	550,15	Train	395,63	1,37	Train	405,282	8,28
300	HEXAETHYLBENZENE	C18H30	604-88-6	571,15	Train	422,21	9,21	Test	444,489	31,49
301	CYCLOHEXYLBENZENE	C12H16	827-52-1	513,27	Train	372,67	0,67	Train	380,489	8,49
302	BIPHENYL	C12H10	92-52-4	528,15	Train	383,54	0,39	Train	380,972	2,18
303	p-TERPHENYL	C18H14	92-94-4	655,15	Train	473,51	6,49	Train	465,507	14,49
304	m-TERPHENYL	C18H14	92-06-8	648,15	Train	462,89	1,11	Train	459,374	4,63
305	o-TERPHENYL	C18H14	84-15-1	609,15	Train	437,36	1,36	Train	454,122	18,12
306	1,1-DIPHENYLETHANE	C14H14	612-00-0	545,78	Train	404,08	12,08	Train	387,796	4,20
307	DIPHENYLMETHANE	C13H12	101-81-5	537,42	Train	392,20	7,80	Train	391,236	8,76
308	1,2-DIPHENYLETHANE	C14H14	103-29-7	553,65	Train	396,01	2,14	Train	377,739	20,41
309	TRIPHENYLMETHANE	C19H16	519-73-3	632,15	Train	469,77	15,77	Train	464,466	10,47
310	2,4-DIPHENYL-4-METHYLPENTENE-1	C18H20	6362-80-7	614	Train	423,78	11,22	Train	418,135	16,87
311	n-PENTYLBENZENE	C11H16	538-68-1	478,61	Train	347,20	8,05	Train	344,899	5,75
312	n-HEXYLBENZENE	C12H18	1077-16-3	499,26	Test	361,17	5,02	Test	357,929	1,78
313	n-OCTYLBENZENE	C14H22	2189-60-8	537,55	Train	386,71	6,56	Test	382,225	2,08
314	n-NONYLBENZENE	C15H24	1081-77-2	555,2	Train	398,28	0,28	Train	393,568	4,43
315	n-UNDECYLBENZENE	C17H28	6742-54-7	586,4	Test	418,29	1,71	Train	414,815	5,19
316	n-TRIDECYLBENZENE	C19H32	123-02-4	614,43	Test	435,78	6,22	Train	434,338	7,66
317	n-TETRADECYLBENZENE	C20H34	1459-10-5	627,15	Train	443,52	7,48	Train	443,518	7,48
318	n-DODECYLBENZENE	C18H30	123-01-3	600,76	Test	427,31	3,69	Train	424,779	6,22
319	5-ETHYL-m-XYLENE	C10H14	934-74-7	456,93	Train	332,52	3,52	Train	336,054	7,05
320	2-ETHYL-m-XYLENE	C10H14	354381	463,19	Train	336,17	2,17	Train	333,099	0,90
321	2-ETHYL-p-XYLENE	C10H14	1758-88-9	459,98	Train	330,22	1,79	Train	331,263	0,74
322	4-ETHYL-m-XYLENE	C10H14	874-41-9	461,59	Train	331,37	1,63	Train	331,263	1,74
323	4-ETHYL-o-XYLENE	C10H14	934-80-5	462,93	Train	332,33	1,67	Train	331,263	2,74
324	2,3-DIMETHYL-2,3-DIPHENYLBUTANE	C18H22	1889-67-4	589	Train	410,68	5,32	Train	410,694	5,31
325	2-PHENYLBUTENE-1	C10H12	2039-93-2	455,15	Train	329,55	4,40	Train	334,612	9,46
326	cis-2-PHENYLBUTENE-2	C10H12	768-00-3	467,85	Train	339,40	1,40	Test	330,286	7,71
327	trans-2-PHENYLBUTENE-2	C10H12	767-99-7	447,15	Test	324,38	1,38	Test	330,286	7,29
328	1-METHYL-2-n-PROPYLBENZENE	C10H14	1074-17-5	457,95	Test	333,17	4,17	Test	325,502	3,50
329	1-METHYL-3-n-PROPYLBENZENE	C10H14	1074-43-7	454,95	Train	329,27	1,27	Train	334,228	6,23
330	1-METHYL-4-n-PROPYLBENZENE	C10H14	1074-55-1	456,45	Train	334,24	5,24	Train	344,339	15,34
331	1,1,2-TRIPHENYLETHANE	C20H18	1520-42-9	622	Train	449,99	4,99	Train	457,285	12,29
332	TETRAPHENYLMETHANE	C25H20	630-76-2	743	Train	537,61	0,39	Train	529,862	8,14
333	1,1,2,2-TETRAPHENYLETHANE	C26H22	632-50-8	633,15	Train	463,75	18,25	Train	506,042	24,04
334	1-(4-ETHYLPHENYL)-2-PHENYLETHANE	C16H18	7439-15-8	565,15	Train	405,26	1,74	Train	408,644	1,64
335	1,2-DIMETHYL-3-PROPYLBENZENE	C11H16	17059-44-8	483,65	Train	350,04	2,04	Train	346,686	1,31
336	1,2,3-TRIMETHYL-4-ETHYLBENZENE	C11H16	61827-86-9	493,55	Train	355,96	2,04	Train	355,037	2,96
337	1,2,4-TRIMETHYL-3-ETHYLBENZENE	C11H16	61827-87-0	489,75	Train	353,22	4,22	Train	355,037	6,04
338	1,2,4-TRIMETHYL-5-ETHYLBENZENE	C11H16	17851-27-3	485,15	Train	352,96	2,96	Train	346,413	3,59
339	1-(4-ETHYLPHENYL)-2-(4-ETHYLPHENYL)ETHANE	C18H22	51526-06-8	579,1	Train	416,32	4,32	Train	436,071	24,07
340	2,2-DIPHENYL PROPANE	C15H16	778-22-3	554,34	Train	395,49	9,51	Train	391,153	13,85
341	STYRENE	C8H8	100-42-5	418,31	Train	303,42	1,58	Train	305,19	0,19
342	o-METHYLSTYRENE	C9H10	611-15-4	442,96	Train	320,46	0,31	Train	314,192	5,96
343	m-METHYLSTYRENE	C9H10	100-80-1	444,75	Train	320,07	4,09	Train	323,264	0,89
344	5-o-TOLYL-2-PENTENE	C12H16	6047-69-4	500	Train	360,89	0,11	Train	355,134	5,87
345	o-ETHYLSTYRENE	C10H12	7564-63-8	460,44	Train	332,63	0,53	Train	326,231	6,92
346	m-ETHYLSTYRENE	C10H12	7525-62-4	463,15	Train	332,82	2,83	Train	334,934	0,72
347	p-ETHYLSTYRENE	C10H12	567776	465,45	Train	338,46	0,31	Train	345,02	6,87
348	p-METHYLSTYRENE	C9H10	622-97-9	445,93	Train	324,73	4,08	Train	333,77	13,12
349	alpha-METHYLSTYRENE	C9H10	98-83-9	438,65	Train	318,88	3,23	Train	318,724	3,07
350	m-DIVINYLBENZENE	C10H10	108-57-6	472,65	Train	336,74	3,41	Train	338,023	2,13
351	ETHYNYLBENZENE	C8H6	536-74-3	416	Train	304,50	0,35	Train	304,15	0,00
352	4-ISOBUTYLSTYRENE	C12H16	63444-56-4	524	Train	376,74	0,74	Train	364,17	11,83
353	p-DIVINYLBENZENE	C10H10	105-06-6	474,2	Train	341,93	1,93	Train	347,999	8,00
354	cis-1-PROPENYLBENZENE	C9H10	766-90-5	452,03	Train	324,40	3,75	Train	324,225	3,58
355	trans-1-PROPENYLBENZENE	C9H10	873-66-5	451,41	Train	323,95	1,20	Train	324,225	0,93
356	p-ISOPROPENYLSTYRENE	C11H12	16262-48-9	515	Train	372,18	9,18	Train	359,663	3,34
357	p-tert-BUTYLSTYRENE	C12H16	1746-23-2	500	Train	359,30	4,30	Train	351,907	3,09

358	NAPHTHALENE	C10H8	91-20-3	491,14	Test	355,69	2,54	Train	355,109	1,96
359	1-METHYLNAPHTHALENE	C11H10	90-12-0	517,83	Train	374,13	6,98	Test	372,915	5,77
360	2-METHYLNAPHTHALENE	C11H10	91-57-6	514,26	Train	373,36	3,21	Train	374,781	4,63
361	1-ETHYLNAPHTHALENE	C12H12	1127-76-0	531,48	Train	383,44	0,71	Test	382,666	1,48
362	1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE	C10H12	119-64-2	480,77	Test	345,98	1,98	Train	347,313	3,31
363	2,6-DIMETHYLNAPHTHALENE	C12H12	581-42-0	535,15	Train	389,48	5,48	Train	393,071	9,07
364	1-PHENYLNAPHTHALENE	C16H12	605-02-7	607,15	Train	434,83	3,18	Train	442,89	4,89
365	1-n-NONYLNAPHTHALENE	C19H26	26438-26-6	639,15	Test	452,04	6,96	Train	452,668	6,33
366	1-n-DECYLNAPHTHALENE	C20H28	26438-27-7	652,15	Train	459,91	9,76	Train	461,14	10,99
367	1-n-BUTYLNAPHTHALENE	C14H16	1634-09-9	562,54	Train	403,58	1,43	Train	404,825	0,18
368	1-n-HEXYLNAPHTHALENE	C16H20	2876-53-1	595,15	Train	424,56	4,44	Test	425,15	3,85
369	2,7-DIMETHYLNAPHTHALENE	C12H12	582-16-1	536,15	Train	390,21	4,21	Train	393,071	7,07
370	1-n-HEXYL-1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE	C16H24	66325-11-9	578,15	Train	408,94	5,06	Train	412,6	1,40
371	FLUORANTHENE	C16H10	206-44-0	655,95	Train	466,15	4,15	Train	466,036	4,04
372	1-n-PROPYLNAPHTHALENE	C13H14	2765-18-6	545,93	Test	392,76	1,76	Train	393,99	2,99
373	2-ETHYLNAPHTHALENE	C12H12	939-27-5	531,05	Train	384,99	7,84	Train	384,463	7,31
374	1-METHYLINDENE	C10H10	767-59-9	471,65	Train	341,93	0,93	Test	345,871	4,87
375	2-METHYLINDENE	C10H10	2177-47-1	479,45	Train	345,52	1,48	Train	347,21	0,21
376	1,2,3-TRIMETHYLINDENE	C12H14	4773-83-5	509	Train	365,35	2,35	Train	363,799	0,80
377	METHYLCYCLOPENTADIENE DIMER	C12H16	26472-00-4	473	Test	339,47	13,32	Test	344,715	18,57
378	1-PHENYLINDENE	C15H12	1961-96-2	610	Train	442,34	0,66	Train	432,499	10,50
379	TRIPHENYLETHYLENE	C20H16	58-72-0	669	Train	487,03	8,03	Train	481,962	2,96
380	TETRAPHENYLETHYLENE	C26H20	632-51-9	760	Train	538,26	3,74	Train	542,827	0,83
381	cis-STILBENE	C14H12	645-49-8	554	Train	398,29	0,29	Train	413,542	15,54
382	trans-STILBENE	C14H12	103-30-0	579,65	Train	416,73	4,27	Train	413,542	7,46
383	trans-3,5-DIMETHOXYSTILBENE	C16H16O2	21956-56-9	668	Train	493,06	1,06	Train	473,462	18,54
384	FLUORENE	C13H10	86-73-7	570,44	Train	407,99	2,01	Train	414,156	4,16
385	INDENE	C9H8	95-13-6	455,77	Train	331,42	0,27	Test	337,719	6,57
386	ANTHRACENE	C14H10	120-12-7	615,18	Train	457,03	1,12	Train	466,748	8,60
387	PHENANTHRENE	C14H10	85-01-8	610,03	Train	440,44	3,56	Train	444,542	0,54
388	CHRYSENE	C18H12	218-01-9	714,15	Train	514,03	4,97	Train	508,598	10,40
389	ACENAPHTHENE	C12H10	83-32-9	550,54	Train	392,70	3,30	Train	389,93	6,07
390	ACENAPHTHALENE	C12H8	208-96-8	543,15	Train	394,25	0,75	Train	398,264	3,26
391	ADAMANTANE	C10H16	281-23-2	461	Train	336,63	22,97	Train	326,932	32,67
392	VINYLNORBORNENE	C9H12	3048-64-4	413,65	Train	299,21	4,06	Train	303,952	8,80
393	DIAMANTANE	C14H20	2292-79-7	529	Train	387,41	6,41	Test	380,793	0,21
394	1,3-DIMETHYLADAMANTANE	C12H20	702-79-4	476,44	Train	338,69	13,54	Train	319,442	5,71
395	4-METHYLPHENANTHRENE	C15H12	832-64-4	628,1	Train	452,41	2,41	Train	457,015	7,02
396	METHYLNORBORNENE	C8H12	694-92-8	390,15	Test	282,48	5,48	Test	288,91	11,91
397	ETHYLNORBORNENE	C9H14	15403-89-1	416,75	Test	302,72	7,72	Train	303,093	8,09
398	INDANE	C9H10	496-11-7	451,12	Train	325,16	3,51	Train	332,933	11,28
399	alpha-TERPINENE	C10H16	99-86-5	448,15	Train	321,35	2,20	Train	324,757	5,61
400	gamma-TERPINENE	C10H16	99-85-4	456,15	Train	327,09	1,44	Train	324,757	0,89
401	2-NORBORNENE	C7H10	498-66-8	368,65	Train	269,31	11,16	Test	277,274	19,12
402	5-ETHYLIDENE-2-NORBORNENE	C9H12	16219-75-3	420,67	Train	298,73	0,58	Train	298,15	0,00
403	BENZANTHRACENE	C18H12	56-55-3	710,75	Train	526,48	13,48	Train	525,064	12,06
404	NAPHTHACENE	C18H12	92-24-0	716,15	Train	545,22	7,79	Train	540,188	12,81
405	sec-BUTYLCYCLOHEXANE	C10H20	1883929	452,49	Train	328,31	4,66	Train	326,639	2,99
406	PIMARIC ACID	C20H30O2	127-27-5	623,1	Train	457,79	6,21	Test	426,513	37,49
407	ISOPIMARIC ACID	C20H30O2	5835-26-7	623,1	Train	457,79	7,79	Test	426,513	23,49
408	BICYCLO[2,2,1]HEPTANE	C7H12	279-23-2	378,15	Train	276,15	3,85	Train	278,281	1,72
409	BICYCLO[2,2,2]OCTANE	C8H14	280-33-1	406,55	Train	296,43	16,72	Train	295,545	17,61
410	TRIAMANTANE	C18H24	13349-10-5	573,9	Train	395,01	0,01	Train	395	0,00
411	TETRAMANTANE	C22H28	27745-90-0	619,9	Test	434,07	22,07	Train	443,516	31,52
412	1-METHYLTETRALIN	C11H14	1559-81-5	493,7	Test	354,19	1,19	Train	355,189	2,19
413	1-ETHYLTETRALIN	C12H16	13556-58-6	512,61	Train	366,75	1,75	Train	367,713	2,71
414	CAMPHENE	C10H16	79-92-5	433,65	Train	311,87	4,72	Train	299,404	7,75
415	alpha-PINENE	C10H16	80-56-8	429,29	Train	304,38	0,62	Train	303,4	1,60
416	beta-PINENE	C10H16	127-91-3	439,19	Train	315,86	5,21	Train	299,404	11,25

417	ACETALDEHYDE	C2H4O	75-07-0	294,15	Train	224,54	7,47	Test	236,967	4,97
418	PROPANAL	C3H6O	123-38-6	322,15	Train	245,28	2,13	Train	255,515	12,37
419	1,2,3,6-TETRAHYDROBENZALDEHYDE	C7H10O	100-50-5	437,15	Train	319,78	0,37	Train	317,139	3,01
420	BUTANAL	C4H8O	123-72-8	347,94	Train	264,24	2,09	Train	273,047	10,90
421	2-METHYLPROPANAL	C4H8O	78-84-2	337,25	Train	253,75	0,40	Train	255,951	1,80
422	PENTANAL	C5H10O	110-62-3	375,15	Train	284,18	0,97	Test	289,645	4,50
423	HEPTANAL	C7H14O	111-71-7	426,15	Test	321,14	12,99	Train	320,322	12,17
424	HEXANAL	C6H12O	66-25-1	401,15	Train	303,09	3,09	Test	305,382	5,38
425	OCTANAL	C8H16O	124-13-0	445,15	Train	334,59	10,44	Train	334,526	10,38
426	NONANAL	C9H18O	124-19-6	465,52	Test	348,99	12,84	Test	348,045	11,90
427	CYCLOHEXANECARBOXALDEHYDE	C7H12O	2043-61-0	432,45	Train	316,24	1,24	Train	318,02	3,02
428	2-ETHYLHEXANAL	C8H16O	123-05-7	436,15	Train	325,74	8,15	Train	320,415	2,83
429	GLYOXAL	C2H2O2	107-22-2	323,55	Train	251,80	16,20	Train	294,927	26,93
430	2-METHYLHEXANAL	C7H14O	925-54-2	415,15	Train	310,87	2,87	Train	305,48	2,52
431	3-METHYLHEXANAL	C7H14O	19269-28-4	417,46	Train	313,86	7,86	Test	312,49	6,49
432	2-METHYL-2-PENTENAL	C6H10O	623-36-9	409,65	Train	306,43	2,28	Train	306,277	2,13
433	2-ETHYL-2-HEXENAL	C8H14O	645-62-5	448,72	Train	333,49	3,84	Train	336,928	7,28
434	DECANAL	C10H20O	112-31-2	481,65	Train	360,13	1,98	Train	360,929	2,78
435	UNDECANAL	C11H22O	112-44-7	506,15	Train	377,45	8,30	Train	373,221	4,07
436	DODECANAL	C12H24O	112-54-9	522	Train	388,24	14,09	Test	384,96	10,81
437	TRIDECANAL	C13H26O	10486-19-8	540,15	Test	400,67	8,67	Train	396,184	4,18
438	2-METHYLBUTYRALDEHYDE	C5H10O	96-17-3	364,8	Train	274,60	5,45	Train	273,156	4,01
439	3-METHYLBUTYRALDEHYDE	C5H10O	590-86-3	365,65	Train	275,50	5,35	Train	281,246	11,10
440	GLYCOL ALDEHYDE	C2H4O2	141-46-8	423,15	Train	335,03	23,97	Train	330,366	28,63
441	ACROLEIN	C3H4O	107-02-8	325,84	Train	249,08	1,93	Train	252,262	5,11
442	cis-CROTONALDEHYDE	C4H6O	15798-64-8	361,87	Train	276,20	9,73	Train	275,16	10,77
443	trans-CROTONALDEHYDE	C4H6O	123-73-9	375,65	Train	286,71	0,56	Train	275,16	10,99
444	METHACROLEIN	C4H6O	78-85-3	341,15	Train	258,26	0,11	Train	266,36	8,21
445	2-PHENYLPROPIONALDEHYDE	C9H10O	93-53-8	472	Train	342,60	0,60	Train	342	0,00
446	o-TOLUALDEHYDE	C8H8O	529-20-4	474,15	Train	351,25	11,10	Train	349,037	8,89
447	p-TOLUALDEHYDE	C8H8O	104-87-0	480,4	Train	358,13	5,13	Train	366,375	13,38
448	BENZALDEHYDE	C7H6O	100-52-7	451,9	Train	335,62	1,38	Train	341,088	4,09
449	SALICYLALDEHYDE	C7H6O2	90-02-8	469,65	Train	361,24	12,09	Train	393,684	44,53
450	p-HYDROXYBENZALDEHYDE	C7H6O2	123-08-0	583,15	Train	451,20	3,20	Train	408,345	39,66
451	TEREPHTHALDEHYDE	C8H6O2	623-27-8	519,65	Train	392,63	4,37	Train	406,718	9,72
452	m-TOLUALDEHYDE	C8H8O	620-23-5	472,15	Train	348,01	3,15	Train	357,063	5,91
453	2-METHYL OCTANAL	C9H18O	7786-29-0	460	Train	342,64	11,64	Train	334,614	3,61
454	2-METHYLHEPTANAL	C8H16O	16630-91-4	429,15	Train	320,51	0,51	Train	320,415	0,42
455	PARALDEHYDE	C6H12O3	123-63-7	397,15	Test	310,70	11,99	Test	329,387	30,68
456	ACETONE	C3H6O	67-64-1	329,44	Train	252,38	0,77	Test	234,068	19,08
457	METHYL ETHYL KETONE	C4H8O	78-93-3	352,79	Train	260,06	4,09	Train	263,1	1,05
458	3-PENTANONE	C5H10O	96-22-0	375,14	Test	279,50	0,65	Train	272,926	7,22
459	METHYL ISOBUTYL KETONE	C6H12O	108-10-1	389,15	Test	283,70	2,45	Train	288,238	2,09
460	3-METHYL-2-PENTANONE	C6H12O	565-61-7	390,55	Train	289,56	4,41	Train	287,337	2,19
461	5-HEXEN-2-ONE	C6H10O	109-49-9	401,65	Train	293,47	2,68	Train	294,572	1,58
462	3-HEPTANONE	C7H14O	106-35-4	420,55	Train	311,67	1,52	Test	305,273	4,88
463	4-HEPTANONE	C7H14O	123-19-3	417,15	Train	309,15	2,00	Train	305,273	1,88
464	3-HEXANONE	C6H12O	589-38-8	396,65	Train	294,74	0,74	Train	289,531	4,47
465	2-PENTANONE	C5H10O	107-87-9	375,46	Train	276,02	3,98	Train	280,226	0,23
466	METHYL ISOPROPYL KETONE	C5H10O	563-80-4	367,55	Train	272,39	0,24	Train	270,917	1,23
467	2-HEXANONE	C6H12O	591-78-6	400,7	Test	293,78	2,37	Test	296,448	0,30
468	2-HEPTANONE	C7H14O	110-43-0	424,18	Train	310,15	2,00	Train	311,839	0,31
469	5-METHYL-2-HEXANONE	C7H14O	110-12-3	417,95	Train	303,86	4,29	Train	304,047	4,10
470	MESITYL OXIDE	C6H10O	141-79-7	402,95	Test	302,07	1,07	Train	293,643	7,36
471	3,3-DIMETHYL-2-BUTANONE	C6H12O	75-97-8	379,45	Train	278,36	3,79	Train	281,28	0,87
472	DIISOBUTYL KETONE	C9H18O	108-83-8	441,41	Train	321,73	0,42	Train	319,847	2,30
473	DIISOPROPYL KETONE	C7H14O	565-80-0	397,55	Train	297,49	9,34	Train	292,965	4,82
474	2-PYRROLIDONE	C4H7NO	616-45-5	524,32	Test	403,65	7,50	Train	368,62	42,53
475	N-METHYL-2-PYRROLIDONE	C5H9NO	872-50-4	477,42	Train	361,45	2,30	Train	354,449	4,70
476	ETHYL ISOAMYL KETONE	C8H16O	624-42-0	431,4	Train	317,08	2,92	Test	312,651	7,35

477	5-NONANONE	C9H18O	502-56-7	461,6	Test	340,26	2,11	Train	334,428	3,72
478	2-NONANONE	C9H18O	821-55-6	467,15	Test	339,70	5,80	Test	340,364	5,14
479	ANTHRAQUINONE	C14H8O2	84-65-1	653,05	Train	467,92	1,58	Train	469,698	0,20
480	ACETYLACETONE	C5H8O2	123-54-6	410,15	Train	298,57	8,58	Test	322,954	15,80
481	ISOPHORONE	C9H14O	78-59-1	488,35	Train	354,66	4,01	Train	362,579	11,93
482	CYCLOPENTANONE	C5H8O	120-92-3	403,8	Train	302,16	3,16	Train	327,666	28,67
483	CYCLOHEXANONE	C6H10O	108-94-1	428,58	Train	320,22	4,07	Test	342,313	26,16
484	BENZOPHENONE	C13H10O	119-61-9	579,24	Train	422,29	0,29	Train	422	0,00
485	ACETOPHENONE	C8H8O	98-86-2	475,26	Train	355,33	5,18	Train	350,339	0,19
486	beta-PROPIOLACTONE	C3H4O2	57-57-8	435,15	Train	334,87	8,29	Test	324,642	18,51
487	gamma-BUTYROLACTONE	C4H6O2	96-48-0	477,15	Test	366,66	0,49	Test	339,443	27,71
488	epsilon-CAPROLACTONE	C6H10O2	502-44-3	514	Train	393,85	11,70	Train	366,858	15,29
489	gamma-VALEROLACTONE	C5H8O2	108-29-2	480,65	Test	368,34	0,92	Train	347,545	21,72
490	ETHYL ISOPROPYL KETONE	C6H12O	565-69-5	386,55	Test	285,65	0,50	Train	281,128	5,02
491	METHYL ISOPROPENYL KETONE	C5H8O	814-78-8	371,15	Test	280,52	2,37	Train	271,651	6,50
492	2-CYCLOHEXYL CYCLOHEXANONE	C12H20O	90-42-6	537,15	Train	387,78	5,22	Train	415,824	22,82
493	QUINONE	C6H4O2	106-51-4	454	Train	347,95	2,20	Test	404,196	54,05
494	DIKETENE	C4H4O2	674-82-8	399,2	Train	308,65	1,65	Train	330,152	23,15
495	METHANOL	CH4O	67-56-1	337,85	Test	263,17	20,98	Test	262,153	22,00
496	ETHANOL	C2H6O	64-17-5	351,44	Test	273,08	13,07	Test	279,328	6,82
497	1-PROPANOL	C3H8O	71-23-8	370,35	Train	287,06	10,53	Test	295,598	1,99
498	ISOPROPANOL	C3H8O	67-63-0	355,3	Train	274,25	10,90	Test	272,468	12,68
499	1-BUTANOL	C4H10O	71-36-3	391,9	Test	303,01	7,49	Test	311,031	0,53
500	2-METHYL-1-PROPANOL	C4H10O	78-83-1	380,81	Train	292,92	9,40	Train	303,218	0,90
501	2-BUTANOL	C4H10O	78-92-2	372,9	Test	287,96	8,19	Train	288,808	7,34
502	2-METHYL-2-PROPANOL	C4H10O	75-65-0	355,57	Train	276,98	7,28	Train	268,931	15,33
503	1-PENTANOL	C5H12O	71-41-0	410,9	Train	316,91	5,24	Train	325,691	3,54
504	2-PENTANOL	C5H12O	6032-29-7	392,2	Train	302,11	5,04	Test	304,587	2,56
505	2-METHYL-2-BUTANOL	C5H12O	75-85-4	375,2	Train	288,54	3,62	Train	284,415	7,74
506	2-METHYL-1-BUTANOL	C5H12O	137-32-6	401,85	Train	309,23	6,92	Test	318,005	1,86
507	2,2-DIMETHYL-1-PROPANOL	C5H12O	75-84-3	386,25	Test	294,28	8,87	Train	312,546	9,40
508	1-HEXANOL	C6H14O	111-27-3	429,9	Test	330,74	2,41	Train	339,634	6,48
509	2-HEXANOL	C6H14O	626-93-7	412,4	Train	316,87	1,28	Train	319,568	1,42
510	3-HEXANOL	C6H14O	623-37-0	406,15	Test	312,07	2,08	Train	319,568	5,42
511	2-METHYL-1-PENTANOL	C6H14O	105-30-6	421,15	Train	323,27	0,12	Test	332,321	9,17
512	3-METHYL-1-PENTANOL	C6H14O	589-35-5	425,55	Train	326,65	4,50	Train	332,321	1,17
513	3-METHYL-3-PENTANOL	C6H14O	77-74-7	394,06	Train	302,28	5,13	Train	300,421	3,27
514	3-PENTANOL	C5H12O	584-02-1	388,45	Train	299,22	3,93	Train	304,587	1,44
515	2-ETHYL-1-HEXANOL	C8H18O	104-76-7	457,75	Test	349,59	3,59	Train	358,927	12,93
516	2-METHYL-1-HEXANOL	C7H16O	624-22-6	437,15	Train	334,71	1,06	Train	345,946	12,30
517	3-METHYL-1-BUTANOL	C5H12O	123-51-3	404,15	Train	310,09	5,91	Test	318,267	2,27
518	3-METHYL-2-BUTANOL	C5H12O	598-75-4	383,88	Train	291,25	7,90	Train	303,279	4,13
519	1-HEPTANOL	C7H16O	111-70-6	448,6	Test	344,26	1,89	Train	352,911	6,76
520	2-HEPTANOL	C7H16O	543-49-7	432,9	Test	331,79	0,37	Train	333,808	1,66
521	3-HEPTANOL	C7H16O	589-82-2	429,15	Train	328,91	1,76	Train	333,808	6,66
522	5-METHYL-1-HEXANOL	C7H16O	627-98-5	445,15	Train	339,82	1,67	Train	346,183	8,03
523	4-METHYL-2-PENTANOL	C6H14O	108-11-2	404,85	Train	309,45	4,56	Test	311,982	2,02
524	o,p-BISPHENOL A	C15H16O2	837-08-1	633,7	Train	489,05	10,95	Train	482,441	17,56
525	1-OCTANOL	C8H18O	111-87-5	467,1	Test	357,55	2,15	Test	365,57	5,87
526	2-OCTANOL	C8H18O	123-96-6	452,9	Train	346,24	2,09	Train	347,361	3,21
527	1-NONANOL	C9H20O	143-08-8	485,2	Test	370,47	1,32	Test	377,651	8,50
528	2-NONANOL	C9H20O	628-99-9	471,7	Train	359,69	4,54	Train	360,277	5,13
529	1-DECANOL	C10H22O	112-30-1	503	Train	383,08	5,93	Train	389,195	12,05
530	1-UNDECANOL	C11H24O	112-42-5	520,3	Train	395,25	9,10	Train	400,236	14,09
531	8-METHYL-1-NONANOL	C10H22O	55505-26-5	493	Test	373,48	2,83	Test	383,341	12,69
532	1-DODECANOL	C12H26O	112-53-8	537,1	Test	406,96	6,96	Test	410,806	10,81
533	1-TRIDECANOL	C13H28O	112-70-9	553,4	Train	418,23	9,23	Train	420,935	11,94
534	1-TETRADECANOL	C14H30O	112-72-1	569	Train	428,91	7,76	Train	430,649	9,50
535	1-PENTADECANOL	C15H32O	629-76-5	583,9	Train	439,00	10,00	Test	439,974	10,97
536	1-HEXADECANOL	C16H34O	36653-82-4	598	Test	448,42	5,42	Train	448,933	5,93

537	1-HEPTADECANOL	C17H36O	1454-85-9	611,3	Test	457,19	10,19	Train	457,547	10,55
538	1-OCTADECANOL	C18H38O	112-92-5	623,6	Train	465,17	7,02	Train	465,835	7,69
539	2-ETHYL-1-BUTANOL	C6H14O	97-95-0	420,15	Train	322,50	3,65	Test	332,321	6,17
540	1-EICOSANOL	C20H42O	629-96-9	645,5	Train	478,95	10,80	Train	481,505	13,36
541	1-NONADECANOL	C19H40O	1454-84-8	635,1	Train	472,49	8,49	Test	473,815	9,82
542	CYCLOHEXANOL	C6H12O	108-93-0	434	Train	327,03	7,12	Train	343,841	9,69
543	1-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	590-67-0	441,15	Train	331,48	6,48	Train	330,31	5,31
544	cis-2-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7443-70-1	438,15	Train	329,22	1,93	Train	351,816	20,67
545	trans-2-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7443-52-9	440,15	Train	330,73	0,43	Train	351,816	20,67
546	cis-3-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	5454-79-5	446,15	Train	335,23	8,77	Train	351,816	7,82
547	trans-3-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7443-55-2	447,15	Train	335,99	8,02	Train	351,816	7,82
548	cis-4-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7731-28-4	444,15	Train	333,73	9,42	Train	351,816	8,67
549	trans-4-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7731-29-5	444,15	Train	333,73	9,42	Train	351,816	8,67
550	L-MENTHOL	C10H20O	2216-51-5	489,55	Train	366,48	0,33	Train	390,251	24,10
551	SITOSTEROL	C29H50O	83-46-5	778	Train	549,61	11,39	Train	531,397	29,60
552	AGATHADIOL	C20H34O2	1857-24-5	640	Train	478,05	4,95	Train	507,102	24,10
553	alpha-TERPINEOL	C10H18O	98-55-5	492,95	Train	368,47	4,47	Train	366,918	2,92
554	beta-TERPINEOL	C10H18O	138-87-4	483,15	Train	361,04	1,97	Train	367,761	4,76
555	2-BUTYL-NONAN-1-OL	C13H28O	51655-57-3	538	Train	405,64	1,36	Train	415,613	8,61
556	2-METHYL-1-UNDECANOL	C12H26O	10522-26-6	521	Train	393,84	1,16	Train	405,254	10,25
557	TETRAHYDROFURFURYL ALCOHOL	C5H10O2	97-99-4	450,8	Train	350,02	6,87	Train	352,884	9,73
558	ALLYL ALCOHOL	C3H6O	107-18-6	370,23	Test	286,07	7,93	Train	293,716	0,28
559	2-PHENYL-2-PROPANOL	C9H12O	617-94-7	475,15	Train	354,67	5,48	Train	362,263	2,11
560	2-BUTYL-OCTAN-1-OL	C12H26O	735273	520	Train	393,09	10,94	Train	405,254	23,10
561	2,3-XYLENOL	C8H10O	526-75-0	490,07	Train	370,26	2,11	Train	370,43	2,28
562	p-ISOPROPENYL PHENOL	C9H10O	4286-23-1	513,7	Train	389,62	1,62	Train	391,158	3,16
563	2,4-XYLENOL	C8H10O	105-67-9	484,13	Train	362,06	6,09	Test	368,83	0,68
564	4-METHYL-CYCLOHEXANE-METHANOL	C8H16O	34885-03-5	463,09	Test	348,79	5,21	Train	363,258	9,26
565	2,5-XYLENOL	C8H10O	95-87-4	484,33	Test	362,21	5,94	Train	368,83	0,68
566	2,6-XYLENOL	C8H10O	576-26-1	474,22	Train	358,28	0,13	Train	370,43	12,28
567	3,4-XYLENOL	C8H10O	95-65-8	500,15	Train	374,04	5,11	Train	368,83	10,32
568	3,5-XYLENOL	C8H10O	108-68-9	494,89	Train	374,85	0,30	Train	373,007	2,14
569	PROPARGYL ALCOHOL	C3H4O	107-19-7	386,65	Train	298,42	6,73	Train	297,165	7,99
570	BENZYL ALCOHOL	C7H8O	100-51-6	478,6	Train	364,84	1,31	Train	362,357	3,79
571	PHENOL	C6H6O	108-95-2	454,99	Test	346,27	5,88	Train	343,18	8,97
572	o-CRESOL	C7H8O	95-48-7	464,15	Test	352,38	1,62	Train	351,07	2,93
573	m-CRESOL	C7H8O	108-39-4	475,43	Test	359,20	0,05	Train	359,036	0,11
574	p-CRESOL	C7H8O	106-44-5	475,13	Train	362,90	3,75	Test	368,281	9,13
575	o-ETHYLPHENOL	C8H10O	90-00-6	477,67	Train	362,16	4,01	Train	361,644	3,49
576	p-HYDROQUINONE	C6H6O2	123-31-9	559,2	Train	442,65	4,65	Test	409,961	28,04
577	p-ETHYLPHENOL	C8H10O	123-07-9	491,14	Train	374,64	1,49	Test	378,205	5,06
578	p-tert-BUTYLPHENOL	C10H14O	98-54-4	512,88	Train	386,97	0,97	Train	384,291	1,71
579	BISPHENOL A	C15H16O2	80-05-7	633,65	Train	491,89	8,26	Train	492,43	7,72
580	NONYLPHENOL	C15H24O	25154-52-3	590,76	Test	439,80	15,15	Train	437,076	12,43
581	ETHYLENE GLYCOL	C2H6O2	107-21-1	470,45	Train	374,71	9,44	Train	374,258	9,89
582	DIETHYLENE GLYCOL	C4H10O3	111-46-6	517,95	Train	409,85	3,30	Train	390,988	22,16
583	TRIETHYLENE GLYCOL	C6H14O4	112-27-6	561,5	Train	436,46	7,31	Test	417,105	12,05
584	TETRAETHYLENE GLYCOL	C8H18O5	112-60-7	602,7	Train	467,46	1,54	Test	448,045	20,96
585	1,2-PROPYLENE GLYCOL	C3H8O2	57-55-6	460,75	Train	365,33	6,67	Train	379,813	7,81
586	1,3-PROPYLENE GLYCOL	C3H8O2	504-63-2	487,55	Train	386,96	6,04	Train	385,281	7,72
587	DIPROPYLENE GLYCOL	C6H14O3	25265-71-8	504,95	Train	394,51	3,51	Test	379,29	11,71
588	NEOPENTYL GLYCOL	C5H12O2	126-30-7	483,15	Train	378,00	2,15	Train	386,035	5,89
589	2-BUTYNE-1,4-DIOL	C4H6O2	110-65-6	511,15	Train	412,27	12,73	Train	395,42	29,58
590	TRIPROPYLENE GLYCOL	C9H20O4	24800-44-0	540,35	Test	410,19	2,96	Test	409,703	3,45
591	2-BUTYL-2-ETHYL-1,3-PROPANEDIOL	C9H20O2	115-84-4	537,1	Test	416,10	5,90	Train	427,986	17,79
592	2-METHYL-1,3-PROPANEDIOL	C4H10O2	2163-42-0	487,15	Train	389,55	3,95	Train	379,666	13,83
593	1,2-BUTANEDIOL	C4H10O2	584-03-2	469,57	Train	371,43	4,88	Train	391,261	24,71
594	1,3-BUTANEDIOL	C4H10O2	107-88-0	481,38	Train	385,29	3,29	Train	368,985	13,02
595	HEXYLENE GLYCOL	C6H14O2	107-41-5	470,65	Train	373,90	7,90	Train	360,388	5,61
596	GLYCEROL	C3H8O3	56-81-5	561	Train	455,57	8,58	Train	448,038	16,11

597	1,2,3-BUTANETRIOL	C4H10O3	4435-50-1	560	Train	452,78	22,22	Train	452,139	22,86
598	1,2,4-BUTANETRIOL	C4H10O3	3068-00-6	545	Train	446,19	14,81	Train	447,927	13,07
599	p-tert-BUTYLCAECHEOL	C10H14O2	98-29-3	558	Train	427,91	2,91	Train	424,015	0,99
600	2,2,4-TRIMETHYL-1,3-PENTANEDIOL	C8H18O2	144-19-4	503,1	Train	388,23	5,58	Test	397,904	15,25
601	2-METHYL-1,3-PENTANEDIOL	C6H14O2	149-31-5	487,7	Train	387,69	4,54	Test	386,328	3,18
602	2,3-BUTANEDIOL	C4H10O2	513-85-9	453,85	Train	354,85	3,30	Train	390,108	31,96
603	cis-2-BUTENE-1,4-DIOL	C4H8O2	6117-80-2	508,15	Test	405,95	4,80	Train	389,229	11,92
604	trans-2-BUTENE-1,4-DIOL	C4H8O2	821-11-4	499	Train	398,64	2,51	Test	389,229	11,92
605	1,4-BUTANEDIOL	C4H10O2	110-63-4	501,15	Train	396,81	10,34	Train	396,491	10,66
606	1,5-PENTANEDIOL	C5H12O2	111-29-5	512,15	Train	404,55	4,60	Train	407,22	1,93
607	1,6-HEXANEDIOL	C6H14O2	629-11-8	525,99	Train	414,49	5,66	Train	417,497	2,65
608	1,2-BENZENEDIOL	C6H6O2	120-80-9	518,65	Train	408,23	8,23	Train	395,399	4,60
609	1,3-BENZENEDIOL	C6H6O2	108-46-3	549,65	Train	430,66	13,34	Test	402,13	41,87
610	PENTAERYTHRITOL	C5H12O4	115-77-5	631	Train	528,46	4,69	Train	489,831	43,32
611	TRIMETHYLOLPROPANE	C6H14O3	77-99-6	562,15	Test	454,46	5,31	Train	452,623	3,47
612	1,2,3-BENZENETRIOL	C6H6O3	87-66-1	581,85	Train	471,76	9,76	Train	447,106	14,89
613	INOSITOL	C6H12O6	87-89-8	691	Train	602,94	8,94	Train	562,524	31,48
614	SORBITOL	C6H14O6	50-70-4	704	Train	603,67	1,67	Train	581,473	20,53
615	FORMIC ACID	CH2O2	64-18-6	373,71	Test	296,59	26,56	Train	315,948	7,20
616	ACETIC ACID	C2H4O2	64-19-7	391,05	Test	305,31	6,73	Test	328,43	16,39
617	PROPIONIC ACID	C3H6O2	79-09-4	414,32	Test	322,68	7,32	Train	342,241	12,24
618	n-DECANOIC ACID	C10H20O2	334-48-5	543,15	Test	415,70	5,45	Train	422,837	1,69
619	OXALIC ACID	C2H2O4	144-62-7	516	Train	419,14	15,86	Train	431,476	3,52
620	n-BUTYRIC ACID	C4H8O2	107-92-6	436,42	Train	339,06	6,09	Test	355,396	10,25
621	2-METHYLBUTYRIC ACID	C5H10O2	116-53-0	450,15	Train	351,86	1,86	Train	351,414	1,41
622	n-PENTANOIC ACID	C5H10O2	109-52-4	458,95	Train	355,68	3,47	Train	367,94	8,79
623	n-NONANOIC ACID	C9H18O2	112-05-0	528,75	Test	405,70	7,45	Train	412,79	0,36
624	ISOBUTYRIC ACID	C4H8O2	79-31-2	427,65	Train	334,13	0,98	Train	338,307	5,16
625	ISOVALERIC ACID	C5H10O2	503-74-2	449,68	Train	346,71	4,44	Train	361,581	10,43
626	n-HEXANOIC ACID	C6H12O2	142-62-1	478,85	Train	370,19	4,97	Test	379,915	4,77
627	2-METHYLHEXANOIC ACID	C7H14O2	4536-23-6	483	Train	375,69	5,04	Train	376,288	5,64
628	1,4-CYCLOHEXANEDICARBOXYLIC ACID	C8H12O4	619-82-9	669	Train	540,27	2,73	Train	515,773	27,23
629	n-OCTANOIC ACID	C8H16O2	124-07-2	512,85	Train	394,49	5,66	Train	402,307	2,16
630	n-UNDECANOIC ACID	C11H22O2	112-37-8	557,15	Train	425,34	2,66	Test	432,474	4,47
631	CYCLOPENTYLACETIC ACID	C7H12O2	1123-00-8	501,15	Train	380,00	2,15	Train	393,039	10,89
632	n-DODECANOIC ACID	C12H24O2	143-07-7	571,85	Train	435,45	1,55	Train	441,727	4,73
633	n-TRIDECANOIC ACID	C13H26O2	638-53-9	585,25	Train	444,51	2,51	Train	450,618	8,62
634	n-TETRADECANOIC ACID	C14H28O2	544-63-8	599,35	Train	454,05	4,05	Test	459,167	9,17
635	n-HEXADECANOIC ACID	C16H32O2	57-10-3	623,15	Test	469,65	3,65	Test	475,318	9,32
636	cis-CROTONIC ACID	C4H6O2	503-64-0	445,05	Train	353,20	0,05	Train	359,372	6,22
637	trans-CROTONIC ACID	C4H6O2	107-93-7	458,15	Train	363,60	0,45	Train	359,372	3,78
638	2-METHYLOCTANOIC ACID	C9H18O2	3004-93-1	518,15	Train	401,04	8,04	Train	398,989	5,99
639	n-OCTADECANOIC ACID	C18H36O2	57-11-4	647,15	Train	485,20	16,20	Test	490,317	21,32
640	ACRYLIC ACID	C3H4O2	79-10-7	414,15	Train	329,15	5,15	Train	342,35	18,35
641	METHACRYLIC ACID	C4H6O2	79-41-4	434,15	Train	341,92	1,92	Train	352,81	12,81
642	OLEIC ACID	C18H34O2	112-80-1	633	Train	472,96	10,96	Test	492,483	30,48
643	LINOLEIC ACID	C18H32O2	60-33-3	628	Train	467,59	3,41	Train	494,626	23,63
644	BENZOIC ACID	C7H6O2	65-85-0	522,4	Train	397,18	2,92	Test	421,966	27,71
645	o-TOLUIC ACID	C8H8O2	118-90-1	532	Test	403,49	6,51	Test	427,779	17,78
646	p-TOLUIC ACID	C8H8O2	99-94-5	547,65	Test	417,88	10,12	Test	440,542	12,54
647	SALICYLIC ACID	C7H6O3	69-72-7	529	Train	415,98	14,02	Train	460,885	30,89
648	ADIPIC ACID	C6H10O4	124-04-9	609	Train	461,45	7,81	Train	457,068	12,19
649	PHTHALIC ACID	C8H6O4	88-99-3	598	Train	469,80	28,65	Train	511,221	70,07
650	ISOPHTHALIC ACID	C8H6O4	121-91-5	753	Train	588,88	38,88	Test	515,21	34,79
651	TEREPHTHALIC ACID	C8H6O4	100-21-0	611,45	Train	483,12	50,03	Train	519,883	13,27
652	PERACETIC ACID	C2H4O3	79-21-0	383	Train	313,67	0,52	Train	345,967	32,82
653	ACETIC ANHYDRIDE	C4H6O3	108-24-7	412,7	Train	323,63	1,04	Train	309,243	13,35
654	PROPIONIC ANHYDRIDE	C6H10O3	123-62-6	440,15	Train	332,02	3,98	Train	338,5	2,50
655	BUTYRIC ANHYDRIDE	C8H14O3	106-31-0	470,93	Train	353,39	1,61	Train	364,539	9,54
656	PALUSTRIC ACID	C20H30O2	1945-53-5	616	Train	453,99	1,99	Train	482,31	30,31

657	SUCCINIC ANHYDRIDE	C4H4O3	108-30-5	536,58	Test	422,21	2,79	Train	403,216	21,78
658	GLUTARIC ANHYDRIDE	C5H6O3	108-55-4	562,69	Train	442,14	4,01	Train	414,266	31,88
659	PHTHALIC ANHYDRIDE	C8H4O3	85-44-9	557,65	Train	425,42	0,42	Train	437,886	12,89
660	MALEIC ANHYDRIDE	C4H2O3	108-31-6	475,15	Train	373,98	1,17	Train	402,576	27,43
661	TRIMELLITIC ANHYDRIDE	C9H4O5	552-30-7	663	Train	524,86	2,36	Train	527,783	5,28
662	METHYL FORMATE	C2H4O2	107-31-3	304,9	Train	232,14	14,86	Test	232,461	14,54
663	ETHYL FORMATE	C3H6O2	109-94-4	327,46	Train	248,68	5,47	Test	251,259	2,89
664	n-PROPYL FORMATE	C4H8O2	110-74-7	353,97	Train	268,12	2,03	Train	269,022	1,13
665	n-BUTYL FORMATE	C5H10O2	592-84-7	379,25	Test	286,53	0,38	Train	285,833	0,32
666	ISOBUTYL FORMATE	C5H10O2	542-55-2	371,22	Train	278,96	4,19	Train	277,327	5,82
667	n-PENTYL FORMATE	C6H12O2	638-49-3	405,45	Test	305,53	4,38	Train	301,765	0,62
668	n-OCTYL FORMATE	C9H18O2	112-32-3	471,95	Test	352,86	3,36	Test	344,934	4,57
669	n-NONYL FORMATE	C10H20O2	5451-92-3	487	Test	363,16	7,16	Test	357,962	1,96
670	n-DECYL FORMATE	C11H22O2	5451-52-5	506	Train	376,33	6,33	Train	370,389	0,39
671	VINYL FORMATE	C3H4O2	692-45-5	320	Test	242,71	12,29	Train	256,298	1,30
672	METHYL ACETATE	C3H6O2	79-20-9	330,09	Train	251,53	8,62	Test	250,992	9,16
673	ETHYL ACETATE	C4H8O2	141-78-6	350,21	Train	266,18	2,82	Test	268,769	0,23
674	n-PROPYL ACETATE	C5H10O2	109-60-4	374,65	Test	284,03	0,32	Test	285,593	1,88
675	n-BUTYL ACETATE	C6H12O2	123-86-4	399,26	Train	301,90	3,75	Train	301,538	3,39
676	ISOBUTYL ACETATE	C6H12O2	110-19-0	389,8	Train	293,17	2,17	Test	293,467	2,47
677	ISOPENTYL ACETATE	C7H14O2	123-92-2	415,15	Test	311,42	5,27	Train	309,009	2,86
678	ALLYL ACETATE	C5H8O2	591-87-7	377,15	Train	284,99	1,16	Test	283,648	2,50
679	ISOPROPYL ACETATE	C5H10O2	108-21-4	361,65	Train	272,97	1,85	Train	275,521	0,70
680	sec-BUTYL ACETATE	C6H12O2	105-46-4	385,15	Train	290,83	1,83	Train	291,703	2,70
681	VINYL ACETATE	C4H6O2	108-05-4	345,65	Test	262,39	2,98	Train	273,539	8,17
682	METHYL PROPIONATE	C4H8O2	554-12-1	352,6	Test	264,75	6,25	Train	266,884	4,12
683	ETHYL PROPIONATE	C5H10O2	105-37-3	372,25	Test	278,77	6,23	Test	283,808	1,19
684	n-PROPYL PROPIONATE	C6H12O2	106-36-5	395,65	Train	295,52	1,37	Train	299,845	5,70
685	n-BUTYL PROPIONATE	C7H14O2	590-01-2	418,26	Train	311,58	1,57	Train	315,063	1,91
686	n-PROPYL n-BUTYRATE	C7H14O2	105-66-8	415,85	Test	309,79	0,36	Train	315,063	4,91
687	VINYL PROPIONATE	C5H8O2	105-38-4	368,15	Train	275,36	5,64	Train	288,352	7,35
688	METHYL n-BUTYRATE	C5H10O2	623-42-7	375,9	Train	281,51	5,49	Train	283,808	3,19
689	ETHYL n-BUTYRATE	C6H12O2	105-54-4	394,65	Train	294,77	2,38	Train	299,845	2,70
690	n-PROPYL ISOBUTYRATE	C7H14O2	644-49-5	408,65	Train	302,07	1,92	Train	294,614	5,54
691	TRIOCTYL TRIMELLITATE	C33H54O6	3319-31-1	687,15	Train	482,71	40,44	Train	567,985	44,84
692	METHYL ACRYLATE	C4H6O2	96-33-3	353,35	Test	266,42	3,58	Train	266,054	3,95
693	ETHYL ACRYLATE	C5H8O2	140-88-5	372,65	Test	280,24	0,69	Train	283,022	2,09
694	n-PROPYL ACRYLATE	C6H10O2	925-60-0	392,15	Test	294,14	1,86	Train	299,099	3,10
695	n-BUTYL ACRYLATE	C7H12O2	141-32-2	420,55	Train	314,61	4,46	Test	314,355	4,21
696	n-BUTYL NONANOATE	C13H26O2	50623-57-9	520	Test	381,19	14,19	Train	392,224	25,22
697	n-BUTYL VALERATE	C9H18O2	591-68-4	459,65	Test	340,60	0,60	Train	343,282	3,28
698	ETHYL ISOVALERATE	C7H14O2	108-64-5	407,45	Train	301,86	2,71	Test	307,358	8,21
699	METHYL METHACRYLATE	C5H8O2	80-62-6	373,45	Train	278,79	5,37	Train	279,56	4,59
700	ETHYL METHACRYLATE	C6H10O2	97-63-2	390,15	Train	290,48	1,67	Train	295,818	3,67
701	n-PROPYL METHACRYLATE	C7H12O2	2210-28-8	414	Train	307,42	1,27	Train	311,24	5,09
702	DIOCTYL PHTHALATE	C24H38O4	117-81-7	657,15	Test	472,98	16,02	Test	503,649	14,65
703	DIISOCTYL PHTHALATE	C24H38O4	27554-26-3	694	Train	496,22	8,93	Train	503,89	1,26
704	1,2-BENZENEDICARBOXYLIC ACID, HEPTYL, NONYL ESTER	C24H38O4	19295-81-9	687	Test	496,97	6,03	Test	510,699	7,70
705	n-PENTYL ACETATE	C7H14O2	628-63-7	421,15	Test	317,63	7,48	Train	316,671	6,52
706	2-ETHYLHEXYL ACETATE	C10H20O2	103-09-3	472,92	Train	353,05	8,90	Train	350,935	6,79
707	BENZYL ACETATE	C9H10O2	140-11-4	487,15	Train	362,29	0,87	Train	365,696	2,55
708	ISOBUTYL ISOBUTYRATE	C8H16O2	97-85-8	420,45	Train	308,22	2,93	Train	302,259	8,89
709	ISOPENTYL ISOVALERATE	C10H20O2	659-70-1	467,15	Train	341,37	8,22	Test	342,939	9,79
710	METHYL OLEATE	C19H36O2	112-62-9	617	Train	443,23	10,77	Train	453,893	0,11
711	n-HEXYL ACETATE	C8H16O2	142-92-7	444,65	Train	334,49	6,49	Test	331,053	3,05
712	BENZYL BENZOATE	C14H12O2	120-51-4	596,39	Train	431,89	0,89	Train	427,735	3,27
713	n-BUTYL BENZOATE	C11H14O2	136-60-7	523,15	Train	385,49	6,34	Train	378,407	0,74
714	n-HEPTYL ACETATE	C9H18O2	112-06-1	465,55	Test	349,30	6,30	Test	344,738	1,74
715	n-OCTYL ACETATE	C10H20O2	112-14-1	484,45	Train	362,52	6,37	Train	357,776	1,63

716	n-NONYL ACETATE	C11H22O2	143-13-5	497,1	Train	371,01	1,14	Train	370,211	1,94
717	n-DECYL ACETATE	C12H24O2	112-17-4	517,15	Train	384,96	1,55	Test	382,085	4,42
718	DIISODECYL PHTHALATE	C28H46O4	26761-40-0	740	Test	523,09	4,09	Train	529,173	10,17
719	DI-n-HEPTYL PHTHALATE	C22H34O4	3648-21-3	663	Test	482,27	4,27	Test	497,194	19,19
720	METHYL SALICYLATE	C8H8O3	119-36-8	493,9	Train	379,95	10,95	Test	393,206	24,21
721	DI-n-NONYL PHTHALATE	C26H42O4	84-76-4	707	Test	508,58	8,08	Test	523,319	22,82
722	DI-n-PROPYL PHTHALATE	C14H18O4	131-16-8	590,65	Test	439,04	4,89	Train	432,166	1,98
723	DIISOBUTYL PHTHALATE	C16H22O4	84-69-5	593,15	Train	433,66	10,84	Test	441,199	3,30
724	DIMETHYL ISOPHTHALATE	C10H10O4	1459-93-4	555,15	Train	414,97	3,82	Train	397,843	13,31
725	DI-n-DECYL PHTHALATE	C28H46O4	84-77-5	736	Test	526,47	11,47	Train	535,138	20,14
726	DI-n-UNDECYL PHTHALATE	C30H50O4	3648-20-2	783	Train	556,91	16,91	Train	546,231	6,23
727	DI-n-HEXYL PHTHALATE	C20H30O4	84-75-3	640	Train	468,10	1,95	Train	482,709	16,56
728	DIMETHYL TEREPHTHALATE	C10H10O4	120-61-6	559,2	Train	422,66	8,51	Test	405,81	8,34
729	DI-n-OCTYL TEREPHTHALATE	C24H38O4	4654-26-6	698	Test	504,92	6,08	Train	510,699	0,30
730	n-BUTYL STEARATE	C22H44O2	123-95-5	623,15	Train	445,52	12,37	Test	475,919	42,77
731	DIBUTYL SEBACATE	C18H34O4	109-43-3	622,15	Train	454,00	16,15	Test	467,793	2,36
732	n-BUTYL n-BUTYRATE	C8H16O2	109-21-7	438,15	Train	325,54	2,39	Test	329,524	6,37
733	2-ETHYLHEXYL ACRYLATE	C11H20O2	103-11-7	489,15	Train	361,19	6,04	Test	361,73	6,58
734	ETHYLENE GLYCOL DIACETATE	C6H10O4	111-55-7	463,65	Train	355,47	5,68	Train	348,772	12,38
735	ISOBUTYL METHACRYLATE	C8H14O2	97-86-9	428,15	Train	315,32	1,17	Train	318,47	4,32
736	n-BUTYL METHACRYLATE	C8H14O2	97-88-1	436,15	Test	323,01	1,01	Test	325,889	3,89
737	METHYL BENZOATE	C8H8O2	93-58-3	472,65	Test	351,09	1,41	Train	340,505	12,00
738	ETHYL BENZOATE	C9H10O2	93-89-0	486,55	Train	360,45	0,70	Test	353,741	7,41
739	DIETHYL OXALATE	C6H10O4	95-92-1	458,61	Train	357,95	9,80	Train	358,442	10,29
740	DIETHYL MALONATE	C7H12O4	105-53-3	472,05	Test	361,18	3,03	Train	363,541	5,39
741	METHYL DECANOATE	C11H22O2	110-42-9	505	Train	372,20	5,05	Train	368,887	1,74
742	ISOPROPYL MYRISTATE	C17H34O2	110-27-0	588	Test	423,87	0,63	Test	428,328	3,83
743	DIMETHYL-1,4-CYCLOHEXANEDICARBOXYLATE	C10H16O4	94-60-0	539,15	Train	401,83	0,17	Train	402	0,00
744	TRI-n-HEPTYL TRIMELLITATE	C30H48O6	1528-48-9	815	Train	582,02	31,02	Train	561,19	10,19
745	1,2-BENZENE DICARBOXYLIC ACID, HEPTYL, UNDECYL ESTER	C26H42O4	65185-88-8	717	Train	515,78	2,22	Test	523,319	5,32
746	DIMETHYL ETHER	C2H6O	115-10-6	248,31	Train	187,16	5,84	Train	196,552	3,55
747	DIETHYL ETHER	C4H10O	60-29-7	307,58	Test	229,61	1,46	Test	236,056	7,91
748	DIISOPROPYL ETHER	C6H14O	108-20-3	341,45	Train	252,73	7,73	Train	257,095	12,10
749	DI-n-BUTYL ETHER	C8H18O	142-96-1	414,15	Test	305,88	3,88	Train	304,651	2,65
750	METHYL tert-BUTYL ETHER	C5H12O	1634-04-4	328,2	Test	242,30	1,85	Test	238,978	5,17
751	DI-sec-BUTYL ETHER	C8H18O	6863-58-7	394,2	Train	292,04	6,39	Train	290,487	4,84
752	METHYL ETHYL ETHER	C3H8O	540-67-0	280,5	Train	210,88	25,12	Train	217,408	18,59
753	METHYL n-PROPYL ETHER	C4H10O	557-17-5	312,2	Train	234,10	0,10	Train	237,057	3,06
754	ISOPROPYL BUTYL ETHER	C7H16O	1860-27-1	382,3	Train	281,54	1,54	Train	280,454	0,45
755	METHYL ISOBUTYL ETHER	C5H12O	625-44-5	331,7	Train	246,71	0,71	Train	246,224	0,22
756	METHYL ISOPROPYL ETHER	C4H10O	598-53-8	303,92	Test	226,65	0,35	Train	227,126	0,13
757	DI-n-HEXYL ETHER	C12H26O	112-58-3	498,85	Train	364,47	9,82	Train	360,329	5,68
758	METHYL n-BUTYL ETHER	C5H12O	628-28-4	343,31	Test	256,75	2,75	Train	255,6	1,60
759	DIVINYL ETHER	C4H6O	109-93-3	301,45	Train	202,79	23,36	Train	197,882	28,27
760	ETHYL PROPYL ETHER	C5H12O	628-32-0	337,01	Test	250,91	2,24	Train	254,654	1,50
761	DINONYL ETHER	C18H38O	2456-27-1	591	Test	424,67	9,33	Train	426,62	7,38
762	PHTHALAN	C8H8O	496-14-0	465,15	Train	344,88	0,12	Train	344,495	0,51
763	ANETHOLE	C10H12O	104-46-1	508,45	Train	372,17	10,02	Train	377,963	15,81
764	1,4-DIOXANE	C4H8O2	123-91-1	374,47	Train	287,87	3,72	Test	289,208	5,06
765	TRIOXANE	C3H6O3	110-88-3	387,65	Test	305,68	12,47	Train	302,614	15,54
766	DI-tert-BUTYL ETHER	C8H18O	6163-66-2	380,4	Train	273,54	2,11	Train	267,112	8,54
767	DI-n-OCTYL ETHER	C16H34O	629-82-3	559,65	Test	404,40	7,60	Train	406,424	5,58
768	DI-n-PENTYL ETHER	C10H22O	693-65-2	459,9	Train	337,84	7,69	Train	333,865	3,72
769	METHYL sec-BUTYL ETHER	C5H12O	6795-87-5	332,15	Test	247,81	4,81	Train	245,892	2,89
770	tert-BUTYL ETHYL ETHER	C6H14O	637-92-3	345,6	Test	253,29	0,14	Test	256,475	3,33
771	METHYL n-PENTYL ETHER	C6H14O	628-80-8	372	Train	277,47	4,47	Train	273,128	0,13
772	ETHYL tert-PENTYL ETHER	C7H16O	919-94-8	374,57	Train	270,63	0,37	Test	272,572	1,57
773	METHYLAL	C3H8O2	109-87-5	315	Train	238,54	2,61	Train	243,378	2,23

774	ACETAL	C6H14O2	105-57-7	376,65	Test	279,83	6,32	Train	284,823	1,33
775	ISOPROPYL ISOBUTYL ETHER	C7H16O	78448-33-6	371,2	Test	271,84	0,84	Train	271,797	0,80
776	ETHYL ISOBUTYL ETHER	C6H14O	627-02-1	354,25	Train	261,59	0,59	Train	263,342	2,34
777	1,2-EPOXY-3-PHENOXYPROPANE	C9H10O2	122-60-1	516,65	Train	389,49	2,49	Train	385,263	1,74
778	METHYL HYDROPEROXIDE	CH4O2	3031-73-0	363,15	Train	291,24	24,76	Train	300,195	15,81
779	ETHYL HYDROPEROXIDE	C2H6O2	3031-74-1	368,15	Train	294,56	11,09	Train	315,395	9,75
780	3,5-DIMETHYLBENZOFURAN	C10H10O	10410-35-2	491,6	Train	359,90	2,90	Train	358,681	1,68
781	1,2-EPOXY-2-METHYLPROPANE	C4H8O	558-30-5	324,65	Train	241,35	0,20	Train	241,15	0,00
782	ETHYLENE OXIDE	C2H4O	75-21-8	283,6	Test	213,25	11,75	Test	216,259	8,74
783	1,2-PROPYLENE OXIDE	C3H6O	75-56-9	307,65	Train	233,87	2,14	Train	248,071	12,07
784	1,3-PROPYLENE OXIDE	C3H6O	503-30-0	321	Train	241,02	4,98	Test	237,105	8,90
785	ETHYL VINYL ETHER	C4H8O	109-92-2	308,7	Train	230,48	1,52	Train	232,948	0,95
786	DI-n-PROPYL ETHER	C6H14O	111-43-3	363,23	Test	269,71	3,71	Train	272,233	6,23
787	BUTYL VINYL ETHER	C6H12O	111-34-2	366,97	Train	272,53	0,53	Train	269,458	2,54
788	n-BUTYL ETHYL ETHER	C6H14O	628-81-9	365,35	Train	271,29	2,29	Train	272,233	3,23
789	BIS(alpha-METHYLBENZYL) ETHER	C16H18O	93-96-9	559,45	Train	374,91	33,24	Train	386,917	21,23
790	n-PROPYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C9H12O2	60956-33-4	555,3	Train	434,35	3,35	Train	414,757	16,24
791	n-BUTYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C10H14O2	99172-63-1	574,9	Train	448,59	4,59	Train	424,724	19,28
792	TETRAHYDROPYRAN	C5H10O	142-68-7	361,15	Train	270,36	5,36	Train	275,183	10,18
793	TRIETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	C8H18O4	112-49-2	489,15	Train	367,77	15,38	Test	359,712	23,44
794	1,2-DIMETHOXYETHANE	C4H10O2	110-71-4	357,75	Train	270,22	1,26	Test	261,572	9,91
795	DIETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	C6H14O3	111-96-6	435,65	Train	328,30	1,85	Test	314,755	15,40
796	TETRAETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	C10H22O5	143-24-8	548,95	Train	411,78	2,37	Train	398,214	15,94
797	DIETHYLENE GLYCOL DIETHYL ETHER	C8H18O3	112-36-7	462,15	Train	343,37	0,78	Test	341,592	2,56
798	DIETHYLENE GLYCOL DI-n-BUTYL ETHER	C12H26O3	112-73-2	529,15	Test	388,96	2,19	Test	390,821	0,33
799	BENZYL ETHYL ETHER	C9H12O	539-30-0	458,15	Train	336,19	1,19	Train	342,552	7,55
800	ANISOLE	C7H8O	100-66-3	426,73	Train	317,41	1,25	Train	321,879	3,23
801	PHENETOLE	C8H10O	103-73-1	443,15	Train	328,74	0,74	Train	336,006	8,01
802	DIBENZYL ETHER	C14H14O	103-50-4	561,45	Train	408,58	0,43	Train	408,15	0,00
803	ALLYL GLYCIDYL ETHER	C6H10O2	106-92-3	427,15	Train	322,10	0,95	Train	316,705	4,45
804	DIPHENYL ETHER	C12H10O	101-84-8	531,46	Train	388,24	0,09	Train	388,15	0,00
805	1-METHYL-3-(METHYLETHOXY)BENZENE	C10H14O	19177-04-9	469,65	Train	342,88	0,88	Train	358,527	16,53
806	2,3,4,5,2',3',4',5'-OCTAHYDRO-BIFURYL-(3,3')	C8H14O2	106538-38-9	497	Train	370,89	5,89	Train	349,974	15,03
807	1,1-DIMETHOXYETHANE	C4H10O2	534-15-6	337,45	Test	254,29	1,86	Train	252,046	4,10
808	PENTAETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	C12H26O6	1191-87-3	615,1	Train	460,33	10,67	Test	431,558	39,44
809	METHYL VINYL ETHER	C3H6O	107-25-5	278,65	Train	209,52	7,63	Train	214,122	3,03
810	1,2-EPOXYBUTANE	C4H8O	106-88-7	336,57	Train	255,21	2,94	Train	265,966	7,82
811	CUMENE HYDROPEROXIDE	C9H12O2	80-15-9	442,7	Train	342,00	14,15	Train	399,375	43,23
812	t-BUTYL HYDROPEROXIDE	C4H10O2	75-91-2	388,15	Train	305,55	5,73	Train	331,259	31,44
813	CYCLOHEXYL HYDROPEROXIDE	C6H12O2	766-07-4	490	Train	382,25	1,25	Train	372,564	8,44
814	DICUMYL PEROXIDE	C18H22O2	80-43-3	669	Train	357,09	12,94	Train	380,413	36,26
815	p-MENTHANE HYDROPEROXIDE	C10H20O2	80-47-7	532	Train	404,25	3,76	Train	411,567	3,57
816	2,5-DIHYDROFURAN	C4H6O	1708-29-8	339	Train	254,24	2,92	Test	255,632	1,52
817	FURAN	C4H4O	110-00-9	304,5	Train	228,44	8,57	Train	254,55	17,55
818	TETRAHYDROFURAN	C4H8O	109-99-9	339,12	Test	254,24	4,91	Train	256,71	2,44
819	DIBENZOFURAN	C12H8O	132-64-9	558,31	Train	400,82	2,33	Train	399,895	3,26
820	DI-t-BUTYL PEROXIDE	C8H18O2	110-05-4	384,15	Train	277,07	0,08	Train	280,432	3,28
821	n-BUTYLHYDROPEROXIDE	C4H10O2	4813-50-7	405	Train	322,52	4,48	Train	343,583	16,58
822	m-DIISOPROPYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C12H18O2	26762-93-6	620	Train	472,72	0,28	Train	424,507	48,49
823	2-METHYLBENZOFURAN	C9H8O	4265-25-2	470,15	Train	344,32	4,17	Train	343,812	3,66
824	p-DIISOPROPYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C12H18O2	98-49-7	616	Train	474,74	6,74	Train	431,65	36,35
825	ALLYL-TERT-BUTYLPEROXIDE	C7H14O2	39972-78-6	389,94	Train	284,87	3,13	Train	285,054	2,95
826	1-tert-BUTOXY-2-[2-(tert-BUTOXY)PROPOXY]PROPANE	C14H30O3	00-00-00	555,4	Train	396,45	1,55	Train	382,868	15,13
827	1,2-DIMETHOXYPROPANE	C5H12O2	7778-85-0	366,15	Train	275,20	2,05	Train	269,766	3,38
828	sec-BUTYL-tert-BUTYL ETHER	C8H18O	32970-45-9	387,15	Train	283,77	5,77	Train	284,494	6,49
829	ISOBUTYL-tert-BUTYL ETHER	C8H18O	33021-02-2	386,4	Test	280,04	2,04	Test	282,131	4,13
830	2-METHYL-1,3-DIOXOLANE	C4H8O2	497-26-7	355,15	Train	272,67	1,74	Train	281,753	10,82
831	METHYL CHLORIDE	CH3Cl	74-87-3	248,95	Test	192,18	10,82	Test	196,356	6,64
832	ETHYL CHLORIDE	C2H5Cl	75-00-3	285,45	Train	218,60	4,55	Train	233,954	10,80

833	VINYL CHLORIDE	C2H3Cl	75-01-4	259,25	Train	200,30	4,70	Train	210,83	5,83
834	1,4-DICHLORO-trans-2-BUTENE	C4H6Cl2	110-57-6	429,26	Train	333,45	7,30	Train	324,896	1,25
835	cis-1,3-DICHLOROPROPENE	C3H4Cl2	10061-01-5	377,45	Train	297,36	3,21	Train	294,055	0,10
836	trans-1,3-DICHLOROPROPENE	C3H4Cl2	10061-02-6	385,15	Train	303,43	3,28	Train	294,055	6,10
837	1,4-DICHLOROBUTANE	C4H8Cl2	110-56-5	428,25	Train	333,74	8,59	Train	320,548	4,60
838	1,5-DICHLOROPENTANE	C5H10Cl2	628-76-2	456,16	Train	354,61	11,61	Test	334,741	8,26
839	DICHLOROMETHANE	CH2Cl2	75-09-2	312,9	Train	246,93	18,07	Train	258,533	6,47
840	1,1-DICHLOROETHANE	C2H4Cl2	75-34-3	330,45	Train	264,63	1,48	Train	265,196	2,05
841	1,2-DICHLOROETHANE	C2H4Cl2	107-06-2	356,59	Train	279,25	6,75	Train	289,896	3,90
842	1,1,2-TRICHLOROETHANE	C2H3Cl3	79-00-5	387	Train	316,40	3,40	Train	316,186	3,19
843	1,2-DICHLOROPROPANE	C3H6Cl2	78-87-5	369,52	Train	285,11	1,04	Train	288,831	2,68
844	1,1,1-TRICHLOROETHANE	C2H3Cl3	71-55-6	347,23	Train	290,07	12,07	Train	291,737	13,74
845	1,1,1,2-TETRACHLOROETHANE	C2H2Cl4	630-20-6	403,65	Train	343,75	12,75	Train	338,686	7,69
846	ISOPROPYL CHLORIDE	C3H7Cl	75-29-6	308,85	Train	232,19	5,96	Train	233,029	5,12
847	PROPARGYL CHLORIDE	C3H3Cl	624-65-7	331	Train	251,74	7,26	Train	254,469	4,53
848	1,2,3-TRICHLOROPROPANE	C3H5Cl3	96-18-4	430	Train	339,18	7,82	Train	336,215	10,79
849	ISOBUTYL CHLORIDE	C4H9Cl	513-36-0	342	Train	259,20	3,20	Train	261,41	5,41
850	tert-BUTYL CHLORIDE	C4H9Cl	507-20-0	323,75	Train	241,07	0,07	Train	241	0,00
851	1,2-DICHLOROBUTANE	C4H8Cl2	616-21-7	397,15	Train	305,67	7,02	Train	304,609	5,96
852	2,3-DICHLOROBUTANE	C4H8Cl2	7581-97-7	392,65	Train	295,38	4,23	Train	294,639	3,49
853	TRICHLOROETHYLENE	C2HCl3	79-01-6	360,1	Train	292,99	12,16	Train	294,429	10,72
854	3-CHLOROPROPENE	C3H5Cl	107-05-1	318,3	Train	242,36	1,79	Train	250,508	6,36
855	HEXACHLORO-1,3-BUTADIENE	C4Cl6	87-68-3	486,15	Train	402,07	13,07	Train	408,774	19,77
856	BENZYL CHLORIDE	C7H7Cl	100-44-7	452,55	Train	334,68	1,53	Train	328,376	4,77
857	3-CHLORO-o-XYLENE	C8H9Cl	608-23-1	461,65	Train	343,63	2,37	Train	338,721	7,28
858	4-CHLORO-o-XYLENE	C8H9Cl	615-60-1	465,65	Test	343,00	2,85	Train	336,921	3,23
859	MONOCHLOROBENZENE	C6H5Cl	108-90-7	404,87	Train	303,62	2,47	Test	307,988	6,84
860	o-DICHLOROBENZENE	C6H4Cl2	95-50-1	453,57	Train	347,11	8,11	Train	334,54	4,46
861	m-DICHLOROBENZENE	C6H4Cl2	541-73-1	446,23	Train	339,86	3,71	Train	342,994	6,84
862	p-DICHLOROBENZENE	C6H4Cl2	106-46-7	447,21	Train	344,29	5,29	Train	352,794	13,79
863	HEXACHLOROBENZENE	C6Cl6	118-74-1	582,55	Train	492,28	22,72	Test	465,395	49,61
864	BENZOTRICHLORIDE	C7H5Cl3	98-07-7	486,65	Train	359,94	4,06	Train	375,008	11,01
865	o-CHLOROTOLUENE	C7H7Cl	95-49-8	432,3	Train	323,39	7,24	Test	316,906	0,76
866	p-CHLOROTOLUENE	C7H7Cl	106-43-4	435,65	Train	327,92	5,77	Train	336,304	14,15
867	2,4-DICHLOROTOLUENE	C7H6Cl2	95-73-8	474,25	Train	357,59	5,44	Train	353,375	1,23
868	cis-1,2-DICHLOROETHYLENE	C2H2Cl2	156-59-2	333,65	Train	266,49	10,51	Train	259,692	17,31
869	trans-1,2-DICHLOROETHYLENE	C2H2Cl2	156-60-5	320,85	Train	256,27	10,88	Train	259,692	7,46
870	CHLOROPRENE	C4H5Cl	126-99-8	332,55	Train	253,66	0,51	Train	250,853	2,30
871	PROPYL CHLORIDE	C3H7Cl	540-54-5	319,67	Test	244,19	2,04	Train	252,669	10,52
872	n-BUTYL CHLORIDE	C4H9Cl	109-69-3	351,58	Train	267,88	4,13	Train	270,356	6,61
873	sec-BUTYL CHLORIDE	C4H9Cl	78-86-4	341,25	Train	256,66	1,49	Train	251,47	6,68
874	1-CHLOROPENTANE	C5H11Cl	543-59-9	380,65	Train	289,29	5,14	Train	287,096	2,95
875	1-CHLORONAPHTHALENE	C10H7Cl	90-13-1	532,45	Train	394,08	0,08	Test	387,346	6,80
876	1,1-DICHLOROETHYLENE	C2H2Cl2	75-35-4	304,71	Train	241,54	6,61	Train	250,446	2,30
877	1,2,4-TRICHLOROBENZENE	C6H3Cl3	120-82-1	486,15	Test	374,89	3,26	Train	368,889	9,26
878	1,4-DICHLORO-cis-2-BUTENE	C4H6Cl2	1476-11-5	425,65	Train	330,64	2,49	Train	324,896	3,25
879	CYANOGEN CHLORIDE	CClN	506-77-4	286	Train	232,79	19,21	Train	244,99	7,01
880	2-CHLOROPROPENE	C3H5Cl	557-98-2	295,8	Train	226,36	12,79	Train	226,779	12,37
881	m-CHLOROBENZOYL CHLORIDE	C7H4Cl2O	618-46-2	498	Train	389,87	14,87	Train	395,634	20,63
882	3,4-DICHLORO-1-BUTENE	C4H6Cl2	760-23-6	388	Train	300,16	0,99	Train	306,964	5,81
883	(Z)-1,3-DICHLORO-2-BUTENE	C4H6Cl2	10075-38-4	401,15	Train	311,18	11,03	Train	306,811	6,66
884	BENZYL DICHLORIDE	C7H6Cl2	98-87-3	487	Train	369,15	8,00	Train	348,752	12,40
885	CHLOROFUOROMETHANE	CH2ClF	593-70-4	264,06	Train	211,48	13,52	Train	223,827	1,17
886	1,4-DIBROMOBENZENE	C6H4Br2	106-37-6	493,55	Train	373,07	3,07	Train	374,364	4,36
887	2-CHLORO-1,1,1-TRIFLUOROETHANE	C2H2ClF3	75-88-7	279,25	Train	226,51	1,50	Train	241,16	13,16
888	PENTAFLUOROETHYL METHYL ETHER	C3H3F5O	22410-44-2	278,7	Train	226,14	1,14	Train	227,519	2,52
889	2-CHLORO-1,1-DIFLUOROETHYLENE	C2HClF2	359-10-4	254,55	Train	205,69	2,31	Train	214,619	6,62
890	METHYL FLUORIDE	CH3F	593-53-3	194,82	Train	152,71	6,29	Train	154,528	4,47
891	DIFLUOROMETHANE	CH2F2	75-10-5	221,5	Train	177,87	12,13	Train	183,332	6,67
892	ETHYL FLUORIDE	C2H5F	353-36-6	235,45	Train	180,84	2,16	Train	194,705	11,71

893	1,1,1-TRIFLUOROETHANE	C2H3F3	420-46-2	225,81	Train	179,35	4,65	Train	175,372	8,63
894	1,1,1,3,3,3-HEXAFLUOROPROPANE	C3H2F6	690-39-1	272,45	Train	227,93	5,93	Train	205,507	16,49
895	HEXAFLUORO-1,3-BUTADIENE	C4F6	685-63-2	279	Train	226,10	2,10	Train	214,944	9,06
896	1,1-DIFLUOROETHYLENE	C2H2F2	75-38-7	187,5	Train	147,56	3,44	Train	157,716	6,72
897	TETRAFLUROETHYLENE	C2F4	116-14-3	197,51	Train	158,71	7,29	Train	163,967	2,03
898	1,1-DIFLUOROETHANE	C2H4F2	75-37-6	249,13	Train	194,99	3,01	Train	195,594	2,41
899	BROMOMETHANE	CH3Br	74-83-9	276,66	Train	212,69	17,31	Train	236,774	6,77
900	BROMOETHANE	C2H5Br	74-96-4	311,49	Train	238,87	11,28	Train	255,332	5,18
901	1,1,2,2-TETRABROMOETHANE	C2H2Br4	79-27-6	516,65	Train	422,38	7,62	Train	416,081	13,92
902	1-BROMOPROPANE	C3H7Br	106-94-5	344,12	Train	263,22	8,78	Train	272,875	0,88
903	2-BROMOPROPANE	C3H7Br	75-26-3	332,56	Train	253,04	1,04	Train	264,001	12,00
904	1-BROMOBUTANE	C4H9Br	109-65-9	374,41	Train	285,67	2,67	Train	289,482	6,48
905	1-BROMOHEPTANE	C7H15Br	629-04-9	451,95	Train	342,19	8,04	Train	334,386	0,24
906	1,1-DIBROMOETHANE	C2H4Br2	557-91-5	381,15	Train	298,61	7,39	Train	317,085	11,09
907	1,2-DIBROMOETHANE	C2H4Br2	106-93-4	404,51	Train	317,60	1,40	Train	324,795	5,80
908	m-DIBROMOBENZENE	C6H4Br2	108-36-1	491,15	Train	367,16	1,01	Train	365,332	0,82
909	BROMOBENZENE	C6H5Br	108-86-1	429,24	Train	318,86	5,41	Train	320,859	3,40
910	METHYL IODIDE	CH3I	74-88-4	315,6	Train	246,33	11,67	Train	265,173	7,17
911	ETHYL IODIDE	C2H5I	75-03-6	345,6	Train	269,09	0,09	Train	282,188	13,19
912	n-PROPYL IODIDE	C3H7I	107-08-4	375,6	Train	291,73	7,73	Train	298,309	14,31
913	IODOBENZENE	C6H5I	591-50-4	461,6	Train	343,16	0,16	Train	343	0,00
914	DIIDOMETHANE	CH2I2	75-11-6	455,15	Train	368,68	16,32	Train	353,503	31,50
915	1-BROMONAPHTHALENE	C10H7Br	90-11-9	554,25	Train	406,24	0,24	Train	397,006	8,99
916	METHYLAMINE	CH5N	74-89-5	266,82	Train	209,89	7,11	Train	217,361	0,36
917	DIMETHYLAMINE	C2H7N	124-40-3	280,03	Train	215,99	7,16	Train	220,397	2,75
918	TRIMETHYLAMINE	C3H9N	75-50-3	276,02	Train	205,72	1,28	Train	217,711	10,71
919	ETHYLAMINE	C2H7N	75-04-7	289,73	Train	219,72	7,28	Train	237,905	10,91
920	2-METHYL-2-AMINOBTUTANE	C5H13N	594-39-8	350,05	Train	258,06	0,94	Train	255,912	3,09
921	TRIETHYLAMINE	C6H15N	121-44-8	361,92	Train	263,81	1,66	Train	255,218	6,93
922	DI-n-PROPYLAMINE	C6H15N	142-84-7	382	Test	284,17	3,52	Train	283,963	3,31
923	N,N-DIMETHYL-n-BUTYLAMINE	C6H15N	927-62-8	367,15	Train	271,47	1,32	Train	273,382	3,23
924	N,N-DIETHYLMETHYLAMINE	C5H13N	616-39-7	338,15	Train	250,69	0,54	Train	255,869	5,72
925	DIETHYLAMINE	C4H11N	109-89-7	328,6	Test	245,74	0,59	Train	249,172	4,02
926	n-PROPYLAMINE	C3H9N	107-10-8	321	Test	242,81	3,19	Train	256,401	10,40
927	n-BUTYLAMINE	C4H11N	109-73-9	350,55	Train	264,47	1,68	Test	273,886	7,74
928	n-PENTYLAMINE	C5H13N	110-58-7	377,65	Train	284,18	4,03	Test	290,44	10,29
929	ISOBUTYLAMINE	C4H11N	78-81-9	340,88	Train	255,79	4,36	Train	265,041	4,89
930	CYCLOPROPYLAMINE	C3H7N	765-30-0	323,15	Train	242,17	5,98	Train	247,271	0,88
931	DIISOBUTYLAMINE	C8H19N	110-96-3	412,25	Train	301,65	4,30	Train	299,594	2,24
932	ISOPROPYLAMINE	C3H9N	75-31-0	304,92	Train	230,77	5,38	Train	236,662	0,51
933	n-TETRADECYLAMINE	C14H31N	2016-42-4	564,45	Train	414,71	6,71	Train	407,443	0,56
934	PYRROLE	C4H5N	109-97-7	403	Test	302,91	9,09	Train	292,999	19,00
935	METHYL DIETHANOLAMINE	C5H13NO2	105-59-9	520,7	Train	415,82	4,67	Train	411,337	0,19
936	MONOETHANOLAMINE	C2H7NO	141-43-5	443,15	Train	351,62	14,93	Train	346,812	19,74
937	DIETHANOLAMINE	C4H11NO2	111-42-2	541,54	Train	442,77	2,38	Train	430,596	14,55
938	TRIETHANOLAMINE	C6H15NO3	102-71-6	608,54	Train	495,70	32,55	Train	463,522	0,37
939	sec-BUTYLAMINE	C4H11N	13952-84-6	336,15	Train	254,51	0,36	Train	254,904	0,75
940	tert-BUTYLAMINE	C4H11N	75-64-9	317,55	Train	237,36	1,36	Train	238,931	2,93
941	CYCLOHEXYLAMINE	C6H13N	108-91-8	407,65	Train	304,13	4,48	Train	301,154	1,50
942	DEHYDROABIETYLAMINE	C20H31N	1446-61-3	660	Train	467,39	3,39	Train	465,516	1,52
943	HEXAMETHYLENEDIAMINE	C6H16N2	124-09-4	473	Train	357,15	3,00	Train	355,646	1,50
944	BENZYLAMINE	C7H9N	100-46-9	457,65	Train	338,37	0,22	Train	338,15	0,00
945	TRIETHYLENEDIAMINE	C6H12N2	280-57-9	447,15	Train	339,74	0,26	Train	340	0,00
946	o-TOLUIDINE	C7H9N	95-53-4	473,49	Train	353,63	4,52	Train	359,672	1,52
947	m-TOLUIDINE	C7H9N	108-44-1	476,52	Train	354,12	4,88	Train	367,39	8,39
948	p-TOLUIDINE	C7H9N	106-49-0	473,57	Train	355,89	4,11	Train	376,352	16,35
949	TRIETHYLENETETRAMINE	C6H18N4	112-24-3	539,65	Train	408,71	0,56	Train	416,111	7,96
950	ALLYLAMINE	C3H7N	107-11-9	326,45	Train	246,13	5,88	Train	254,265	2,27
951	ETHYLENEDIAMINE	C2H8N2	107-15-3	390,41	Train	307,17	3,83	Train	309,201	1,80
952	ETHYLENEIMINE	C2H5N	151-56-4	329	Test	247,86	14,18	Train	259,281	2,76

953	DIISOPROPYLAMINE	C6H15N	108-18-9	357,05	Train	266,07	0,08	Train	266,15	0,00
954	DI-n-BUTYLAMINE	C8H19N	111-92-2	432	Test	319,66	4,66	Test	315,203	0,20
955	PIPERIDINE	C5H11N	110-89-4	379,55	Test	284,67	4,52	Train	311,268	31,12
956	p-NITRODIPHENYLAMINE	C12H10N2O 2	836-30-6	600	Train	451,31	0,31	Train	490,303	39,30
957	p-AMINODIPHENYLAMINE	C12H12N2	101-54-2	627,15	Train	472,65	6,15	Train	482,258	15,76
958	QUINOLINE	C9H7N	91-22-5	510,31	Train	373,01	0,99	Train	362,717	11,28
959	FORMANILIDE	C7H7NO	103-70-8	544,15	Train	416,55	0,45	Train	417	0,00
960	N-AMINOETHYL PIPERAZINE	C6H15N3	140-31-8	493,2	Train	370,99	3,99	Train	379,149	12,15
961	1,2-PROPANEDIAMINE	C3H10N2	78-90-0	392,45	Train	309,05	2,90	Train	307,941	1,79
962	N,N-DIETHYLANILINE	C10H15N	91-66-7	489,42	Train	355,40	2,75	Train	371,493	13,34
963	N-METHYLPYRROLE	C5H7N	96-54-8	385,89	Train	285,04	3,11	Train	274,401	13,75
964	PYRAZINE	C4H4N2	290-37-9	389,15	Test	293,05	11,95	Test	308,134	3,13
965	DIPHENYLAMINE	C12H11N	122-39-4	575,15	Train	422,53	3,48	Train	428,49	2,49
966	PHENYLHYDRAZINE	C6H8N2	100-63-0	516,65	Train	402,35	12,35	Train	381,081	8,92
967	MELAMINE	C3H6N6	108-78-1	698	Test	571,25	0,76	Test	503,772	68,23
968	QUINALDINE	C10H9N	91-63-4	520,91	Test	380,25	2,90	Test	422,663	39,51
969	NITROMETHANE	CH3NO2	75-52-5	374,35	Train	306,50	1,65	Train	308,15	0,00
970	NITROETHANE	C2H5NO2	79-24-3	387,22	Train	296,63	6,52	Train	295,531	7,62
971	1-NITROPROPANE	C3H7NO2	108-03-2	404,33	Train	308,95	0,80	Train	310,967	2,82
972	2-NITROPROPANE	C3H7NO2	79-46-9	393,4	Train	300,78	0,22	Train	301	0,00
973	HYDRACRYLONITRILE	C3H5NO	109-78-4	494,15	Train	401,11	1,04	Train	402,15	0,00
974	MORPHOLINE	C4H9NO	110-91-8	401,15	Train	308,95	0,80	Test	323,727	15,58
975	PYRROLIDINE	C4H9N	123-75-1	359,72	Train	270,20	5,80	Train	294,909	18,91
976	N-METHYLPYRROLIDINE	C5H11N	120-94-5	352,3	Train	260,05	1,05	Train	276,43	17,43
977	1-NITROBUTANE	C4H9NO2	627-05-4	425,92	Train	324,63	4,48	Train	325,63	5,48
978	ACETONITRILE	C2H3N	75-05-8	354,75	Train	280,65	5,50	Train	219,334	55,82
979	PROPIONITRILE	C3H5N	107-12-0	370,5	Train	279,60	6,40	Test	311,05	25,05
980	ACRYLONITRILE	C3H3N	107-13-1	350,45	Train	268,57	0,42	Train	280,387	12,24
981	METHACRYLONITRILE	C4H5N	126-98-7	363,45	Train	275,85	1,60	Train	293,293	19,04
982	SUCCINONITRILE	C4H4N2	110-61-2	540,15	Train	405,45	0,45	Train	405	0,00
983	ADIPONITRILE	C6H8N2	111-69-3	568,15	Train	430,12	1,88	Train	431,829	0,17
984	o-NITROTOLUENE	C7H7NO2	88-72-2	495,64	Train	369,45	9,55	Train	373,112	5,89
985	p-NITROTOLUENE	C7H7NO2	99-99-0	511,65	Train	383,76	4,76	Test	388,979	9,98
986	m-NITROTOLUENE	C7H7NO2	99-08-1	505	Train	374,54	0,46	Train	380,451	5,45
987	GLUTARONITRILE	C5H6N2	544-13-8	559,15	Train	424,40	2,40	Train	422,164	0,16
988	n-BUTYRONITRILE	C4H7N	109-74-0	390,75	Train	294,12	2,97	Train	325,709	34,56
989	VALERONITRILE	C5H9N	110-59-8	414,45	Test	311,14	3,99	Test	339,651	32,50
990	MALONONITRILE	C3H2N2	109-77-3	491,5	Train	391,87	6,72	Train	345,438	39,71
991	HEXANENITRILE	C6H11N	628-73-9	436,75	Train	327,03	10,88	Test	352,927	36,78
992	ISOBUTYRONITRILE	C4H7N	78-82-0	376,76	Train	274,31	7,17	Train	276,798	4,68
993	trans-CROTONITRILE	C4H5N	627-26-9	394,38	Train	301,77	2,77	Train	301,361	2,36
994	BENZONITRILE	C7H5N	100-47-0	464,15	Train	337,42	6,73	Train	340,62	3,53
995	PYRIDINE	C5H5N	110-86-1	388,41	Train	288,01	5,14	Train	285,756	7,39
996	ANILINE	C6H7N	62-53-3	457,15	Train	342,28	1,87	Train	352,031	7,88
997	2,4-TOLUENE DIISOCYANATE	C9H6N2O2	584-84-9	524,15	Train	394,50	5,65	Train	392,714	7,44
998	HEXAMETHYLENEIMINE	C6H13N	111-49-9	411,15	Train	307,91	6,76	Test	326,76	25,61
999	N-METHYLANILINE	C7H9N	100-61-8	469,02	Train	347,11	3,89	Train	352,395	1,40
1000	N,N-DIMETHYLANILINE	C8H11N	121-69-7	466,69	Train	340,76	7,39	Train	346,147	2,00
1001	2-METHYLPYRIDINE	C6H7N	109-06-8	402,55	Train	299,25	0,10	Train	299,15	0,00
1002	cis-CROTONITRILE	C4H5N	1190-76-7	380,6	Train	291,23	2,58	Train	301,361	12,71
1003	CYANOGEN	C2N2	460-19-5	251,9	Train	209,68	4,32	Train	264,93	50,93
1004	METHYL MERCAPTAN	CH4S	74-93-1	279,11	Train	217,53	0,47	Train	218	0,00
1005	ETHYL MERCAPTAN	C2H6S	75-08-1	308,15	Train	227,31	6,69	Train	244,541	10,54
1006	n-PROPYL MERCAPTAN	C3H8S	107-03-9	340,87	Train	250,77	2,38	Test	262,671	9,52
1007	tert-BUTYL MERCAPTAN	C4H10S	75-66-1	337,37	Train	249,08	0,07	Train	253,73	4,58
1008	ISOBUTYL MERCAPTAN	C4H10S	513-44-0	361,64	Test	263,83	0,32	Train	271,144	6,99
1009	sec-BUTYL MERCAPTAN	C4H10S	513-53-1	358,13	Train	263,79	0,21	Train	260,366	3,63
1010	n-HEXYL MERCAPTAN	C6H14S	111-31-9	425,81	Test	310,71	5,06	Train	311,473	5,82
1011	n-NONYL MERCAPTAN	C9H20S	1455-21-6	492,95	Train	356,74	5,59	Train	353,292	2,14

1012	n-OCTYL MERCAPTAN	C8H18S	111-88-6	472,19	Train	342,66	1,51	Test	340,033	1,12
1013	ISOPROPYL MERCAPTAN	C3H8S	75-33-2	325,71	Train	239,80	0,80	Train	242,437	3,44
1014	CYCLOHEXYL MERCAPTAN	C6H12S	1569-69-3	431,95	Train	312,53	0,38	Train	312,15	0,00
1015	BENZYL MERCAPTAN	C7H8S	100-53-8	472,03	Train	343,52	0,37	Train	343,15	0,00
1016	METHYL ETHYL SULFIDE	C3H8S	624-89-5	339,8	Train	253,73	4,42	Train	256,123	2,03
1017	METHYL n-PROPYL SULFIDE	C4H10S	3877-15-4	368,69	Train	274,58	1,58	Train	273,622	0,62
1018	METHYL t-BUTYL SULFIDE	C5H12S	6163-64-0	372,05	Train	272,76	2,61	Train	275,337	5,19
1019	METHYL t-PENTYL SULFIDE	C6H14S	13286-92-5	423	Train	305,72	0,72	Train	290,51	14,49
1020	DI-n-PROPYL SULFIDE	C6H14S	111-47-7	415,98	Test	304,70	0,45	Train	300,038	5,11
1021	DIETHYL SULFIDE	C4H10S	352-93-2	365,25	Train	268,99	5,84	Train	267,099	3,95
1022	ETHYL n-OCTYL SULFIDE	C10H22S	3698-94-0	505,54	Test	366,25	3,25	Train	356,546	6,45
1023	DIMETHYL SULFIDE	C2H6S	75-18-3	310,48	Train	232,45	4,70	Train	237,61	0,46
1024	THIOPHENE	C4H4S	110-02-1	357,31	Train	265,11	1,34	Train	279,658	13,21
1025	BENZOTHIOPHENE	C8H6S	95-15-8	494,05	Test	363,91	0,25	Train	370,169	6,02
1026	2-MERCAPTOBENZOTHAZOLE	C7H5NS2	149-30-4	496,15	Train	392,72	1,28	Train	394	0,00
1027	DIETHYL DISULFIDE	C4H10S2	110-81-6	427,13	Train	311,20	1,95	Train	315,014	1,86
1028	UNDECYL MERCAPTAN	C11H24S	5332-52-5	530,55	Train	381,81	2,19	Train	377,998	6,00
1029	n-DECYL MERCAPTAN	C10H22S	143-10-2	512,35	Test	369,74	1,41	Test	365,933	5,22
1030	n-PENTYL MERCAPTAN	C5H12S	110-66-7	399,79	Train	292,52	1,37	Test	296,063	4,91
1031	DIMETHYL DISULFIDE	C2H6S2	624-92-0	382,9	Train	286,84	1,31	Train	295,997	7,85
1032	DI-n-PROPYL DISULFIDE	C6H14S2	629-19-6	469	Train	339,82	0,67	Test	343,237	4,09
1033	4,6-DIMETHYLDIBENZOTHIOPHENE	C14H12S	1207-12-1	660,3	Train	474,34	2,66	Train	465,256	11,74
1034	DI-n-OCTYL SULFIDE	C16H34S	288761	601	Train	428,12	3,88	Test	423,719	8,28
1035	DICYCLOHEXYL SULFIDE	C12H22S	7133-46-2	559	Train	396,29	0,29	Train	396	0,00
1036	3-ETHYL-2,5-DIMETHYLTHIOPHENE	C8H12S	55735-23-4	456,15	Train	334,56	2,56	Train	327,517	4,48
1037	2-METHYL BENZOTHIOPHENE	C9H8S	1195-14-8	514,7	Train	375,80	10,36	Train	378,597	7,55
1038	THIAINDAN	C8H8S	4565-32-6	506,5	Test	369,87	1,87	Train	365,925	2,08
1039	2-METHYL THIAINDAN	C9H10S	6165-55-5	521,8	Train	379,91	4,91	Train	373,28	1,72
1040	n-DODECYL MERCAPTAN	C12H26S	112-55-0	547,75	Test	393,08	0,08	Train	389,527	3,47
1041	tert-OCTYL MERCAPTAN	C8H18S	141-59-3	428,65	Train	305,25	1,25	Train	304,17	0,17
1042	n-HEPTYL MERCAPTAN	C7H16S	1639-09-4	450,09	Train	327,53	3,88	Train	326,111	2,46
1043	DIALLYL SULFIDE	C6H10S	592-88-1	412,15	Train	299,82	1,17	Test	296,318	2,33
1044	n-BUTYL MERCAPTAN	C4H10S	109-79-5	371,61	Train	272,65	1,51	Train	279,819	5,67
1045	PHENYL MERCAPTAN	C6H6S	108-98-5	442,29	Train	328,32	0,17	Train	328,15	0,00
1046	TETRAHYDROTHIOPHENE	C4H8S	110-01-0	394,27	Test	292,34	1,34	Train	281,653	9,35
1047	DIMETHYL SULFOXIDE	C2H6OS	67-68-5	464	Train	360,43	0,57	Train	361	0,00
1048	SULFOLANE	C4H8O2S	126-33-0	560,45	Train	429,36	8,80	Train	425,316	12,83
1049	3-METHYL SULFOLANE	C5H10O2S	872-93-5	549,15	Train	419,54	0,46	Train	431,124	11,12
1050	DI-n-PROPYL SULFONE	C6H14O2S	598-03-8	543	Train	401,14	1,99	Train	397,263	1,89
1051	DI-n-BUTYL SULFONE	C8H18O2S	598-04-9	564	Train	414,41	1,74	Train	418,206	2,06
1052	ACETYL CHLORIDE	C2H3ClO	75-36-5	323,9	Test	255,70	13,46	Train	258,639	10,51
1053	CHLOROACETIC ACID	C2H3ClO2	79-11-8	462,5	Train	368,99	30,16	Test	370,047	29,10
1054	CHLOROACETYL CHLORIDE	C2H2Cl2O	79-04-9	379,15	Test	301,05	14,95	Test	299,87	16,13
1055	DICHLOROACETYL CHLORIDE	C2HCl3O	79-36-7	380,45	Train	314,86	24,14	Train	330,026	8,97
1056	BENZOYL CHLORIDE	C7H5ClO	98-88-4	470,15	Train	362,67	17,67	Train	367,146	22,15
1057	p-CHLOROBENZOTRIFLUORIDE	C7H4ClF3	98-56-6	411,85	Train	315,35	0,65	Train	320,192	4,19
1058	2,4-DICHLOROBENZOTRIFLUORIDE	C7H3Cl2F3	320-60-5	450,65	Train	345,63	3,63	Train	338,245	3,76
1059	o-CHLOROANILINE	C6H6ClN	95-51-2	481,99	Test	368,29	4,58	Test	374,832	11,12
1060	FLUOROBENZENE	C6H5F	462-06-6	357,88	Train	264,85	1,16	Train	263,32	2,68
1061	CHLOROMETHYL METHYL ETHER	C2H5ClO	107-30-2	332,65	Train	256,55	8,60	Test	258,696	6,45
1062	3-CHLORO-1,2-PROPANEDIOL	C3H7ClO2	96-24-2	486,15	Train	393,67	9,33	Train	414,466	11,47
1063	1,3-DICHLORO-2-PROPANOL	C3H6Cl2O	96-23-1	447,45	Test	361,64	3,49	Train	364,596	6,45
1064	HEXAFLUOROBENZENE	C6F6	392-56-3	353,41	Train	279,03	5,03	Train	271,744	2,26
1065	2,3-DICHLORO-1-PROPANOL	C3H6Cl2O	616-23-9	457,15	Train	365,62	0,53	Train	369,002	2,85
1066	DI(2-CHLOROETHYL)ETHER	C4H8Cl2O	111-44-4	451,65	Train	352,93	4,78	Train	338,619	9,53
1067	3-(METHYLMERCAPTO)PROPANAL	C4H8OS	3268-49-3	438,65	Train	333,33	0,83	Train	325,568	8,58
1068	TRIFLUOROACETIC ACID	C2HF3O2	76-05-1	344,95	Train	287,49	22,51	Train	322,727	12,73
1069	6-AMINOHEXANOL	C6H15NO	4048-33-3	496,15	Train	386,64	5,36	Test	382,088	9,91
1070	3-MERCAPTOPROPIONIC ACID	C3H6O2S	107-96-0	501	Train	367,37	1,22	Train	366,15	0,00
1071	o-CHLOROBENZOIC ACID	C7H5ClO2	118-91-2	560,15	Test	434,40	11,60	Train	439,375	6,63

1072	4-METHOXYPHENYLACETIC ACID	C9H10O3	104-01-8	564	Train	435,78	4,22	Train	440,244	0,24
1073	N,N-DIMETHYLFORMAMIDE	C3H7NO	68-12-2	425,15	Train	323,31	6,84	Train	278,95	51,20
1074	UREA	CH4N2O	57-13-6	465	Train	385,15	9,85	Train	402,614	7,61
1075	2-METHACRYLAMIDE	C4H7NO	79-39-0	488	Train	381,28	0,28	Train	399,789	18,79
1076	ACRYLAMIDE	C3H5NO	79-06-1	514	Train	405,31	0,69	Train	391,074	14,93
1077	epsilon-CAPROLACTAM	C6H11NO	105-60-2	543,15	Train	416,95	4,30	Train	393,299	19,35
1078	alpha-EPICHLOROHYDRIN	C3H5ClO	106-89-8	391,65	Train	304,55	0,55	Train	301,712	2,29
1079	ACETONE CYANOHYDRIN	C4H7NO	75-86-5	444	Train	347,05	0,11	Train	347,15	0,00
1080	TRIPHENYLPHOSPHINE	C18H15P	603-35-0	650,15	Train	453,06	0,09	Train	453,15	0,00
1081	NITROBENZENE	C6H5NO2	98-95-3	483,95	Train	361,64	0,64	Test	365,852	4,85
1082	GLYCOLIC ACID	C2H4O3	79-14-1	443	Train	355,34	46,66	Train	384,332	17,67
1083	ACETALDOL	C4H8O2	107-89-1	444	Test	349,42	6,51	Test	338,351	17,58
1084	FURFURAL	C5H4O2	98-01-1	434,85	Train	333,28	0,13	Train	333,15	0,00
1085	alpha-HYDROXYISOBUTYRIC ACID	C4H8O3	594-61-6	485,15	Train	379,02	18,98	Train	395,801	2,20
1086	o-NITROANISOLE	C7H7NO3	91-23-6	546,15	Train	413,22	8,78	Train	397,952	24,05
1087	ACETOMETHOXANE	C8H14O4	828-00-2	459,15	Train	356,27	0,12	Train	363,533	7,38
1088	ETHYLENE GLYCOL DIACRYLATE	C8H10O4	136911	503	Train	377,58	4,43	Train	370,108	3,04
1089	PROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER ACETATE	C6H12O3	108-65-6	418,95	Train	318,65	2,65	Train	312,384	3,62
1090	METHOXYDIHYDROPYRAN	C6H10O2	932952	400,75	Train	301,20	2,05	Train	306,498	7,35
1091	DICHLOROSILANE	Cl2H2Si	4109-96-0	281,45	Train	226,64	9,36	Train	240,861	4,86
1092	TRICHLOROSILANE	Cl3HSi	10025-78-2	305	Train	249,26	9,89	Train	275,028	15,88
1093	HEXAMETHYLDISILAZANE	C6H19NSi2	999-97-3	399,15	Train	286,47	2,32	Train	278,738	5,41
1094	HEXAMETHYLDISILOXANE	C6H18OSi2	107-46-0	373,67	Train	267,65	3,50	Test	250,218	20,93
1095	HEXAMETHYLCYCLOTRILOXANE	C6H18O3Si3	541-05-9	408,26	Train	297,62	10,53	Train	266,145	42,01
1096	DODECAMETHYLPENTASILOXANE	C12H36O4Si5	141-63-9	503,1	Train	357,35	5,20	Test	353,081	0,93
1097	METHYL VINYL DICHLOROSILANE	C3H6Cl2Si	124-70-9	366,95	Test	280,21	4,06	Train	279,992	3,84
1098	[3-(MERCAPTO)PROPYL]TRIETHOXY-SILANE	C9H22O3SSi	14814-09-6	498,8	Train	364,22	3,29	Test	387,146	26,22
1099	3-(TRIMETHOXY-SILYL)-1-PROPANETHIOL	C6H16O3SSi	4420-74-0	487,15	Train	361,90	14,90	Train	351,924	4,92
1100	BIS[3-(TRIETHOXY-SILYL)PROPYL]DISULFIDE	C18H42O6S2	56706-10-6	731,4	Train	521,81	3,81	Train	508,642	9,36
1101	TETRAMETHYLSILANE	C4H12Si	75-76-3	299,8	Test	215,34	1,67	Test	206,685	10,32
1102	OCTAMETHYLCYCLOTETRA-SILOXANE	C8H24O4Si4	556-67-2	448,15	Train	325,82	4,33	Train	302,691	27,46
1103	GLUTARALDEHYDE	C5H8O2	111-30-8	461,15	Train	356,23	0,77	Train	339,057	17,94
1104	n-TRIACONTANE	C30H62	638-68-6	722,85	Train	500,02	21,98	Train	511,598	10,40
1105	n-DOTRIACONTANE	C32H66	544-85-4	738,85	Train	508,03	25,97	Train	524,16	9,84
1106	3-OCTANONE	C8H16O	106-68-3	440,65	Train	325,69	2,69	Test	320,219	2,78
1107	4-OCTANONE	C8H16O	589-63-9	436,15	Train	322,37	0,63	Test	320,219	2,78
1108	3-NONANONE	C9H18O	925-78-0	460,65	Train	339,56	0,41	Train	334,428	4,72
1109	n-HEXATRIACONTANE	C36H74	630-06-8	770,15	Train	523,13	32,87	Train	546,973	9,03
1110	4-NONANONE	C9H18O	4485-09-0	460,65	Train	339,56	1,56	Train	334,428	3,57
1111	2-CYCLOHEXENE-1-ONE	C6H8O	930-68-7	445,15	Train	332,71	3,56	Train	341,504	12,35
1112	2,6,8-TRIMETHYL-4-NONANONE	C12H24O	123-18-2	491,4	Train	354,31	9,84	Test	353,748	10,40
1113	2,3-DIMETHYLOCTANE	C10H22	7146-60-3	437,46	Train	314,34	2,34	Train	306,219	5,78
1114	2,4-DIMETHYLOCTANE	C10H22	4032-94-4	429,05	Train	311,67	4,67	Train	299,606	7,39
1115	2,5-DIMETHYLOCTANE	C10H22	15869-89-3	431,65	Train	313,56	4,56	Train	299,606	9,39
1116	2,6-DIMETHYLOCTANE	C10H22	2051-30-1	433,53	Train	314,93	4,93	Train	299,606	10,39
1117	2,7-DIMETHYLOCTANE	C10H22	1072-16-8	433,02	Train	313,54	2,61	Train	299,885	11,05
1118	m-ETHYLPHENOL	C8H10O	620-17-7	491,57	Test	370,90	1,11	Test	369,307	2,69
1119	2,6-DI-tert-BUTYL-p-CRESOL	C15H24O	128-37-0	541,15	Train	390,46	0,31	Train	402,626	12,48
1120	2-PHENYLETHANOL	C8H10O	60-12-8	492,05	Test	374,29	0,71	Train	378,744	3,74
1121	2,6-DIMETHYL-4-HEPTANOL	C9H20O	108-82-7	451	Test	340,26	1,11	Test	347,023	7,87
1122	1-PHENYL-1-PROPANOL	C9H12O	93-54-9	492,15	Train	379,28	16,13	Train	370,911	7,76
1123	1-PHENYL-2-PROPANOL	C9H12O	698-87-3	493,15	Train	373,68	5,68	Test	373,712	5,71
1124	2-PHENYL-1-PROPANOL	C9H12O	1123-85-9	497,65	Train	383,67	2,52	Train	375,13	6,02
1125	3-PHENYL-1-PROPANOL	C9H12O	122-97-4	508,15	Train	385,55	3,40	Train	390,239	8,09
1126	BETA-CHOLESTEROL	C27H46O	57-88-5	771	Train	549,23	5,23	Train	522,607	21,39
1127	alpha-METHYLBENZYL ALCOHOL	C8H10O	98-85-1	477,15	Train	368,64	10,49	Train	358,51	0,36
1128	p-TOLUALCOHOL	C8H10O	589-18-4	490,15	Train	374,99	0,99	Train	385,783	11,78
1129	o-TOLUALCOHOL	C8H10O	89-95-2	497,15	Train	378,06	0,91	Train	369,712	7,44

1130	m-TOLUALCOHOL	C8H10O	587-03-1	490,15	Train	370,94	7,21	Train	377,147	1,00
1131	p-tert-OCTYLPHENOL	C14H22O	140-66-9	563,6	Train	411,07	1,07	Train	412,254	2,25
1132	p-tert-AMYLPHENOL	C11H16O	80-46-6	535,65	Train	399,04	5,89	Train	389,64	3,51
1133	p-CUMYLPHENOL	C15H16O	599-64-4	608,15	Train	453,26	9,26	Train	447,437	3,44
1134	DINONYLPHENOL	C24H42O	1323-65-5	735	Test	527,64	11,36	Train	509,116	29,88
1135	2,4-PENTANEDIOL	C5H12O2	625-69-4	474,15	Train	378,16	7,01	Test	363,76	7,39
1136	3-METHYL-trans-2-PENTENE	C6H12	616-12-6	343,59	Train	250,13	3,98	Train	249,586	3,44
1137	5-METHYL-1-HEXENE	C7H14	3524-73-0	358,46	Test	262,29	3,29	Train	256,217	2,78
1138	DECAN-1,10-DIOL	C10H22O2	112-47-0	574	Train	447,95	22,80	Train	454,62	29,47
1139	1,4-CYCLOHEXANEDIMETHANOL	C8H16O2	105-08-8	556,15	Train	434,85	0,70	Test	425,972	8,18
1140	NEOABIETIC ACID	C20H30O2	471-77-2	631	Train	461,81	1,81	Train	472,661	12,66
1141	2-METHYL-1-OCTENE	C9H18	4588-18-5	417,8	Train	303,43	6,78	Train	295,142	1,51
1142	Z-METHYL-1-HEPTENE	C8H16	15870-10-7	392,37	Train	285,74	2,59	Train	278,847	4,30
1143	TRIMELLITIC ACID	C9H6O6	528-44-9	675	Train	540,91	29,76	Test	575,885	64,74
1144	TRILACTIC ACID	C9H14O7	78024-33-6	619	Train	501,47	2,47	Train	477,411	21,59
1145	LINOLENIC ACID	C18H30O2	463-40-1	632	Train	468,93	6,07	Train	496,746	21,75
1146	ABIETIC ACID	C20H30O2	514-10-3	649,7	Test	478,45	21,55	Train	474,024	25,98
1147	AZELAIC ACID	C9H16O4	123-99-9	632,9	Train	475,85	12,31	Train	481,077	7,07
1148	NEOPENTANOIC ACID	C5H10O2	75-98-9	436,95	Train	338,24	1,09	Train	346,571	9,42
1149	n-PENTADECANOIC ACID	C15H30O2	1002-84-2	610,65	Train	461,42	4,42	Train	467,395	10,40
1150	2-ETHYL HEXANOIC ACID	C8H16O2	149-57-5	500,66	Train	388,47	5,32	Train	387,892	4,74
1151	n-HEPTANOIC ACID	C7H14O2	111-14-8	496,15	Test	382,60	5,55	Train	391,359	3,21
1152	NEOHEXANOIC ACID	C6H12O2	595-37-9	460,15	Train	351,59	0,56	Train	358,494	6,34
1153	NEOHEPTANOIC ACID	C7H14O2	1185-39-3	475,65	Train	362,51	5,49	Train	370,897	2,90
1154	DEHYDROABIETIC ACID	C20H28O2	1740-19-8	645	Train	474,68	0,68	Train	472,864	1,14
1155	n-HEPTADECANOIC ACID	C17H34O2	506-12-7	634,65	Test	477,07	4,07	Test	482,954	9,95
1156	n-NONADECANOIC ACID	C19H38O2	646-30-0	657,15	Train	491,41	4,41	Test	497,422	10,42
1157	n-EICOSANIC ACID	C20H40O2	506-30-9	668,53	Test	498,60	4,60	Train	504,283	10,28
1158	PIMELIC ACID	C7H12O4	111-16-0	617,3	Train	466,53	43,38	Train	465,374	42,22
1159	SUBERIC ACID	C8H14O4	505-48-6	624,8	Train	470,98	12,17	Train	473,371	9,78
1160	CINNAMIC ACID	C9H8O2	140-10-3	573,15	Train	440,74	7,27	Train	430,976	17,02
1161	ACETOXYACETIC ACID	C4H6O4	13831-30-6	542	Train	429,38	11,62	Test	392,26	48,74
1162	SEBACIC ACID	C10H18O4	111-20-6	642,1	Train	511,98	18,83	Train	496,684	3,53
1163	ITACONIC ACID	C5H6O4	97-65-4	601	Train	490,57	0,43	Train	457,567	33,43
1164	2-ETHYL BUTYRIC ACID	C6H12O2	88-09-5	466,95	Train	364,10	4,10	Train	364,142	4,14
1165	SUCCINIC ACID	C4H6O4	110-15-6	591	Train	449,52	29,63	Train	453,793	25,36
1166	GLUTARIC ACID	C5H8O4	110-94-1	600	Train	455,80	5,20	Train	448,436	12,56
1167	PYROMELLITIC ACID	C10H6O8	89-05-4	722	Train	603,74	3,74	Train	620,962	20,96
1168	IBUPROFEN	C13H18O2	15687-27-1	580,45	Train	442,90	3,90	Train	438,758	0,24
1169	1-METHYL-4-VINYLCYCLOHEXENE	C9H14	17699-86-4	425,15	Train	303,80	3,20	Train	298,885	8,12
1170	2,6-NAPHTHALENEDICARBOXYLIC ACID	C12H8O4	1141-38-4	695	Train	544,18	30,83	Train	552,907	22,09
1171	METHYL MALEIC ANHYDRIDE	C5H4O3	616-02-4	486,15	Test	379,65	5,50	Train	410,004	35,85
1172	sec-BUTYL FORMATE	C5H10O2	589-40-2	366,55	Test	276,29	0,29	Train	277,027	1,03
1173	tert-BUTYL FORMATE	C5H10O2	762-75-4	355,95	Test	265,54	1,39	Train	270,762	6,61
1174	n-HEXYL FORMATE	C7H14O2	629-33-4	428,65	Train	322,17	2,17	Train	316,887	3,11
1175	n-HEPTYL FORMATE	C8H16O2	112-23-2	451,25	Train	338,27	8,27	Test	331,258	1,26
1176	1,2-HEXADIENE	C6H10	592-44-9	349,15	Train	256,53	2,38	Train	252,399	1,75
1177	CYCLOHEXYL FORMATE	C7H12O2	4351-54-6	435,65	Train	324,15	0,00	Train	324,15	0,00
1178	tert-BUTYL ACETATE	C6H12O2	540-88-5	369,15	Train	275,89	1,06	Train	285,733	8,78
1179	METHYL ISOBUTYRATE	C5H10O2	547-63-7	365,45	Train	271,59	4,57	Train	261,056	15,09
1180	ETHYL ISOBUTYRATE	C6H12O2	97-62-1	383	Train	283,87	3,13	Train	278,29	8,71
1181	ISOPROPYL ACRYLATE	C6H10O2	689-12-3	383,15	Test	285,83	2,83	Test	290,962	7,96
1182	BENZYL FORMATE	C8H8O2	104-57-4	476,15	Train	350,76	4,24	Train	355,477	0,48
1183	CETYL METHACRYLATE	C20H38O2	2495-27-4	641	Test	459,31	3,31	Train	457,664	1,66
1184	ALLYL METHACRYLATE	C7H10O2	96-05-9	412,65	Test	305,39	0,76	Test	309,455	3,31
1185	DIMETHYL-2,6-NAPHTHALENEDICARBOXYLATE	C14H12O4	840-65-3	650,86	Train	487,15	4,15	Train	460,447	22,55
1186	CYCLOHEXYL ACETATE	C8H14O2	622-45-7	447,15	Train	330,82	0,33	Train	324,736	6,41
1187	GLYCERYL TRIACETATE	C9H14O6	102-76-1	532,15	Train	409,92	1,08	Train	414,546	3,55
1188	n-NONYL n-UNDECYL PHTHALATE	C28H46O4	65185-89-9	743,9	Train	532,12	4,12	Train	535,138	7,14

1189	DIISONONYL PHTHALATE	C26H42O4	28553-12-0	682	Train	484,87	8,13	Train	516,953	23,95
1190	DIETHYL PHTHALATE	C12H14O4	84-66-2	567,15	Train	423,81	0,66	Train	412,455	10,70
1191	DI-n-BUTYL PHTHALATE	C16H22O4	84-74-2	613,15	Train	453,34	9,08	Train	450,333	6,07
1192	DIMETHYL PHTHALATE	C10H10O4	131-11-3	556,85	Train	418,31	0,70	Train	390,994	28,01
1193	DIETHYL SUCCINATE	C8H14O4	123-25-1	490,15	Train	369,27	0,12	Train	369,15	0,00
1194	ETHYLIDENE DIACETATE	C6H10O4	542-10-9	442,15	Train	341,10	2,05	Train	336,128	7,02
1195	DIALLYL MALEATE	C10H12O4	999-21-3	520	Train	389,65	7,35	Test	394,198	2,80
1196	DIBUTYL MALEATE	C12H20O4	105-76-0	553,15	Train	415,05	2,05	Train	417,785	4,79
1197	ISOBUTYL ACRYLATE	C7H12O2	106-63-8	410	Test	305,05	0,79	Train	306,631	2,37
1198	METHYL DODECANOATE	C13H26O2	111-82-0	540	Test	395,85	1,85	Train	392,224	1,78
1199	DIETHYL MALEATE	C8H12O4	141-05-9	498,15	Test	377,68	11,53	Train	373,9	7,75
1200	DIMETHYL MALEATE	C6H8O4	624-48-6	478,15	Train	364,38	3,77	Train	348,791	19,36
1201	DIPROPYL MALEATE	C10H16O4	2432-63-5	521	Train	392,97	1,03	Train	396,805	2,81
1202	sec-BUTYL ACRYLATE	C7H12O2	401255	404,15	Train	301,63	0,37	Train	306,359	4,36
1203	n-PROPYL BENZOATE	C10H12O2	2315-68-6	504,15	Train	372,49	1,34	Train	366,361	4,79
1204	DIISOBUTYL ETHER	C8H18O	628-55-7	395,76	Train	289,03	1,38	Test	288,461	0,81
1205	1-HEPTYNE	C7H12	628-71-7	372,93	Train	274,08	3,08	Train	269,09	1,91
1206	ETHYL ISOPROPYL ETHER	C5H12O	625-54-7	326,15	Test	241,49	0,49	Train	245,251	4,25
1207	ETHYL n-HEXYL ETHER	C8H18O	5756-43-4	417,15	Train	308,10	2,10	Test	304,651	1,35
1208	1,3-DIOXANE	C4H8O2	505-22-6	378,15	Test	290,70	2,55	Train	289,208	1,06
1209	ETHYLAL	C5H12O2	462-95-3	360,65	Test	269,30	1,15	Train	277,02	8,87
1210	1,2-DIETHOXYETHANE	C6H14O2	629-14-1	394,55	Train	293,84	1,16	Test	293,41	1,59
1211	2,3-DIHYDROFURAN	C4H6O	1191-99-7	327,65	Test	245,72	3,43	Test	255,632	6,48
1212	1-ETHYL-2-ISOPROPYLBENZENE	C11H16	18970-44-0	466,15	Test	337,85	3,85	Test	328,73	5,27
1213	1,1-DICHLOROPROPANE	C3H6Cl2	78-99-9	361,25	Train	288,62	8,62	Train	282,209	2,21
1214	1,3-DICHLOROPROPANE	C3H6Cl2	142-28-9	393,55	Train	307,45	2,30	Test	305,62	0,47
1215	2,3-DICHLOROPROPENE	C3H4Cl2	78-88-6	366,5	Train	286,50	1,65	Train	285,786	2,36
1216	n-PENTADECYLBENZENE	C21H36	2131-18-2	639,15	Train	450,70	9,30	Train	452,339	7,66
1217	n-HEXADECYLBENZENE	C22H38	1459-09-2	651,15	Train	457,83	11,17	Train	460,823	8,18
1218	n-HEPTADECYLBENZENE	C23H40	14752-75-1	662,15	Train	464,21	11,79	Test	468,989	7,01
1219	n-OCTADECYLBENZENE	C24H42	929727	673,15	Test	470,54	13,46	Train	476,854	7,15
1220	1,2,3-TRICHLOROBENZENE	C6H3Cl3	87-61-6	491,75	Train	382,90	3,10	Train	370,489	15,51
1221	1,3,5-TRICHLOROBENZENE	C6H3Cl3	108-70-3	481,55	Train	375,86	4,29	Train	373,065	7,09
1222	3,3,3-TRIFLUOROPROPENE	C3H3F3	677-21-4	248,15	Train	197,59	5,59	Train	200,772	8,77
1223	1,1,2-TRIFLUOROETHANE	C2H3F3	430-66-0	278,15	Train	223,04	4,96	Train	221,518	6,48
1224	1,1,2,2,3-PENTAFLUOROPROPANE	C3H3F5	679-86-7	298,4	Train	242,82	3,19	Train	243,357	2,64
1225	BENZOTRIFLUORIDE	C7H5F3	98-08-8	375,2	Train	279,78	5,22	Train	269,596	15,40
1226	DIBROMOMETHANE	CH2Br2	74-95-3	370,1	Train	291,29	22,71	Train	310,089	3,91
1227	2-BROMOBUTANE	C4H9Br	78-76-2	364,37	Train	277,37	1,79	Train	280,781	1,63
1228	BROMOCHLOROMETHANE	CH2BrCl	74-97-5	341,2	Train	268,20	20,80	Train	292,26	3,26
1229	1,2-DIFLUOROETHANE	C2H4F2	624-72-6	283,65	Test	223,38	0,38	Train	220,694	2,31
1230	1,1-DICHLORO-1-FLUOROETHANE	C2H3Cl2F	1717-00-6	305,15	Train	249,63	1,37	Train	251	0,00
1231	1,1,1-TRICHLOROFLUOROETHANE	C2H2Cl3F	2366-36-1	366	Train	312,44	12,44	Train	311,131	11,13
1232	p-BROMOTOLUENE	C7H7Br	106-38-7	457,5	Train	341,13	2,02	Train	347,978	4,83
1233	n-HEXYL IODIDE	C6H13I	638-45-9	454,5	Train	350,39	16,24	Train	341,962	7,81
1234	n-BUTYL IODIDE	C4H9I	542-69-8	403,7	Train	312,78	8,63	Train	313,605	9,46
1235	CHLOROTRIFLUOROETHYLENE	C2ClF3	79-38-9	244,8	Train	197,40	8,61	Train	212,665	6,67
1236	VINYL BROMIDE	C2H3Br	593-60-2	288,95	Train	230,53	0,47	Train	231	0,00
1237	1-CHLORO-1,1-DIFLUOROETHANE	C2H3ClF2	75-68-3	263,95	Train	210,35	0,65	Train	211	0,00
1238	VINYL FLUORIDE	C2H3F	75-02-5	200,95	Train	154,67	5,33	Train	161,864	1,86
1239	n-HEXYLAMINE	C6H15N	111-26-2	405,85	Train	304,60	4,45	Train	306,136	5,99
1240	n-HEPTYLAMINE	C7H17N	111-68-2	430,05	Train	321,92	4,77	Test	321,039	3,89
1241	n-OCTYLAMINE	C8H19N	111-86-4	452,75	Train	338,02	5,02	Train	335,207	2,21
1242	n-NONYLAMINE	C9H21N	112-20-9	475,35	Test	353,96	10,81	Train	348,694	5,54
1243	n-DECYLAMINE	C10H23N	2016-57-1	493,65	Train	366,61	8,46	Train	361,548	3,40
1244	n-DODECYLAMINE	C12H27N	124-22-1	532,35	Test	393,24	8,24	Train	385,525	0,53
1245	N-ETHYL-2-METHYLALLYLAMINE	C6H13N	18328-90-0	377,9	Train	278,08	2,07	Train	278,535	1,62
1246	PENTAETHYLENE HEXAMINE	C10H28N6	4067-16-7	659	Train	498,61	15,39	Train	485,106	28,89
1247	TRIALLYLAMINE	C9H15N	102-70-5	423,65	Train	303,02	9,13	Train	299,628	12,52
1248	TRI-n-BUTYLAMINE	C12H27N	102-82-9	487,15	Train	349,21	3,94	Train	347,828	5,32

1249	DIETHYLENETRIAMINE	C4H13N3	111-40-0	480,25	Train	363,90	3,25	Train	372,128	4,98
1250	TETRAETHYLENEPENTAMINE	C8H23N5	112-57-2	606,15	Train	458,85	22,85	Train	453,28	17,28
1251	TRIPROPYLAMINE	C9H21N	102-69-2	429,65	Train	310,60	3,40	Train	305,13	8,87
1252	VINYLACETONITRILE	C4H5N	109-75-1	391,67	Test	293,84	2,31	Train	324,011	27,86
1253	AMINOCAPRONITRILE	C6H12N2	2432-74-8	503	Train	381,72	1,28	Test	393,451	10,45
1254	n-BUTYL ISOCYANATE	C5H9NO	111-36-4	388,15	Train	296,23	0,58	Train	307,612	11,96
1255	o-ETHYLANILINE	C8H11N	578-54-1	482,65	Train	359,98	1,83	Test	369,918	11,77
1256	o-PHENYLENEDIAMINE	C6H8N2	95-54-5	530,15	Train	404,46	4,54	Train	409,728	0,73
1257	PROPYLENEIMINE	C3H7N	75-55-8	339,65	Train	255,16	7,99	Train	269,863	6,71
1258	m-PHENYLENEDIAMINE	C6H8N2	108-45-2	560	Test	425,18	14,03	Train	416,082	4,93
1259	N,N'-DI-tert-BUTYLETHYLENEDIAMINE	C10H24N2	4062-60-6	462,15	Train	332,82	3,18	Train	345,859	9,86
1260	CYCLOPENTYLAMINE	C5H11N	1003-03-8	381,62	Train	285,13	0,48	Train	284,216	0,43
1261	DICYCLOHEXYLAMINE	C12H23N	101-83-7	529	Train	372,49	0,16	Train	372,02	0,63
1262	N-METHYLCYCLOHEXYLAMINE	C7H15N	100-60-7	422	Train	310,32	2,17	Train	309,154	1,00
1263	N-AMINOETHYL ETHANOLAMINE	C4H12N2O	111-41-1	517	Train	407,44	9,71	Train	403,09	14,06
1264	cis-DICYANO-1-BUTENE	C6H6N2	2141-58-4	577	Train	443,55	1,45	Train	412,724	32,28
1265	trans-DICYANO-1-BUTENE	C6H6N2	2141-59-5	555	Train	426,64	0,36	Train	412,724	14,28
1266	1,4-DICYANO-2-BUTENE	C6H6N2	1119-85-3	547	Test	412,76	10,24	Train	430,701	7,70
1267	DIPHENYLMETHANE-4,4'-DIISOCYANATE	C15H10N2O 2	101-68-8	609	Train	468,12	3,88	Train	480,327	8,33
1268	N,N'-DIPHENYL-p-PHENYLENEDIAMINE	C18H16N2	74-31-7	772	Train	570,98	0,98	Train	528,031	41,97
1269	o-NITRODIPHENYLAMINE	C12H10N2O 2	119-75-5	616	Train	460,48	0,48	Train	480,207	20,21
1270	DIALLYLAMINE	C6H11N	124-02-7	384,15	Train	283,86	5,14	Train	280,039	8,96
1271	m-DINITROBENZENE	C6H4N2O4	99-65-0	575,5	Test	435,28	12,13	Train	437,187	14,04
1272	o-DINITROBENZENE	C6H4N2O4	528-29-0	592	Train	449,93	26,78	Test	431,383	8,23
1273	p-DINITROBENZENE	C6H4N2O4	100-25-4	571,5	Train	436,98	6,02	Train	443,954	0,95
1274	2,4-DINITROTOLUENE	C7H6N2O4	121-14-2	590	Train	441,73	0,27	Train	444,357	2,36
1275	2,6-DINITROTOLUENE	C7H6N2O4	606-20-2	558	Train	422,04	11,11	Train	445,532	12,38
1276	3,4-DINITROTOLUENE	C7H6N2O4	610-39-9	610	Test	456,70	3,30	Test	444,357	15,64
1277	2,5-DINITROTOLUENE	C7H6N2O4	619-15-8	590	Test	441,73	3,27	Test	444,357	0,64
1278	3,5-DINITROTOLUENE	C7H6N2O4	618-85-9	588	Train	445,86	4,14	Train	447,426	2,57
1279	p-PHENYLENEDIAMINE	C6H8N2	106-50-3	540	Test	414,45	14,25	Test	423,481	5,22
1280	PHENYL ISOCYANATE	C7H5NO	103-71-9	439,43	Train	329,24	5,09	Train	331,879	7,73
1281	PIPERAZINE	C4H10N2	110-85-0	419,15	Train	323,40	14,75	Train	354,529	16,38
1282	PYRIDAZINE	C4H4N2	289-80-5	481,15	Train	362,33	4,18	Test	308,134	50,02
1283	PYRIMIDINE	C4H4N2	289-95-2	396,9	Train	298,89	5,26	Train	308,134	3,98
1284	PYRAZOLE	C3H4N2	288-13-1	460,15	Train	355,92	0,27	Train	335,768	19,88
1285	MALEONITRILE	C4H2N2	928-53-0	492	Train	386,94	0,06	Train	370,066	16,93
1286	FUMARONITRILE	C4H2N2	764-42-1	459,15	Train	361,11	2,89	Train	370,066	6,07
1287	2,2'-IMINOBIS-ACETONITRILE	C4H5N3	628-87-5	527	Train	415,99	2,01	Train	428,213	10,21
1288	o-NITROANILINE	C6H6N2O2	88-74-4	558	Train	424,90	16,25	Train	420,802	20,35
1289	p-NITROANILINE	C6H6N2O2	100-01-6	609,15	Test	466,64	19,51	Train	433,944	52,21
1290	m-NITROANILINE	C6H6N2O2	99-09-2	579	Train	438,77	30,38	Train	426,872	42,28
1291	INDOLE	C8H7N	120-72-9	526,15	Train	396,52	4,52	Train	392,758	0,76
1292	ISOQUINOLINE	C9H7N	119-65-3	516,37	Train	380,44	0,29	Train	380,15	0,00
1293	p-AMINOAZOBENZENE	C12H11N3	60-09-3	633	Train	471,31	0,31	Train	471	0,00
1294	p-AMINODIPHENYL	C12H11N	92-67-1	610	Train	454,67	28,52	Train	445,472	19,32
1295	1,5-NAPHTHALENE DIISOCYANATE	C12H6N2O2	3173-72-6	603	Train	454,93	0,07	Train	447,004	8,00
1296	DIBENZOPYRROLE	C12H9N	86-74-8	627,87	Train	468,70	6,30	Train	466,913	8,09
1297	NICOTINONITRILE	C6H4N2	100-54-9	474,15	Train	365,66	8,51	Train	360,954	3,80
1298	2,6-DIETHYLANILINE	C10H15N	579-66-8	508,65	Train	376,96	5,19	Train	397,188	15,04
1299	ACROLEIN CYANOHYDRIN	C4H5NO	5809-59-6	461	Train	362,05	7,95	Train	367,285	2,72
1300	2,4,6-TRIMETHYLPYRIDINE	C8H11N	108-75-8	443,7	Train	332,43	5,28	Test	355,16	28,01
1301	2,6-DIMETHYLPYRIDINE	C7H9N	108-48-5	417,2	Train	306,21	0,21	Train	306	0,00
1302	3-METHYLPYRIDINE	C6H7N	108-99-6	417,29	Train	324,01	14,86	Train	312,854	3,70
1303	METHYLGLUTARONITRILE	C6H8N2	4553-62-2	536,15	Train	394,05	6,05	Train	395,157	7,16
1304	4-METHYLPYRIDINE	C6H7N	108-89-4	418,5	Train	312,21	0,06	Train	312,15	0,00
1305	1,6-HEXAMETHYLENE DIISOCYANATE	C8H12N2O2	822-06-0	528,15	Train	410,86	2,71	Train	402,919	5,23
1306	THIACYCLOPROPANE	C2H4S	420-12-2	328,08	Train	244,00	8,00	Train	244,388	7,61

1307	METHYL n-BUTYL SULFIDE	C5H12S	628-29-5	396,58	Train	294,57	3,42	Train	290,19	0,96
1308	ETHYL t-BUTYL SULFIDE	C6H14S	14290-92-7	393,56	Train	284,45	0,55	Test	285,669	0,67
1309	TRIMETHYLENE SULFIDE	C3H6S	287-27-4	368,12	Train	273,37	2,22	Test	263,569	7,58
1310	DIBENZOTHIOPHENE	C12H8S	132-65-0	604,61	Train	436,42	1,42	Train	440,564	5,56
1311	tert-DODECYL MERCAPTAN	C12H26S	25103-58-6	515,65	Test	364,96	5,19	Train	379,186	9,04
1312	tert-NONYL MERCAPTAN	C9H20S	25360-10-5	469,15	Train	337,75	0,40	Train	332,023	6,13
1313	2-METHYLTHIOPHENE	C5H6S	554-14-3	385,71	Test	283,71	4,44	Test	291,205	3,06
1314	3-METHYLTHIOPHENE	C5H6S	616-44-4	388,55	Test	285,80	0,65	Train	291,205	6,06
1315	CAMPHOR	C10H16O	76-22-2	480,57	Test	348,45	9,75	Train	364,155	25,46
1316	N-METHYLFORMAMIDE	C2H5NO	123-39-7	472,66	Train	371,20	12,95	Train	358,25	25,90
1317	ACETAMIDE	C2H5NO	60-35-5	494,3	Train	391,16	12,84	Train	376,339	27,66
1318	DIACETONE ALCOHOL	C6H12O2	123-42-2	441,05	Train	335,24	1,24	Train	340,484	6,48
1319	FURFURYL ALCOHOL	C5H6O2	98-00-0	443,15	Train	344,35	3,80	Train	354,421	6,27
1320	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	C4H9NO	127-19-5	439,25	Train	335,83	0,32	Train	336,15	0,00
1321	ACETAMINOPHEN	C8H9NO2	103-90-2	530	Train	396,80	23,20	Train	450,206	30,21
1322	BIS(DIFLUOROMETHYL)ETHER	C2H2F4O	1691-17-4	279,5	Train	238,34	0,34	Train	233,843	4,16
1323	p-METHOXYPHENOL	C7H8O2	150-76-5	517,85	Train	401,24	3,24	Train	393,572	4,43
1324	2-METHOXYETHANOL	C3H8O2	109-86-4	397,5	Test	304,01	7,99	Train	302,759	9,24
1325	2-ETHOXYETHANOL	C4H10O2	110-80-5	408,15	Train	311,37	4,64	Train	317,83	1,83
1326	2-BUTOXYETHANOL	C6H14O2	111-76-2	444,47	Test	337,34	3,19	Train	345,788	11,64
1327	2-(2-METHOXYETHOXY)ETHANOL	C5H12O3	111-77-3	466,75	Test	357,71	2,44	Test	350,202	9,95
1328	2-(2-ETHOXYETHOXY)ETHANOL	C6H14O3	111-90-0	475,05	Train	361,58	1,57	Train	362,331	0,82
1329	2-AMINOETHOXYETHANOL	C4H11NO2	929-06-6	496,24	Test	383,53	13,48	Train	363,541	33,46
1330	ETHYLCHLOROACETATE	C4H7ClO2	105-39-5	417,35	Test	322,45	4,71	Test	304,884	22,27
1331	ACETALDOXIME	C2H5NO	107-29-9	388,35	Train	311,96	1,19	Train	313,15	0,00
1332	2-(DIFLUOROMETHOXY)-1,1,1-TRIFLUOROETHANE	C3H3F5O	1885-48-9	302,15	Train	250,03	4,03	Train	248,602	2,60
1333	TRIETHYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER	C7H16O4	112-35-6	507	Test	387,68	3,80	Train	390,031	1,45
1334	SUCCINIMIDE	C4H5NO2	123-56-8	568,6	Train	448,19	5,81	Train	426,228	27,77
1335	4-CARBOXYBENZALDEHYDE	C8H6O3	619-66-9	702	Train	542,63	9,37	Train	470,699	81,30
1336	THIOGLYCOLIC ACID	C2H4O2S	68-11-1	493	Train	398,13	1,02	Train	399,15	0,00
1337	2-HYDROXYETHYL METHACRYLATE	C6H10O3	868-77-9	499,15	Train	380,17	6,02	Train	382,956	8,81
1338	2-ACETOACETOXY ETHYL METHACRYLATE	C10H14O5	21282-97-3	547,15	Train	409,90	2,85	Train	419,861	12,81
1339	METHYL LACTATE	C4H8O3	547-64-8	417,95	Train	325,32	1,17	Train	329,303	5,15
1340	2-METHOXY PROPANOL-1	C4H10O2	1589-47-5	402,65	Train	306,74	7,41	Train	298,502	15,65
1341	TRIACETONE ALCOHOL	C9H18O3	3682-91-5	486	Train	384,01	2,99	Train	407,036	20,04
1342	BENZAMIDE	C7H7NO	55-21-0	563,15	Train	432,45	0,55	Train	433	0,00
1343	alpha-METHYLBENZYL ALCOHOL FORMATE	C9H10O2	7775-38-4	477	Train	356,41	4,41	Train	351,53	0,47
1344	2-FORMYL BENZOIC ACID	C8H6O3	119-67-5	561	Train	431,08	8,92	Train	459,59	19,59
1345	4-HYDROXYBUTYRALDEHYDE	C4H8O2	25714-71-0	432	Train	340,40	7,60	Train	357,152	9,15
1346	m-CHLORONITROBENZENE	C6H4ClNO2	121-73-3	508,85	Test	386,21	1,79	Train	394,475	6,48
1347	4-HYDROXYSTYRENE	C8H8O	2628-17-3	502	Train	379,96	0,04	Train	380,837	0,84
1348	ACETYSALICYLIC ACID	C9H8O4	50-78-2	564	Train	480,61	42,54	Train	481,309	41,84
1349	p-PHENETIDINE	C8H11NO	156-43-4	527	Train	400,90	11,90	Train	411,436	22,44
1350	2-METHYL-, 3-HYDROXY-2,2,4-TRIMETHYLPENTYL PROPANOATE	C12H24O3	77-68-9	530,9	Train	390,55	11,40	Train	397,227	18,08
1351	ISOAGATHOLAL	C20H32O2	17990-11-3	628	Train	462,99	5,01	Train	454,519	13,48
1352	o-CHLOROPHENOL	C6H5ClO	95-57-8	447,53	Train	347,39	11,24	Test	366,713	30,56
1353	m-CHLOROPHENOL	C6H5ClO	108-43-0	487	Test	376,27	6,12	Test	374,232	4,08
1354	p-CHLOROPHENOL	C6H5ClO	106-48-9	493,11	Test	385,01	3,99	Train	382,965	6,04
1355	PENTAFLUOROPHENOL	C6F5OH	771-61-9	418,79	Train	339,06	6,32	Train	349,622	4,25
1356	1-ISOPROPOXY-2-PROPANOL	C6H14O2	3944-36-3	411,15	Train	308,17	4,98	Test	316,224	3,07
1357	2-CHLOROETHANOL	C2H5ClO	107-07-3	401,75	Train	319,05	9,10	Train	328,148	0,00
1358	ISOPHTHALOYL CHLORIDE	C8H4Cl2O2	99-63-8	549	Train	441,22	11,93	Train	439,124	14,03
1359	4-FORMYLMORPHOLINE	C5H9NO2	4394-85-8	513,15	Train	386,49	0,34	Train	386,15	0,00
1360	OCTAMETHYLTRISILOXANE	C8H24O2Si3	107-51-7	425,7	Train	304,07	4,08	Train	288,579	19,57
1361	OCTADECAMETHYLOCTASILOXANE	C18H54O7Si8	556-69-4	583,6	Train	411,01	6,14	Train	427,678	10,53
1362	TETRAETHYL SILANE	C8H20Si	631-36-7	426,56	Train	302,92	2,23	Test	281,177	23,97
1363	HEXADECAMETHYLHEPTASILOXANE	C16H48O6Si7	541-01-5	559,94	Test	395,48	10,68	Test	405,199	0,95

1364	3-ETHYL HEPTANAL	C9H18O	2570-97-0	453,5	Train	339,17	8,17	Train	340,954	9,95
1365	DIAMYL KETONE	C11H22O	927-49-1	500,55	Test	366,98	5,50	Test	360,84	0,64
1366	2-BUTYL-1-DECANOL	C14H30O	21078-81-9	563	Test	423,39	1,61	Test	425,544	0,54
1367	2-METHYL-1-TRIDECANOL	C14H30O	32480-16-3	563,1	Test	423,46	1,54	Test	425,544	0,54
1368	2-METHYL-DODECAN-1-OL	C13H28O	22663-61-2	538,8	Test	406,24	0,76	Test	415,613	8,61
1369	4-METHYL-1-OCTANOL	C9H20O	38514-03-3	477,9	Train	364,05	3,05	Test	371,31	10,31
1370	6-METHYL-1-OCTANOL	C9H20O	38514-05-5	479,15	Train	365,01	2,01	Train	371,31	8,31
1371	3-ETHYL-1-HEPTANOL	C9H20O	3525-25-5	480,15	Train	365,77	0,77	Test	371,31	6,31
1372	THYMOL	C10H14O	89-83-8	505,65	Test	375,78	1,63	Train	383,399	9,25
1373	1-METHYL-3-HYDROXY-5-ISOPROPYL BENZENE	C10H14O	485106	514,15	Train	387,04	0,04	Train	387,35	0,35
1374	1-METHYL-3-HYDROXY-6-ISOPROPYL BENZENE	C10H14O	485076	511,15	Train	379,87	12,13	Test	383,399	8,60
1375	cis-1,8-TERPIN	C10H20O2	565-48-0	531,15	Train	412,38	0,38	Train	409,601	2,40
1376	trans-1,8-TERPIN	C10H20O2	565-50-4	537,15	Train	417,04	2,96	Train	409,601	10,40
1377	7-METHYL-1-OCTENE	C9H18	13151-06-9	408,15	Train	297,02	7,37	Train	290,275	0,63
1378	m-TOLUIC ACID	C8H8O2	99-04-7	536,15	Train	404,67	14,48	Test	433,672	14,52
1379	OCTAHYDRO-PENTALENE-1-CARBOXYLIC ACID	C9H14O2	7403-22-7	576,9	Train	443,97	8,97	Train	440,135	5,14
1380	DODECANEDIOIC ACID	C12H22O4	693-23-2	658,1	Train	522,26	19,26	Test	510,223	7,22
1381	TETRADECANEDIOIC ACID	C14H26O4	821-38-5	674,5	Train	534,00	10,00	Train	516,654	7,35
1382	2-METHYL-1-NONENE	C10H20	2980-71-4	441,55	Test	319,79	1,79	Train	310,598	7,40
1383	8-METHYL-1-NONENE	C10H20	26741-24-2	443,65	Train	321,96	2,96	Train	305,979	13,02
1384	cis-2-DECENE	C10H20	20348-51-0	447	Train	326,60	3,60	Train	318,212	4,79
1385	trans-2-DECENE	C10H20	20063-97-2	446	Test	325,87	3,87	Train	318,212	3,79
1386	cis-2-DODECENE	C12H24	7206-26-0	491	Train	356,79	2,79	Test	346,133	7,87
1387	trans-2-DODECENE	C12H24	7206-13-5	491	Train	356,79	2,79	Test	346,133	7,87
1388	CYCLOPROPANE CARBOXYLIC ACID	C4H6O2	1759-53-1	456,15	Train	352,07	8,08	Train	386,352	26,20
1389	MALONIC ACID	C3H4O4	141-82-2	580	Train	473,58	1,24	Train	474,82	0,00
1390	4-HYDROXYMETHYL BENZOIC ACID	C8H8O3	3006-96-0	614,7	Train	486,89	11,11	Train	483,306	14,69
1391	ISOBUTYRIC ANHYDRIDE	C8H14O3	97-72-3	455,65	Train	344,44	4,29	Train	343,836	3,69
1392	2,2,4-TRIMETHYL-1,3-PENTANEDIOL DIISOBUTYRATE	C16H30O4	6846-50-0	553,15	Train	385,86	8,14	Train	406,151	12,15
1393	n-CROTYL ACETATE	C6H10O2	628-08-0	403,65	Test	304,54	0,46	Train	304,403	0,60
1394	sec-BUTENYL ACETATE	C6H10O2	1766990	385,65	Train	292,76	2,76	Train	294,161	4,16
1395	ETHYL TRIMETHYL ACETATE	C7H14O2	3938-95-2	391,7	Train	287,92	0,23	Train	280,272	7,88
1396	DI(2-ETHYLHEXYL)TEREPHTHALATE	C24H38O4	6422-86-2	673,15	Train	484,49	26,66	Train	503,649	7,50
1397	PHTHALIDE	C8H6O2	87-41-2	563,15	Train	423,61	1,54	Train	395,51	29,64
1398	ALLYL ACRYLATE	C6H8O2	999-55-3	395,15	Train	295,41	5,59	Train	297,239	3,76
1399	DIALLYL PHTHALATE	C14H14O4	131-17-9	594	Test	438,57	7,42	Train	429,915	1,24
1400	METHYL STEARATE	C19H38O2	112-61-8	623,7	Train	449,70	5,30	Train	451,292	3,71
1401	METHYL MYRISTATE	C15H30O2	124-10-7	569,9	Train	415,49	0,49	Train	413,583	1,42
1402	METHYL PALMITATE	C17H34O2	112-39-0	597,7	Test	433,36	2,64	Train	433,204	2,80
1403	ETHYL PHENYL ACETATE	C10H12O2	101-97-3	498,55	Train	371,96	0,19	Train	372,15	0,00
1404	METHYL EICOSANOATE	C21H42O2	1120-28-1	647,9	Test	464,53	78,38	Test	468,019	81,87
1405	DI(2-ETHYLHEXYL)ADIPATE	C22H42O4	103-23-1	690,15	Train	495,56	26,41	Train	490,231	21,08
1406	BENZENE-1,2,4-TRICARBOXYLIC ACID TRIMETHYL ESTER	C12H12O6	204446	626,9	Train	470,21	0,79	Test	440,582	30,42
1407	DIMETHYLMALONATE	C5H8O4	108-59-8	452,5	Train	347,98	10,18	Train	337,401	20,75
1408	1,3,5-TRIETHYLBENZENE	C12H18	102-25-0	489,05	Train	354,88	0,73	Train	357,937	3,79
1409	1-BROMODODECANE	C12H25Br	143-15-7	549,15	Train	410,40	6,75	Train	396,073	21,08
1410	1,2-DIBROMODODECANE	C12H24Br2	55334-42-4	633	Train	483,75	37,75	Train	434,488	11,51
1411	DIFLUOROMETHYL METHYL ETHER	C2H4F2O	359-15-9	268,65	Train	211,70	1,70	Train	223,227	13,23
1412	DIFLUOROMETHYL TRIFLUOROMETHYL ETHER	C2HF5O	3822-68-2	237,9	Train	205,45	6,56	Train	215,797	3,80
1413	CYCLOPROPANECARBOXAMIDE	C4H7NO	6228-73-5	528,3	Train	417,07	0,93	Train	418	0,00
1414	CYCLOPROPYL CYANIDE	C4H5N	5500-21-0	408,15	Train	305,40	0,25	Train	305,15	0,00
1415	6-AMINOHEXANAMIDE	C6H14N2O	373-04-6	581,4	Train	461,38	13,38	Train	451,276	3,28
1416	1,5-PENTANEDIAMINE	C5H14N2	462-94-2	451,15	Train	341,53	6,38	Train	342,504	7,35
1417	HEXANAMIDE	C6H13NO	628-02-4	529,15	Train	414,72	1,72	Train	419,832	6,83
1418	2,4-DIMETHYLANILINE	C8H11N	95-68-1	486,65	Train	357,88	5,27	Train	376,884	13,73

1419	1,3-DIMETHYL-5-NITROBENZENE	C8H9NO2	99-12-7	547,15	Train	406,87	1,13	Train	393,343	14,66
1420	2,6-DIETHYLNAPHTHALENE	C14H16	59919-41-4	576	Train	418,01	4,01	Train	410,796	3,20
1421	3-(N,N-DIMETHYLAMINO) PROPYLAMINE	C5H14N2	109-55-7	407,65	Train	306,37	1,78	Train	311,431	3,28
1422	4-[2-(2-AMINOETHOXY)ETHYL]MORPHOLINE	C8H18N2O2	20207-13-0	516	Train	386,51	4,49	Train	390,851	0,15
1423	2-(N-MORPHOLINO)-2'-HYDROXYDIETHYLETHER	C8H17NO3	3603-45-0	535,8	Train	404,70	1,30	Train	407,11	1,11
1424	1-n-PENTYLNAPHTHALENE	C15H18	86-89-5	579,15	Train	414,32	2,68	Train	415,203	1,80
1425	8-METHYLQUINOLINE	C10H9N	611-32-5	519,65	Train	378,95	0,80	Train	380,033	1,88
1426	TRI-n-OCTYLAMINE	C24H51N	1116-76-3	639,15	Train	442,48	2,02	Train	470,75	26,25
1427	2-BUTOXIME	C4H9NO	96-29-7	425,15	Train	334,27	0,88	Train	335,15	0,00
1428	DIAMYLAMINE	C10H23N	2050-92-2	476,15	Train	350,44	4,79	Train	343,409	2,24
1429	TRIAMYLAMINE	C15H33N	621-77-2	516,15	Train	366,86	3,29	Train	384,772	14,62
1430	UNDECYLAMINE	C11H25N	7307-55-3	514,75	Test	381,26	16,11	Train	373,811	8,66
1431	NIACIN	C6H5NO2	59-67-6	526	Train	422,49	25,51	Train	436,86	11,14
1432	L-PHENYLALANINE	C9H11NO2	63-91-2	628	Train	495,54	11,46	Train	490,276	16,72
1433	DI-n-OCTYLAMINE	C16H35N	1120-48-5	580,81	Train	420,50	2,70	Train	413,68	4,12
1434	DI-2-ETHYLHEXYLAMINE	C16H35N	106-20-7	554,25	Test	399,25	1,90	Train	402,582	1,43
1435	TETRAMETHYLETHYLENEDIAMINE	C6H16N2	110-18-9	394,15	Train	291,05	0,90	Train	295,551	5,40
1436	ACRIDINE	C13H9N	260-94-6	619,15	Train	446,57	0,57	Train	446	0,00
1437	1,3-PROPANEDIAMINE	C3H10N2	109-76-2	410,15	Train	312,09	10,06	Train	314,203	7,95
1438	4,4'-DINITRODIPHENYLAMINE	C12H9N3O4	1821-27-8	709	Train	545,55	6,45	Train	537,68	14,32
1439	4,4'-DINITROTRIPHENYLAMINE	C18H13N3O4	1100-10-3	743	Train	559,69	6,31	Train	558,719	7,28
1440	BENZIDINE	C12H12N2	92-87-5	674,85	Train	515,71	5,29	Train	495,615	25,39
1441	2,6-TOLUENE DIISOCYANATE	C9H6N2O2	91-08-7	522	Train	396,87	4,87	Train	394,173	2,17
1442	N-ETHYLANILINE	C8H11N	103-69-5	476,15	Train	351,44	6,71	Train	365,077	6,93
1443	DICYANDIAMIDE	C2H4N4	461-58-5	581	Train	475,57	2,43	Train	478	0,00
1444	DI-tert-BUTYL DISULFIDE	C8H18S2	110-06-5	473,6	Train	335,38	0,23	Train	336,338	1,19
1445	DI-tert-BUTYL SULFIDE	C8H18S	107-47-1	426,15	Train	303,65	0,50	Train	297,644	6,51
1446	2-METHYLTHIACYCLOPENTANE	C5H10S	1795-09-1	405,6	Train	299,87	0,78	Test	291,51	9,14
1447	METHYL ISOPROPYL SULFIDE	C4H10S	1551-21-9	357,91	Train	265,08	1,08	Train	264,77	0,77
1448	PHENOTHIAZINE	C12H9NS	92-84-2	644,15	Train	482,45	3,45	Train	487,341	8,34
1449	2-ETHYL-TETRAHYDROTHIOPHENE	C6H12S	1551-32-2	429,15	Train	316,45	2,45	Test	307,115	6,89
1450	2-PROPYLBENZOTHIOPHENE	C11H12S	16587-32-9	563,6	Train	411,78	0,78	Train	402,555	8,45
1451	2-BUTYLBENZOTHIOPHENE	C12H14S	17890-53-8	581,8	Train	423,91	0,09	Train	413,028	10,97
1452	2-ETHYLTHIOPHENE	C6H8S	872-55-9	407,15	Train	300,49	0,34	Train	308,921	8,77
1453	2-n-PROPYLTHIOPHENE	C7H10S	1551-27-5	431,65	Train	317,71	0,12	Train	323,685	6,10
1454	2,5-DIMETHYLTHIOPHENE	C6H8S	638-02-8	409,95	Train	298,89	1,85	Test	302,328	5,29
1455	ETHYL METHYL DISULFIDE	C3H8S2	20333-39-5	407,15	Train	300,84	0,16	Train	305,658	4,66
1456	ETHYL PROPYL DISULFIDE	C5H12S2	30453-31-7	446,85	Test	324,67	0,98	Train	329,477	3,83
1457	METHYL PHENYL SULFIDE	C7H8S	100-68-5	467,46	Train	349,87	4,72	Train	338,141	7,01
1458	DI-n-BUTYL SULFIDE	C8H18S	544-40-1	461,95	Train	336,52	3,37	Test	329,698	3,45
1459	2,7-DIMETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	16587-40-9	528,7	Train	385,11	0,11	Train	394,913	9,91
1460	DIISOPENTYLSULFIDE	C10H22S	544-02-5	488,45	Test	349,78	7,26	Train	343,106	13,93
1461	DIPHENYL DISULFIDE	C12H10S2	882-33-7	583,15	Train	436,58	2,42	Train	444,346	5,35
1462	4-METHYL DIBENZOTHIOPHENE	C13H10S	7372-88-5	622,8	Train	448,48	1,52	Train	453,254	3,25
1463	ETHYL PROPYL SULFIDE	C5H12S	4110-50-3	391,65	Train	287,66	2,01	Train	284,011	1,64
1464	METHYL PENTYL SULFIDE	C6H14S	1741-83-9	418,15	Train	309,76	1,76	Train	305,899	2,10
1465	2-ETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	1196-81-2	529,8	Train	388,14	0,86	Train	391,619	2,62
1466	2,3-DIMETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	4923-91-5	538	Train	392,45	5,55	Train	386,572	11,43
1467	ETHYL n-PENTYL SULFIDE	C7H16S	26158-99-6	442,7	Test	323,39	0,39	Test	315,247	7,75
1468	2,3,5-TRIMETHYLTHIOPHENE	C7H10S	1795-05-7	437,65	Train	318,80	0,80	Train	312,802	5,20
1469	DIISOPROPYL SULFIDE	C6H14S	625-80-9	393,16	Train	280,56	0,41	Train	280,15	0,00
1470	2,3-DIMETHYLTHIOPHENE	C6H8S	632-16-6	414,76	Train	304,80	0,80	Train	302,072	1,93
1471	3,4-DIMETHYLTHIOPHENE	C6H8S	632-15-5	418,15	Test	304,87	0,87	Train	302,328	1,67
1472	3-ETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	31283-14-4	531,5	Train	389,39	2,39	Train	391,619	4,62
1473	3,5-DIMETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	1964-45-0	537,21	Train	393,19	7,19	Train	396,626	10,63
1474	ETHYL TERT-BUTYL DISULFIDE	C6H14S2	4151-69-3	448,81	Train	322,43	1,43	Train	325,875	4,88
1475	ETHYLENE GLYCOL 2-ETHYLHEXYL ETHER	C10H22O2	1559-35-9	501,15	Train	375,55	4,40	Train	388,368	17,22
1476	PROPYLENE GLYCOL ETHYL ETHER ACETATE	C7H14O3	54839-24-6	438	Train	330,84	0,84	Train	326,231	3,77

1477	DIPROPYLENE GLYCOL t-BUTYL ETHER	C10H22O3	132739-31-2	515	Train	382,33	12,67	Train	376,169	18,83
1478	DICHLOROACETIC ACID	C2H2Cl2O2	79-43-6	467,15	Train	392,29	12,71	Train	381,059	23,94
1479	PROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER	C4H10O2	107-98-2	393,25	Train	297,89	7,11	Test	293,391	11,61
1480	DIPROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER	C7H16O3	34590-94-8	461,45	Train	350,55	3,40	Train	352,757	5,61
1481	PROPYLENE GLYCOL 1-tert-BUTYL ETHER	C7H16O2	57018-52-7	425,2	Train	315,53	2,62	Train	325,15	7,00
1482	TRIPROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER	C10H22O4	25498-49-1	515,55	Train	388,84	5,31	Train	397,408	3,26
1483	PROPYLENE GLYCOL 2-tert-BUTYL ETHER	C7H16O2	94023-15-1	425,15	Train	317,35	9,66	Train	329,739	2,74
1484	p-CHLOROANILINE	C6H6ClN	106-47-8	503,65	Train	387,15	1,15	Train	390,597	4,60
1485	TRIETHYLENE GLYCOL n-BUTYL ETHER	C10H22O4	143-22-6	551,15	Test	416,41	0,41	Train	421,15	5,15
1486	TRIETHYLENE GLYCOL MONOETHYL ETHER	C8H18O4	112-50-5	529,15	Test	401,85	6,30	Train	400,471	7,68
1487	PROPYLENE GLYCOL MONOALLYL ETHER	C6H12O2	21460-36-6	428,15	Test	321,60	5,96	Train	321,99	5,56
1488	2,3-EPOXY-1-PROPANOL	C3H6O2	556-52-5	433,65	Train	342,02	2,13	Train	338,533	5,62
1489	2-HEXOXYETHANOL	C8H18O2	112-25-4	481,45	Test	363,53	0,38	Test	371,166	8,02
1490	MONOOLEIN	C21H40O4	111-03-5	714	Train	530,94	11,94	Train	545,869	26,87
1491	DIPROPYLENE GLYCOL n-PROPYL ETHER	C9H20O3	29911-27-1	485,45	Test	363,18	2,03	Train	373,038	11,89
1492	PROPYLENE GLYCOL n-PROPYL ETHER	C6H14O2	1569-01-3	421,85	Train	317,91	3,25	Test	323,7	2,55
1493	DIETHYLENE GLYCOL MONOBUTYL ETHER ACETATE	C10H20O4	124-17-4	518,45	Train	390,23	1,08	Test	388,551	0,60
1494	3-HYDROXY-2-METHYL PROPIONALDEHYDE	C4H8O2	38433-80-6	440	Train	344,66	9,34	Train	344,169	9,83
1495	HYDROXYACETONITRILE	C2H3NO	107-16-4	467	Test	366,68	27,32	Train	374,123	19,88
1496	AMINOACETONITRILE	C2H4N2	540-61-4	425	Train	336,96	6,04	Train	344,133	1,13
1497	PHENYLACETONITRILE	C8H7N	140-29-4	506,65	Train	374,45	0,30	Train	374,15	0,00
1498	N,N-DIETHYLHYDROXYLAMINE	C4H11NO	3710-84-7	403,7	Train	307,67	10,48	Train	315,705	2,45
1499	DIOLEIN	C39H72O5	2465-32-9	920	Test	636,07	83,93	Test	606,697	113,30
1500	CROTYL GLYCOL ETHER	C6H12O2	52458-04-5	453,1	Train	343,13	4,87	Train	348,243	0,24
1501	sec-BUTENYL GLYCOL ETHER	C6H12O2	100524-60-5	427,4	Train	325,34	7,66	Train	340,729	7,73
1502	MALATHION	C10H19O6PS 2	121-75-5	654	Train	471,61	0,61	Train	471	0,00
1503	N-METHYLTHIOPYRROLIDONE	C5H9NS	10441-57-3	557	Train	407,45	0,45	Train	407	0,00
1504	PENTAFLUOROETHYL TRIFLUOROVINYL ETHER	C4F8O	10493-43-3	281,15	Train	245,15	12,15	Train	232,027	0,97
1505	TRIFLUOROMETHYL TRIFLUOROVINYL ETHER	C3F6O	1187-93-5	247,15	Train	213,12	4,12	Train	214,201	5,20
1506	1-ETHOXY-2-PROPANOL	C5H12O2	1569-02-4	405,7	Test	306,53	6,62	Train	308,936	4,21
1507	1-tert-BUTOXY-2-[2-(HYDROXY)PROPOXY]PROPANE	C10H22O3	58797-58-3	528	Train	388,90	14,10	Train	374,249	28,75
1508	METHYL GLYCOLATE	C3H6O3	96-35-5	424,15	Train	332,37	6,78	Train	334,198	4,95
1509	tert-BUTYL METHACRYLATE	C8H14O2	585-07-9	409,15	Train	299,06	1,09	Test	312,753	12,60
1510	TETRAETHOXYSILANE	C8H20O4Si	78-10-4	440,9	Train	328,47	3,65	Train	344,622	19,80
1511	gamma-AMINOPROPYLTRIMETHOXYSILANE	C9H23NO3Si	919-30-2	493,05	Train	370,29	1,03	Train	383,107	13,85
1512	HEXADECAMETHYLCYCLOOCTASILOXANE	C16H48O8Si 8	556-68-3	576,5	Train	414,58	9,58	Train	414,454	9,45
1513	EICOSAMETHYLNONASILOXANE	C20H60O8Si 9	2652-13-3	606,4	Test	425,85	6,19	Test	448,188	16,15
1514	HEXACOSAMETHYLDODECASILOXANE	C26H78O11S i12	208768	665,4	Train	463,25	7,75	Train	500,191	29,19
1515	(3-METHYLACRYLOXYPROPYL)TRICHLOROSILANE	C7H11Cl3O2 Si	7351-61-3	523,8	Train	409,85	12,85	Train	398,098	1,10
1516	METHYL CHLOROSILANE	CH5ClSi	993-00-0	281,85	Train	220,48	2,48	Train	214,872	3,13
1517	METHYL DICHLOROSILANE	CH4Cl2Si	75-54-7	314,7	Train	250,03	8,88	Train	251,727	10,58
1518	METHYL TRICHLOROSILANE	CH3Cl3Si	75-79-6	339,55	Test	268,18	7,97	Test	280,781	4,63
1519	VINYLTRICHLOROSILANE	C2H3Cl3Si	75-94-5	363,85	Train	286,36	3,21	Train	301,327	18,18
1520	3-(TRIETHOXYSILYL)PROPIONITRILE	C9H19NO3Si	919-31-3	512,06	Train	383,66	10,51	Test	418,854	45,70
1521	TRIS(2-METHOXYETHOXY)VINYLSILANE	C11H24O6Si	1067-53-4	550,25	Train	414,08	25,93	Train	414,598	26,45
1522	METHYL SILICATE	C4H12O4Si	681-84-5	393,27	Train	299,98	5,83	Train	288,014	6,14
1523	3-CHLOROPROPYLTRIMETHOXYSILANE	C6H15ClO3Si	2530-87-2	472,15	Test	363,98	12,50	Train	344,559	6,92
1524	[3-(2,3-EPOXYPROXY)PROPYL]TRIMETHOXYSILANE	C9H20O5Si	2530-83-8	535	Train	408,53	0,38	Train	393,604	14,55
1525	BIS[3-(TRIMETHOXYSILYL)PROPYL]DISULFIDE	C12H30O6S2 Si2	35112-74-4	599,5	Train	443,08	7,92	Train	466,288	15,29
1526	METHYL SILANE	CH6Si	992-94-9	216,25	Train	162,98	0,02	Train	163	0,00

1527	DIMETHYL SILANE	C2H8Si	1111-74-6	253,55	Train	192,38	4,38	Train	186,737	1,26
1528	TRIMETHYL SILANE	C3H10Si	993-07-7	279,85	Train	209,19	5,19	Train	199,455	4,55
1529	DIMETHYLCHLOROSILANE	C2H7ClSi	1066-35-9	308,65	Train	238,05	7,10	Train	226,61	18,54
1530	TRIMETHYLCHLOROSILANE	C3H9ClSi	75-77-4	330,75	Train	245,63	0,63	Test	233,29	11,71
1531	DIMETHYLDICHLOROSILANE	C2H6Cl2Si	75-78-5	343,35	Train	263,17	0,98	Train	257,918	6,23
1532	DECAMETHYLCYCLOPENTASILOXANE	C10H30O5Si 5	541-02-6	484,1	Train	351,00	0,85	Test	335,228	14,92
1533	DODECAMETHYLCYCLOHEXASILOXANE	C12H36O6Si 6	540-97-6	518,15	Train	374,67	8,52	Test	364,382	1,77
1534	DIPHENYLDICHLOROSILANE	C12H10Cl2Si	80-10-4	577,25	Test	435,62	20,47	Test	410,941	4,21
1535	ETHYLTRICHLOROSILANE	C2H5Cl3Si	115-21-9	371,05	Train	292,36	4,21	Test	296,975	8,83
1536	DICHLORODIETHYLSILANE	C4H10Cl2Si	1719-53-5	403,15	Train	307,45	10,30	Train	291,8	5,35
1537	ETHYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C8H10O2	3071-32-7	536	Train	427,77	10,77	Train	396,126	20,87
1538	2,6-DIAMINOTOLUENE	C7H10N2	823-40-5	557	Train	422,90	1,10	Train	425,204	1,20
1539	ACETOVANILLONE	C9H10O3	498-02-2	570,65	Train	441,61	0,39	Train	436,977	5,02
1540	VANILLIN	C8H8O3	121-33-5	558	Train	429,11	5,89	Train	430,448	4,55
1541	DIGLYCOLIC ACID	C4H6O5	110-99-6	610	Train	494,50	5,50	Train	460,643	39,36
1542	LEVULINIC ACID	C5H8O3	123-76-2	530	Train	407,07	2,94	Test	399,676	10,32
1543	ETHYLENE GLYCOL MONOPROPYL ETHER	C5H12O2	2807-30-9	424,5	Test	323,01	0,86	Train	332,155	10,01
1544	2-(2-BUTOXYETHOXY)ETHANOL	C8H18O3	112-34-5	504,15	Train	381,77	3,62	Test	386,239	8,09
1545	m-CHLOROANILINE	C6H6ClN	108-42-9	501,65	Test	381,48	0,48	Test	382,124	1,12
1546	4-CHLORO-3-NITROBENZOTRIFLUORIDE	C7H3ClF3NO 2	121-17-5	495,73	Train	378,91	4,76	Train	390,572	16,42
1547	3,4-DICHLOROPHENYL ISOCYANATE	C7H3Cl2NO	102-36-3	509,2	Train	392,32	6,32	Train	388,168	2,17
1548	3-NITROBENZOTRIFLUORIDE	C7H4F3NO2	98-46-4	475,93	Train	359,22	1,78	Train	366,811	5,81
1549	TRICHLOROACETALDEHYDE	C2HCl3O	75-87-6	370,85	Train	313,95	34,06	Train	334,48	13,52
1550	TRICHLOROACETIC ACID	C2HCl3O2	76-03-9	470,78	Train	411,02	15,98	Train	398,884	28,12
1551	CHLOROACETALDEHYDE	C2H3ClO	107-20-0	358	Test	279,48	16,52	Train	292,422	3,58
1552	DICHLOROACETALDEHYDE	C2H2Cl2O	79-02-7	362	Train	294,08	6,92	Train	311,632	10,63
1553	1-CHLORO-2,4-DINITROBENZENE	C6H3ClN2O4	97-00-7	588	Test	450,35	16,65	Train	455,156	11,84
1554	p-DIMETHYLAMINOBENZALDEHYDE	C9H11NO	100-10-7	588	Train	437,01	16,86	Train	410,655	9,50
1555	ETHYL CHLOROFORMATE	C3H5ClO2	541-41-3	366	Train	288,36	0,79	Test	298,593	9,44
1556	METHOXYACETIC ACID	C3H6O3	625-45-6	478,26	Train	387,79	1,21	Train	389	0,00
1557	METHYL CHLOROFORMATE	C2H3ClO2	79-22-1	344	Train	271,68	13,47	Train	282,487	2,66
1558	TETRACHLOROTHIOPHENE	C4Cl4S	6012-97-1	506,54	Train	397,46	0,46	Train	397	0,00
1559	3,4-DICHLOROANILINE	C6H5Cl2N	95-76-1	545	Train	419,63	11,48	Test	404,558	3,59
1560	1,2-DICHLORO-4-NITROBENZENE	C6H3Cl2NO2	99-54-7	529	Train	406,55	10,40	Train	415,866	19,72
1561	o-CHLORONITROBENZENE	C6H4ClNO2	88-73-3	519	Train	395,82	1,33	Train	387,532	9,62
1562	p-CHLORONITROBENZENE	C6H4ClNO2	100-00-5	515,15	Train	395,24	1,91	Train	402,549	5,40
1563	CYCLOHEXANONE OXIME	C6H11NO	100-64-1	481,15	Train	362,58	0,43	Train	362,15	0,00
1564	VINYLTRIMETHOXSILANE	C5H12O3Si	317069	397,4	Train	299,81	3,66	Test	287,094	9,06
1565	TRIMETHOXSILANE	C3H10O3Si	2487-90-3	357,5	Train	269,19	0,04	Train	269,15	0,00
1566	DIMETHYLDIMETHOXSILANE	C4H12O2Si	1112-39-6	354,55	Train	266,56	3,41	Test	241,332	21,82
1567	PHENYLTRICHLOROSILANE	C6H5Cl3Si	98-13-5	474,95	Train	372,38	8,23	Train	361,995	2,16
1568	PHENYLMETHYLDICHLOROSILANE	C7H8Cl2Si	149-74-6	477,35	Train	363,06	9,91	Test	344,854	8,30
1569	TRIMETHYL SILANOL	C3H10OSi	1066-40-6	372,15	Train	279,04	17,96	Test	292,618	4,38
1570	TETRADECAMETHYLHEXASILOXANE	C14H42O5Si 6	107-52-8	532,95	Test	377,48	2,33	Train	380,454	5,30
1571	DECAMETHYLTETRAASILOXANE	C10H30O3Si 4	141-62-8	467,55	Train	333,03	3,12	Test	322,638	13,51
1572	PYRUVIC ACID	C3H4O3	127-17-3	438,15	Train	349,67	5,48	Train	370,119	14,97
1573	BIS(CHLOROMETHYL)ETHER	C2H4Cl2O	542-88-1	378	Test	298,39	8,61	Train	296,836	10,16
1574	BIS(CYANOETHYL)ETHER	C6H8N2O	1656-48-0	579	Train	439,65	9,35	Train	439,851	9,15
1575	3-AMINO-1-PROPANOL	C3H9NO	156-87-6	460,65	Train	373,12	1,03	Train	374,15	0,00
1576	1-AMINO-2-PROPANOL	C3H9NO	78-96-6	432,61	Train	341,70	5,34	Train	352,963	5,92
1577	METHYL CHLOROACETATE	C3H5ClO2	96-34-4	402,97	Train	312,11	12,71	Train	289,12	35,70
1578	ETHYL THIOLACETATE	C4H8OS	625-60-5	388	Train	293,51	1,51	Test	302,812	10,81
1579	ACETOACETANILIDE	C10H11NO2	102-01-2	648	Train	457,16	34,01	Train	442,201	19,05
1580	ACETANILIDE	C8H9NO	103-84-4	576,95	Train	413,62	20,53	Train	394,657	39,49
1581	8-HYDROXYQUINOLINE	C9H7NO	148-24-3	540	Train	409,27	1,27	Train	419,948	11,95
1582	LACTONITRILE	C3H5NO	78-97-7	457	Train	357,99	7,84	Train	352,722	2,57

1583	LYSINE	C6H14N2O2	56-87-1	615	Train	497,57	6,57	Train	485,047	5,95
1584	L-GLUTAMIC ACID	C5H9NO4	56-86-0	591	Train	491,86	1,86	Train	516,031	26,03
1585	6-HYDROXYHEXANOIC ACID	C6H12O3	1191-25-9	557	Train	446,28	0,72	Train	439,008	7,99
1586	LACTIC ACID	C3H6O3	50-21-5	490	Train	391,29	20,71	Train	389,676	22,32
1587	TARTARIC ACID	C4H6O6	133-37-9	660	Train	522,54	39,39	Train	517,82	34,67
1588	HYDROXYCAPROIC ACID	C6H12O3	6064-63-7	518	Train	410,72	6,28	Train	421,357	4,36
1589	ETHYL LACTATE	C5H10O3	97-64-3	427,65	Train	332,05	1,05	Train	343,072	12,07
1590	2-ETHOXYETHYL ACETATE	C6H12O3	111-15-9	429,74	Train	325,89	1,26	Test	320,802	6,35
1591	DIETHYLENE GLYCOL ETHYL ETHER ACETATE	C8H16O4	112-15-2	490,55	Train	371,15	3,00	Train	364,864	3,29
1592	METHYL ACETOACETATE	C5H8O3	105-45-3	444,45	Train	337,75	5,26	Train	325,011	17,99
1593	ETHYL ACETOACETATE	C6H10O3	141-97-9	453,95	Train	344,08	0,93	Train	338,987	4,16
1594	METHYL CYANOACETATE	C4H5NO2	105-34-0	478,24	Train	381,00	0,35	Train	376,199	4,45
1595	ETHYL CYANOACETATE	C5H7NO2	105-56-6	479,15	Train	380,83	2,33	Train	387,807	4,66
1596	3-METHOXYPROPIONITRILE	C4H7NO	110-67-8	438,15	Test	332,20	5,95	Train	344,164	6,01
1597	ISOXAZOLE	C3H3NO	288-14-2	367,9	Train	284,05	0,95	Train	302,729	17,73
1598	1,4-BENZENEDICARBOXYLIC ACID,BIS(2,3-DIHYDROXYPROPYL)ESTER	C14H18O8	66032-51-7	715	Train	586,61	8,61	Train	597,523	19,52
1599	TEREPHTHALOYL CHLORIDE	C8H4Cl2O2	100-20-9	537,65	Train	436,36	16,79	Train	445,834	7,32
1600	1-CHLORO-2-PROPANOL	C3H7ClO	127-00-4	399,65	Test	316,25	8,57	Train	322,077	2,74
1601	ACRYLOXY PROPIONIC ACID	C6H8O4	24615-84-7	533,8	Train	417,71	3,29	Train	412,011	8,99
1602	tert-BUTYLFORMAMIDE	C5H11NO	2425-74-3	475,15	Train	366,01	10,86	Train	383,685	28,54
1603	N-METHYLACETAMIDE	C3H7NO	79-16-3	478,15	Train	379,97	1,18	Train	381,15	0,00
1604	THIODIGLYCOL	C4H10O2S	111-48-8	555,15	Train	440,75	7,60	Train	417,802	15,35
1605	DIMERCAPTOETHYL ETHER	C4H10OS2	91352	490,15	Test	355,47	15,69	Train	353,466	17,68
1606	2-MERCAPTOETHANOL	C2H6OS	60-24-2	430,9	Train	330,39	9,76	Train	335,955	4,20
1607	ETHYLTHIOETHANOL	C4H10OS	110-77-0	456,65	Train	349,60	0,55	Train	352,707	2,56
1608	1,2-ETHANEDITHIOL	C2H6S2	540-63-6	419,2	Train	318,11	0,04	Train	318,15	0,00
1609	DIETHYLETHANOLAMINE	C6H15NO	100-37-8	436,15	Train	330,70	0,55	Train	343,864	13,71
1610	METHYLETHANOLAMINE	C3H9NO	109-83-1	431,15	Train	346,70	1,55	Train	348,185	3,04
1611	DIMETHYLETHANOLAMINE	C4H11NO	108-01-0	407,15	Train	314,43	2,28	Train	330,642	18,49
1612	DIISOPROPANOLAMINE	C6H15NO2	110-97-4	521,9	Train	423,03	14,88	Train	439,363	31,21
1613	N-(2-HYDROXYETHYL)PIPERAZINE	C6H14N2O	103-76-4	519,11	Train	400,23	10,23	Train	405,049	15,05
1614	3-METHOXYISOPROPYLAMINE	C4H11NO	37143-54-7	370	Train	282,16	1,01	Train	278,133	3,02
1615	ETHYLENE GLYCOL MONOBUTYL ETHER ACETATE	C8H16O3	112-07-2	465,15	Train	350,92	6,77	Train	348,48	4,33
1616	ETHYL VANILLIN	C9H10O3	121-32-4	567	Train	434,94	13,06	Train	439,781	8,22
1617	2-HYDROXYETHYL ACRYLATE	C5H8O3	818-61-1	484	Train	372,20	5,80	Train	373,634	4,37
1618	2-HYDROXYPROPYL METHACRYLATE	C7H12O3	923-26-2	485	Train	365,84	8,31	Train	375,964	1,81
1619	ETHYL-3-ETHOXYPROPIONATE	C7H14O3	763-69-9	441,65	Test	329,98	1,17	Train	333,475	2,33
1620	BIS-(2-HYDROXYETHYL) TEREPHTHALATE	C12H14O6	959-26-2	683	Train	544,88	4,12	Train	530,253	18,75
1621	2-HYDROXYPROPYL ACRYLATE	C6H10O3	999-61-1	498,15	Train	379,46	7,31	Train	366,385	5,77
1622	DI-(2-CHLOROETHOXY)METHANE	C5H10Cl2O2	111-91-1	491,25	Test	383,99	0,84	Train	368,125	15,03
1623	SACCHARIN	C7H5NO3S	81-07-2	661,9	Train	526,75	6,75	Train	523,161	3,16
1624	1-METHYLVINYL ACETATE	C5H8O2	108-22-5	370	Train	278,12	4,88	Test	286,73	3,73
1625	2-PENTOXYETHANOL	C7H16O2	6196-58-3	460,65	Train	348,73	0,58	Train	358,777	10,63
1626	1-CHLORO-3-PROPANOL	C3H7ClO	627-30-5	434,15	Train	343,97	2,19	Train	341,972	4,18
1627	TRIFLUOROACETAMIDE	C2H2F3NO	354-38-1	435,65	Train	364,03	6,97	Train	380,789	9,79
1628	METHOXYACETONE	C4H8O2	5878-19-3	387,65	Train	287,91	9,24	Train	285,749	11,40
1629	DILACTIDE (dl)	C6H8O4	95-96-5	528,2	Train	423,18	4,82	Test	434,352	6,35
1630	STIGMASTEROL	C29H48O	83-48-7	778	Train	558,01	2,99	Train	536,27	24,73
1631	2-(2-PENTOXYETHOXY)ETHANOL	C9H20O3	18912-81-7	519,5	Train	392,38	9,38	Train	397,408	14,41
1632	METHYL-4-FORMYLBENZOATE	C9H8O3	1571-08-0	543,2	Train	410,50	4,50	Train	406,264	0,26
1633	HYDROXYPIVALYL HYDROXYPIVALATE	C10H20O4	1115-20-4	565,15	Train	430,35	1,35	Train	443,592	14,59
1634	TETRAETHYLENE GLYCOL MONOBUTYL ETHER	C12H26O5	1559-34-8	577,15	Train	435,05	3,95	Train	451,586	12,59
1635	METHYL para-TOLUATE	C9H10O2	99-75-2	490,15	Test	365,46	1,75	Train	365,844	2,13
1636	PHENYL ACETATE	C8H8O2	122-79-2	468,85	Train	388,37	39,22	Train	375,734	26,58
1637	4-[(TETRAHYDRO-2-FURANYL)OXY]-1-BUTANOL	C8H16O3	64001-06-5	520	Train	401,52	3,48	Train	403,999	1,00
1638	PROPYLENE GLYCOL n-BUTYL ETHER	C7H16O2	5131-66-8	443,15	Train	333,09	0,94	Train	337,739	5,59
1639	DIPROPYLENE GLYCOL n-BUTYL ETHER	C10H22O3	29911-28-2	504,8	Test	376,66	3,11	Train	384,786	11,24
1640	TRIETHYLENE GLYCOL BIS(2-	C22H42O6	94-28-0	670,15	Train	481,94	1,79	Train	496,82	16,67

ETHYLHEXANOATE)										
1641	4,6-DINITRO-o-sec-BUTYLPHENOL	C10H12N2O 5	88-85-7	605,15	Train	470,25	20,10	Train	488,643	38,49
1642	t-BUTYL ACETOACETATE	C8H14O3	1694-31-1	457,65	Train	340,73	1,58	Train	353,604	14,45
1643	TRIETHYLENE GLYCOL n-PROPYL ETHER	C9H20O4	23305-64-8	538,5	Train	407,90	2,10	Test	411,031	1,03
1644	TRIETHYLENE GLYCOL n-HEXYL ETHER	C12H26O4	25961-89-1	569,7	Train	428,19	0,19	Test	440,173	12,17
1645	1,3-DIMETHYL UREA	C3H8N2O	96-31-1	542,15	Train	428,94	1,21	Train	430,15	0,00
1646	MONOMETHYL UREA	C2H6N2O	598-50-5	563,9	Train	464,34	2,67	Train	467	0,00
1647	BIS-(2-AMINOETHYL)ETHER	C4H12N2O	2752-17-2	457,15	Train	350,49	11,51	Train	344,198	17,80
1648	4-(2-AMINOETHYL)MORPHOLINE	C6H14N2O	50465	475,15	Train	356,74	2,42	Train	351,156	7,99
1649	N-ETHYLMORPHOLINE	C6H13NO	100-74-3	411,65	Train	304,86	0,71	Train	303,199	0,95
1650	PROPYLENE GLYCOL alpha-METHYLBENZYL ETHER	C11H16O2	871518-84-2	526,3	Train	396,53	6,53	Train	391,346	1,35
1651	2-(alpha-METHYLBENZYLOXY)-1-PROPANOL	C11H16O2	857237-25-3	529	Train	400,84	14,84	Train	394,936	8,94
1652	METHYL-3-MERCAPTOPROPIONATE	C4H8O2S	2935-90-2	434,1	Train	321,37	11,78	Train	325,709	7,44
1653	MONOMETHYL TEREPHTHALATE	C9H8O4	1679-64-7	593,3	Test	458,69	13,32	Train	470,357	1,64
1654	ETHYL LEVULINATE	C7H12O3	539-88-8	478,95	Train	353,38	9,78	Test	353,244	9,91
1655	4-(2-METHOXYETHYL)MORPHOLINE	C7H15NO2	10220-23-2	467,02	Train	347,54	3,46	Train	337,181	13,82
1656	4-(2-HYDROXYETHYL)MORPHOLINE	C6H13NO2	622-40-2	492,65	Train	379,14	1,01	Train	379,86	0,29
1657	CYCLOHEXYL ISOCYANATE	C7H11NO	3173-53-3	442,15	Train	333,34	7,34	Train	331,006	5,01
1658	2,2',2''-NITRILOTRIS-ACETONITRILE	C6H6N4	7327-60-8	623	Train	490,49	0,52	Train	491	0,00
1659	METHYL ISOCYANATE	C2H3NO	624-83-9	312	Train	251,01	0,99	Train	252	0,00
1660	ISOPHORONE DIISOCYANATE	C12H18N2O 2	4098-71-9	562	Train	421,84	6,31	Train	421,066	7,08

Annexe B: Points d'auto-inflammations

B.1 Valeurs des contributions de groupes :

Tableau B.1 : Valeurs des contributions de groupes du deuxième ordre donnant AIP :

N°	Groupe	Occurrence	Paramètres
1	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}$	94	0,08334524
2	$(\text{CH}_3)_3\text{C}$	41	0,14854341
3	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)$	9	0,11590832
4	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CH}_3)_2$	5	0,06142491
5	$\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{CH}_3)_2$	2	-0,10527089
6	$\text{CH}_n=\text{CH}_m-\text{CH}_p=\text{CH}_k$ (k,m,n,p in 0..2)	7	0,01855491
7	$\text{CH}_3-\text{CH}_m=\text{CH}_n$ (m,n in 0..2)	67	0,05220737
8	$\text{CH}_2-\text{CH}_m=\text{CH}_n$ (m,n in 0..2)	104	-0,29457823
9	$\text{CH}_p-\text{CH}_m=\text{CH}_n$ (m,n in 0..2; p in 0..1)	14	0,01706527
10	CHCHO or CCHO	7	-2,46473385
11	CH_3COCH_2	19	0,14764096
12	CH_3COCH or CH_3COC	3	0,17959846
13	CHCOOH or CCOOH	8	-0,16990453
14	CH_3COOCH or CH_3COOC	6	0,13095098
15	CO-O-CO	4	-1,42884768
16	CHOH	36	-0,1023759
17	COH	8	-0,06414828
18	$\text{CH}_3\text{COCH}_n\text{OH}$ (n in 0..2)	1	0,76716498
19	NCCHOH or NCCOH	1	408,986198
20	$\text{OH-CH}_n\text{-COO}$ (n in 0..2)	3	-0,25829954
21	$\text{CH}_m(\text{OH})\text{CH}_n(\text{OH})$ (m,n in 0..2)	10	0,05741922
22	$\text{CH}_m(\text{OH})\text{CH}_n(\text{NH}_p)$ (m,n,p in 0..2)	5	0,50101413
23	$\text{CH}_m(\text{NH}_2)\text{CH}_n(\text{NH}_2)$ (m,n in 0..2)	1	0,7973356
24	$\text{CH}_m(\text{NH})\text{CH}_n(\text{NH}_2)$ (m,n in 1..2)	5	0,58261814
25	$\text{HOOC-CH}_n\text{-COOH}$ (n in 1..2)	1	0,06178703
26	$\text{HOOC-CH}_n\text{-CH}_m\text{-COOH}$ (n, m in 1..2)	3	1,59025185
27	$\text{HO-CH}_n\text{-COOH}$ (n in 1..2)	3	-0,28906916
28	$\text{NC-CH}_n\text{-CH}_m\text{-CN}$ (n, m in 1..2)	1	-0,3814863
29	$\text{OH-CH}_n\text{-CH}_m\text{-CN}$ (n, m in 1..2)	1	0,01566224
30	$\text{COO-CH}_n\text{-CH}_m\text{-OOC}$ (n, m in 1..2)	4	-0,16978824
31	$\text{OOC-CH}_m\text{-CH}_m\text{-COO}$ (n, m in 1..2)	2	-0,71730787
32	COCH_nCOO (n in 1..2)	4	-1,61397231

33	CH _m -O-CH _n =CH _p (m,n,p in 0..3)	3	-0,28220886
34	CH _m =CH _n -F (m,n in 0..2)	2	5,32676
35	CH _m =CH _n -Br (m,n in 0..2)	1	1,12592801
36	CH _m =CH _n -Cl (m,n in 0..2)	9	0,50928957
37	CH _m =CH _n -CN (m,n in 0..2)	3	-2,07769604
38	CH _n =CH _m -COO-CH _p (m,n,p in 0..3)	22	-0,38082594
39	CH _m =CH _n -CHO (m,n in 0..2)	5	0,08225379
40	CH _m =CH _n -COOH (m,n in 0..2)	6	0,41772249
41	aC-CH _n -X (n in 1..2) X: Halogen	1	1,88672586
42	aC-CH _n -O- (n in 1..2)	4	-0,60751708
43	aC-CH _n -OH (n in 1..2)	5	-0,13037858
44	aC-CH _n -CHO (n in 1..2)	1	1,63690584
45	aC-CH _n -COOH (n in 1..2)	1	0,31534911
46	aC-CH _n -OOC-H (n in 1..2)	1	0,28869945
47	aC-CH _n -OOC (n in 1..2)	2	-0,781899
48	aC-CH _n -COO (n in 1..2)	1	-0,62155743
49	aC-CH(CH ₃) ₂	13	0,17713154
50	aC-C(CH ₃) ₃	5	-0,43938624
51	(CH _n =C) _(cyc) -CHO (n in 0..2)	1	2,0882591
52	(CH _n =C) _{cyc} -CH ₃ (n in 0..2)	15	0,1188891
53	(CH _n =C) _{cyc} -CH ₂ (n in 0..2)	7	0,20450775
54	CH _{cyc} -CH ₃	33	-1,93262344
55	CH _{cyc} -CH ₂	22	-2,23227791
56	CH _{cyc} -CH	2	-2,17903558
57	CH _{cyc} -C	4	-2,09374262
58	CH _{cyc} -CH=CH _n (n in 1..2)	3	-1,46700205
59	CH _{cyc} -C=CH _n (n in 1..2)	2	-2,45209896
60	CH _{cyc} -Cl	1	-1,72051433
61	CH _{cyc} -OH	7	-2,33175597
62	CH _{cyc} -NH ₂	3	11,1096978
63	CH _{cyc} -CN	1	-4,37213961
64	CH _{cyc} -COOH	3	-1,99184093
65	CH _{cyc} -CO	1	-10,2203592
66	CH _{cyc} -S-	1	-2,41284495
67	CH _{cyc} -CHO	2	-2,14369747
68	CH _{cyc} -O-	2	-0,94417085
69	CH _{cyc} -OOC	3	-2,11475721
70	C _{cyc} -CH ₃	23	0,79099381
71	C _{cyc} -CH ₂	5	0,5208629
72	C _{cyc} -OH	4	0,22406855
73	>N _{cyc} -CH ₃	2	-2,65129313
74	>N _{cyc} -CH ₂	8	-3,59307161
75	AROMRINGS ¹ s ²	41	-0,5167985
76	AROMRINGS ¹ s ³	22	-0,26978975
77	AROMRINGS ¹ s ⁴	38	-0,31176621
78	AROMRINGS ¹ s ² s ³	8	-0,3534335
79	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴	20	-0,96941931
80	AROMRINGS ¹ s ³ s ⁵	8	-0,27415966
81	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴	3	-0,13922165
82	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁵	3	-0,50417598
83	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴ s ⁵	3	-0,27014063
84	PYRIDINES ²	1	0,6766574
85	PYRIDINES ³	1	0,22649246
86	PYRIDINES ⁴	1	0,22649246
87	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴ s ⁵	2	-0,509927

B.2 Valeurs des contributions de groupes :

Tableau B.2 : Valeurs des contributions de groupes du troisième ordre donnant AIP :

N°	Groupe	Occurrence	Paramètres
1	HOOC-(CH _n) _m -COOH (<i>m</i> >2, <i>n</i> in 0..2)	5	-0,15804329
2	OH-(CH _n) _m -OH (<i>m</i> >2, <i>n</i> in 0..2)	5	0,14030212
3	NH ₂ -(CH _n) _m -NH ₂ (<i>m</i> >2; <i>n</i> in 0..2))	2	0,86731194
4	NC-(CH _n) _m -CN (<i>m</i> >2)	2	-0,22676195
5	aC-(CH _n =CH _m) _{cyc} (fused rings) (<i>n,m</i> in 0..1)	9	0,09807294
6	aC-aC (different rings)	7	0,88010765
7	aC-CH _n _{cyc} (different rings) (<i>n</i> in 0..1)	1	-1,42808234
8	aC-CH _n _{cyc} (fused rings) (<i>n</i> in 0..1)	9	-0,81738176
9	aC-(CH _n) _m -aC (different rings) (<i>m</i> >1; <i>n</i> in 0..2)	2	-0,97983914
10	CH _{cyc} -CH _{cyc} (different rings)	3	-4,33136364
11	CH _{multiring}	24	-2,13107658
12	C _{multiring}	13	1,38557152
13	aC-CH _m -aC (different rings) (<i>m</i> in 0..2)	5	-0,36664954
14	aC-CO _{cyc} (fused rings)	3	0,01767319
15	aC-S _{cyc} (fused rings)	14	-1,50936371
16	aC-NH _n _{cyc} (fused rings) (<i>n</i> in 0..1)	1	0,33482771
17	aC-NH-aC (different rings)	2	1,62740177
18	aC-O-aC (different rings)	1	5,4153297
19	AROM.FUSED[2]	35	-0,33993865
20	AROM.FUSED[2]s ¹	12	-0,35963797
21	AROM.FUSED[2]s ²	5	-0,11758504
22	AROM.FUSED[4a]	3	0,31428205
23	AROM.FUSED[4p]	2	0,21471247
24	AROM.FUSED[4a]s ¹	2	0,09846068
25	PYRIDINE.FUSED[2-iso]	1	0,0738645
26	aC-CONHCH ₂ -CH _{cyc} (different rings)	1	

B.3 Résultats de prédiction des points d'auto-inflammation

N°	: Numéro de classement d'un composé
Name	: Nom chimique d'un composé
CAS	: Numéro d'enregistrement unique (Chemical Abstracts Service).
Type	: Ensemble de molécules d'apprentissage (training) ou de test
EMA	: Erreur de prédiction en K.
Pred AIT	: Prédiction du point d'auto-inflammation en K.

Tableau B.3 : Banque de données des points d'auto-inflammation pour les 1196 molécules

N°	Name	CAS	Type	Pred AIT	EMA(K)
1	chlorodifluoromethane	75-45-6	Train	875,81	29,19
2	dichlorofluoromethane	75-43-4	Train	895,81	70,66
3	dichloromethane	75-09-2	Train	712,61	175,54
4	nitromethane	75-52-5	Train	652,16	0,01
5	methyldichlorosilane	75-54-7	Train	519,15	16
6	trichloroethylene	79-01-6	Train	736,48	53,33
7	1,1,2,2-tetrabromoethane	79-27-6	Train	673,59	65,44
8	1,1-dichloroethylene	75-35-4	Train	754,91	88,09
9	cis-1,2-dichloroethylene	156-59-2	Train	740,7	7,7

10	trans-1,2-dichloroethylene	156-60-5	Train	740,7	7,7
11	1,1-difluoroethylene	75-38-7	Train	889,33	23,67
12	vinylbromide	593-60-2	Train	803,15	0
13	vinylchloride	75-01-4	Train	715,63	29,37
14	1-chloro-1,1-difluoroethane	75-68-3	Train	904,98	0,02
15	acetylchloride	75-36-5	Train	709,23	46,08
16	methylchloroformate	79-22-1	Train	773,81	3,34
17	1,1,1-trichloroethane	71-55-6	Train	810,15	0
18	1,1,2-trichloroethane	79-00-5	Train	790,08	56,93
19	vinyltrichlorosilane	75-94-5	Train	597,08	60,93
20	1,1-dichloroethane	75-34-3	Train	772,33	41,18
21	1,2-dichloroethane	107-06-2	Test	758,65	72,65
22	ethyleneoxide	75-21-8	Train	653,32	48,68
23	methylformate	107-31-3	Train	719,06	9,94
24	2-chloroethanol	107-07-3	Test	723	24,85
25	ethyleneimine	151-56-4	Train	748,3	155,15
26	nitroethane	79-24-3	Train	650,71	17,56
27	dimethylether	115-10-6	Test	576,97	46,18
28	ethanol	64-17-5	Train	681,93	14,07
29	dimethylsulfoxide	67-68-5	Train	488,15	0
30	2-mercaptoethanol	60-24-2	Train	541,86	26,29
31	ethyleneglycol	107-21-1	Train	683,69	14,69
32	dimethylsulfate	77-78-1	Train	553,4	92,25
33	dimethylsulfide	75-18-3	Train	514,8	36,65
34	ethylmercaptan	75-08-1	Train	544,42	27,58
35	dimethylchlorosilane	1066-35-9	Train	522,68	5,53
36	dimethylamine	124-40-3	Train	588,03	6,97
37	ethylamine	75-04-7	Train	606,56	50,44
38	ethylenediamine	107-15-3	Train	658,15	0
39	dimethylsilane	1111-74-6	Train	430,6	72,55
40	malononitrile	109-77-3	Train	868,71	5,71
41	methylacetylene	74-99-7	Train	590,82	22,33
42	acrolein	107-02-8	Train	505,34	1,66
43	oxalicacid	144-62-7	Test	757,92	56,08
44	acrylicacid	79-10-7	Train	748,77	63,62
45	ethylenecarbonate	96-49-1	Train	627,09	55,09
46	3-chloropropene	107-05-1	Test	617,65	140,5
47	alpha-epichlorohydrin	106-89-8	Train	708,99	19,84
48	ethylchloroformate	541-41-3	Train	759,48	13,67
49	1,2,3-trichloropropane	96-18-4	Train	777,86	200,86
50	nitroglycerine	55-63-0	Train	543,13	0,02
51	cyclopropane	75-19-4	Test	676,13	94,87
52	1,1-dichloropropane	78-99-9	Train	757,72	72,28
53	1,2-dichloropropane	78-87-5	Train	756,68	73,32
54	1,3-dichloro-2-propanol	96-23-1	Train	730,93	41,93
55	2,3-dichloro-1-propanol	616-23-9	Train	750,33	61,33
56	methylvinylchlorosilane	124-70-9	Test	609,94	12,21
57	allylalcohol	107-18-6	Train	588,28	62,72
58	methylvinylether	107-25-5	Train	539,88	20,27
59	1,2-propyleneoxide	75-56-9	Train	727,37	24,22
60	acetol	116-09-6	Train	802,99	0,01
61	2,3-epoxy-1-propanol	556-52-5	Train	653,64	34,51
62	ethylformate	109-94-4	Train	692,19	35,96
63	methylacetate	79-20-9	Test	745,95	29,05
64	trioxane	110-88-3	Train	552,32	134,68
65	isopropylchloride	75-29-6	Train	741,5	124,5
66	3-chloro-1,2-propanediol	96-24-2	Train	715,66	35,66
67	allylamine	107-11-9	Test	554,83	92,21
68	n,n-dimethylformamide	68-12-2	Train	493,5	224,65
69	1-nitropropane	108-03-2	Train	627,65	15,35

70	2-nitropropane	79-46-9	Train	701,02	0,02
71	propane	74-98-6	Test	662,7	60,3
72	methylethylether	540-67-0	Train	566,39	103,24
73	2-methoxyethanol	109-86-4	Test	562,44	4,29
74	methylal	109-87-5	Train	526,5	16,15
75	1,2-propyleneglycol	57-55-6	Train	672	22
76	1,3-propyleneglycol	504-63-2	Train	671,6	20,6
77	glycerol	56-81-5	Train	673,67	30,52
78	n-propylmercaptan	107-03-9	Train	537,91	22,09
79	trimethylchlorosilane	75-77-4	Test	682,89	14,74
80	isopropylamine	75-31-0	Train	682,6	9,45
81	n-propylamine	107-10-8	Test	591,5	0,5
82	trimethylamine	75-50-3	Train	570,79	107,64
83	1-amino-2-propanol	78-96-6	Train	676,3	29,26
84	methylethanolamine	109-83-1	Train	627,56	4,41
85	1,3-propanediamine	109-76-2	Train	645,85	15,15
86	trimethoxysilane	2487-90-3	Train	445,03	0,03
87	trimethylsilane	993-07-7	Train	526,49	66,66
88	hexachloro-1,3-butadiene	87-68-3	Train	846,79	36,36
89	maleicanhydride	108-31-6	Test	767,88	17,88
90	succinonitrile	110-61-2	Train	784	0
91	diketene	674-82-8	Train	560,71	22,44
92	fumaricacid	110-17-8	Train	787	226,15
93	thiophene	110-02-1	Train	605,95	62,2
94	chloroprene	126-99-8	Train	629,35	36,2
95	vinylacetonitrile	109-75-1	Train	675,58	6,42
96	1,3-butadiene	106-99-0	Train	595,39	97,76
97	dimethylacetylene	503-17-3	Train	584,2	11,8
98	ethylacetylene	107-00-6	Train	578,23	13,77
99	2,3-dihydrofuran	1191-99-7	Test	617,63	35,48
100	divinylether	109-93-3	Train	620,08	13,07
101	cis-crotonicacid	503-64-0	Train	718,2	49,2
102	trans-crotonicacid	107-93-7	Train	718,2	49,2
103	methacrylicacid	79-41-4	Train	735,81	27,66
104	methylacrylate	96-33-3	Train	686,19	54,96
105	vinylacetate	108-05-4	Train	694,15	5,85
106	propylenecarbonate	108-32-7	Test	651,68	28,68
107	tartaricacid	133-37-9	Train	823,21	122,21
108	acetonecyanohydrin	75-86-5	Train	931	29,15
109	cyclobutane	287-23-0	Train	629,22	70,78
110	isobutene	115-11-7	Test	626,11	112,04
111	di(2-chloroethyl)ether	111-44-4	Train	537,94	104,21
112	1,2-epoxybutane	106-88-7	Train	638,35	73,8
113	1,2-epoxy-2-methylpropane	558-30-5	Train	712,16	0,01
114	ethylvinylether	109-92-2	Train	509,34	34,52
115	methylethylketone	78-93-3	Train	730,96	58,04
116	2-methylpropanal	78-84-2	Train	474,3	3,7
117	tetrahydrofuran	109-99-9	Test	586,48	89,33
118	3-(methylmercapto)propanal	3268-49-3	Train	476,58	51,57
119	acetaldol	107-89-1	Train	502,72	20,43
120	1,3-dioxane	505-22-6	Train	558,85	11,7
121	1,4-dioxane	123-91-1	Test	558,85	105,7
122	isobutyricacid	79-31-2	Train	676,5	16,65
123	methylpropionate	554-12-1	Train	777,31	35,31
124	n-propylformate	110-74-7	Train	661,16	66,99
125	alpha-hydroxyisobutyricacid	594-61-6	Train	715,96	33,04
126	isobutylchloride	513-36-0	Test	714,51	27,51
127	n,n-dimethylacetamide	127-19-5	Train	627,16	0,01
128	morpholine	110-91-8	Train	602,33	19,18
129	1-nitrobutane	627-05-4	Train	608,97	8,03

130	n-butane	106-97-8	Train	637,22	76,22
131	isobutane	75-28-5	Train	690,61	42,54
132	piperazine	110-85-0	Train	689,56	38,59
133	diethylether	60-29-7	Train	522,26	89,11
134	methylisopropylether	598-53-8	Train	569,05	59,05
135	2-methyl-1-propanol	78-83-1	Train	659,5	21,65
136	2-methyl-2-propanol	75-65-0	Train	744,6	6,4
137	methyl-n-propylether	557-17-5	Train	557,23	33,23
138	1,2-butanediol	584-03-2	Train	644,55	20,45
139	1,3-butanediol	107-88-0	Train	618,78	48,22
140	1,4-butanediol	110-63-4	Train	644,24	14,24
141	2,3-butanediol	513-85-9	Train	688,43	13,28
142	n-butylhydroperoxide	4813-50-7	Train	432,66	51,66
143	1,2-dimethoxyethane	110-71-4	Test	521,83	47,01
144	2-ethoxyethanol	110-80-5	Train	553,79	45,64
145	2-methoxypropanol-1	1589-47-5	Train	553,14	26,14
146	diethylsulfate	64-67-5	Train	539,18	128,97
147	n-butylmercaptan	109-79-5	Train	532,1	12,9
148	n-butylamine	109-73-9	Train	578,81	6,19
149	sec-butylamine	13952-84-6	Train	637,52	13,48
150	diethylamine	109-89-7	Train	597	13,85
151	isobutylamine	78-81-9	Test	595,25	55,9
152	dimethylethanolamine	108-01-0	Train	557,7	10,45
153	diethanolamine	111-42-2	Train	752,25	182,75
154	n-aminoethylethanolamine	111-41-1	Train	693,9	52,9
155	dimethyldimethoxysilane	1112-39-6	Train	565,92	59,23
156	tetramethylsilane	75-76-3	Test	706,8	103,65
157	diethylenetriamine	111-40-0	Train	624,66	6,34
158	furfural	98-01-1	Train	589	0
159	cyclopentadiene	542-92-7	Test	688,98	224,17
160	2-methyl-1-butene-3-yne	78-80-8	Train	558,95	0,05
161	1-pentene-3-yne	646-05-9	Train	560,55	1,55
162	1-pentene-4-yne	871-28-3	Train	539,99	1,01
163	glutaronitrile	544-13-8	Train	785,88	57,88
164	furfurylalcool	98-00-0	Train	617,91	45,24
165	n-methylpyrrole	96-54-8	Train	697,15	166
166	cyclopentene	142-29-0	Test	633,47	34,68
167	isoprene	78-79-5	Train	586,05	92,9
168	3-methyl-1-butyne	598-23-2	Train	581,38	13,38
169	1-pentyne	627-19-0	Train	567,47	12,47
170	2-pentyne	627-21-4	Train	572,59	2,41
171	allylacetate	591-87-7	Train	612,99	34,05
172	ethylacrylate	140-88-5	Train	655,82	0,18
173	methylmethacrylate	80-62-6	Test	664,63	43,52
174	n-butylisocyanate	111-36-4	Train	659,47	17,53
175	cyclopentane	287-92-3	Train	597,34	36,81
176	2-methyl-1-butene	563-46-2	Train	572,7	65,3
177	2-methyl-2-butene	513-35-9	Train	572,33	65,67
178	3-methyl-1-butene	563-45-1	Train	619,94	18,21
179	methylisopropylketone	563-80-4	Train	741,18	6,82
180	2-pentanone	107-87-9	Train	707,18	17,97
181	3-pentanone	96-22-0	Train	725,08	0,08
182	n-butylformate	592-84-7	Train	635,99	40,99
183	ethylpropionate	105-37-3	Test	763,63	50,48
184	isobutylformate	542-55-2	Train	668,92	75,77
185	isopropylacetate	108-21-4	Train	750,44	17,29
186	isovaleric acid	503-74-2	Train	685,66	3,49
187	neopentanoic acid	75-98-9	Train	745,55	65,55
188	n-propylacetate	109-60-4	Test	700,67	22,33
189	tetrahydrofurfuryl alcohol	97-99-4	Train	568,49	15,34

190	diethylcarbonate	105-58-8	Train	606,97	0,03
191	cyclopentylamine	1003-03-8	Train	524,61	8,54
192	isopentane	78-78-4	Train	643,43	49,72
193	neopentane	463-82-1	Train	761,12	37,97
194	n-pentane	109-66-0	Train	616,77	100,77
195	malonicacid	141-82-2	Train	748,98	0,02
196	ethylisopropylether	625-54-7	Train	523,47	33,47
197	ethylpropylether	628-32-0	Train	517,99	19,99
198	methyln-butylether	628-28-4	Train	549,22	38,22
199	ethylal	462-95-3	Train	487,6	2,4
200	ethyleneglycolmonopropylether	2807-30-9	Test	546,2	38,05
201	1,5-pentanediol	111-29-5	Train	622,45	14,3
202	2,4-pentanediol	625-69-4	Test	599,6	40,4
203	2-(2-methoxyethoxy)ethanol	111-77-3	Test	515,95	49,95
204	n-pentylmercaptan	110-66-7	Train	526,88	5,12
205	n-pentylamine	110-58-7	Test	567,97	7,03
206	1-chloro-2,4-dinitrobenzene	97-00-7	Train	572,45	132,7
207	1,2,4-trichlorobenzene	120-82-1	Train	749,3	94,96
208	1,3,5-trichlorobenzene	108-70-3	Train	810,38	39,62
209	m-dichlorobenzene	541-73-1	Train	802,34	117,66
210	o-dichlorobenzene	95-50-1	Train	783,56	137,44
211	p-dichlorobenzene	106-46-7	Train	799,49	120,51
212	quinone	106-51-4	Train	780,71	52,44
213	bromobenzene	108-86-1	Train	832,6	5,55
214	monochlorobenzene	108-90-7	Train	810,8	100,2
215	3,4-dichloroaniline	95-76-1	Train	752,4	214,25
216	nitrobenzene	98-95-3	Train	765,38	10,38
217	benzene	71-43-2	Test	802,53	30,62
218	cis-dicyano-1-butene	2141-58-4	Train	669,61	20,61
219	trans-dicyano-1-butene	2141-59-5	Train	669,61	20,61
220	m-nitroaniline	99-09-2	Train	752,02	97,98
221	o-nitroaniline	88-74-4	Train	713,53	80,62
222	p-nitroaniline	100-01-6	Train	746,47	103,53
223	phenol	108-95-2	Train	832,77	155,23
224	1,2-benzenediol	120-80-9	Test	835,79	4,21
225	1,3-benzenediol	108-46-3	Test	844,01	35,99
226	aniline	62-53-3	Train	812,16	77,84
227	2-methylpyridine	109-06-8	Train	808,15	0
228	3-methylpyridine	108-99-6	Train	773,15	0
229	4-methylpyridine	108-89-4	Train	773,15	0
230	methylcyclopentadiene	26519-91-5	Train	628,12	90,03
231	adiponitrile	111-69-3	Train	773,75	49,4
232	phenylhydrazine	100-63-0	Train	447,18	0,03
233	cyclohexene	110-83-8	Test	600,33	17,18
234	1,5-hexadiene	592-42-7	Train	535,05	57,1
235	1-hexyne	693-02-7	Train	558,17	17,17
236	2-hexyne	764-35-2	Train	562,61	8,61
237	3-hexyne	928-49-4	Train	562,61	8,61
238	cyclohexanone	108-94-1	Train	622,29	69,86
239	mesityloxide	141-79-7	Train	583,49	34,51
240	2-methyl-2-pentenal	623-36-9	Train	487,3	5,3
241	epsilon-caprolactone	502-44-3	Train	582,17	28,83
242	ethylmethacrylate	97-63-2	Test	638,74	4,26
243	isopropylacrylate	689-12-3	Train	663,23	26,77
244	n-propylacrylate	925-60-0	Train	631,75	16,75
245	propionicanhydride	123-62-6	Train	596,21	38,21
246	ethyleneglycoldiacetate	111-55-7	Train	724,79	30,36
247	diallylamine	124-02-7	Train	523,64	19,51
248	cyclohexane	110-82-7	Test	574,26	56,11
249	2,3-dimethyl-1-butene	563-78-0	Train	607,72	25,43

250	2,3-dimethyl-2-butene	563-79-1	Train	681,64	7,94
251	3,3-dimethyl-1-butene	558-37-2	Train	691,67	61,67
252	2-ethyl-1-butene	760-21-4	Test	542,17	45,98
253	cis-3-hexene	03/09/7642	Test	537,12	15,88
254	trans-3-hexene	13269-52-8	Test	537,12	30,88
255	methylcyclopentane	96-37-7	Train	614,73	12,73
256	2-methyl-1-pentene	763-29-1	Test	562,7	10,45
257	3-methyl-1-pentene	760-20-3	Train	593,27	31,73
258	4-methyl-1-pentene	691-37-2	Train	572,18	0,97
259	butylvinylether	111-34-2	Train	503,22	5,07
260	cyclohexanol	108-93-0	Train	561,06	12,09
261	3,3-dimethyl-2-butanone	75-97-8	Train	782,52	48,52
262	ethylisopropylketone	565-69-5	Train	730,9	5,9
263	2-hexanone	591-78-6	Train	677,11	19,04
264	3-hexanone	589-38-8	Train	699,8	12,2
265	methylisobutylketone	108-10-1	Train	714,04	7,11
266	3-methyl-2-pentanone	565-61-7	Train	703,91	16,09
267	n-butylacetate	123-86-4	Test	669,66	24,34
268	sec-butylacetate	105-46-4	Train	717,02	22,02
269	diacetonealcohol	123-42-2	Train	750,92	125,56
270	ethyln-butyrate	105-54-4	Test	747,29	11,29
271	2-ethylbutyricacid	88-09-5	Train	613,63	59,37
272	isobutylacetate	110-19-0	Train	707,92	11,92
273	neohexanoicacid	595-37-9	Train	696,62	36,62
274	n-propylpropionate	106-36-5	Train	747,29	39,29
275	2-ethoxyethylacetate	111-15-9	Test	528,16	124,43
276	paraldehyde	123-63-7	Train	584,12	73,12
277	propyleneglycolmonomethyletheracetate	108-65-6	Train	587,49	39,66
278	cyclohexylamine	108-91-8	Train	516,78	49,37
279	n-ethyl-2-methylallylamine	18328-90-0	Train	544,99	69,01
280	hexamethylenimine	111-49-9	Train	587,63	15,52
281	2,2-dimethylbutane	75-83-2	Train	720,94	22,79
282	2,3-dimethylbutane	79-29-8	Train	674,91	18,24
283	n-hexane	110-54-3	Test	599,99	101,99
284	2-methylpentane	107-83-5	Test	621,8	42,8
285	3-methylpentane	96-14-0	Test	610,32	59,17
286	n-butylethylether	628-81-9	Train	514,09	30,09
287	diisopropylether	108-20-3	Train	583,43	132,57
288	di-n-propylether	111-43-3	Test	514,09	25,94
289	2-methyl-1-pentanol	105-30-6	Test	604,04	20,89
290	3-methyl-1-pentanol	589-35-5	Train	604,04	11,96
291	3-methyl-3-pentanol	77-74-7	Train	663,93	19,93
292	methyln-pentylether	628-80-8	Test	542,17	39,17
293	methyltert-pentylether	994-05-8	Test	575,9	157,25
294	acetal	105-57-7	Train	486,98	16,17
295	2-butoxyethanol	111-76-2	Train	539,49	28,34
296	1,2-diethoxyethane	629-14-1	Test	485,91	7,76
297	1,6-hexanediol	629-11-8	Train	604,69	80,31
298	hexyleneglycol	107-41-5	Train	649,98	70,98
299	1-isopropoxy-2-propanol	3944-36-3	Train	562,42	59,42
300	propyleneglycoln-propylether	1569-01-3	Train	551,66	39,66
301	diethyleneglycoldimethylether	111-96-6	Train	485,75	24,75
302	2-(2-ethoxyethoxy)ethanol	111-90-0	Test	496,07	18,92
303	triethyleneglycol	112-27-6	Train	510,78	133,22
304	n-hexylmercaptan	111-31-9	Train	522,18	2,18
305	diisopropylamine	108-18-9	Train	588,72	0,01
306	n,n-dimethyl-n-butylamine	927-62-8	Train	545,13	30,13
307	di-n-propylamine	142-84-7	Train	571,96	0,19
308	n-hexylamine	111-26-2	Train	558,6	3,6
309	triethylamine	121-44-8	Train	516,66	5,49

310	diisopropanolamine	110-97-4	Train	739,04	91,89
311	triethylphosphate	78-40-0	Train	727,94	0,06
312	tetramethylethylenediamine	110-18-9	Train	517,06	104,94
313	triethylenetetramine	112-24-3	Train	565,96	45,04
314	hexamethyldisilazane	999-97-3	Train	641,18	0,03
315	m-chlorobenzoylchloride	618-46-2	Train	793,83	42,17
316	phenylisocyanate	103-71-9	Train	730	144
317	benzaldehyde	100-52-7	Train	555,46	90,46
318	benzoicacid	65-85-0	Train	805,01	42,03
319	p-hydroxybenzaldehyde	123-08-0	Train	576,3	65,3
320	salicylaldehyde	90-02-8	Train	560,7	38,7
321	salicylicacid	69-72-7	Train	809,93	8,22
322	benzylchloride	100-44-7	Train	858,14	0,01
323	m-nitrotoluene	99-08-1	Train	718,39	140,39
324	o-nitrotoluene	88-72-2	Train	664,31	86,16
325	p-nitrotoluene	99-99-0	Train	710,51	47,36
326	toluene	108-88-3	Train	798,19	45,04
327	m-cresol	108-39-4	Test	817,91	14,09
328	o-cresol	95-48-7	Train	803,64	68,36
329	p-cresol	106-44-5	Test	815,72	16,28
330	p-methoxyphenol	150-76-5	Train	684,82	9,33
331	n-methylaniline	100-61-8	Train	771,29	12,71
332	m-toluidine	108-44-1	Test	789,73	34,58
333	o-toluidine	95-53-4	Test	766,76	11,61
334	p-toluidine	106-49-0	Train	786,29	31,14
335	2-norbornene	498-66-8	Train	642,44	135,71
336	2,4-diaminotoluene	95-80-7	Train	727,17	22,83
337	2,6-diaminotoluene	823-40-5	Train	795,39	45,39
338	1-heptyne	628-71-7	Train	550,05	22,05
339	n-butylacrylate	141-32-2	Train	612,31	46,31
340	isobutylacrylate	106-63-8	Test	637,63	24,48
341	n-propylmethacrylate	2210-28-8	Test	618,01	28,01
342	2-hydroxypropylmethacrylate	923-26-2	Train	625,53	22,47
343	cycloheptane	291-64-5	Test	556,78	53,63
344	1,1-dimethylcyclopentane	1638-26-2	Train	641,81	45,19
345	cis-1,2-dimethylcyclopentane	1192-18-3	Test	636,16	2,84
346	cis-1,3-dimethylcyclopentane	2532-58-3	Test	636,16	2,84
347	ethylcyclopentane	1640-89-7	Test	570,17	37,02
348	2-ethyl-1-pentene	3404-71-5	Test	535,91	64,09
349	3-ethyl-1-pentene	04/04/4038	Train	580,31	19,69
350	cis-3-heptene	06/10/7642	Test	531,39	31,61
351	trans-3-heptene	14686-14-7	Train	531,39	45,61
352	methylcyclohexane	108-87-2	Train	587	63,85
353	2-methyl-1-hexene	06/02/6094	Train	554,02	11,02
354	3-methyl-1-hexene	3404-61-3	Train	580,31	2,31
355	5-methyl-1-hexene	3524-73-0	Train	562,25	8,75
356	2,3,3-trimethyl-1-butene	594-56-9	Train	669,87	19,87
357	diisopropylketone	565-80-0	Train	729,16	17,16
358	2-heptanone	110-43-0	Train	648,56	17,59
359	3-heptanone	106-35-4	Train	668,73	14,27
360	4-heptanone	123-19-3	Test	668,73	19,27
361	1-methylcyclohexanol	590-67-0	Train	561,47	6,68
362	cis-2-methylcyclohexanol	7443-70-1	Train	571,49	2,34
363	trans-2-methylcyclohexanol	7443-52-9	Train	571,49	2,34
364	cis-3-methylcyclohexanol	5454-79-5	Train	571,49	1,49
365	trans-3-methylcyclohexanol	7443-55-2	Train	571,49	1,49
366	cis-4-methylcyclohexanol	7731-28-4	Train	571,49	1,34
367	trans-4-methylcyclohexanol	7731-29-5	Train	571,49	1,34
368	2-methylhexanal	925-54-2	Train	470,85	0,85
369	3-methylhexanal	19269-28-4	Test	497,92	27,92

370	5-methyl-2-hexanone	110-12-3	Test	685,79	221,64
371	n-butylpropionate	590-01-2	Train	727,43	27,61
372	isopentylacetate	123-92-2	Train	678,01	44,86
373	neoheptanoicacid	1185-39-3	Train	665,44	15,44
374	n-pentylacetate	628-63-7	Train	642,71	9,56
375	n-propyln-butyrate	105-66-8	Train	727,43	48,43
376	n-propylisobutyrate	644-49-5	Train	678,21	42,79
377	ethyl-3-ethoxypropionate	763-69-9	Test	539,98	110,17
378	propyleneglycolethyletheracetate	54839-24-6	Train	531,44	23,44
379	2,2-dimethylpentane	590-35-2	Train	694,56	44,56
380	2,3-dimethylpentane	565-59-3	Train	632,28	24,13
381	2,4-dimethylpentane	108-08-7	Train	627,11	17,11
382	3,3-dimethylpentane	562-49-2	Train	660,02	50,02
383	2-methylhexane	591-76-4	Test	604,15	51
384	3-methylhexane	589-34-4	Train	594,64	41,49
385	2,2,3-trimethylbutane	464-06-2	Train	736,74	13,59
386	2-methyl-1-hexanol	624-22-6	Test	589,39	48,39
387	propyleneglycol1-tert-butylether	57018-52-7	Train	594,06	23,06
388	propyleneglycol2-tert-butylether	94023-15-1	Train	571,8	0,8
389	diethyleneglycolmonopropylether	6881-94-3	Train	493,85	16,7
390	n-heptylmercaptan	1639-09-4	Train	517,91	8,91
391	n-heptylamine	111-68-2	Train	550,43	10,43
392	isophthaloylchloride	99-63-8	Train	784,11	60,96
393	phthalicanhydride	85-44-9	Train	849,1	7,9
394	ethynylbenzene	536-74-3	Train	763	0
395	isophthalicacid	121-91-5	Train	788,33	19,33
396	phthalicacid	88-99-3	Train	764,86	4,14
397	styrene	100-42-5	Train	782,32	19,17
398	acetophenone	98-86-2	Train	810,04	33,11
399	m-tolualdehyde	620-23-5	Train	537,58	21,58
400	methylbenzoate	93-58-3	Train	824,29	46,14
401	methylsalicylate	119-36-8	Test	827,84	99,84
402	vanillin	121-33-5	Train	500,06	10,06
403	acetanilide	103-84-4	Train	760,24	42,91
404	m-xylene	108-38-3	Test	769,55	31,4
405	o-xylene	95-47-6	Train	738,86	2,71
406	p-xylene	106-42-3	Train	765,04	36,11
407	m-ethylphenol	620-17-7	Train	804,29	46,29
408	o-ethylphenol	90-00-6	Train	786,11	50,11
409	p-ethylphenol	123-07-9	Train	801,53	83,53
410	m-tolualcohol	587-03-1	Train	733,08	24,92
411	o-tolualcohol	89-95-2	Train	684,94	29,06
412	2,3-xylenol	526-75-0	Train	809,83	62,17
413	2,4-xylenol	105-67-9	Test	758,09	113,91
414	2,5-xylenol	95-87-4	Train	758,09	113,91
415	2,6-xylenol	576-26-1	Train	809,83	62,17
416	3,4-xylenol	95-65-8	Test	758,09	113,91
417	3,5-xylenol	108-68-9	Train	814,32	57,68
418	n,n-dimethylaniline	121-69-7	Train	643,7	0,55
419	n-ethylaniline	103-69-5	Train	756,47	4,32
420	o-ethylaniline	578-54-1	Train	736,43	41,43
421	vinylcyclohexene	100-40-3	Train	646	103
422	diethylmaleate	141-05-9	Train	633,93	10,78
423	1-octyne	629-05-0	Train	542,9	25,9
424	2-ethyl-2-hexenal	645-62-5	Train	480,31	12,31
425	n-butylmethacrylate	97-88-1	Test	601,02	33,87
426	cyclohexylacetate	622-45-7	Train	599,1	7,9
427	isobutylmethacrylate	97-86-9	Test	623,11	40,04
428	butyricanhydride	106-31-0	Train	571,39	19,39
429	diethylsuccinate	123-25-1	Train	725,3	11,3

430	1,1-dimethylcyclohexane	590-66-9	Train	606,13	29,13
431	cis-1,2-dimethylcyclohexane	04/01/2207	Test	602,21	25,06
432	trans-1,2-dimethylcyclohexane	6876-23-9	Test	602,21	25,06
433	cis-1,3-dimethylcyclohexane	638-04-0	Test	602,21	23,21
434	trans-1,3-dimethylcyclohexane	06/03/2207	Train	602,21	23,21
435	cis-1,4-dimethylcyclohexane	624-29-3	Train	602,21	25,21
436	trans-1,4-dimethylcyclohexane	07/04/2207	Train	602,21	25,21
437	2,3-dimethyl-1-hexene	16746-86-4	Train	572,55	17,45
438	ethylcyclohexane	1678-91-7	Train	553,61	18,61
439	2-ethyl-1-hexene	1632-16-2	Train	530,31	69,69
440	1-methyl-1-ethylcyclopentane	16747-50-5	Train	588,1	53,9
441	2-methyl-1-heptene	15870-10-7	Train	546,4	22,4
442	6-methyl-1-heptene	5026-76-6	Train	553,62	6,62
443	cis-3-octene	14850-22-7	Train	526,24	11,76
444	trans-3-octene	14919-01-8	Train	526,24	21,76
445	cis-4-octene	7642-15-1	Train	526,24	12,76
446	trans-4-octene	14850-23-8	Train	526,24	25,76
447	n-propylcyclopentane	2040-96-2	Train	560,51	18,36
448	2,4,4-trimethyl-1-pentene	107-39-1	Test	598,39	65,76
449	2,4,4-trimethyl-2-pentene	107-40-4	Train	594,02	13,02
450	2-octanone	111-13-7	Train	625,93	27,07
451	1,4-cyclohexanedimethanol	105-08-8	Train	546,39	42,76
452	ethyleneglycolmonobutyletheracetate	112-07-2	Train	518,96	94,19
453	diethyleneglycolethyletheracetate	112-15-2	Train	488,01	145,14
454	2,2-dimethylhexane	590-73-8	Train	663,42	53,42
455	2,3-dimethylhexane	584-94-1	Train	612,75	24,75
456	2,4-dimethylhexane	589-43-5	Test	598,53	10,53
457	2,5-dimethylhexane	592-13-2	Train	608,52	20,52
458	3,3-dimethylhexane	563-16-6	Train	635,09	25,09
459	3,4-dimethylhexane	583-48-2	Train	602,3	14,3
460	2-methyl-3-ethylpentane	609-26-7	Train	598,53	134,62
461	2-methylheptane	592-27-8	Test	589,48	69,48
462	3-methylheptane	589-81-1	Train	581,47	69,47
463	4-methylheptane	589-53-7	Train	581,47	71,47
464	n-octane	111-65-9	Train	574,12	95,12
465	2,2,3-trimethylpentane	564-02-3	Train	697,51	5,64
466	2,3,3-trimethylpentane	560-21-4	Train	682,37	20,78
467	2,3,4-trimethylpentane	565-75-3	Train	660,34	39,66
468	di-n-butylether	142-96-1	Train	507,25	40,1
469	diisobutylether	628-55-7	Train	516,12	46,12
470	2-ethyl-1-hexanol	104-76-7	Test	577,01	16,01
471	ethyln-hexylether	5756-43-4	Train	507,25	42,25
472	2-hexoxyethanol	112-25-4	Test	528,15	25
473	succinicacid	110-15-6	Train	840,86	139,86
474	diethyleneglycoldiethylether	112-36-7	Test	470,14	18,86
475	2-(2-butoxyethoxy)ethanol	112-34-5	Test	491,78	13,78
476	triethyleneglycoldimethylether	112-49-2	Train	470,06	6,06
477	di-n-butylsulfate	625-22-9	Train	518,75	16,75
478	n-octylmercaptan	111-88-6	Train	514,01	14,01
479	diisobutylamine	110-96-3	Train	577,85	56,2
480	n-octylamine	111-86-4	Test	543,24	19,59
481	tetraethylsilane	631-36-7	Test	607,31	99,16
482	tetraethylenepentamine	112-57-2	Train	534,48	38,67
483	isoquinoline	119-65-3	Train	750,01	0,01
484	quinoline	91-22-5	Train	753,18	0,03
485	cinnamicacid	140-10-3	Train	828,58	168,58
486	alpha-methylstyrene	98-83-9	Train	772,49	75,11
487	m-methylstyrene	100-80-1	Train	745,51	16,64
488	p-methylstyrene	622-97-9	Train	739,54	71,61
489	cis-1-propenylbenzene	766-90-5	Train	797,93	50,07

490	trans-1-propenylbenzene	873-66-5	Train	797,93	50,07
491	2-phenylpropionaldehyde	93-53-8	Train	501	0
492	benzylacetate	140-11-4	Train	715,31	17,84
493	ethylbenzoate	93-89-0	Test	817,86	54,71
494	alpha-methylbenzylalcoholformate	7775-38-4	Train	798	0
495	ethylvanillin	121-32-4	Train	497,57	18,57
496	4-methoxyphenylaceticacid	104-01-8	Train	613,01	0,01
497	cumene	98-82-8	Train	778,76	81,76
498	m-ethyltoluene	620-14-4	Test	740,33	12,82
499	o-ethyltoluene	611-14-3	Train	696,04	17,11
500	p-ethyltoluene	622-96-8	Test	734,02	14,13
501	mesitylene	108-67-8	Train	762,15	61
502	n-propylbenzene	103-65-1	Test	765,65	36,5
503	1,2,3-trimethylbenzene	526-73-8	Train	752,58	9,43
504	1,2,4-trimethylbenzene	95-63-6	Test	636,57	151,58
505	3-phenyl-1-propanol	122-97-4	Test	759,96	95,96
506	cumenehydroperoxide	80-15-9	Train	432,67	10,63
507	1-methyl-4-vinylcyclohexene	17699-86-4	Train	601,7	53,3
508	isophorone	78-59-1	Train	675,2	57,95
509	glyceryltriacetate	102-76-1	Train	737,13	31,13
510	triallylamine	102-70-5	Train	483,89	3,89
511	1-nonyne	03/09/3452	Train	536,56	30,56
512	n-butylcyclopentane	2040-95-1	Train	552,1	28,95
513	isopropylcyclohexane	696-29-7	Train	559,24	3,09
514	2-methyl-1-octene	4588-18-5	Test	539,67	55,67
515	7-methyl-1-octene	13151-06-9	Train	546,05	10,05
516	n-propylcyclohexane	1678-92-8	Train	546,05	24,9
517	1-trans-3,5-trimethylcyclohexane	1795-26-2	Test	620,69	33,54
518	diisobutylketone	108-83-8	Train	685,7	16,55
519	2-nonanone	821-55-6	Train	607,55	25,6
520	5-nonanone	502-56-7	Train	620,63	13,37
521	3,3-diethylpentane	1067-20-5	Train	615,04	51,89
522	2,4-dimethyl-3-ethylpentane	1068-87-7	Train	602,62	60,53
523	2,2-dimethylheptane	1071-26-7	Train	637,78	49,78
524	2,6-dimethylheptane	1072-05-5	Train	593,14	40,14
525	3-methyloctane	2216-33-3	Test	570,25	77,1
526	4-methyloctane	2216-34-4	Train	570,25	77,1
527	n-nonane	111-84-2	Train	563,93	85,93
528	2,2,3,3-tetramethylpentane	7154-79-2	Train	723,53	20,38
529	2,2,3,4-tetramethylpentane	1186-53-4	Train	726,42	23,42
530	2,2,4,4-tetramethylpentane	1070-87-7	Train	759,66	56,66
531	2,3,3,4-tetramethylpentane	16747-38-9	Train	704,19	1,04
532	2,2,5-trimethylhexane	3522-94-9	Test	671,33	48,33
533	dipropyleneglycoln-propylether	29911-27-1	Test	494,66	2,66
534	n-nonylmercaptan	1455-21-6	Train	510,45	19,45
535	tert-nonylmercaptan	25360-10-5	Train	508,98	0,02
536	n-nonylamine	112-20-9	Train	536,85	15,85
537	naphthalene	91-20-3	Test	763,44	35,71
538	quinaldine	91-63-4	Train	730,01	0,01
539	dimethylphthalate	131-11-3	Train	818,44	55,29
540	acetoacetanilide	102-01-2	Train	780,39	55,24
541	dicyclopentadiene	77-73-6	Test	657,56	125,59
542	1,2,3,4-tetrahydronaphthalene	119-64-2	Train	584,09	72,91
543	n-propylbenzoate	2315-68-6	Test	810,6	92,6
544	n-butylbenzene	104-51-8	Train	749,72	66,57
545	sec-butylbenzene	135-98-8	Test	743,3	52,3
546	tert-butylbenzene	98-06-6	Train	707,75	15,4
547	m-cymene	535-77-3	Train	739,94	30,94
548	o-cymene	527-84-4	Train	695,44	25,44
549	p-cymene	99-87-6	Train	733,6	25,45

550	m-diethylbenzene	141-93-5	Train	698,24	24,91
551	o-diethylbenzene	135-01-3	Train	643,99	24,16
552	p-diethylbenzene	105-05-5	Test	688,77	14,38
553	isobutylbenzene	538-93-2	Train	769,43	68,43
554	1,2,3,4-tetramethylbenzene	488-23-3	Train	769,94	69,94
555	1,2,3,5-tetramethylbenzene	527-53-7	Train	720,35	20,2
556	1,2,4,5-tetramethylbenzene	95-93-2	Train	755,08	55,08
557	n,n-diethylaniline	91-66-7	Train	604,33	0,82
558	2,6-diethylaniline	579-66-8	Train	713,19	24,19
559	adamantane	281-23-2	Test	583,44	23,29
560	d-limonene	5989-27-5	Train	528,97	18,97
561	alpha-pinene	80-56-8	Train	645,2	117,05
562	beta-pinene	127-91-3	Train	548,19	20,19
563	camphor	76-22-2	Train	761,88	22,62
564	cis-decahydronaphthalene	493-01-6	Train	545,8	22,65
565	trans-decahydronaphthalene	493-02-7	Test	545,8	17,65
566	1-decyne	764-93-2	Train	530,89	33,89
567	n-butylcyclohexane	1678-93-9	Train	539,35	20,2
568	1,1-diethylcyclohexane	78-01-3	Train	542,57	29,42
569	2-methyl-1-nonene	2980-71-4	Train	533,67	24,67
570	8-methyl-1-nonene	26741-24-2	Test	539,36	12,36
571	1,2,3,4-tetramethylcyclohexane	3726-45-2	Train	643,61	0,61
572	diethyleneglycolmonobutyletheracetate	124-17-4	Test	484,68	78,47
573	n-decane	124-18-5	Test	555,09	81,09
574	2,2-dimethyloctane	15869-87-1	Test	617,23	46,23
575	2,3-dimethyloctane	7146-60-3	Train	583,18	46,18
576	2,4-dimethyloctane	4032-94-4	Test	573,07	73,07
577	2,5-dimethyloctane	15869-89-3	Train	573,07	73,07
578	2,6-dimethyloctane	2051-30-1	Test	573,07	73,07
579	2,7-dimethyloctane	1072-16-8	Train	580,2	80,2
580	2-methylnonane	871-83-0	Test	566,5	79,35
581	3-methylnonane	06/04/5911	Train	560,59	75,59
582	4-methylnonane	17301-94-9	Train	560,59	75,59
583	5-methylnonane	15869-85-9	Test	560,59	75,59
584	2,2,3,3-tetramethylhexane	13475-81-5	Train	697,84	16,16
585	2,2,5,5-tetramethylhexane	1071-81-4	Train	742,5	9,5
586	3,3,5-trimethylheptane	7154-80-5	Test	608,71	46,29
587	di-n-pentylether	693-65-2	Train	501,44	57,44
588	n-decylmercaptan	143-10-2	Train	507,18	24,18
589	n-decylamine	2016-57-1	Test	531,15	16,15
590	n,n'-di-tert-butylethylenediamine	4062-60-6	Train	629,58	24,58
591	pentaethylenhexamine	4067-16-7	Train	514,86	1,86
592	1-methylnaphthalene	90-12-0	Train	753,55	48,45
593	2-methylnaphthalene	91-57-6	Train	779,6	22,4
594	n-butylbenzoate	136-60-7	Train	802,36	89,21
595	pentamethylbenzene	700-12-9	Train	707,31	4,31
596	2-ethylhexylacrylate	103-11-7	Test	567,73	42,58
597	methyldecanoate	110-42-9	Train	622,67	7,33
598	n-undecane	1120-21-4	Test	547,34	72,34
599	undecylmercaptan	5332-52-5	Train	504,17	28,17
600	undecylamine	7307-55-3	Test	526,03	16,03
601	biphenyl	92-52-4	Train	812,9	0,25
602	diphenylether	101-84-8	Train	891,14	0,01
603	p-aminodiphenyl	92-67-1	Train	803,58	80,43
604	diphenylamine	122-39-4	Train	855,01	51,99
605	1-ethylnaphthalene	1127-76-0	Train	717,62	35,53
606	2-ethylnaphthalene	939-27-5	Train	754,19	4,19
607	p-aminodiphenylamine	101-54-2	Train	851,24	47,24
608	hydrazobenzene	122-66-7	Train	810,65	6,65
609	cyclohexylbenzene	827-52-1	Train	679,99	0,01

610	p-tert-butylethylbenzene	7364-19-4	Train	598,21	45,21
611	m-diisopropylbenzene	99-62-7	Train	697,06	24,94
612	p-diisopropylbenzene	100-18-5	Train	687,5	34,5
613	1,2,3-triethylbenzene	42205-08-3	Train	621,62	18,38
614	1,2,4-triethylbenzene	877-44-1	Train	560,37	79,63
615	1,3,5-triethylbenzene	102-25-0	Train	633,95	6,05
616	2-cyclohexylcyclohexanone	90-42-6	Train	540	62
617	bicyclohexyl	92-51-3	Train	522,42	4,27
618	n-dodecane	112-40-3	Train	540,5	64,5
619	3-methylundecane	1002-43-3	Train	544,77	61,62
620	di-n-hexylether	112-58-3	Train	496,44	38,29
621	diethyleneglycoldi-n-butylether	112-73-2	Train	467,03	8,97
622	n-dodecylmercaptan	112-55-0	Train	501,38	31,38
623	n-dodecylamine	124-22-1	Train	521,41	14,41
624	tri-n-butylamine	102-82-9	Train	498,04	16,89
625	diphenylmethane	101-81-5	Train	748,28	9,87
626	1-n-propylnaphthalene	2765-18-6	Train	690,36	0,36
627	methyldecanoate	111-82-0	Train	590,09	19,91
628	n-tridecane	629-50-5	Train	534,42	59,42
629	anthracene	120-12-7	Train	808,12	5,03
630	benzylbenzoate	120-51-4	Train	814,74	61,59
631	1,1-diphenylethane	612-00-0	Train	720,6	7,45
632	1,2-diphenylethane	103-29-7	Train	731,74	21,41
633	1-n-butylphthalene	1634-09-9	Train	659,47	26,32
634	di-n-propylphthalate	131-16-8	Test	782,98	90,98
635	1,4-di-tert-butylbenzene	1012-72-2	Train	554,51	58,51
636	1,2,3,5-tetraethylbenzene	38842-05-6	Train	572,56	25,44
637	n-tetradecane	629-59-4	Train	528,97	55,97
638	n-tetradecylamine	2016-42-4	Test	513,37	10,37
639	bisphenola	80-05-7	Train	796,22	21,93
640	1-n-pentylphthalene	86-89-5	Train	634,65	54,65
641	1-pentadecene	13360-61-7	Train	510,34	7,34
642	n-pentadecane	629-62-9	Train	524,06	49,06
643	di-n-butylphthalate	84-74-2	Train	755,33	80,18
644	diisobutylphthalate	84-69-5	Train	788,93	83,78
645	pentaethylbenzene	605-01-6	Train	551,47	14,53
646	1-hexadecene	629-73-2	Test	507,08	6,07
647	glutaricacid	110-94-1	Train	655,72	8,28
648	2,2,4,4,6,8,8-heptamethylnonane	09/04/4390	Train	710,3	267,7
649	di-n-octylether	629-82-3	Test	488,29	10,14
650	di-n-octylsulfide	06/08/2690	Train	481,81	35,81
651	1-heptadecene	6765-39-5	Test	504,07	1,07
652	n-heptadecane	629-78-7	Test	515,58	40,58
653	benzanthracene	56-55-3	Train	830,09	0,09
654	naphthacene	92-24-0	Train	834,01	4,01
655	m-terphenyl	92-06-8	Train	807,07	21,08
656	p-terphenyl	92-94-4	Train	804,43	3,72
657	hexaethylbenzene	604-88-6	Test	565,16	24,16
658	linolenicacid	463-40-1	Train	475,96	159,04
659	oleicacid	112-80-1	Train	497,19	138,81
660	dibutylsebacate	109-43-3	Train	610,04	28,11
661	1-octadecene	112-88-9	Train	501,3	21,85
662	n-octadecane	593-45-3	Test	511,89	36,89
663	methylolate	112-62-9	Test	507,75	18,75
664	1-nonadecene	18435-45-5	Train	498,72	4,28
665	n-nonadecane	629-92-5	Train	508,5	33,5
666	dehydroabieticacid	1740-19-8	Train	541,95	60,05
667	abieticacid	514-10-3	Train	512,48	41,52
668	neoabieticacid	471-77-2	Train	561	0
669	di-n-hexylphthalate	84-75-3	Test	656,56	106,56

670	dehydroabietylamine	1446-61-3	Train	534,95	40,95
671	cetylmethacrylate	2495-27-4	Train	512,12	17,88
672	1-eicosene	01/07/3452	Train	496,32	6,68
673	n-eicosane	112-95-8	Test	505,38	30,38
674	tri-o-cresylphosphate	78-30-8	Train	658,17	0,02
675	n-heneicosane	629-94-7	Train	502,51	27,51
676	di-n-heptylphthalate	3648-21-3	Train	612,79	47,21
677	di(2-ethylhexyl)adipate	103-23-1	Train	573	77,15
678	n-butylstearate	123-95-5	Test	520,95	102,2
679	n-docosane	629-97-0	Train	499,84	24,84
680	n-tricosane	638-67-5	Train	497,37	22,37
681	diisooctylphthalate	27554-26-3	Test	622,68	57,32
682	dioctylphthalate	117-81-7	Train	600,84	63,31
683	n-tetracosane	646-31-1	Train	495,06	20,06
684	tri-n-octylamine	1116-76-3	Train	477,61	21,39
685	n-pentacosane	629-99-2	Train	492,91	17,91
686	diisononylphthalate	28553-12-0	Train	590,09	82,09
687	di-n-nonylphthalate	84-76-4	Train	561,87	98,13
688	n-hexacosane	630-01-3	Test	490,89	15,89
689	n-heptacosane	593-49-7	Test	489	14
690	di-n-decylphthalate	84-77-5	Train	545,76	109,24
691	diisodecylphthalate	26761-40-0	Test	566,94	108,06
692	n-octacosane	630-02-4	Train	487,23	12,23
693	n-nonacosane	630-03-5	Test	485,56	10,56
694	tri-n-heptyltrimellitate	1528-48-9	Test	542,8	60,8
695	di-n-undecylphthalate	3648-20-2	Train	533,16	116,84
696	n-triacontane	638-68-6	Test	483,98	8,98
697	n-dotriacontane	544-85-4	Train	481,09	6,09
698	n-hexatriacontane	630-06-8	Train	476,14	1,14
699	diolein	2465-32-9	Train	467,16	133,84
700	triolein	122-32-7	Train	459,39	170,61
701	dichlorosilane	4109-96-0	Train	430,6	113,45
702	trichlorosilane	10025-78-2	Train	515,89	60,74
703	sec-butylacrylate	05/08/2998	Test	624,24	4,24
704	cis-crotonaldehyde	15798-64-8	Train	501,16	3,84
705	di-2-ethylhexylamine	106-20-7	Train	515,87	22,87
706	dipropyleneglycolmonoethylether	30025-38-8	Test	496,93	14,93
707	tripropyleneglycolmonoethylether	75899-69-3	Train	475,11	7,19
708	di-n-octylamine	1120-48-5	Train	511,19	6,81
709	isoxazole	288-14-2	Train	543	0
710	ethylhydrogensulfate	540-82-9	Train	561,8	5,2
711	ethylthiolacetate	625-60-5	Train	515,11	40,89
712	succinimide	123-56-8	Train	788,84	62,16
713	ethyltrichlorosilane	115-21-9	Test	617,34	60,81
714	2-methyloctanoicacid	3004-93-1	Train	572,25	33,75
715	2,3,4,5,2',3',4',5'-octahydro-bifuryl-(3,3')	106538-38-9	Train	532,68	67,68
716	1,2-benzenedicarboxylicacid,heptyl,undecylester	65185-88-8	Train	561,87	98,13
717	1,2-benzenedicarboxylicacid,heptyl,nonylester	19295-81-9	Test	583,21	76,79
718	methylcyclopentadienedimer	26472-00-4	Train	577,43	72,43
719	allylglycidylether	106-92-3	Train	503,1	74,1
720	3-methyl-1,4-pentadiene	1115-08-8	Train	579,17	6,83
721	1,2,3-butanetriol	4435-50-1	Train	662,81	11,19
722	acetoxyceticacid	13831-30-6	Train	754,12	32,12
723	isoagatholal	17990-11-3	Train	463,09	58,09
724	agathadiol	1857-24-5	Train	480,58	15,58
725	decan-1,10-diol	112-47-0	Train	557,61	2,61
726	1-triacontene	18435-53-5	Train	479,18	23,82
727	dicyclohexylsulfide	7133-46-2	Train	497	0
728	1,2,3,6-tetrahydrobenzaldehyde	100-50-5	Train	497,58	21,82
729	2-methylhexanoicacid	4536-23-6	Train	597,39	50,61

730	1-methyl-3-(methylethoxy)benzene	19177-04-9	Train	577,64	103,36
731	2-methyl-2-aminobutane	594-39-8	Train	681,98	0,02
732	1,2,4-butanetriol	3068-00-6	Train	635,71	39,29
733	2,6,8-trimethyl-4-nonanone	123-18-2	Test	623,94	73,94
734	benzamide	55-21-0	Train	930,85	15,15
735	alpha-terpineol	98-55-5	Train	581,68	7,68
736	dimethylsuccinate	106-65-0	Train	762,2	16,8
737	1,2-epoxy-3-phenoxypropane	122-60-1	Train	594,22	99,22
738	phthalan	496-14-0	Train	598,12	114,12
739	palustricacid	1945-53-5	Train	505,54	9,54
740	1-ethoxy-2-propanol	1569-02-4	Train	560	59
741	trans-2-methyl-1,3-pentadiene	926-54-5	Train	569,05	11,95
742	1,2,3-trimethyl-4-ethylbenzene	61827-86-9	Train	740,88	25,12
743	1,2,4-trimethyl-3-ethylbenzene	61827-87-0	Train	740,88	25,12
744	1,2,4-trimethyl-5-ethylbenzene	17851-27-3	Train	719,83	46,17
745	1-tert-butoxy-2-[2-(tert-butoxy)propoxy]propane	1243297-10-0	Train	485,24	11,76
746	1-tert-butoxy-2-[2-(hydroxy)propoxy]propane	58797-58-3	Test	504,91	152,09
747	m-ethylstyrene	7525-62-4	Train	705,89	48,89
748	p-ethylstyrene	07/07/3454	Train	697,05	62,05
749	o-ethylstyrene	7564-63-8	Train	650,86	16,86
750	benzene-1,2,4-tricarboxylicacidtrimethylester	01/10/2459	Test	815,46	28,54
751	1,2-dimethyl-3-propylbenzene	17059-44-8	Train	688,58	49,42
752	3-methylbutyraldehyde	590-86-3	Test	504,96	9,96
753	2-methyl-1,3-pentanediol	149-31-5	Train	596,2	25,8
754	di-tert-butylsulfide	107-47-1	Train	518,28	5,72
755	di-tert-butyldisulfide	110-06-5	Train	477,65	6,65
756	3-ethyl-1-hexene	3404-58-8	Train	569,26	17,26
757	4-methyl-1-heptene	13151-05-8	Train	548,76	0,76
758	n-nonyln-undecylphthalate	65185-89-9	Train	545,76	38,24
759	beta-terpineol	138-87-4	Train	523,94	21,06
760	trans-1,3-hexadiene	20237-34-7	Train	544,46	42,54
761	methylglycolate	96-35-5	Train	758,64	8,36
762	cyclopropylamine	765-30-0	Train	545,47	33,47
763	cyclopropanecarboxamide	6228-73-5	Train	459	0
764	cyclopropylcyanide	5500-21-0	Train	707	0
765	trans-1,4-diethylcyclohexane	13990-93-7	Train	538,15	2,85
766	1,2-dibromododecane	55334-42-4	Train	538,49	42,49
767	3-octanone	106-68-3	Test	641,98	38,83
768	4-octanone	589-63-9	Test	641,98	21,98
769	3-ethyl-1-heptanol	3525-25-5	Train	566,42	2,42
770	3-nonanone	925-78-0	Test	620,63	23,63
771	4-nonanone	4485-09-0	Train	620,63	41,63
772	1-methylvinylacetate	108-22-5	Test	672,41	106,59
773	methylisopropylsulfide	1551-21-9	Train	512,11	20,89
774	1,1,1,3,3-pentafluoropropane	460-73-1	Train	714,97	29,97
775	dimethylmalonate	108-59-8	Train	820,94	39,94
776	1,3-dimethyladamantane	702-79-4	Train	625,41	10,41
777	pimaricacid	127-27-5	Train	500,45	40,45
778	isopimaricacid	5835-26-7	Train	500,45	40,45
779	1,4-benzenedicarboxylicacid,bis(2,3-dihydroxypropyl)ester	66032-51-7	Train	585,67	65,33
780	4,6-dimethyldibenzothiophene	1207-12-1	Train	727,31	10,69
781	cis-2-butene	590-18-1	Train	611,13	13,13
782	trans-2-butene	624-64-6	Test	611,13	14,13
783	cis-2-pentene	627-20-3	Train	564,61	40,61
784	trans-2-pentene	646-04-8	Test	564,61	26,61
785	cis-2-hexene	7688-21-3	Train	555,68	37,68
786	trans-2-hexene	4050-45-7	Test	555,68	37,68
787	cis-2-heptene	6443-92-1	Train	547,86	35,36
788	trans-2-heptene	14686-13-6	Train	547,86	30,36
789	cis-2-octene	08/04/7642	Train	540,96	33,96

790	trans-2-octene	13389-42-9	Train	540,96	23,96
791	cis-2-decene	20348-51-0	Test	529,34	23,34
792	trans-2-decene	20063-97-2	Test	529,34	14,34
793	cis-2-dodecene	7206-26-0	Train	519,92	15,92
794	trans-2-dodecene	7206-13-5	Train	519,92	6,92
795	trans-2-pentadecene	74392-36-2	Test	508,73	2,27
796	trans-2-eicosene	42448-85-1	Train	495,22	3,78
797	6-aminohexanamide	373-04-6	Train	598,15	40,85
798	2-pentanethiol	2084-19-7	Train	541,99	0,01
799	phenothiazine	92-84-2	Train	743,16	0,01
800	4-methyl-1-octanol	38514-03-3	Train	566,42	2,42
801	6-methyl-1-octanol	38514-05-5	Train	566,42	2,42
802	saccharin	81-07-2	Train	770	0
803	acryloxypropionicacid	24615-84-7	Train	669,24	19,24
804	dilactide(dl)	95-96-5	Train	723,35	34,65
805	1,2-dimethoxypropane	7778-85-0	Test	520,25	23,25
806	sec-butyl-tert-butylether	32970-45-9	Train	598,91	108,91
807	isobutyl-tert-butylether	33021-02-2	Test	533,83	43,83
808	ethylisoamylketone	624-42-0	Train	677,02	33,98
809	4-hydroxymethylbenzoicacid	3006-96-0	Train	742,03	30,03
810	1-(4-ethylphenyl)-2-(4-ethylphenyl)ethane	51526-06-8	Train	557,47	52,47
811	acetone	67-64-1	Train	728,54	9,61
812	ethylacetate	141-78-6	Test	725,77	25,77
813	tert-butylmethacrylate	585-07-9	Train	722,49	50,49
814	1,1-dimethoxyethane	534-15-6	Train	524,75	46,75
815	2-methylbutyraldehyde	96-17-3	Train	472,68	15,32
816	diallylsulfide	592-88-1	Train	486,59	0,41
817	acetoaceticacid	541-50-4	Train	757,99	19,84
818	1,6-hexamethylenediisocyanate	822-06-0	Train	632,15	11,15
819	vinylethylenecarbonate	4427-96-7	Train	690,2	55,8
820	pyridine	110-86-1	Train	755	0
821	2-methyloctanal	7786-29-0	Train	469,18	6,82
822	2-n-propylthiophene	1551-27-5	Train	561,71	12,71
823	ethylpropyldisulfide	30453-31-7	Train	476,18	10,18
824	ethylmethylsulfide	20333-39-5	Train	478,88	1,88
825	2,5-dimethylthiophene	638-02-8	Train	553,91	0,09
826	2-ethylthiophene	872-55-9	Train	571,55	7,55
827	difluoromethyltrifluoromethylether	3822-68-2	Train	467,11	32,11
828	1,9-decadiene	1647-16-1	Train	516	49
829	diisopentylsulfide	544-02-5	Train	497,48	33,48
830	4-methyldibenzothiophene	7372-88-5	Train	740,24	12,24
831	2,7-dimethylbenzothiophene	16587-40-9	Train	574,15	1,15
832	dichlorodiethylsilane	1719-53-5	Train	613,87	13,87
833	crotylglycoether	52458-04-5	Test	519,25	21,75
834	hexanamide	628-02-4	Train	676,76	18,76
835	difluoromethylmethylether	359-15-9	Train	586,42	56,58
836	n,n-diethylmethylamine	616-39-7	Train	552,57	10,57
837	methylphenylsulfide	100-68-5	Train	534	0
838	2,2,4-trimethyl-1,3-pentanediol	144-19-4	Train	643,75	24,6
839	methylhydroperoxide	3031-73-0	Train	432,67	45,67
840	ethylhydroperoxide	3031-74-1	Train	432,66	47,66
841	isobutyricanhydride	97-72-3	Train	562,64	39,51
842	trans-1,8-terpin	565-50-4	Train	570,17	6,17
843	cis-1,8-terpin	565-48-0	Train	570,17	9,17
844	4-[(tetrahydro-2-furanyl)oxy]-1-butanol	64001-06-5	Train	533,17	10,83
845	propyleneglycoln-butylether	5131-66-8	Train	544,32	11,17
846	1-eicosanol	629-96-9	Train	504,27	45,73
847	1-nonadecanol	1454-84-8	Test	507,29	42,71
848	1-octadecanol	112-92-5	Train	510,57	39,43
849	1-heptadecanol	1454-85-9	Train	514,14	35,86

850	dipropyleneglycoln-butylether	29911-28-2	Train	492,53	25,53
851	methylsilicate	681-84-5	Train	504,55	9,55
852	triethyleneglycolbis(2-ethylhexanoate)	94-28-0	Train	475,02	183,13
853	2-methyl-1-undecanol	10522-26-6	Train	542,19	3,19
854	2-methyl-dodecan-1-ol	22663-61-2	Train	535,93	1,93
855	2-methyl-1-tridecanol	32480-16-3	Train	530,32	0,32
856	2-butyl-octan-1-ol	08/02/3913	Test	542,19	3,19
857	2-butyl-nonan-1-ol	51655-57-3	Test	535,93	1,93
858	2-butyl-1-decanol	21078-81-9	Train	530,32	0,32
859	1-dodecanol	112-53-8	Test	538,11	10,04
860	1-tridecanol	112-70-9	Train	532,28	17,72
861	1-tetradecanol	112-72-1	Test	527,05	22,95
862	1-hexadecanol	36653-82-4	Train	518,04	31,96
863	1-undecanol	112-42-5	Test	544,65	5,35
864	1-pentadecanol	629-76-5	Test	522,33	27,67
865	1-nonanol	143-08-8	Train	560,43	10,43
866	1-octanol	111-87-5	Test	570,08	15,08
867	1-pentanol	71-41-0	Train	610,03	36,88
868	1-butanol	71-36-3	Train	628,96	12,96
869	1-propanol	71-23-8	Train	652,33	8,33
870	gamma-aminopropyltriethoxysilane	919-30-2	Test	477,97	95,18
871	1,3,5-tri-tert-butylbenzene	1460-02-2	Train	519,6	118,4
872	8-methyl-1-nonanol	55505-26-5	Train	562,87	8,87
873	1-heptanol	111-70-6	Train	581,27	26,27
874	1,3,5,7-cyclooctatetraene	629-20-9	Train	647,41	119,41
875	2-ethyl-1-butanol	97-95-0	Test	604,04	12,96
876	vinyltrimethoxysilane	07/02/2768	Test	516,5	19,35
877	2-(2-pentoxyethoxy)ethanol	18912-81-7	Train	489,84	33,84
878	3-pentanol	584-02-1	Train	607,77	100,23
879	1-tetracontene	61868-18-6	Test	469,1	33,9
880	2-pentoxyethanol	6196-58-3	Test	533,51	56,51
881	3-ethylheptanal	2570-97-0	Train	493,39	19,39
882	benzylalcohol	100-51-6	Train	774,44	66,29
883	4-methylphenanthrene	832-64-4	Train	795,96	0,04
884	2,2-dimethyl-1-propanol	75-84-3	Train	734,55	41,4
885	2-ethyl-tetrahydrothiophene	1551-32-2	Train	541,58	38,58
886	pentafluoroethylmethylether	22410-44-2	Train	616,03	100,03
887	monobutylsulfate	15507-13-8	Train	545,71	6,71
888	2-propylbenzothiophene	16587-32-9	Train	566,58	14,58
889	2-butylbenzothiophene	17890-53-8	Train	557,4	18,4
890	p-isopropenylphenol	4286-23-1	Train	796,82	104,82
891	2-methyl-1-butanol	137-32-6	Train	621,66	36,34
892	3-methyl-1-butanol	123-51-3	Test	634,68	11,68
893	3-hexanol	623-37-0	Test	592,51	0,51
894	ethylpropylsulfide	4110-50-3	Train	503,97	10,03
895	methylpentylsulfide	1741-83-9	Train	501,95	3,05
896	2-methyl-2-butanol	75-85-4	Train	695,09	12,91
897	3-methyl-2-butanol	598-75-4	Train	652,48	4,48
898	m-toluicacid	99-04-7	Train	779,52	3,52
899	1,3,5-triisopropylbenzene	717-74-8	Train	632,62	9,62
900	n-heptane	142-82-5	Train	585,99	108,99
901	t-butylacetoacetate	1694-31-1	Train	610,45	2,3
902	ethyltrimethylacetate	3938-95-2	Train	660,54	18,46
903	isopropanol	67-63-0	Train	666,04	62,71
904	2-butanol	78-92-2	Test	626,2	36,95
905	2-pentanol	6032-29-7	Train	607,77	8,23
906	2-hexanol	626-93-7	Test	592,51	0,51
907	2-heptanol	543-49-7	Train	579,67	6,67
908	2-octanol	123-96-6	Train	568,71	9,71
909	2-nonanol	628-99-9	Test	559,24	12,24

910	2-acetoacetoxyethylmethacrylate	21282-97-3	Train	543,19	58,96
911	acetomethoxane	828-00-2	Train	608	11
912	o-terphenyl	84-15-1	Train	789,72	13,43
913	trimethylolpropane	77-99-6	Train	656,25	12,25
914	1,1,1,3,3,3-hexafluoropropane	690-39-1	Train	720,29	35,71
915	ethyln-octylsulfide	3698-94-0	Train	491,92	15,92
916	trioctyltrimellitate	3319-31-1	Train	535,95	147,2
917	4,6-dinitro-o-sec-butylphenol	88-85-7	Train	603,54	12,46
918	3-chloropropyltrimethoxysilane	2530-87-2	Train	523,85	64,85
919	pentafluorophenol	771-61-9	Train	931,19	36,81
920	phthalide	87-41-2	Train	790,38	5,38
921	trimethylsilanol	1066-40-6	Test	722,23	54,08
922	dimethylterephthalate	120-61-6	Test	827,98	58,83
923	citricacid	77-92-9	Train	875,24	407,91
924	di-(2-chloroethoxy)methane	111-91-1	Test	493,33	24,67
925	2-methyl-,3-hydroxy-2,2,4-trimethylpentylpropanoate	77-68-9	Train	667,56	1,41
926	1-chloro-3-propanol	627-30-5	Train	697,17	25,17
927	1-chloro-2-propanol	127-00-4	Train	693,22	11,78
928	[3-(mercapto)propyl]triethoxysilane	14814-09-6	Train	471,84	40,84
929	3-(trimethoxysilyl)-1-propanethiol	4420-74-0	Train	490,99	46,99
930	3-chloro-o-xylene	608-23-1	Train	774,59	127,59
931	4-chloro-o-xylene	615-60-1	Train	676,52	29,52
932	1-n-nonylnaphthalene	26438-26-6	Train	572,88	3,12
933	1-n-decyl-naphthalene	26438-27-7	Train	562,86	4,14
934	bis[3-(triethoxysilyl)propyl]disulfide	56706-10-6	Train	449,54	20,46
935	bis[3-(trimethoxysilyl)propyl]disulfide	35112-74-4	Train	457,52	12,48
936	thiaindan	4565-32-6	Train	528,87	4,13
937	2-methylthiaindan	6165-55-5	Train	534,68	3,68
938	acetylacetone	123-54-6	Train	772,62	159,62
939	2-cyclohexene-1-one	930-68-7	Train	671,62	138,62
940	diamylketone	927-49-1	Test	588,67	3,33
941	5-hexen-2-one	109-49-9	Train	600,44	7,56
942	(3-methylacryloxypropyl)trichlorosilane	7351-61-3	Test	575,2	31,2
943	1-methyl-3-hydroxy-5-isopropylbenzene	03/03/3228	Train	799,58	54,58
944	1-methyl-3-hydroxy-6-isopropylbenzene	02/02/3228	Train	723,69	21,31
945	2-methylthiacyclopentane	1795-09-1	Train	568,07	33,07
946	thymol	89-83-8	Train	723,69	21,31
947	triethyleneglycoln-hexylether	25961-89-1	Train	471,21	22,21
948	triethyleneglycoln-propylether	23305-64-8	Train	474,06	13,06
949	alpha-methylbenzylalcohol	98-85-1	Train	754,53	1,53
950	methyltert-butylether	1634-04-4	Train	604,38	128,62
951	diethyleneglycol	111-46-6	Test	550,8	85,35
952	n-methyl-2-pyrrolidone	872-50-4	Train	673,9	152,75
953	propyleneimine	75-55-8	Train	765,42	71,42
954	melamine	108-78-1	Train	647	0
955	methoxyacetone	5878-19-3	Test	595,96	47,04
956	methylpara-toluate	99-75-2	Test	803,86	30,71
957	sec-butenylacetate	07/11/6737	Train	686,57	33,43
958	tert-butylethylether	637-92-3	Test	538,18	46,82
959	bis(alpha-methylbenzyl)ether	93-96-9	Train	653,21	7,21
960	2-hydroxypropylacrylate	999-61-1	Train	640,44	19,44
961	benzonitrile	100-47-0	Train	570	0
962	triethyleneglycolmonomethylether	112-35-6	Test	483,53	8,53
963	triethyleneglycolmonoethylether	112-50-5	Test	475,11	7,11
964	triethyleneglycoln-butylether	143-22-6	Train	473,07	19,07
965	glyoxal	107-22-2	Train	477,5	38,5
966	glycolaldehyde	141-46-8	Test	509,2	4,2
967	n-propylbenzenehydroperoxide	60956-33-4	Train	432,68	82,32
968	n-butylbenzenehydroperoxide	99172-63-1	Train	432,67	71,33
969	hexafluoro-1,3-butadiene	685-63-2	Train	916,22	61,22

970	o,p-bisphenola	837-08-1	Train	779,43	48,43
971	propyleneglycolalpha-methylbenzylether	871518-84-2	Train	555,8	19,2
972	2-(alpha-methylbenzyloxy)-1-propanol	857237-25-3	Train	542,3	32,7
973	1,3-dimethylurea	96-31-1	Train	568	0
974	monomethylurea	598-50-5	Train	588	0
975	n-ethylmorpholine	100-74-3	Train	517,15	59
976	4-(2-aminoethyl)morpholine	01/03/2038	Train	504,84	1,69
977	1,2,4,5-tetraisopropylbenzene	635-11-0	Train	593,24	13,24
978	2,2-diphenylpropane	778-22-3	Train	736,16	18,84
979	octahydro-pentalene-1-carboxylicacid	7403-22-7	Train	607,89	117,89
980	allylacrylate	999-55-3	Train	577,57	36,43
981	terephthaloylchloride	100-20-9	Train	780,38	57,23
982	2,4-dimethylaniline	95-68-1	Test	682,4	50,75
983	1,3-dimethyl-5-nitrobenzene	99-12-7	Train	705,38	58,38
984	n-hexadecane	544-76-3	Test	519,62	44,62
985	3-heptanol	589-82-2	Test	579,67	6,67
986	adipicacid	124-04-9	Train	631,66	2,34
987	3-(triethoxysilyl)propionitrile	919-31-3	Train	490,97	23,03
988	tris(2-methoxyethoxy)vinylsilane	1067-53-4	Train	463,69	29,46
989	2-ethylbenzothiophene	1196-81-2	Train	577,2	20,2
990	2,3-dimethylbenzothiophene	4923-91-5	Train	563,74	9,26
991	heptafluoropropylmethylether	375-03-1	Train	653,52	34,63
992	2,3,5-trimethylthiophene	1795-05-7	Train	541,85	27,15
993	ethylchloride	75-00-3	Train	731,36	70,64
994	propylchloride	540-54-5	Train	707,68	85,47
995	n-butylchloride	109-69-3	Train	677,72	55,28
996	1-chloropentane	543-59-9	Train	649,04	116,04
997	methylacetoacetate	105-45-3	Train	581,26	28,11
998	bis-(2-aminoethyl)ether	2752-17-2	Test	498,42	0,58
999	neopentylglycol	126-30-7	Train	698,14	49,99
1000	1,4-dibromobenzene	106-37-6	Train	842,44	3,44
1001	trans-crotonaldehyde	123-73-9	Train	501,16	3,84
1002	phenylacetate	122-79-2	Train	804	0
1003	ethyln-pentylsulfide	26158-99-6	Train	498,62	3,38
1004	methyl-3-mercaptopropionate	2935-90-2	Train	584,69	4,69
1005	p-toluicacid	99-94-5	Train	775,56	67,59
1006	n-crotylacetate	628-08-0	Train	590,04	2,04
1007	ethylbenzene	100-41-4	Train	779,01	75,86
1008	di-n-butylsulfide	544-40-1	Train	496,23	7,23
1009	di(2-ethylhexyl)terephthalate	6422-86-2	Train	600,84	71,16
1010	2-methylheptanal	16630-91-4	Train	470	20,8
1011	ethylisobutylether	627-02-1	Train	519,08	32,08
1012	hydracrylonitrile	109-78-4	Train	767,98	0,02
1013	epsilon-caprolactam	105-60-2	Train	646,81	21,34
1014	1,5-pentanediamine	462-94-2	Train	605,76	22,76
1015	hydroxypivalylhydroxypivalate	1115-20-4	Train	636,13	23,13
1016	propylene	115-07-1	Train	641,11	87,04
1017	1-butene	106-98-9	Train	580,47	76,53
1018	aceticanhydride	108-24-7	Train	562,32	42,83
1019	1-pentene	109-67-1	Train	569,4	23,4
1020	1-hexene	592-41-6	Test	559,84	33,84
1021	1-heptene	592-76-7	Train	551,52	18,37
1022	1-octene	111-66-0	Test	544,2	41,05
1023	1-nonene	124-11-8	Train	537,71	20,71
1024	1-decene	872-05-9	Test	531,92	23,77
1025	1-undecene	821-95-4	Train	526,72	16,77
1026	1-tridecene	2437-56-1	Test	517,77	14,77
1027	1-tetradecene	1120-36-1	Test	513,89	5,89
1028	1,4-cyclohexanedicarboxylicacid	619-82-9	Train	641,63	47,52
1029	terephthalicacid	100-21-0	Train	784,82	15,67

1030	1-dodecene	112-41-4	Test	522,03	6,12
1031	methyl-4-formylbenzoate	1571-08-0	Train	560,94	139,06
1032	2-ethylhexanoicacid	149-57-5	Train	583,8	0,65
1033	tetraethoxysilane	78-10-4	Train	470,96	37,19
1034	n-propyliodide	107-08-4	Train	562,82	8,18
1035	n-butyliodide	542-69-8	Train	554,12	0,12
1036	n-hexyliodide	638-45-9	Train	539,75	11,75
1037	benzothiophene	95-15-8	Train	614,76	15,24
1038	2-methyloctane	3221-61-2	Train	577,09	83,94
1039	sec-butenylglycoether	100524-60-5	Train	536,66	29,66
1040	3-(n,n-dimethylamino)propylamine	109-55-7	Train	529,5	41,5
1041	3-chloropropyltrichlorosilane	03/06/2550	Train	626,95	42,2
1042	2-methylbenzothiophene	1195-14-8	Train	581,37	54,63
1043	tetraethyleneglycolmonobutylether	1559-34-8	Train	463,08	10,08
1044	cyclopropanecarboxylicacid	1759-53-1	Train	732,19	13,54
1045	1-bromoheptane	629-04-9	Train	580,08	5,08
1046	1-bromododecane	143-15-7	Train	537,51	29,51
1047	p-hydroquinone	123-31-9	Train	842,71	53,71
1048	propyleneglycolmonomethylether	107-98-2	Train	569,58	19,43
1049	iso-butylcyclohexane	1678-98-4	Train	547,97	0,82
1050	4-formylmorpholine	4394-85-8	Train	618,14	0,01
1051	sec-butylcyclohexane	07/01/7058	Train	546,32	3,83
1052	tert-butylcyclohexane	3178-22-1	Train	598,31	16,84
1053	cis-2-nonene	6434-77-1	Test	534,83	12,83
1054	trans-2-nonene	6434-78-2	Train	534,83	12,83
1055	cis-1,3-dichloropropene	10061-01-5	Train	641,84	2,16
1056	trans-1,3-dichloropropene	10061-02-6	Train	641,84	2,16
1057	propargylalcohol	107-19-7	Train	585,8	52,35
1058	propyleneglycolmonoallylether	21460-36-6	Train	529,63	11,37
1059	2,2,4-trimethylpentane	540-84-1	Test	702,2	18,05
1060	formicacid	64-18-6	Test	512,64	240,36
1061	n-butyricacid	107-92-6	Train	676,97	39,18
1062	pimelicacid	111-16-0	Train	612,25	2,25
1063	n-hexanoicacid	142-62-1	Train	625,85	27,15
1064	n-heptanoicacid	111-14-8	Test	607,48	25,52
1065	n-octanoicacid	124-07-2	Test	592,27	22,73
1066	n-decanoicacid	334-48-5	Train	568,53	20,53
1067	n-undecanoicacid	112-37-8	Train	559,09	24,09
1068	n-dodecanoicacid	143-07-7	Train	550,86	26,86
1069	n-tridecanoicacid	638-53-9	Test	543,61	29,61
1070	n-tetradecanoicacid	544-63-8	Train	537,19	33,19
1071	n-pentadecanoicacid	1002-84-2	Train	531,46	35,46
1072	n-hexadecanoicacid	57-10-3	Test	526,3	38,3
1073	n-heptadecanoicacid	506-12-7	Train	521,65	40,65
1074	n-octadecanoicacid	57-11-4	Train	517,43	42,43
1075	subericacid	505-48-6	Train	596,24	6,24
1076	n-nonadecanoicacid	646-30-0	Train	513,58	44,58
1077	n-eicosanicacid	506-30-9	Train	510,05	47,05
1078	n-nonanoicacid	112-05-0	Test	579,46	9,54
1079	azelaicacid	123-99-9	Train	582,83	10,83
1080	n-pentanoicacid	109-52-4	Train	648,46	24,54
1081	propionicacid	79-09-4	Train	707,07	40,93
1082	isobutylisobutyrate	97-85-8	Train	686,87	18,28
1083	4-[2-(2-aminoethoxy)ethyl]morpholine	20207-13-0	Train	479,01	3,01
1084	2-(n-morpholino)-2'-hydroxydiethylether	3603-45-0	Train	493,42	15,42
1085	8-methylquinoline	611-32-5	Train	741,99	0,01
1086	triethylorthoformate	122-51-0	Test	471,57	18,42
1087	methylmyristate	124-10-7	Train	566,94	30,06
1088	methylpalmitate	112-39-0	Test	549,64	38,36
1089	methylstearate	112-61-8	Test	536,23	45,77

1090	triamantane	13349-10-5	Train	640,08	13,08
1091	tetramantane	27745-90-0	Train	712,16	20,84
1092	bicyclo[2.2.1]heptane	279-23-2	Train	603,35	146,65
1093	bicyclo[2.2.2]octane	280-33-1	Test	578,71	121,29
1094	1-docosene	1599-67-3	Test	491,99	11,01
1095	1-tetracosene	10192-32-2	Test	488,2	14,8
1096	1-hexacosene	18835-33-1	Train	484,85	18,15
1097	1-octacosene	18835-34-2	Train	481,86	21,14
1098	2,3-dimethylthiophene	632-16-6	Train	559,07	27,07
1099	diisopropylsulfide	625-80-9	Train	519	0
1100	chlorocyclohexane	542-18-7	Train	597,99	0,01
1101	gamma-butyrolactone	96-48-0	Test	644,65	83,5
1102	2-ethylhexanal	123-05-7	Train	470	6,85
1103	1-methoxy-2-propanolpropanoate	148462-57-1	Train	603,16	29,99
1104	2-butoxime	96-29-7	Train	588,14	0,01
1105	4-methyl-cyclohexane-methanol	34885-03-5	Test	568,89	1,11
1106	diallylphthalate	131-17-9	Train	634,73	179,58
1107	cyanogen	460-19-5	Train	889,01	94,99
1108	acrylonitrile	107-13-1	Train	706,82	47,18
1109	dodecamethylpentasiloxane	141-63-9	Train	604,2	18,95
1110	1-decanol	112-30-1	Test	552,03	2,03
1111	1-bromopropane	106-94-5	Train	649,78	37,22
1112	monomethylterephthalate	1679-64-7	Train	810,13	3,13
1113	ethylphenylacetate	101-97-3	Train	767,99	0,01
1114	monochlorosilane	13465-78-6	Train	430,55	47,55
1115	ethyllevulinate	539-88-8	Train	783,04	84,89
1116	ethylfluoride	353-36-6	Train	747	0
1117	hexamethyldisiloxane	107-46-0	Test	675,12	51,97
1118	octamethyltrisiloxane	107-51-7	Train	645,83	22,68
1119	decamethyltetrasiloxane	141-62-8	Train	622,79	0,36
1120	tetradecamethylhexasiloxane	107-52-8	Test	588,89	34,26
1121	hexadecamethylheptasiloxane	541-01-5	Train	576,05	47,1
1122	octadecamethyloctasiloxane	556-69-4	Test	565,13	58,02
1123	eicosamethylnonasiloxane	2652-13-3	Test	555,74	67,41
1124	hexacosamethyldodecasiloxane	01/08/2471	Test	534,05	89,1
1125	octamethylcyclotetrasiloxane	556-67-2	Train	712,63	39,63
1126	dodecamethylcyclohexasiloxane	540-97-6	Test	651,49	13,51
1127	sucroseacetateisobutyrate	126-13-6	Train	674,11	1,96
1128	methylactate	547-64-8	Train	679,72	21,57
1129	ethylactate	97-64-3	Train	650,6	22,55
1130	5-o-tolyl-2-pentene	6047-69-4	Train	565,33	82,67
1131	ethylacetoacetate	141-97-9	Train	570,07	1,92
1132	sebacicacid	111-20-6	Train	585,22	28,22
1133	dodecanedioicacid	693-23-2	Test	563,36	31,36
1134	tetradecanedioicacid	821-38-5	Train	554,59	43,59
1135	1-bromobutane	109-65-9	Train	626,91	23,09
1136	4-(2-methoxyethyl)morpholine	10220-23-2	Train	496,55	9,55
1137	4-(2-hydroxyethyl)morpholine	622-40-2	Train	515,66	3,34
1138	methylinoleate	112-63-0	Test	491,34	105,66
1139	3-ethylbenzothiophene	31283-14-4	Train	577,2	10,2
1140	3,5-dimethylbenzothiophene	1964-45-0	Train	597,4	24,4
1141	1-ethyltetralin	13556-58-6	Train	560,76	29,24
1142	1-methyltetralin	1559-81-5	Train	598,72	26,28
1143	mono-tert-butylhydroquinone	1948-33-0	Train	745,11	14,96
1144	p-divinylbenzene	105-06-6	Train	704,78	38,22
1145	1,1,3-trimethylcyclopentane	4516-69-2	Test	670,48	21,52
1146	1,1,2-trimethylcyclopentane	4259-00-1	Train	670,48	21,52
1147	trans-2,2,4,6,6-pentamethyl-3-heptene	27656-49-1	Train	574,18	16,82
1148	1-cis-2-trans-3-trimethylcyclopentane	15890-40-1	Test	663,23	75,77
1149	1-cis-2-trans-4-trimethylcyclopentane	4850-28-6	Train	663,23	75,77

1150	n-(2-hydroxyethyl)piperazine	103-76-4	Train	532,89	22,11
1151	n-aminoethylpiperazine	140-31-8	Train	517,65	40,35
1152	cyclohexanecarboxaldehyde	2043-61-0	Train	493,07	25,07
1153	ethylolate	111-62-6	Train	504,7	61,3
1154	methyleicosanoate	1120-28-1	Test	525,53	53,47
1155	2-butyl-2-ethyl-1,3-propanediol	115-84-4	Train	602,27	33,27
1156	tetrahydropyran	142-68-7	Test	566,12	15,12
1157	3,4-dimethylthiophene	632-15-5	Train	553,91	21,91
1158	ethyltert-butylsulfide	4151-69-3	Train	477,49	6,49
1159	methyldiethanolamine	105-59-9	Train	546,84	32,16
1160	methylpalmitoleate	1120-25-8	Train	514,69	72,31
1161	acetonitrile	75-05-8	Train	859,5	61,35
1162	propionitrile	107-12-0	Train	771,59	16,56
1163	butyronitrile	109-74-0	Train	756,83	16,32
1164	valeronitrile	110-59-8	Train	739,07	14,08
1165	hexanenitrile	628-73-9	Train	717,28	10,87
1166	propanal	123-38-6	Train	507,2	7,05
1167	butanal	123-72-8	Test	504,18	1,03
1168	pentanal	110-62-3	Train	501,39	6,24
1169	hexanal	66-25-1	Train	498,81	28,81
1170	heptanal	111-71-7	Train	496,4	27,4
1171	octanal	124-13-0	Train	494,16	28,16
1172	nonanal	124-19-6	Train	492,07	29,07
1173	decanal	112-31-2	Train	490,11	28,11
1174	undecanal	112-44-7	Test	488,27	26,27
1175	dodecanal	112-54-9	Train	486,53	25,53
1176	tridecanal	10486-19-8	Train	484,9	22,9
1177	diethylphthalate	84-66-2	Test	803,12	72,97
1178	2-methyl-1,3-dioxolane	497-26-7	Train	590,18	101,03
1179	ethylpalmitate	628-97-7	Train	542,54	20,46
1180	[3-(2,3-epoxypropyl)propyl]trimethoxysilane	2530-83-8	Train	482,67	37,33
1181	bromoethane	74-96-4	Train	678,67	56,33
1182	p-tolualdehyde	104-87-0	Train	535,68	132,47
1183	methylerucate	1120-34-9	Test	496,82	6,82
1184	ethylerucate	37910-77-3	Train	494,55	13,55
1185	methyllinolenate	301-00-8	Test	480,66	110,34
1186	1-hexanol	111-27-3	Train	594,4	36,4
1187	hexadecamethylcyclooctasiloxane	556-68-3	Train	607,87	48,13
1188	3,4-dichlorophenylisocyanate	102-36-3	Train	602,08	193,08
1189	aceticacid	64-19-7	Test	730,87	30,87
1190	1,2-dibromoethane	106-93-4	Train	663,97	99,18
1191	benzoylchloride	98-88-4	Train	803,39	37,76
1192	hexamethylcyclotrisiloxane	541-05-9	Test	736,29	77,14
1193	decamethylcyclopentasiloxane	541-02-6	Train	682,43	37,28
1194	cyclooctane	292-64-8	Train	543,09	39,94
1195	furan	110-00-9	Test	664,31	1,16
1196	2,2,4-trimethyl-1,3-pentanediodiisobutyrate	6846-50-0	Train	716,14	44,99

Annexe C : Limites d'inflammabilité

C.1 Valeurs des contributions de groupes pour LII :

Tableau C.1.1 : Valeurs des contributions de groupes du deuxième ordre donnant LII :

N°	Groupes	occurrences	Paramètres
1	$(\text{CH}_3)_2\text{CH}$	125	-0,236
2	$(\text{CH}_3)_3\text{C}$	59	-0,086
3	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}(\text{CH}_3)$	10	-0,403
4	$\text{CH}(\text{CH}_3)\text{C}(\text{CH}_3)_2$	5	-0,968
5	$\text{C}(\text{CH}_3)_2\text{C}(\text{CH}_3)_2$	4	-1,767
6	$\text{CH}_n=\text{CH}_m-\text{CH}_p=\text{CH}_k$ (k, m, n, p in 0..2)	12	0,172
7	$\text{CH}_3-\text{CH}_m=\text{CH}_n$ (m, n in 0..2)	93	0,685
8	$\text{CH}_2-\text{CH}_m=\text{CH}_n$ (m, n in 0..2)	120	0,058
9	$\text{CH}_p-\text{CH}_m=\text{CH}_n$ (m, n in 0..2; p in 0..1)	20	-0,688
10	CHCHO or CCHO	10	-0,196
11	CH_3COCH_2	20	0,079
12	CH_3COCH or CH_3COC	3	0,396
13	CHCOOH or CCOOH	13	-0,432
14	CH_3COOCH or CH_3COOC	9	-0,354
15	CO-O-CO	4	-0,032
16	CHOH	43	-0,103
17	COH	9	-0,216
18	$\text{CH}_3\text{COCH}_n\text{OH}$ (n in 0..2)	1	0,312
19	NCCHOH or NCCOH	3	-3,159
20	$\text{OH-CH}_n\text{-COO}$ (n in 0..2)	4	0,094
21	$\text{CH}_m(\text{OH})\text{CH}_n(\text{OH})$ (m, n in 0..2)	12	-0,108
22	$\text{CH}_m(\text{OH})\text{CH}_n(\text{NH}_p)$ (m, n, p in 0..2)	6	-0,088
23	$\text{CH}_m(\text{NH}_2)\text{CH}_n(\text{NH}_2)$ (m, n in 0..2)	2	-0,272
24	$\text{CH}_m(\text{NH})\text{CH}_n(\text{NH}_2)$ (m, n in 1..2)	5	-1,396
25	$\text{CH}_m(\text{NH}_n)\text{-COOH}$ (m, n in 0..2)	4	-0,243
26	$\text{HOOC-CH}_n\text{-COOH}$ (n in 1..2)	1	-0,040
27	$\text{HOOC-CH}_n\text{-CH}_m\text{-COOH}$ (n, m in 1..2)	4	-0,612
28	$\text{HO-CH}_n\text{-COOH}$ (n in 1..2)	7	-0,139
29	$\text{CH}_3\text{-O-CH}_n\text{-COOH}$ (n in 1..2)	1	0,066
30	HS-CH-COOH	1	0,256
31	$\text{HS-CH}_n\text{-CH}_m\text{-COOH}$ (n, m in 1..2)	1	0,218
32	$\text{NC-CH}_n\text{-CH}_m\text{-CN}$ (n, m in 1..2)	1	-0,126
33	$\text{OH-CH}_n\text{-CH}_m\text{-CN}$ (n, m in 1..2)	1	0,616
34	$\text{HS-CH}_n\text{-CH}_m\text{-SH}$ (n, m in 1..2)	1	0,571
35	$\text{COO-CH}_n\text{-CH}_m\text{-OOC}$ (n, m in 1..2)	5	-0,332

36	OO-CH _m -CH _m -COO (<i>n, m</i> in 1..2)	2	0,281
37	NC-CH _n -COO (<i>n</i> in 1..2)	2	-0,030
38	COCH _n COO (<i>n</i> in 1..2)	4	0,958
39	CH _m -O-CH _n =CH _p (<i>m,n,p</i> in 0..3)	4	0,148
40	CH _m =CH _n -F (<i>m,n</i> in 0..2)	6	0,772
41	CH _m =CH _n -Br (<i>m,n</i> in 0..2)	1	-0,394
42	CH _m =CH _n -Cl (<i>m,n</i> in 0..2)	13	0,492
43	CH _m =CH _n -CN (<i>m,n</i> in 0..2)	8	0,355
44	CH _n =CH _m -COO-CH _p (<i>m,n,p</i> in 0..3)	29	0,022
45	CH _m =CH _n -CHO (<i>m,n</i> in 0..2)	6	0,161
46	CH _m =CH _n -COOH (<i>m,n</i> in 0..2)	8	0,488
47	aC-CH _n -X (<i>n</i> in 1..2) X: Halogen	3	-0,108
48	aC-CH _n -NH _m (<i>n</i> in 1..2; <i>m</i> in 0..2))	1	-0,581
49	aC-CH _n -O- (<i>n</i> in 1..2)	10	-0,463
50	aC-CH _n -OH (<i>n</i> in 1..2)	8	-0,328
51	aC-CH _n -CN (<i>n</i> in 1..2)	1	-0,096
52	aC-CH _n -CHO (<i>n</i> in 1..2)	1	0,104
53	aC-CH _n -SH (<i>n</i> in 1..2)	1	-0,130
54	aC-CH _n -COOH (<i>n</i> in 1..2)	2	0,226
55	aC-CH _n -OOC-H (<i>n</i> in 1..2)	2	-0,345
56	aC-CH _n -OOC (<i>n</i> in 1..2)	2	-0,465
57	aC-CH _n -COO (<i>n</i> in 1..2)	1	12,755
58	aC-CH(CH ₃) ₂	16	1,160
59	aC-C(CH ₃) ₃	8	0,094
60	aC-CF ₃	4	1,221
61	(CH _n =C) _(cvc) -CHO (<i>n</i> in 0..2)	1	0,270
62	(CH _n =C) _{cvc} -CH ₃ (<i>n</i> in 0..2)	27	1,269
63	(CH _n =C) _{cvc} -CH ₂ (<i>n</i> in 0..2)	9	1,890
64	CH _{cvc} -CH ₃	44	0,369
65	CH _{cvc} -CH ₂	28	-0,183
66	CH _{cvc} -CH	10	-1,271
67	CH _{cvc} -C	5	1,040
68	CH _{cvc} -CH=CH _n (<i>n</i> in 1..2)	4	5,734
69	CH _{cvc} -C=CH _n (<i>n</i> in 1..2)	2	0,036
70	CH _{cvc} -OH	14	0,161
71	CH _{cvc} -NH ₂	3	-0,160
72	CH _{cvc} -NH-CH _n (<i>n</i> in 0..3)	2	-0,029
73	CH _{cvc} -SH	1	0,262
74	CH _{cvc} -CN	1	-0,317
75	CH _{cvc} -COOH	3	-0,239
76	CH _{cvc} -CO	1	-0,666
77	CH _{cvc} -S-	1	-0,053
78	CH _{cvc} -CHO	2	0,212
79	CH _{cvc} -O-	5	-0,068
80	CH _{cvc} -OOCH	1	-0,254
81	CH _{cvc} -COO	1	0,675
82	CH _{cvc} -OOC	3	7,086
83	C _{cvc} -CH ₃	25	2,413
84	C _{cvc} -CH ₂	7	2,316
85	C _{cvc} -OH	4	1,934
86	>N _{cvc} -CH ₃	4	-2,522
87	>N _{cvc} -CH ₂	8	-1,653
88	AROMRINGS ¹ s ²	59	-0,727
89	AROMRINGS ¹ s ³	30	-0,352
90	AROMRINGS ¹ s ⁴	72	-0,627
91	AROMRINGS ¹ s ² s ³	14	-0,973
92	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴	32	-1,077
93	AROMRINGS ¹ s ³ s ⁵	10	-0,777

94	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴	3	0,037
95	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁵	4	3,218
96	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴ s ⁵	4	-1,731
97	PYRIDINES ²	1	0,173
98	PYRIDINES ³	3	-0,359
99	PYRIDINES ⁴	1	0,721
100	PYRIDINES ² s ⁶	1	-0,044
101	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴ s ⁵	2	0,239

Tableau C.1.2 : Valeurs des contributions de groupes du troisième ordre donnant LII :

N°	Groupes	occurrences	Paramètres
1	HOOC-(CH _n) _m -COOH (m>2, n in 0..2)	5	-0,189
2	NH ₂ -(CH _n) _m -OH (m>2, n in 0..2)	1	-0,207
3	OH-(CH _n) _m -OH (m>2, n in 0..2)	5	-0,006
4	NH ₂ -(CH _n) _m -NH ₂ (m>2; n in 0..2)	3	-0,061
5	NC-(CH _n) _m -CN (m>2)	2	0,642
6	aC-(CH _n =CH _m) _{cyc} (fused rings) (n,m in 0..1)	16	-3,278
7	aC-aC (different rings)	13	-0,042
8	aC-CH _{ncyc} (different rings) (n in 0..1)	2	1,508
9	aC-CH _{ncyc} (fused rings) (n in 0..1)	20	-1,366
10	aC-(CH _n) _m -aC (different rings) (m>1; n in 0..2)	3	0,373
11	CH _{cyc} -CH _{cyc} (different rings)	3	-0,316
12	CH _{multiring}	33	-0,151
13	C _{multiring}	16	4,387
14	aC-CH _m -aC (different rings) (m in 0..2)	11	1,264
15	aC-(CH _m =CH _n)-aC (different rings) (m,n in 0..2)	5	1,322
16	aC-CO-aC (different rings)	1	0,065
17	aC-CH _m -CO-aC (different rings) (m in 0..2)	1	0,644
18	aC-CO _{cyc} (fused rings)	5	-1,722
19	aC-S _{cyc} (fused rings)	15	-3,660
20	aC-NH-aC (different rings)	4	1,707
21	aC-(N=CH _n) _{cyc} (fused rings) (n in 0..1)	1	1,384
22	aC-O-aC (different rings)	1	-0,019
	aC-CH _n -O-CH _m -aC (different rings) (n,m in 0..2)	1	0,339
24	aC-O _{cyc} (fused rings)	4	-0,527
25	AROM.FUSED[2]	54	-2,491
26	AROM.FUSED[2]s ¹	17	-0,953
27	AROM.FUSED[2]s ²	12	-2,005
28	AROM.FUSED[3]	4	-2,541
29	AROM.FUSED[4a]	3	-3,070
30	AROM.FUSED[4p]	5	-4,296
31	AROM.FUSED[4a]s ¹	3	-3,501
32	PYRIDINE.FUSED[2-iso]	1	-1,669
33	PYRIDINE.FUSED[4]	1	-5,265
34	N _{multiring}	2	-2,561

C.2 Valeurs des contributions de groupes pour LSI :

Tableau C.2.1 : Valeurs des contributions de groupes du premier ordre donnant LSI :

N°	Groupe	Occurrence	Paramètres
1	CH ₃	953	-343,613
2	CH ₂	696	-205,793
3	CH	215	-41,774

4	C	74	17,358
5	CH ₂ =CH	89	-439,273
6	CH=CH	62	-541,338
7	CH ₂ =C	38	-526,161
8	CH=C	14	-309,235
9	C=C	7	-337,070
10	CH ₂ =C=CH	3	-314,491
11	CH ₂ =C=C	1	-76,526
12	CH≡C	14	163,489
13	CH≡C	5	352,911
14	aCH	385	-194,652
15	aC fused with aromatic ring	34	-69,029
16	aC fused with non-aromatic ring	31	445,203
17	aC except as above	34	283,121
18	aN in aromatic ring	13	38,559
19	aC-CH ₃	87	-501,359
20	aC-CH ₂	90	-264,959
21	aC-CH	29	-89,939
22	aC-C	26	-131,186
23	aC-CH=CH ₂	8	-286,037
24	aC-CH=CH	7	-630,767
25	aC-C=CH ₂	4	-574,289
26	aC-C≡CH	1	-24,041
27	aC-C≡C	1	-898,038
28	OH	158	-164,702
29	aC-OH	48	-165,185
30	COOH	69	-191,654
31	aC-COOH	15	-193,944
32	CH ₃ CO	29	-591,698
33	CH ₂ CO	18	-319,312
34	CHCO	2	615,590
35	aC-CO	9	-173,223
36	CHO	40	-181,584
37	aC-CHO	13	-302,591
38	CH ₃ COO	33	-373,055
39	CH ₂ COO	33	-190,242
40	CHCOO	9	-253,943
41	CCOO	3	-12,362
42	HCOO	17	-186,289
43	aC-COO	30	-133,555
44	aC-OOC	2	-200,377
45	COO except as above	32	128,897
46	CH ₃ O	31	-167,890

47	CH ₂ O	52	102,082
48	CH-O	5	72,580
49	C=C	3	198,476
50	aC-O	14	66,163
51	CH ₂ NH ₂	34	-339,526
52	CHNH ₂	7	-226,189
53	CNH ₂	2	-169,562
54	CH ₃ NH	3	-371,854
55	CH ₂ NH	14	40,270
56	CHNH	1	234,342
57	CH ₃ N	7	-140,209
58	CH ₂ N	9	91,055
59	aC-NH ₂	23	-202,715
60	aC-NH	9	-1,809
61	aC-N	4	-14,295
62	NH ₂ except as above	8	-178,657
63	CH ₂ CN	20	-349,740
64	CHCN	2	-656,453
65	CCN	1	-536,871
66	aC-CN	2	-34,303
67	CN except as above	15	-182,002
68	CH ₂ NCO	2	-319,918
69	aC-NCO	3	-71,492
70	CH ₂ NO ₂	3	-318,024
71	CHNO ₂	1	-263,630
72	aC-NO ₂	19	17,530
73	NO ₂ except as above	1	170,382
74	CONH ₂	7	-141,625
75	CONHCH ₃	1	-497,751
76	CON(CH ₃) ₂	1	-691,994
77	aC-CONH ₂	1	-506,272
78	aC-NH(CO)H	1	-587,746
79	aC-NHCO	3	-430,727
80	NHCONH	1	-55,422
81	NH ₂ CONH	1	-166,501
82	CH ₂ Cl	30	-275,441
83	CHCl	8	-269,463
84	CCl	1	-183,778
85	CHCl ₂	3	-274,251
86	CCl ₃	4	-735,074
87	CH ₂ F	4	-297,672
88	CHF ₂	4	-240,853
89	CF ₂	1	-133,071

90	CF ₃	6	-421,897
91	CCl ₂ F	1	-409,440
92	aC-Cl	30	-1412,616
93	aC-F	3	-298,746
94	aC-Br	5	-143,193
95	-I except as above	3	-77,416
96	-Br except as above	10	-375,515
97	-F except as above	14	-108,865
98	-Cl except as above	28	-105,264
99	CHNOH	1	-324,420
100	CNOH	1	-147,853
101	OCH ₂ CH ₂ OH	20	-68,631
102	OCHCH ₂ OH	5	-122,097
103	OCH ₂ CHOH	11	-278,354
104	-O-OH	10	283,762
105	CH ₂ SH	13	97,826
106	CHSH	1	-313,298
107	CSH	1	-318,515
108	CH ₃ S	10	-503,362
109	CH ₂ S	15	408,258
110	CHS	1	-234,411
111	CS	2	-74,240
112	aC-S-	2	719,864
113	SO	1	517,148
114	SO ₄ (Sulfate)	1	-161,780
115	PO ₄ (Phosphate)	2	294,647
116	aC-PO ₄	2	200,142
117	CO ₃ (Carbonate)	2	399,998
118	C ₂ H ₃ O	6	-950,180
119	C ₂ H ₂ O	1	127,638
120	CH ₂ (cyclic)	153	-112,907
121	CH (cyclic)	105	1588,961
122	C (cyclic)	16	-151,046
123	CH=CH (cyclic)	39	-350,301
124	CH=C (cyclic)	30	876,371
125	C=C (cyclic)	5	-325,360
126	CH ₂ =C (cyclic)	4	187,521
127	NH (cyclic)	11	1113,296
128	N (cyclic)	10	-323,125
129	CH=N (cyclic)	3	-1,609
130	O (cyclic)	37	-800,592
131	CO (cyclic)	23	-155,360
132	S (cyclic)	24	70,385

133	SO ₂ (cyclic)	1	-264,501
134	>NH	4	-227,643
135	-O-	3	-212,539
136	-S-	1	-88,609
137	>CO	3	465,622
138	SiHO	1	105,061
139	SiO	11	-177,553
140	SiH ₂	2	-408,456
141	SiH	2	494,965
142	Si	9	541,438
143	C _{cyclic} =N-	1	846,219
144	C _{cyclic} =CH-	1	829,772
145	C _{cyclic} =C	1	-318,257
146	C=NH	1	-655,781
147	HCONH	2	-130,607
148	CH=C=CH	1	123,485

Tableau C.2.2 : Valeurs des contributions de groupes du deuxième ordre donnant LSI :

N°	Groupe	Occurrence	Paramètres
1	(CH ₃) ₂ CH	108	-292,938
2	(CH ₃) ₃ C	52	-291,874
3	CH(CH ₃)CH(CH ₃)	10	-137,046
4	CH(CH ₃)C(CH ₃) ₂	5	-131,833
5	C(CH ₃) ₂ C(CH ₃) ₂	4	70,812
6	CH _n =CH _m -CH _p =CH _k (<i>k,m,n,p</i> in 0..2)	10	-189,551
7	CH ₃ -CH _m =CH _n (<i>m,n</i> in 0..2)	84	-347,236
8	CH ₂ -CH _m =CH _n (<i>m,n</i> in 0..2)	101	128,025
9	CH _p -CH _m =CH _n (<i>m,n</i> in 0..2; <i>p</i> in 0..1)	17	75,521
10	CHCHO or CCHO	10	39,287
11	CH ₃ COCH ₂	19	80,583
12	CH ₃ COCH or CH ₃ COC	3	73,984
13	CHCOOH or CCOOH	12	51,094
14	CH ₃ COOCH or CH ₃ COOC	8	16,978
15	CO-O-CO	4	191,556
16	CHOH	32	-133,764
17	COH	9	-108,335
18	CH ₃ COCH _n OH (<i>n</i> in 0..2)	1	-44,946
19	NCCHOH or NCCOH	3	127,918
20	OH-CH _n -COO (<i>n</i> in 0..2)	4	224,578
21	CH _m (OH)CH _n (OH) (<i>m,n</i> in 0..2)	10	400,419
22	CH _m (OH)CH _n (NH _p) (<i>m,n,p</i> in 0..2)	6	130,743
23	CH _m (NH ₂)CH _n (NH ₂) (<i>m,n</i> in 0..2)	2	157,267
24	CH _m (NH)CH _n (NH ₂) (<i>m,n</i> in 1..2)	4	-112,947
25	CH _m (NH _n)-COOH (<i>m,n</i> in 0..2)	4	-264,287
26	HOOC-CH _n -COOH (<i>n</i> in 1..2)	1	-374,121
27	HOOC-CH _n -CH _m -COOH (<i>n, m</i> in 1..2)	4	56,283
28	HO-CH _n -COOH (<i>n</i> in 1..2)	7	138,871
29	CH ₃ -O-CH _n -COOH (<i>n</i> in 1..2)	1	-27,578
30	NC-CH _n -CH _m -CN (<i>n, m</i> in 1..2)	1	52,445
31	OH-CH _n -CH _m -CN (<i>n, m</i> in 1..2)	1	1,752

32	COO-CH _n -CH _m -OOC (n, m in 1..2)	4	-110,258
33	NC-CH _n -COO (n in 1..2)	2	-258,958
34	COCH _n COO (n in 1..2)	4	-115,107
35	CH _m -O-CH _n =CH _p (m,n,p in 0..3)	3	-654,345
36	CH _m =CH _n -F (m,n in 0..2)	6	-347,297
37	CH _m =CH _n -Br (m,n in 0..2)	1	-265,532
38	CH _m =CH _n -Cl (m,n in 0..2)	11	265,856
39	CH _m =CH _n -CN (m,n in 0..2)	8	132,643
40	CH _n =CH _m -COO-CH _p (m,n,p in 0..3)	27	-320,432
41	CH _m =CH _n -CHO (m,n in 0..2)	6	293,415
42	CH _m =CH _n -COOH (m,n in 0..2)	7	-130,928
43	aC-CH _n -X (n in 1..2) X: Halogen	3	-143,750
44	aC-CH _n -NH _m (n in 1..2; m in 0..2)	1	253,552
45	aC-CH _n -O- (n in 1..2)	7	85,881
46	aC-CH _n -OH (n in 1..2)	8	109,635
47	aC-CH _n -CN (n in 1..2)	1	-191,335
48	aC-CH _n -CHO (n in 1..2)	1	-223,618
49	aC-CH _n -COOH (n in 1..2)	2	161,453
50	aC-CH _n -OOC-H (n in 1..2)	2	-405,418
51	aC-CH _n -OOC (n in 1..2)	2	-46,701
52	aC-CH _n -COO (n in 1..2)	1	117,912
53	aC-CH(CH ₃) ₂	14	-419,651
54	aC-C(CH ₃) ₃	8	-494,786
55	aC-CF ₃	5	-477,887
56	(CH _n =C) _(cyc) -CHO (n in 0..2)	1	-87,497
57	(CH _n =C) _(cyc) -CH ₃ (n in 0..2)	23	-175,235
58	(CH _n =C) _(cyc) -CH ₂ (n in 0..2)	7	106,141
59	CH _{cyc} -CH ₃	38	-342,423
60	CH _{cyc} -CH ₂	22	-463,369
61	CH _{cyc} -CH	7	-235,052
62	CH _{cyc} -C	5	138,747
63	CH _{cyc} -CH=CH _n (n in 1..2)	2	-47,389
64	CH _{cyc} -C=CH _n (n in 1..2)	2	-188,738
65	CH _{cyc} -OH	10	142,734
66	CH _{cyc} -NH ₂	2	-848,028
67	CH _{cyc} -NH-CH _n (n in 0..3)	2	275,671
68	CH _{cyc} -CN	1	385,114
69	CH _{cyc} -COOH	3	56,620
70	CH _{cyc} -CO	1	-126,200
71	CH _{cyc} -S-	1	-20,550
72	CH _{cyc} -CHO	2	45,228
73	CH _{cyc} -O-	3	-16,008
74	CH _{cyc} -OOCH	1	208,733
75	CH _{cyc} -COO	1	66,084
76	CH _{cyc} -OOC	2	290,977
77	C _{cyc} -CH ₃	15	-269,634
78	C _{cyc} -CH ₂	3	-328,432
79	C _{cyc} -OH	4	-12,832
80	>N _{cyc} -CH ₃	3	-885,377
81	>N _{cyc} -CH ₂	5	-389,276
82	AROMRINGS ¹ s ²	56	-310,532
83	AROMRINGS ¹ s ³	29	708,969
84	AROMRINGS ¹ s ⁴	64	844,901
85	AROMRINGS ¹ s ² s ³	14	-231,034
86	AROMRINGS ¹ s ² s ⁴	26	-146,910
87	AROMRINGS ¹ s ³ s ⁵	10	-144,922
88	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁴	2	-142,607
89	AROMRINGS ¹ s ² s ³ s ⁵	4	5,126

90	AROMRINGS ^{1s²s⁴s⁵}	3	-268,001
91	PYRIDINES ²	1	1031,513
92	PYRIDINES ³	2	142,668
93	PYRIDINES ⁴	1	-149,524
94	PYRIDINES ^{2s⁶}	1	-195,106
95	AROMRINGS ^{1s²s³s⁴s⁵}	2	-269,171

Tableau C.2.3 : Valeurs des contributions de groupes du troisième ordre donnant LSI :

N°	Groupe	Occurrence	Paramètres
1	HOOC-(CH _n) _m -COOH (m>2, n in 0..2)	5	-176,233
2	NH ₂ -(CH _n) _m -OH (m>2, n in 0..2)	1	30,569
3	OH-(CH _n) _m -OH (m>2, n in 0..2)	5	386,399
4	NH ₂ -(CH _n) _m -NH ₂ (m>2; n in 0..2)	3	-7,318
5	NC-(CH _n) _m -CN (m>2)	1	-217,591
6	aC-(CH _n =CH _m) _{cvc} (fused rings) (n,m in 0..1)	13	295,704
7	aC-aC (different rings)	13	-270,439
8	aC-CH _{ncvc} (different rings) (n in 0..1)	2	-428,709
9	aC-CH _{ncvc} (fused rings) (n in 0..1)	13	-534,391
10	aC-(CH _n) _m -aC (different rings) (m>1; n in 0..2)	3	-930,005
11	CH _{cvc} -CH _{cvc} (different rings)	3	-722,534
12	CH _{multiring}	17	-690,230
13	C _{multiring}	1	233,183
14	aC-CH _m -aC (different rings) (m in 0..2)	9	216,815
15	aC-(CH _m =CH _n)-aC (different rings) (m,n in 0..2)	5	-59,714
16	aC-CO-aC (different rings)	1	-520,449
17	aC-CH _m -CO-aC (different rings) (m in 0..2)	1	-44,542
18	aC-CO _{cvc} (fused rings)	4	19,014
19	aC-S _{cvc} (fused rings)	10	-334,061
20	aC-NH _{ncvc} (fused rings) (n in 0..1)	3	-333,673
21	aC-NH-aC (different rings)	5	-409,987
22	aC-O-aC (different rings)	1	3,539
23	aC-CH _n -O-CH _m -aC (different rings) (n,m in 0..2)	1	-699,458
24	aC-O _{cvc} (fused rings)	2	-678,579
25	AROM.FUSED[2]	50	-600,334
26	AROM.FUSED[2]s ¹	17	258,477
27	AROM.FUSED[2]s ²	9	-401,533
28	AROM.FUSED[3]	3	-211,765
29	AROM.FUSED[4a]	3	-43,022
30	AROM.FUSED[4p]	5	-152,270
31	AROM.FUSED[4a]s ¹	2	-285,720
32	PYRIDINE.FUSED[2-iso]	1	243,200
33	PYRIDINE.FUSED[4]	1	309,827
34	N _{multiring}	1	-267,120

C.3 Résultats de prédiction des limites d'inflammabilités.

N°	: Numéro de classement d'un composé
Name	: Nom chimique d'un composé
CAS	: Numéro d'enregistrement unique (Chemical Abstracts Service).
Type	: Ensemble de molécules d'apprentissage (training) ou de test
EMA	: Erreur de prédiction en %.
Pred	: Prédiction des limites d'inflammabilités en %.

Tableau C.3 : Banque de données des limites d'inflammabilité pour les 1663 molécules.

N°	Name	Formula	CAS	LII			LSI		
				Type	Pred	EMA	Type	Pred	EMA
1	DIMETHYL SULFOXIDE	C2H6OS	67-68-5	Train	2,60	0,00	Train	28,50	0,00
2	PYRAZOLE	C3H4N2	288-13-1	Train	3,11	0,51	Train	23,41	0,19
3	ACETONE	C3H6O	67-64-1	Test	3,15	0,55	Train	12,62	0,38
4	DIETHYLAMINE	C4H11N	109-89-7	Test	1,44	0,26	-	0,00	0,00
5	METHYL ISOBUTYL KETONE	C6H12O	108-10-1	Train	1,29	0,09	Train	7,78	0,22
6	2-METHYL-1-PENTANOL	C6H14O	105-30-6	Train	1,15	0,05	Test	8,23	1,42
7	TRIETHYLENE GLYCOL	C6H14O4	112-27-6	Train	1,17	0,27	-	0,00	0,00
8	DI-n-PROPYLAMINE	C6H15N	142-84-7	Train	1,04	0,17	Train	9,62	1,78
9	n-HEPTANE	C7H16	142-82-5	Train	1,06	0,01	Train	7,38	0,68
10	2,2,4-TRIMETHYLPENTANE	C8H18	540-84-1	Train	0,87	0,08	Train	5,96	0,04
11	DI-n-BUTYL ETHER	C8H18O	142-96-1	Train	0,94	0,04	Test	7,78	0,73
12	2,3-DIMETHYLOCTANE	C10H22	7146-60-3	Train	0,71	0,01	Test	5,69	0,85
13	3-METHYLUDECANE	C12H26	1002-43-3	Test	0,59	0,01	Test	5,06	0,83
14	n-HEXADECANE	C16H34	544-76-3	Train	0,46	0,03	Train	4,12	0,08
15	SQUALANE	C30H62	111-01-3	Test	0,23	0,03	-	0,00	0,00
16	ETHYLTRICHLOROSILANE	C2H5Cl3Si	115-21-9	Test	3,18	0,45	-	0,00	0,00
17	1,2-DICHLOROETHANE	C2H4Cl2	107-06-2	Train	5,12	0,62	Train	20,64	4,64
18	MONOCHLOROBENZENE	C6H5Cl	108-90-7	Test	1,66	0,36	Train	9,57	0,03
19	METHYL ETHYL KETONE	C4H8O	78-93-3	Test	2,17	0,37	Test	10,98	0,02
20	1-HEXANOL	C6H14O	111-27-3	Test	1,24	0,04	Train	8,11	0,09
21	1-PROPANOL	C3H8O	71-23-8	Train	2,52	0,42	Train	12,81	1,19
22	1-BUTANOL	C4H10O	71-36-3	Train	1,88	0,18	Test	10,67	0,63
23	1-DECANOL	C10H22O	112-30-1	Test	0,74	0,14	Train	5,66	0,16
24	ISOPROPANOL	C3H8O	67-63-0	Train	2,33	0,33	Train	11,11	1,59
25	2-BUTANOL	C4H10O	78-92-2	Train	1,70	0,00	Test	10,51	0,71
26	n-PROPYL PROPIONATE	C6H12O2	106-36-5	Test	1,41	0,11	Train	9,46	1,76
27	2,5-DIMETHYLTHIOPHENE	C6H8S	638-02-8	Train	1,08	0,13	Train	8,45	3,25
28	1-PHENYLNAPHTHALENE	C16H12	605-02-7	Train	0,58	0,02	Train	4,58	0,52
29	1,1,2-TRICHLOROETHANE	C2H3Cl3	79-00-5	Train	6,76	0,04	-	0,00	0,00
30	ETHYLCHLOROACETATE	C4H7ClO2	105-39-5	Test	2,56	0,16	Train	11,22	0,52
31	3,4-DICHLOROPHENYL ISOCYANATE	C7H3Cl2NO	102-36-3	Train	1,48	0,28	-	0,00	0,00
32	2,3,5-TRIMETHYLTHIOPHENE	C7H10S	1795-05-7	Train	0,87	0,17	Train	9,09	1,11
33	PHENYLACETONITRILE	C8H7N	140-29-4	Train	1,10	0,00	Train	7,00	0,00
34	DICYANDIAMIDE	C2H4N4	461-58-5	Train	3,60	0,00	Train	34,10	0,00
35	DIISOPROPYL ETHER	C6H14O	108-20-3	Train	1,02	0,02	Train	7,76	0,14
36	ACETIC ACID	C2H4O2	64-19-7	Test	5,13	1,13	Train	21,21	1,31
37	PROPIONIC ACID	C3H6O2	79-09-4	Train	3,02	0,12	Train	15,63	3,63
38	ISOBUTYL ISOBUTYRATE	C8H16O2	97-85-8	Train	0,97	0,01	Train	6,11	1,48
39	DODECAMETHYLPENTASILOXANE	C12H36O4Si5	141-63-9	Train	0,53	0,15	Test	9,30	2,40
40	BROMOBENZENE	C6H5Br	108-86-1	Train	1,69	0,19	Train	11,35	2,25
41	ETHYL CYANOACETATE	C5H7NO2	105-56-6	Train	1,74	0,04	Train	10,74	0,14
42	1-PENTANOL	C5H12O	71-41-0	Train	1,50	0,10	Train	9,19	0,81
43	HEXAMETHYLDISILOXANE	C6H18OSi2	107-46-0	Train	0,99	0,19	Train	15,71	2,89
44	OCTAMETHYLTRISILOXANE	C8H24O2Si3	107-51-7	Train	0,76	0,14	Test	12,69	0,49
45	HEXADECAMETHYLHEPTASILOXANE	C16H48O6Si7	541-01-5	Test	0,40	0,00	Train	7,44	1,70
46	OCTADECAMETHYLOCTASILOXANE	C18H54O7Si8	556-69-4	Train	0,36	0,04	Train	6,80	0,92
47	EICOSAMETHYLNONASILOXANE	C20H60O8Si9	2652-13-3	Test	0,33	0,01	Test	6,27	0,76
48	1-ETHYLTETRALIN	C12H16	13556-58-6	Train	0,73	0,07	Train	4,84	0,64
49	p-DIVINYLBENZENE	C10H10	105-06-6	Train	0,73	0,16	Train	8,30	0,80
50	1,1,3-TRIMETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	4516-69-2	Train	0,88	0,07	Train	5,26	0,93
51	1,1,2-TRIMETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	4259-00-1	Test	0,88	0,07	Train	5,26	0,93
52	trans-2,2,4,6,6-PENTAMETHYL-3-HEPTENE	C12H24	27656-49-1	Train	0,68	0,06	Train	4,75	0,18
53	1-cis-2-trans-3-TRIMETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	15890-40-1	Train	0,89	0,05	Train	6,58	0,39
54	1-cis-2-trans-4-TRIMETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	4850-28-6	Train	0,89	0,05	Train	6,58	0,39
55	N-(2-HYDROXYETHYL)PIPERAZINE	C6H14N2O	103-76-4	Train	1,23	0,05	Train	10,57	0,43
56	N-AMINOETHYL PIPERAZINE	C6H15N3	140-31-8	Train	1,11	0,01	Test	10,83	1,17
57	CYCLOHEXANECARBOXALDEHYDE	C7H12O	2043-61-0	Train	1,11	0,04	Test	9,92	0,17

58	2-BUTYL-2-ETHYL-1,3-PROPANEDIOL	C9H20O2	115-84-4	Train	0,81	0,02	Train	5,92	0,28
59	TETRAHYDROPYRAN	C5H10O	142-68-7	Test	1,55	0,00	Train	16,82	3,82
60	3,4-DIMETHYLTHIOPHENE	C6H8S	632-15-5	Train	1,08	0,02	Train	8,45	2,65
61	ETHYL TERT-BUTYL DISULFIDE	C6H14S2	4151-69-3	Train	0,98	0,02	Test	11,23	0,57
62	METHYL DIETHANOLAMINE	C5H13NO2	105-59-9	Train	1,35	0,08	-	0,00	0,00
63	ACETALDEHYDE	C2H4O	75-07-0	Test	4,60	0,60	Train	21,59	8,41
64	PROPANAL	C3H6O	123-38-6	Train	2,83	0,23	Train	15,83	1,17
65	BUTANAL	C4H8O	123-72-8	Train	2,04	0,14	Train	12,60	0,10
66	PENTANAL	C5H10O	110-62-3	Test	1,60	0,06	Train	10,53	0,43
67	HEXANAL	C6H12O	66-25-1	Train	1,32	0,04	Train	9,09	0,40
68	HEPTANAL	C7H14O	111-71-7	Train	1,12	0,02	Train	8,03	0,38
69	OCTANAL	C8H16O	124-13-0	Train	0,97	0,01	Train	7,22	0,34
70	NONANAL	C9H18O	124-19-6	Train	0,86	0,01	Train	6,58	0,30
71	DECANAL	C10H20O	112-31-2	Test	0,77	0,00	Test	6,06	0,26
72	UNDECANAL	C11H22O	112-44-7	Train	0,70	0,00	Train	5,63	0,22
73	DODECANAL	C12H24O	112-54-9	Test	0,64	0,01	Test	5,27	0,17
74	TRIDECANAL	C13H26O	10486-19-8	Test	0,59	0,01	Train	4,96	0,15
75	1-METHYLTETRALIN	C11H14	1559-81-5	Test	0,78	0,03	Train	5,43	0,04
76	PROPANE	C3H8	74-98-6	Test	2,49	0,39	-	0,00	0,00
77	ISOBUTANE	C4H10	75-28-5	Train	1,80	0,00	Train	9,10	0,70
78	n-BUTANE	C4H10	106-97-8	Test	1,86	0,26	Train	10,90	2,50
79	n-PENTANE	C5H12	109-66-0	Test	1,49	0,09	Test	9,36	1,56
80	ISOPENTANE	C5H12	78-78-4	Train	1,40	0,00	Test	8,71	1,11
81	NEOPENTANE	C5H12	463-82-1	Train	1,45	0,05	Test	7,75	0,25
82	n-HEXANE	C6H14	110-54-3	Test	1,24	0,04	Train	8,23	1,03
83	2-METHYLPENTANE	C6H14	107-83-5	Test	1,18	0,02	Train	7,75	0,75
84	3-METHYLPENTANE	C6H14	96-14-0	Train	1,14	0,06	Train	8,36	1,36
85	2,2-DIMETHYLBUTANE	C6H14	75-83-2	Train	1,20	0,00	Train	7,46	0,46
86	2,3-DIMETHYLBUTANE	C6H14	79-29-8	Train	1,17	0,03	Train	7,59	0,59
87	2-METHYLHEXANE	C7H16	591-76-4	Train	1,01	0,01	Train	7,00	1,00
88	3-METHYLHEXANE	C7H16	589-34-4	Train	0,99	0,01	Train	7,48	1,48
89	3-ETHYLPENTANE	C7H16	617-78-7	Test	0,99	0,01	Train	7,48	0,48
90	2,2-DIMETHYLPENTANE	C7H16	590-35-2	Train	1,03	0,07	Train	6,77	0,03
91	2,3-DIMETHYLPENTANE	C7H16	565-59-3	Train	0,99	0,11	Train	7,33	0,63
92	2,4-DIMETHYLPENTANE	C7H16	108-08-7	Train	0,97	0,13	Train	6,66	0,04
93	3,3-DIMETHYLPENTANE	C7H16	562-49-2	Test	1,02	0,08	Test	7,19	0,49
94	2,2,3-TRIMETHYLBUTANE	C7H16	464-06-2	Train	1,09	0,09	Train	6,00	0,11
95	n-OCTANE	C8H18	111-65-9	Train	0,93	0,03	Test	6,71	0,21
96	2-METHYLHEPTANE	C8H18	592-27-8	Test	0,89	0,05	Test	6,40	0,60
97	3-METHYLHEPTANE	C8H18	589-81-1	Train	0,87	0,08	Train	6,78	0,98
98	4-METHYLHEPTANE	C8H18	589-53-7	Train	0,87	0,05	Train	6,78	0,98
99	3-ETHYLHEXANE	C8H18	619-99-8	Train	0,87	0,07	Train	6,78	0,98
100	2,2-DIMETHYLHEXANE	C8H18	590-73-8	Train	0,91	0,09	Train	6,22	0,72
101	2,3-DIMETHYLHEXANE	C8H18	584-94-1	Train	0,87	0,13	Train	6,67	0,77
102	2,4-DIMETHYLHEXANE	C8H18	589-43-5	Train	0,84	0,16	Train	6,47	0,57
103	2,5-DIMETHYLHEXANE	C8H18	592-13-2	Train	0,86	0,14	Train	6,13	0,23
104	3,3-DIMETHYLHEXANE	C8H18	563-16-6	Train	0,90	0,10	Test	6,56	1,06
105	3,4-DIMETHYLHEXANE	C8H18	583-48-2	Train	0,85	0,15	Train	7,09	1,19
106	2-METHYL-3-ETHYLPENTANE	C8H18	609-26-7	Test	0,84	0,04	Train	6,47	0,57
107	3-METHYL-3-ETHYLPENTANE	C8H18	1067-08-9	Test	0,90	0,04	Train	6,56	1,06
108	2,2,3-TRIMETHYLPENTANE	C8H18	564-02-3	Train	0,93	0,07	Train	5,85	0,25
109	2,3,3-TRIMETHYLPENTANE	C8H18	560-21-4	Train	0,94	0,06	Train	5,84	0,24
110	2,3,4-TRIMETHYLPENTANE	C8H18	565-75-3	Train	0,87	0,23	Train	6,55	0,55
111	2,2,3,3-TETRAMETHYLBUTANE	C8H18	594-82-1	Train	1,05	0,15	Test	5,18	0,12
112	n-NONANE	C9H20	111-84-2	Train	0,82	0,03	Train	6,16	0,56
113	2,2,5-TRIMETHYLHEXANE	C9H20	3522-94-9	Train	0,78	0,06	Train	5,55	0,35
114	3,3,5-TRIMETHYLHEPTANE	C10H22	7154-80-5	Test	0,69	0,11	Train	5,67	0,17
115	2,4,4-TRIMETHYLHEXANE	C9H20	16747-30-1	Train	0,77	0,04	Train	5,80	0,60
116	3,3-DIETHYLPENTANE	C9H20	1067-20-5	Test	0,80	0,10	Train	6,04	0,34
117	2,2,3,3-TETRAMETHYLPENTANE	C9H20	7154-79-2	Train	0,91	0,11	Test	5,07	0,17

118	2,2,3,4-TETRAMETHYLPENTANE	C9H20	1186-53-4	Train	0,83	0,10	Train	5,38	0,08
119	2,2,4,4-TETRAMETHYLPENTANE	C9H20	1070-87-7	Test	0,79	0,04	Train	5,42	0,42
120	2,3,3,4-TETRAMETHYLPENTANE	C9H20	16747-38-9	Train	0,88	0,04	Train	4,97	0,33
121	n-DECANE	C10H22	124-18-5	Test	0,74	0,01	Test	5,72	0,32
122	2,2,3,3-TETRAMETHYLHEXANE	C10H22	13475-81-5	Train	0,81	0,11	Train	4,79	0,69
123	2,2,5,5-TETRAMETHYLHEXANE	C10H22	1071-81-4	Train	0,71	0,20	Train	5,09	0,99
124	iso-BUTYLCYCLOHEXANE	C10H20	1678-98-4	Train	0,74	0,00	Test	5,94	0,41
125	tert-BUTYLCYCLOHEXANE	C10H20	3178-22-1	Train	0,68	0,08	Train	6,21	0,81
126	n-UNDECANE	C11H24	1120-21-4	Test	0,67	0,03	Train	5,34	0,24
127	n-DODECANE	C12H26	112-40-3	Test	0,62	0,02	Train	5,02	0,12
128	n-TRIDECANE	C13H28	629-50-5	Train	0,57	0,02	Train	4,75	0,05
129	n-TETRADECANE	C14H30	629-59-4	Train	0,53	0,03	Train	4,51	0,01
130	n-PENTADECANE	C15H32	629-62-9	Train	0,49	0,02	Train	4,30	0,00
131	n-HEPTADECANE	C17H36	629-78-7	Test	0,44	0,08	Test	3,95	0,15
132	n-OCTADECANE	C18H38	593-45-3	Train	0,41	0,01	Train	3,81	0,09
133	n-NONADECANE	C19H40	629-92-5	Test	0,39	0,01	Test	3,67	0,13
134	2,2-DIMETHYLOCTANE	C10H22	15869-87-1	Train	0,73	0,03	Train	5,38	0,58
135	n-EICOSANE	C20H42	112-95-8	Train	0,37	0,03	Test	3,55	0,15
136	n-HENEICOSANE	C21H44	629-94-7	Train	0,35	0,05	Train	3,44	0,16
137	n-DOCOSANE	C22H46	629-97-0	Train	0,34	0,06	Train	3,34	0,16
138	n-TRICOSANE	C23H48	638-67-5	Train	0,32	0,08	Train	3,25	0,25
139	n-TETRACOSANE	C24H50	646-31-1	Test	0,31	0,01	Train	3,17	0,24
140	n-PENTACOSANE	C25H52	629-99-2	Train	0,30	0,00	Test	3,09	0,21
141	n-HEXACOSANE	C26H54	630-01-3	Train	0,29	0,01	Train	3,01	0,29
142	n-HEPTACOSANE	C27H56	593-49-7	Test	0,28	0,02	Test	2,95	0,25
143	n-OCTACOSANE	C28H58	630-02-4	Train	0,27	0,03	Train	2,88	0,32
144	n-NONACOSANE	C29H60	630-03-5	Train	0,26	0,04	Train	2,82	0,28
145	3-METHYLNONANE	C10H22	5911-04-6	Train	0,71	0,06	Train	5,77	0,77
146	2-METHYLNONANE	C10H22	871-83-0	Test	0,72	0,08	Train	5,51	0,51
147	4-METHYLNONANE	C10H22	17301-94-9	Train	0,71	0,06	Train	5,77	0,77
148	5-METHYLNONANE	C10H22	15869-85-9	Train	0,71	0,06	Train	5,77	0,77
149	2,2,4,4,6,8,8-HEPTAMETHYLNONANE	C16H34	4390-04-9	Test	0,43	0,17	Test	3,82	0,28
150	2-METHYLOCTANE	C9H20	3221-61-2	Test	0,80	0,02	Train	5,91	0,51
151	3-METHYLOCTANE	C9H20	2216-33-3	Train	0,78	0,02	Train	6,23	0,83
152	4-METHYLOCTANE	C9H20	2216-34-4	Test	0,78	0,05	Test	6,23	0,83
153	3-ETHYLHEPTANE	C9H20	15869-80-4	Train	0,78	0,02	Train	6,23	0,83
154	2,2-DIMETHYLHEPTANE	C9H20	1071-26-7	Train	0,81	0,11	Test	5,76	0,66
155	CYCLOPROPANE	C3H6	75-19-4	Test	2,16	0,24	-	0,00	0,00
156	CYCLOBUTANE	C4H8	287-23-0	Test	1,71	0,09	-	0,00	0,00
157	CYCLOPENTANE	C5H10	287-92-3	Train	1,42	0,08	-	0,00	0,00
158	METHYLCYCLOPENTANE	C6H12	96-37-7	Train	1,18	0,02	Train	10,39	1,99
159	ETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	1640-89-7	Test	1,08	0,02	Test	8,05	1,35
160	1,1-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	1638-26-2	Test	1,00	0,10	Train	6,03	0,77
161	cis-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	1192-18-3	Test	1,01	0,09	Train	7,99	0,69
162	trans-1,2-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	822-50-4	Test	1,01	0,09	Train	7,99	0,69
163	cis-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	2532-58-3	Test	1,01	0,09	Train	7,99	0,69
164	trans-1,3-DIMETHYLCYCLOPENTANE	C7H14	1759-58-6	Train	1,01	0,09	Train	7,99	0,69
165	n-PROPYLCYCLOPENTANE	C8H16	2040-96-2	Test	0,94	0,01	Train	7,23	0,83
166	ISOPROPYLCYCLOPENTANE	C8H16	3875-51-2	Train	1,00	0,10	Train	6,46	0,04
167	1-METHYL-1-ETHYLCYCLOPENTANE	C8H16	16747-50-5	Train	0,89	0,01	Test	6,78	0,68
168	n-BUTYLCYCLOPENTANE	C9H18	2040-95-1	Train	0,84	0,04	Test	6,59	0,69
169	CYCLOHEXANE	C6H12	110-82-7	Train	1,21	0,09	-	0,00	0,00
170	METHYLCYCLOHEXANE	C7H14	108-87-2	Test	1,03	0,12	-	0,00	0,00
171	ETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	1678-91-7	Train	0,96	0,01	Train	7,43	0,83
172	1,1-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	590-66-9	Test	0,89	0,11	Train	5,71	0,39
173	cis-1,2-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	2207-01-4	Test	0,90	0,10	Train	7,38	0,88
174	trans-1,2-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	6876-23-9	Train	0,90	0,10	Train	7,38	0,88
175	cis-1,3-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	638-04-0	Test	0,90	0,10	Train	7,38	0,88
176	trans-1,3-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	2207-03-6	Test	0,90	0,10	Train	7,38	0,88
177	cis-1,4-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	624-29-3	Train	0,90	0,10	Train	7,38	0,88

178	trans-1,4-DIMETHYLCYCLOHEXANE	C8H16	2207-04-7	Train	0,90	0,10	Train	7,38	0,88
179	1-trans-3,5-TRIMETHYLCYCLOHEXANE	C9H18	1795-26-2	Train	0,80	0,20	Test	6,19	0,72
180	n-PROPYLCYCLOHEXANE	C9H18	1678-92-8	Train	0,85	0,07	Train	6,75	0,85
181	ISOPROPYLCYCLOHEXANE	C9H18	696-29-7	Train	0,90	0,16	Test	6,09	0,19
182	1,2,3,4-TETRAMETHYLCYCLOHEXANE	C10H20	3726-45-2	Test	0,72	0,02	Train	5,37	1,63
183	n-BUTYLCYCLOHEXANE	C10H20	1678-93-9	Test	0,76	0,01	Train	6,20	0,70
184	cis-DECAHYDRONAPHTHALENE	C10H18	493-01-6	Train	0,76	0,05	Train	6,41	1,51
185	trans-DECAHYDRONAPHTHALENE	C10H18	493-02-7	Train	0,76	0,05	Test	6,41	1,51
186	BICYCLOHEXYL	C12H22	92-51-3	Train	0,64	0,01	Train	6,50	1,40
187	1,1-DIETHYLCYCLOHEXANE	C10H20	78-01-3	Train	0,73	0,02	Train	7,24	1,24
188	n-DECYLCYCLOHEXANE	C16H32	1795-16-0	Train	0,47	0,03	Train	4,32	0,38
189	CYCLOHEPTANE	C7H14	291-64-5	Train	1,06	0,04	-	0,00	0,00
190	CYCLOOCTANE	C8H16	292-64-8	Test	0,94	0,04	-	0,00	0,00
191	trans-1,4-DIETHYLCYCLOHEXANE	C10H20	13990-93-7	Train	0,79	0,04	Train	5,41	1,59
192	2,6-DIMETHYLHEPTANE	C9H20	1072-05-5	Train	0,77	0,14	Test	5,69	0,29
193	2,2-DIMETHYL-3-ETHYLPENTANE	C9H20	16747-32-3	Test	0,77	0,03	Test	5,81	0,61
194	2,4-DIMETHYL-3-ETHYLPENTANE	C9H20	1068-87-7	Train	0,73	0,07	Train	5,74	0,24
195	PROPYLENE	C3H6	115-07-1	Test	2,15	0,00	-	0,00	0,00
196	1-TRIACONTENE	C30H60	18435-53-5	Test	0,25	0,12	-	0,00	0,00
197	1-BUTENE	C4H8	106-98-9	Test	1,86	0,26	Train	12,45	2,45
198	cis-2-BUTENE	C4H8	590-18-1	Test	1,84	0,14	Train	11,10	1,40
199	trans-2-BUTENE	C4H8	624-64-6	Train	1,84	0,14	Train	11,10	1,40
200	ISOBUTENE	C4H8	115-11-7	Train	1,71	0,09	Train	11,24	1,64
201	1-PENTENE	C5H10	109-67-1	Test	1,49	0,09	Train	10,43	1,73
202	cis-2-PENTENE	C5H10	627-20-3	Train	1,62	0,12	Test	9,26	0,14
203	trans-2-PENTENE	C5H10	646-04-8	Train	1,62	0,12	Train	9,26	0,14
204	2-METHYL-1-BUTENE	C5H10	563-46-2	Test	1,52	0,12	Train	9,36	0,24
205	3-METHYL-1-BUTENE	C5H10	563-45-1	Train	1,56	0,06	Train	9,90	0,80
206	2-METHYL-2-BUTENE	C5H10	513-35-9	Test	1,48	0,08	Train	10,77	2,07
207	1-HEXENE	C6H12	592-41-6	Train	1,24	0,04	Train	9,02	1,12
208	cis-2-HEXENE	C6H12	7688-21-3	Train	1,33	0,09	Test	8,16	0,84
209	trans-2-HEXENE	C6H12	4050-45-7	Train	1,33	0,09	Train	8,16	0,84
210	cis-3-HEXENE	C6H12	7642-09-3	Train	1,45	0,25	Train	8,00	1,00
211	trans-3-HEXENE	C6H12	13269-52-8	Train	1,45	0,25	Train	8,00	1,00
212	2-METHYL-1-PENTENE	C6H12	763-29-1	Test	1,26	0,06	Train	8,23	0,77
213	3-METHYL-1-PENTENE	C6H12	760-20-3	Test	1,25	0,05	Test	9,43	0,03
214	4-METHYL-1-PENTENE	C6H12	691-37-2	Test	1,18	0,02	Test	8,42	0,98
215	2-METHYL-2-PENTENE	C6H12	625-27-4	Train	1,34	0,14	Train	9,05	0,35
216	3-METHYL-cis-2-PENTENE	C6H12	922-62-3	Train	1,34	0,14	Test	9,05	0,45
217	4-METHYL-1-HEXENE	C7H14	3769-23-1	Train	0,99	0,11	Train	8,09	0,01
218	4-METHYL-cis-2-PENTENE	C6H12	691-38-3	Train	1,39	0,19	Train	7,86	1,25
219	4-METHYL-trans-2-PENTENE	C6H12	674-76-0	Test	1,39	0,19	Test	7,86	1,25
220	2-ETHYL-1-BUTENE	C6H12	760-21-4	Train	1,37	0,17	Train	8,07	0,93
221	2,3-DIMETHYL-1-BUTENE	C6H12	563-78-0	Test	1,32	0,12	Test	7,92	1,18
222	3,3-DIMETHYL-1-BUTENE	C6H12	558-37-2	Train	1,32	0,12	Train	8,26	0,74
223	2,3-DIMETHYL-2-BUTENE	C6H12	563-79-1	Train	1,07	0,13	Train	8,74	0,64
224	2-ETHYL-1-PENTENE	C7H14	3404-71-5	Train	1,16	0,16	Train	7,25	0,55
225	1-HEPTENE	C7H14	592-76-7	Test	1,06	0,06	Test	7,98	0,68
226	cis-2-HEPTENE	C7H14	6443-92-1	Train	1,13	0,03	Train	7,32	0,48
227	trans-2-HEPTENE	C7H14	14686-13-6	Train	1,13	0,13	Train	7,32	0,48
228	trans-3-HEPTENE	C7H14	14686-14-7	Train	1,21	0,11	Test	7,20	0,60
229	2-METHYL-1-HEXENE	C7H14	6094-02-6	Train	1,08	0,08	Train	7,38	0,42
230	3-ETHYL-1-PENTENE	C7H14	4038-04-4	Train	1,07	0,07	Train	8,29	0,19
231	3-METHYL-1-HEXENE	C7H14	3404-61-3	Train	1,07	0,07	Test	8,29	0,09
232	3-ETHYL-1-HEXENE	C8H16	3404-58-8	Test	0,93	0,00	Test	7,42	0,26
233	4-METHYL-1-HEPTENE	C8H16	13151-05-8	Train	0,87	0,06	Train	7,27	1,78
234	cis-2-NONENE	C9H18	6434-77-1	Test	0,86	0,03	Train	6,13	0,28
235	trans-2-NONENE	C9H18	6434-78-2	Train	0,86	0,03	Train	6,13	0,22
236	2,3,3-TRIMETHYL-1-BUTENE	C7H14	594-56-9	Train	1,14	0,14	Train	6,90	0,50
237	cis-3-HEPTENE	C7H14	7642-10-6	Test	1,21	0,11	Train	7,20	0,60

238	1-OCTENE	C8H16	111-66-0	Train	0,93	0,13	Test	7,18	0,38
239	trans-2-OCTENE	C8H16	13389-42-9	Test	0,98	0,08	Train	6,66	0,24
240	2,4,4-TRIMETHYL-1-PENTENE	C8H16	107-39-1	Test	0,92	0,04	Train	6,22	0,22
241	2,4,4-TRIMETHYL-2-PENTENE	C8H16	107-40-4	Train	1,03	0,13	Train	6,74	0,34
242	2-ETHYL-1-HEXENE	C8H16	1632-16-2	Train	1,00	0,10	Train	6,60	0,30
243	1-NONENE	C9H18	124-11-8	Test	0,82	0,12	Test	6,55	0,35
244	1-DECENE	C10H20	872-05-9	Test	0,74	0,04	Train	6,03	0,33
245	1-UNDECENE	C11H22	821-95-4	Train	0,67	0,12	Train	5,61	0,41
246	1-DODECENE	C12H24	112-41-4	Train	0,62	0,22	Train	5,25	0,55
247	1-TRIDECENE	C13H26	2437-56-1	Test	0,57	0,17	Train	4,95	0,25
248	1-TETRADECENE	C14H28	1120-36-1	Train	0,53	0,13	Train	4,68	0,18
249	1-PENTADECENE	C15H30	13360-61-7	Train	0,49	0,19	Test	4,45	0,15
250	1-HEXADECENE	C16H32	629-73-2	Train	0,46	0,16	Train	4,25	0,15
251	1-OCTADECENE	C18H36	112-88-9	Train	0,41	0,11	Train	3,91	0,11
252	6-METHYL-1-HEPTENE	C8H16	5026-76-6	Train	0,89	0,01	Train	6,82	1,32
253	CYCLOPENTENE	C5H8	142-29-0	Train	1,47	0,03	Train	14,93	2,83
254	CYCLOHEXENE	C6H10	110-83-8	Test	1,25	0,05	-	0,00	0,00
255	trans-2-EICOSENE	C20H40	42448-85-1	Test	0,38	0,12	Train	3,54	0,52
256	trans-2-PENTADECENE	C15H30	74392-36-2	Test	0,51	0,16	Train	4,29	0,69
257	CYCLOHEPTENE	C7H12	628-92-2	Train	1,09	0,01	Train	11,07	2,47
258	CYCLOOCTENE	C8H14	931-88-4	Test	0,96	0,04	Train	9,85	2,35
259	cis-2-OCTENE	C8H16	7642-04-8	Train	0,98	0,70	Train	6,66	0,24
260	trans-3-OCTENE	C8H16	14919-01-8	Test	1,04	0,14	Test	6,56	0,34
261	cis-4-OCTENE	C8H16	7642-15-1	Train	1,04	0,14	Train	6,56	0,34
262	trans-4-OCTENE	C8H16	14850-23-8	Train	1,04	0,14	Train	6,56	0,34
263	cis-3-OCTENE	C8H16	14850-22-7	Train	1,04	0,14	Train	6,56	0,34
264	1-HEPTADECENE	C17H34	6765-39-5	Train	0,44	0,14	Train	4,07	0,07
265	1-NONADECENE	C19H38	18435-45-5	Train	0,39	0,09	Train	3,77	0,07
266	1-EICOSENE	C20H40	3452-07-1	Train	0,37	0,07	Test	3,64	0,04
267	VINYLCYCLOHEXENE	C8H12	100-40-3	Train	0,62	0,36	-	0,00	0,00
268	1-METHYLCYCLOPENTENE	C6H10	693-89-0	Train	1,20	0,10	Test	11,14	1,34
269	3-METHYLCYCLOPENTENE	C6H10	1120-62-3	Test	1,22	0,08	Train	10,21	0,01
270	4-METHYLCYCLOPENTENE	C6H10	1759-81-5	Test	1,22	0,08	Train	10,21	0,01
271	2,3-DIMETHYL-1-HEXENE	C8H16	16746-86-4	Train	0,95	0,05	Train	6,91	0,09
272	d-LIMONENE	C10H16	5989-27-5	Train	0,76	0,01	Train	6,65	0,55
273	TERPINOLENE	C10H16	586-62-9	Train	0,78	0,02	Train	6,80	0,00
274	PROPENYL CYCLOHEXENE	C9H14	13511-13-2	Train	0,78	0,02	-	0,00	0,00
275	1-DOCOSENE	C22H44	1599-67-3	Test	0,34	0,10	Train	3,41	0,09
276	1-TETRACOSENE	C24H48	10192-32-2	Train	0,31	0,09	Train	3,23	0,17
277	1-HEXACOSENE	C26H52	18835-33-1	Test	0,29	0,08	Train	3,07	0,25
278	1-OCTACOSENE	C28H56	18835-34-2	Train	0,27	0,07	Train	2,93	0,32
279	1,2-BUTADIENE	C4H6	590-19-2	Train	1,72	0,12	Train	17,46	0,84
280	1,3-BUTADIENE	C4H6	106-99-0	Train	1,84	0,15	Train	15,45	0,55
281	1,2-PENTADIENE	C5H8	591-95-7	Train	1,40	0,10	Train	13,57	1,27
282	cis-1,3-PENTADIENE	C5H8	1574-41-0	Train	1,61	0,01	Train	10,71	2,39
283	trans-1,3-PENTADIENE	C5H8	2004-70-8	Train	1,61	0,01	Train	10,71	2,39
284	1,4-PENTADIENE	C5H8	591-93-5	Train	1,49	0,11	Train	11,81	1,29
285	2,3-PENTADIENE	C5H8	591-96-8	Train	1,60	0,00	Train	12,10	0,00
286	ISOPRENE	C5H8	78-79-5	Train	1,51	0,01	Train	10,84	1,94
287	1,5-HEXADIENE	C6H10	592-42-7	Test	1,24	0,06	Train	9,99	0,91
288	3-METHYL-1,2-BUTADIENE	C5H8	598-25-4	Train	1,60	0,00	Test	15,20	0,00
289	METHYLCYCLOPENTADIENE	C6H8	26519-91-5	Train	1,24	0,06	-	0,00	0,00
290	1,4-HEXADIENE	C6H10	592-45-0	Train	1,33	0,15	Train	8,93	1,03
291	trans,trans-2,4-HEXADIENE	C6H10	5194-51-4	Train	1,42	0,12	Train	8,33	2,57
292	CYCLOPENTADIENE	C5H6	542-92-7	Test	1,53	0,17	Train	14,53	0,07
293	DICYCLOPENTADIENE	C10H12	77-73-6	Test	0,78	0,02	Test	5,26	1,05
294	alpha-PHELLANDRENE	C10H16	99-83-2	Train	0,82	0,02	Train	5,41	1,69
295	beta-PHELLANDRENE	C10H16	555-10-2	Train	0,82	0,02	Train	5,67	1,43
296	cis,trans-2,4-HEXADIENE	C6H10	5194-50-3	Train	1,42	0,12	Train	8,33	2,57
297	3-METHYL-1,4-PENTADIENE	C6H10	1115-08-8	Train	1,38	0,07	-	0,00	0,00

298	1,5,9-CYCLODODECATRIENE	C12H18	706-31-0	Train	0,68	0,02	-	0,00	0,00
299	2,5-DIMETHYL-1,5-HEXADIENE	C8H14	627-58-7	Train	0,95	0,05	Train	6,71	1,29
300	2,5-DIMETHYL-2,4-HEXADIENE	C8H14	764-13-6	Train	1,04	0,04	Train	7,99	0,29
301	1,3-CYCLOHEXADIENE	C6H8	592-57-4	Test	1,29	0,11	Train	12,41	0,61
302	1,4-CYCLOHEXADIENE	C6H8	628-41-1	Train	1,29	0,11	Train	12,41	0,51
303	1,5-CYCLOOCTADIENE	C8H12	111-78-4	Train	0,99	0,01	Train	9,69	1,09
304	trans-1,3-HEXADIENE	C6H10	20237-34-7	Train	1,44	0,80	Train	9,01	2,94
305	trans-2-METHYL-1,3-PENTADIENE	C6H10	926-54-5	Train	1,35	0,04	-	0,00	0,00
306	1,9-DECADIENE	C10H18	1647-16-1	Train	0,74	0,01	-	0,00	0,00
307	1,3,5,7-CYCLOOCTATETRAENE	C8H8	629-20-9	Test	1,04	0,19	Train	9,38	1,32
308	METHYLACETYLENE	C3H4	74-99-7	Train	2,15	0,45	Train	60,65	3,35
309	ETHYLACETYLENE	C4H6	107-00-6	Train	1,67	0,07	Test	28,97	3,93
310	DIMETHYLACETYLENE	C4H6	503-17-3	Train	1,62	0,25	Train	33,26	8,54
311	1-PENTYNE	C5H8	627-19-0	Train	1,36	0,06	Test	19,29	3,01
312	3-HEXYNE	C6H10	928-49-4	Train	1,12	0,02	Train	15,54	1,96
313	2-HEXYNE	C6H10	764-35-2	Train	1,12	0,02	Train	15,54	2,26
314	2-PENTYNE	C5H8	627-21-4	Train	1,33	0,03	Train	21,03	4,27
315	1-HEXYNE	C6H10	693-02-7	Train	1,15	0,05	Train	14,60	2,00
316	2-METHYL-1-BUTENE-3-YNE	C5H6	78-80-8	Train	1,40	0,00	Train	18,17	6,93
317	1-OCTYNE	C8H14	629-05-0	Train	0,88	0,08	Test	10,01	0,89
318	VINYLCETYLENE	C4H4	689-97-4	Train	1,68	0,52	Train	40,06	8,36
319	3-METHYL-1-BUTYNE	C5H8	598-23-2	Train	1,28	0,02	Train	16,43	6,37
320	1-PENTENE-3-YNE	C5H6	646-05-9	Train	1,34	0,06	Train	26,12	1,02
321	1-PENTENE-4-YNE	C5H6	871-28-3	Train	1,36	0,04	Test	25,43	2,53
322	DIPHENYLACETYLENE	C14H10	501-65-5	Train	0,70	0,00	Train	5,31	0,01
323	1-NONYNE	C9H16	3452-09-3	Train	0,78	0,02	Train	8,71	0,69
324	1-DECYNE	C10H18	764-93-2	Train	0,71	0,01	Train	7,75	0,65
325	BENZENE	C6H6	71-43-2	Test	1,50	0,30	Train	10,32	2,32
326	TOLUENE	C7H8	108-88-3	Train	1,24	0,14	Test	8,41	1,31
327	ETHYLBENZENE	C8H10	100-41-4	Train	1,03	0,03	Train	7,91	1,21
328	o-XYLENE	C8H10	95-47-6	Test	1,15	0,05	Train	6,45	0,05
329	m-XYLENE	C8H10	108-38-3	Train	1,10	0,00	Train	6,69	0,29
330	p-XYLENE	C8H10	106-42-3	Test	1,13	0,03	Train	6,69	0,09
331	n-PROPYLBENZENE	C9H12	103-65-1	Test	0,91	0,03	Train	7,13	0,93
332	CUMENE	C9H12	98-82-8	Train	0,85	0,03	Train	6,96	0,46
333	o-ETHYLTOLUENE	C9H12	611-14-3	Train	0,96	0,06	Train	6,18	0,38
334	m-ETHYLTOLUENE	C9H12	620-14-4	Test	0,93	0,03	Test	6,39	0,29
335	p-ETHYLTOLUENE	C9H12	622-96-8	Train	0,96	0,06	Train	6,40	0,40
336	1,2,3-TRIMETHYLBENZENE	C9H12	526-73-8	Train	1,01	0,21	Train	5,93	0,67
337	1,2,4-TRIMETHYLBENZENE	C9H12	95-63-6	Train	1,02	0,12	Train	6,27	1,03
338	MESITYLENE	C9H12	108-67-8	Train	0,99	0,11	Train	5,67	1,62
339	n-BUTYLBENZENE	C10H14	104-51-8	Test	0,81	0,01	Train	6,51	0,71
340	ISOBUTYLBENZENE	C10H14	538-93-2	Train	0,78	0,02	Train	6,22	0,22
341	sec-BUTYLBENZENE	C10H14	135-98-8	Train	0,84	0,04	Train	6,61	0,29
342	tert-BUTYLBENZENE	C10H14	98-06-6	Train	0,82	0,02	Test	5,76	0,04
343	o-CYMENE	C10H14	527-84-4	Train	0,81	0,01	Train	5,64	0,54
344	m-CYMENE	C10H14	535-77-3	Test	0,78	0,02	Test	5,80	0,50
345	p-CYMENE	C10H14	99-87-6	Test	0,80	0,10	Train	5,81	0,21
346	o-DIETHYLBENZENE	C10H14	135-01-3	Test	0,83	0,03	Train	5,94	0,54
347	m-DIETHYLBENZENE	C10H14	141-93-5	Train	0,81	0,01	Train	6,13	0,53
348	p-DIETHYLBENZENE	C10H14	105-05-5	Train	0,83	0,03	Test	6,13	0,03
349	1,2,3,4-TETRAMETHYLBENZENE	C10H14	488-23-3	Train	0,81	0,01	-	0,00	0,00
350	1,2,3,5-TETRAMETHYLBENZENE	C10H14	527-53-7	Train	0,65	0,15	Train	5,88	0,72
351	1,2,4,5-TETRAMETHYLBENZENE	C10H14	95-93-2	Train	0,95	0,15	Train	5,33	1,27
352	p-tert-BUTYL ETHYLBENZENE	C12H18	7364-19-4	Train	0,68	0,02	Train	4,85	0,65
353	1,4-DI-tert-BUTYLBENZENE	C14H22	1012-72-2	Train	0,58	0,02	Test	4,09	0,51
354	alpha-TOCOPHEROL	C29H50O2	59-02-9	Train	0,24	0,03	-	0,00	0,00
355	1,3,5-TRI-tert-BUTYLBENZENE	C18H30	1460-02-2	Train	0,44	0,03	Train	3,31	0,42
356	1,3,5-TRISOPROPYLBENZENE	C15H24	717-74-8	Train	0,47	0,05	Train	4,23	0,79
357	PENTAMETHYLBENZENE	C11H16	700-12-9	Train	0,72	0,02	Train	5,75	0,45

358	1,2,4,5-TETRAISOPROPYLBENZENE	C18H30	635-11-0	Train	0,40	0,02	Train	3,79	0,11
359	m-DIISOPROPYLBENZENE	C12H18	99-62-7	Test	0,61	0,09	Test	5,16	0,86
360	p-DIISOPROPYLBENZENE	C12H18	100-18-5	Test	0,62	0,08	Test	5,16	0,86
361	1,2,4-TRIETHYLBENZENE	C12H18	877-44-1	Train	0,68	0,02	Train	5,58	0,02
362	HEXAMETHYLBENZENE	C12H18	87-85-4	Test	0,66	0,04	Train	4,68	1,12
363	1,2,3-TRIETHYLBENZENE	C12H18	42205-08-3	Train	0,68	0,02	Train	5,32	0,08
364	n-HEPTYLBENZENE	C13H20	1078-71-3	Train	0,61	0,01	Train	5,23	0,13
365	1,2,3,5-TETRAETHYLBENZENE	C14H22	38842-05-6	Train	0,45	0,15	Train	5,12	0,32
366	n-DECYLBENZENE	C16H26	104-72-3	Train	0,49	0,11	Train	4,44	0,16
367	PENTAETHYLBENZENE	C16H26	605-01-6	Train	0,45	0,05	Train	4,88	0,68
368	HEXAETHYLBENZENE	C18H30	604-88-6	Test	0,40	0,00	Train	4,05	0,25
369	CYCLOHEXYLBENZENE	C12H16	827-52-1	Train	0,65	0,05	Train	5,38	0,02
370	BIPHENYL	C12H10	92-52-4	Train	0,83	0,13	Train	5,76	0,04
371	p-TERPHENYL	C18H14	92-94-4	Train	0,60	0,10	Test	4,09	0,39
372	m-TERPHENYL	C18H14	92-06-8	Train	0,59	0,09	Test	4,09	0,39
373	o-TERPHENYL	C18H14	84-15-1	Train	0,60	0,10	Train	4,02	0,22
374	1,1-DIPHENYLETHANE	C14H14	612-00-0	Train	0,61	0,01	Train	6,13	0,93
375	DIPHENYLMETHANE	C13H12	101-81-5	Train	0,64	0,04	-	0,00	0,00
376	1,2-DIPHENYLETHANE	C14H14	103-29-7	Train	0,59	0,01	Train	5,90	0,70
377	TRIPHENYLMETHANE	C19H16	519-73-3	Train	0,42	0,08	Train	5,28	0,08
378	2,4-DIPHENYL-4-METHYLPENTENE-1	C18H20	6362-80-7	Train	0,48	0,02	-	0,00	0,00
379	n-PENTYLBENZENE	C11H16	538-68-1	Train	0,73	0,07	Train	6,00	0,50
380	n-HEXYLBENZENE	C12H18	1077-16-3	Test	0,66	0,04	Train	5,58	0,28
381	n-OCTYLBENZENE	C14H22	2189-60-8	Train	0,56	0,09	Train	4,93	0,03
382	n-NONYLBENZENE	C15H24	1081-77-2	Test	0,52	0,10	Train	4,66	0,04
383	n-UNDECYLBENZENE	C17H28	6742-54-7	Train	0,46	0,14	Train	4,24	0,16
384	n-TRIDECYLBENZENE	C19H32	123-02-4	Test	0,41	0,09	Test	3,90	0,30
385	n-TETRADECYLBENZENE	C20H34	1459-10-5	Train	0,39	0,11	Train	3,76	0,34
386	n-DODECYLBENZENE	C18H30	123-01-3	Train	0,43	0,11	Test	4,06	0,24
387	5-ETHYL-m-XYLENE	C10H14	934-74-7	Train	0,85	0,05	Train	5,47	0,93
388	2-ETHYL-m-XYLENE	C10H14	2870-04-4	Train	0,87	0,07	Train	5,71	0,69
389	2-ETHYL-p-XYLENE	C10H14	1758-88-9	Test	0,88	0,08	Test	6,02	0,38
390	4-ETHYL-m-XYLENE	C10H14	874-41-9	Train	0,88	0,08	Train	6,02	0,38
391	4-ETHYL-o-XYLENE	C10H14	934-80-5	Test	0,88	0,08	Train	6,02	0,38
392	3-ETHYL-o-XYLENE	C10H14	933-98-2	Train	0,87	0,07	Test	5,71	0,69
393	2,3-DIMETHYL-2,3-DIPHENYLBUTANE	C18H22	1889-67-4	Train	0,51	0,01	Train	3,84	1,36
394	2-PHENYLBUTENE-1	C10H12	2039-93-2	Train	0,89	0,01	Train	6,34	0,06
395	cis-2-PHENYLBUTENE-2	C10H12	768-00-3	Test	0,93	0,03	-	0,00	0,00
396	trans-2-PHENYLBUTENE-2	C10H12	767-99-7	Train	0,93	0,03	-	0,00	0,00
397	1-METHYL-2-n-PROPYLBENZENE	C10H14	1074-17-5	Train	0,85	0,05	Test	5,73	0,33
398	1-METHYL-3-n-PROPYLBENZENE	C10H14	1074-43-7	Test	0,83	0,03	Train	5,91	0,31
399	1-METHYL-4-n-PROPYLBENZENE	C10H14	1074-55-1	Train	0,85	0,05	Train	5,91	0,41
400	1,1,2-TRIPHENYLETHANE	C20H18	1520-42-9	Train	0,43	0,07	Train	4,65	0,55
401	TETRAPHENYLMETHANE	C25H20	630-76-2	Train	0,30	0,10	Test	4,23	0,97
402	1,1,2,2-TETRAPHENYLETHANE	C26H22	632-50-8	Train	0,33	0,07	Train	4,10	1,10
403	1-(4-ETHYLPHENYL)-2-PHENYLETHANE	C16H18	7439-15-8	Train	0,51	0,01	Train	4,95	0,46
404	1,2-DIMETHYL-3-PROPYLBENZENE	C11H16	17059-44-8	Train	0,78	0,11	Test	5,34	0,64
405	1,2,3-TRIMETHYL-4-ETHYLBENZENE	C11H16	61827-86-9	Train	0,72	0,01	Train	8,43	1,40
406	1,2,4-TRIMETHYL-3-ETHYLBENZENE	C11H16	61827-87-0	Train	0,72	0,00	Train	8,43	1,40
407	1,2,4-TRIMETHYL-5-ETHYLBENZENE	C11H16	17851-27-3	Train	0,82	0,09	-	0,00	0,00
408	1-(4-ETHYLPHENYL)-2-(4-ETHYLPHENYL)ETHANE	C18H22	51526-06-8	Train	0,46	0,01	Train	4,31	0,93
409	2,2-DIPHENYL PROPANE	C15H16	778-22-3	Train	0,55	0,34	Train	5,36	0,68
410	STYRENE	C8H8	100-42-5	Train	0,96	0,14	-	0,00	0,00
411	o-METHYLSTYRENE	C9H10	611-15-4	Train	0,90	0,10	-	0,00	0,00
412	m-METHYLSTYRENE	C9H10	100-80-1	Train	0,87	0,17	-	0,00	0,00
413	5-o-TOLYL-2-PENTENE	C12H16	6047-69-4	Train	0,72	0,04	Train	5,02	1,26
414	o-ETHYLSTYRENE	C10H12	7564-63-8	Train	0,78	0,07	Train	6,76	0,20
415	m-ETHYLSTYRENE	C10H12	7525-62-4	Train	0,76	0,09	Train	7,02	0,06
416	p-ETHYLSTYRENE	C10H12	3454-07-7	Train	0,78	0,07	Test	7,03	0,07

417	p-METHYLSTYRENE	C9H10	622-97-9	Train	0,89	0,09	-	0,00	0,00
418	alpha-METHYLSTYRENE	C9H10	98-83-9	Train	0,95	0,05	Train	7,03	0,93
419	m-DIVINYLBENZENE	C10H10	108-57-6	Train	0,72	0,42	-	0,00	0,00
420	ETHYNYLBENZENE	C8H6	536-74-3	Train	1,20	0,00	Test	11,90	0,00
421	4-ISOBUTYLSTYRENE	C12H16	63444-56-4	Train	0,63	0,07	Train	5,70	0,00
422	cis-1-PROPENYLBENZENE	C9H10	766-90-5	Train	0,97	0,03	Train	6,86	0,16
423	trans-1-PROPENYLBENZENE	C9H10	873-66-5	Train	0,97	0,03	Test	6,86	0,16
424	p-ISOPROPENYLSTYRENE	C11H12	16262-48-9	Train	0,73	0,07	Train	6,35	0,15
425	p-tert-BUTYLSTYRENE	C12H16	1746-23-2	Train	0,65	0,05	Train	5,33	0,77
426	NAPHTHALENE	C10H8	91-20-3	Train	0,97	0,09	Train	6,19	0,29
427	1-METHYLNAPHTHALENE	C11H10	90-12-0	Test	0,76	0,08	Train	5,87	0,63
428	2-METHYLNAPHTHALENE	C11H10	91-57-6	Train	0,82	0,14	Train	5,65	0,75
429	1-ETHYLNAPHTHALENE	C12H12	1127-76-0	Train	0,67	0,03	Train	5,66	0,46
430	1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE	C10H12	119-64-2	Test	0,87	0,03	Train	6,27	1,27
431	2,6-DIMETHYLNAPHTHALENE	C12H12	581-42-0	Train	0,71	0,01	Train	5,22	0,22
432	1-n-BUTYLNAPHTHALENE	C14H16	1634-09-9	Test	0,57	0,03	Train	4,98	0,12
433	1-n-HEXYLNAPHTHALENE	C16H20	2876-53-1	Train	0,49	0,01	Train	4,48	0,62
434	2,7-DIMETHYLNAPHTHALENE	C12H12	582-16-1	Train	0,71	0,01	Train	5,22	0,22
435	1-n-HEXYL-1,2,3,4-TETRAHYDRONAPHTHALENE	C16H24	66325-11-9	Train	0,52	0,02	Train	4,01	1,09
436	FLUORANTHENE	C16H10	206-44-0	Train	0,42	0,18	Train	4,76	0,55
437	1-n-PROPYLNAPHTHALENE	C13H14	2765-18-6	Test	0,62	0,08	Train	5,29	0,19
438	2-ETHYLNAPHTHALENE	C12H12	939-27-5	Train	0,73	0,03	Train	5,46	0,26
439	1-METHYLINDENE	C10H10	767-59-9	Train	1,05	0,15	Test	5,99	0,49
440	2-METHYLINDENE	C10H10	2177-47-1	Train	1,04	0,14	Train	6,24	0,84
441	1,2,3-TRIMETHYLINDENE	C12H14	4773-83-5	Train	0,76	0,06	-	0,00	0,00
442	METHYLCYCLOPENTADIENE DIMER	C12H16	26472-00-4	Train	0,63	0,07	-	0,00	0,00
443	1-PHENYLINDENE	C15H12	1961-96-2	Train	0,65	0,05	Train	4,26	0,06
444	TRIPHENYLETHYLENE	C20H16	58-72-0	Train	0,47	0,07	Train	5,70	0,40
445	TETRAPHENYLETHYLENE	C26H20	632-51-9	Train	0,33	0,03	Train	4,67	0,64
446	cis-STILBENE	C14H12	645-49-8	Train	0,64	0,06	Train	5,84	0,54
447	trans-STILBENE	C14H12	103-30-0	Train	0,64	0,06	Train	5,84	0,54
448	trans-3,5-DIMETHOXYSTILBENE	C16H16O2	21956-56-9	Train	0,58	0,02	Train	5,08	0,54
449	FLUORENE	C13H10	86-73-7	Train	0,62	0,08	Train	5,15	0,15
450	INDENE	C9H8	95-13-6	Train	1,24	0,24	Train	7,08	0,68
451	ANTHRACENE	C14H10	120-12-7	Train	0,63	0,03	Test	5,58	0,38
452	PHENANTHRENE	C14H10	85-01-8	Train	0,69	0,01	Test	5,71	0,51
453	CHRYSENE	C18H12	218-01-9	Train	0,53	0,03	Train	5,32	0,02
454	PYRENE	C16H10	129-00-0	Train	0,59	0,01	Train	5,76	0,46
455	ACENAPHTHENE	C12H10	83-32-9	Train	0,66	0,14	Train	5,14	0,16
456	ACENAPHTHALENE	C12H8	208-96-8	Train	0,91	0,11	-	0,00	0,00
457	ADAMANTANE	C10H16	281-23-2	Train	0,75	0,16	Train	5,33	0,67
458	VINYLNORBORNENE	C9H12	3048-64-4	Train	0,57	0,23	Train	4,59	1,41
459	DIAMANTANE	C14H20	2292-79-7	Test	0,54	0,04	Train	3,67	0,53
460	1,3-DIMETHYLADAMANTANE	C12H20	702-79-4	Train	0,60	0,06	-	0,00	0,00
461	4-METHYLPHENANTHRENE	C15H12	832-64-4	Train	0,57	0,02	Train	5,45	1,58
462	METHYLNORBORNENE	C8H12	694-92-8	Train	0,92	0,02	Train	6,79	0,89
463	ETHYLNORBORNENE	C9H14	15403-89-1	Train	0,87	0,07	Train	5,60	0,10
464	INDANE	C9H10	496-11-7	Train	0,98	0,02	Test	6,67	0,47
465	alpha-TERPINENE	C10H16	99-86-5	Train	0,79	0,01	Train	7,83	1,03
466	gamma-TERPINENE	C10H16	99-85-4	Train	0,79	0,01	Train	7,83	1,03
467	2-NORBORNENE	C7H10	498-66-8	Test	1,07	0,07	Test	7,84	1,44
468	5-ETHYLIDENE-2-NORBORNENE	C9H12	16219-75-3	Train	0,80	0,00	Train	5,50	0,00
469	BENZANTHRACENE	C18H12	56-55-3	Train	0,50	0,00	Train	5,21	0,09
470	NAPHTHACENE	C18H12	92-24-0	Train	0,47	0,03	Test	5,11	0,19
471	sec-BUTYLCYCLOHEXANE	C10H20	7058-01-7	Train	0,78	0,04	Train	5,93	0,46
472	PIMARIC ACID	C20H30O2	127-27-5	Test	0,49	0,08	-	0,00	0,00
473	ISOPIMARIC ACID	C20H30O2	5835-26-7	Train	0,49	0,08	-	0,00	0,00
474	BICYCLO[2.2.1]HEPTANE	C7H12	279-23-2	Test	1,04	0,07	Train	7,94	1,04
475	BICYCLO[2.2.2]OCTANE	C8H14	280-33-1	Train	0,93	0,04	Test	7,34	0,38

476	TRIAMANTANE	C18H24	13349-10-5	Train	0,41	0,22	-	0,00	0,00
477	TETRAMANTANE	C22H28	27745-90-0	Test	0,33	0,02	-	0,00	0,00
478	CAMPHENE	C10H16	79-92-5	Train	0,72	0,02	Train	4,49	0,21
479	alpha-PINENE	C10H16	80-56-8	Test	0,72	0,02	Train	4,34	0,16
480	beta-PINENE	C10H16	127-91-3	Train	0,72	0,02	Train	4,49	0,21
481	1,2,3,6-TETRAHYDROBENZALDEHYDE	C7H10O	100-50-5	Train	1,14	0,04	Train	9,76	0,19
482	2-METHYLPROPANAL	C4H8O	78-84-2	Train	1,95	0,35	Train	12,16	1,16
483	GLYOXAL	C2H2O2	107-22-2	Train	5,91	0,09	-	0,00	0,00
484	2-METHYLHEXANAL	C7H14O	925-54-2	Train	1,06	0,04	Train	8,51	1,31
485	3-METHYLHEXANAL	C7H14O	19269-28-4	Test	1,04	0,06	Train	8,15	0,95
486	2-METHYL-2-PENTENAL	C6H10O	623-36-9	Train	1,54	0,14	Train	11,71	1,01
487	2-ETHYL-2-HEXENAL	C8H14O	645-62-5	Train	1,17	0,17	Train	8,46	0,36
488	2-METHYLBUTYRALDEHYDE	C5H10O	96-17-3	Train	1,49	0,25	Train	11,43	1,47
489	3-METHYLBUTYRALDEHYDE	C5H10O	590-86-3	Train	1,50	0,26	-	0,00	0,00
490	GLYCOL ALDEHYDE	C2H4O2	141-46-8	Test	4,69	1,77	-	0,00	0,00
491	ACROLEIN	C3H4O	107-02-8	Train	2,75	0,05	Train	30,38	0,62
492	cis-CROTONALDEHYDE	C4H6O	15798-64-8	Train	2,25	0,15	Train	15,70	0,20
493	METHACROLEIN	C4H6O	78-85-3	Train	2,07	0,41	Train	16,01	1,41
494	2-PHENYLPROPIONALDEHYDE	C9H10O	93-53-8	Train	1,00	0,00	Test	8,00	0,00
495	o-TOLUALDEHYDE	C8H8O	529-20-4	Train	1,19	0,09	Test	7,04	0,34
496	BENZALDEHYDE	C7H6O	100-52-7	Train	1,30	0,10	Train	9,54	1,04
497	SALICYLALDEHYDE	C7H6O2	90-02-8	Train	1,41	0,01	Train	8,39	0,01
498	p-HYDROXYBENZALDEHYDE	C7H6O2	123-08-0	Train	1,39	0,01	Train	8,84	0,44
499	TEREPHTHALDEHYDE	C8H6O2	623-27-8	Train	1,23	0,03	Test	8,15	0,85
500	m-TOLUALDEHYDE	C8H8O	620-23-5	Train	1,14	0,04	Train	7,33	2,77
501	2-METHYL OCTANAL	C9H18O	7786-29-0	Train	0,82	0,03	Test	6,88	1,43
502	2-METHYLHEPTANAL	C8H16O	16630-91-4	Train	0,93	0,00	Train	7,59	1,51
503	PARALDEHYDE	C6H12O3	123-63-7	Train	1,41	0,11	-	0,00	0,00
504	3-PENTANONE	C5H10O	96-22-0	Test	1,56	0,04	Train	9,99	1,99
505	3-METHYL-2-PENTANONE	C6H12O	565-61-7	Train	1,20	0,10	Train	8,24	0,44
506	5-HEXEN-2-ONE	C6H10O	109-49-9	Train	1,36	0,00	-	0,00	0,00
507	3-HEPTANONE	C7H14O	106-35-4	Train	1,10	0,00	Train	7,73	0,43
508	4-HEPTANONE	C7H14O	123-19-3	Train	1,10	0,00	Train	7,73	0,93
509	3-HEXANONE	C6H12O	589-38-8	Train	1,29	0,01	Train	8,70	0,70
510	2-PENTANONE	C5H10O	107-87-9	Test	1,67	0,12	Train	9,41	1,21
511	METHYL ISOPROPYL KETONE	C5H10O	563-80-4	Train	1,49	0,09	Train	8,58	0,44
512	2-HEXANONE	C6H12O	591-78-6	Train	1,36	0,14	Train	8,28	0,28
513	2-HEPTANONE	C7H14O	110-43-0	Test	1,15	0,05	Train	7,41	0,49
514	5-METHYL-2-HEXANONE	C7H14O	110-12-3	Train	1,10	0,05	Train	7,03	1,18
515	MESITYL OXIDE	C6H10O	141-79-7	Test	1,52	0,22	Train	8,60	0,20
516	3,3-DIMETHYL-2-BUTANONE	C6H12O	75-97-8	Train	1,26	0,04	Train	7,36	0,06
517	DIISOBUTYL KETONE	C9H18O	108-83-8	Train	0,79	0,01	Train	5,87	0,33
518	DIISOPROPYL KETONE	C7H14O	565-80-0	Train	1,10	0,00	-	0,00	0,00
519	2-PYRROLIDONE	C4H7NO	616-45-5	Train	2,20	0,30	Train	16,07	1,67
520	N-METHYL-2-PYRROLIDONE	C5H9NO	872-50-4	Train	1,54	0,24	Train	10,44	0,94
521	ETHYL ISOAMYL KETONE	C8H16O	624-42-0	Train	0,92	0,03	Train	6,65	1,08
522	5-NONANONE	C9H18O	502-56-7	Train	0,85	0,05	Train	6,39	0,79
523	2-NONANONE	C9H18O	821-55-6	Test	0,88	0,06	Test	6,18	0,28
524	ANTHRAQUINONE	C14H8O2	84-65-1	Train	0,80	0,10	-	0,00	0,00
525	ACETYLACETONE	C5H8O2	123-54-6	Test	1,92	0,22	Train	9,47	1,93
526	ISOPHORONE	C9H14O	78-59-1	Train	0,83	0,01	Test	4,99	1,19
527	CYCLOPENTANONE	C5H8O	120-92-3	Test	1,50	0,00	Train	13,50	2,70
528	CYCLOHEXANONE	C6H10O	108-94-1	Test	1,27	0,03	Test	11,66	2,26
529	2-OCTANONE	C8H16O	111-13-7	Train	1,00	0,00	Train	6,73	0,63
530	BENZOPHENONE	C13H10O	119-61-9	Train	0,70	0,00	Test	5,40	0,00
531	ACETOPHENONE	C8H8O	98-86-2	Train	1,12	0,02	Train	8,33	1,63
532	beta-PROPIOLACTONE	C3H4O2	57-57-8	Test	2,74	0,16	Train	22,79	2,31
533	epsilon-CAPROLACTONE	C6H10O2	502-44-3	Train	1,38	0,02	Train	12,45	2,85
534	gamma-VALEROLACTONE	C5H8O2	108-29-2	Train	1,59	0,11	Train	11,35	0,75
535	ETHYL ISOPROPYL KETONE	C6H12O	565-69-5	Train	1,22	0,08	Train	8,15	0,35

536	METHYL ISOPROPENYL KETONE	C5H8O	814-78-8	Test	1,76	0,04	Train	8,87	0,13
537	2-CYCLOHEXYL CYCLOHEXANONE	C12H20O	90-42-6	Train	0,66	0,04	Train	6,21	0,51
538	QUINONE	C6H4O2	106-51-4	Test	1,44	0,26	Train	10,23	3,27
539	DIKETENE	C4H4O2	674-82-8	Train	2,02	0,02	Test	17,21	0,41
540	2-METHYL-2-PROPANOL	C4H10O	75-65-0	Train	1,86	0,02	Train	10,21	1,21
541	2-METHYL-1-BUTANOL	C5H12O	137-32-6	Train	1,36	0,04	Train	9,35	0,35
542	2,2-DIMETHYL-1-PROPANOL	C5H12O	75-84-3	Test	1,44	0,06	Train	8,21	0,89
543	3-HEXANOL	C6H14O	623-37-0	Train	1,16	0,13	Train	8,02	0,01
544	3-METHYL-1-PENTANOL	C6H14O	589-35-5	Test	1,15	0,05	Train	8,23	1,57
545	3-METHYL-3-PENTANOL	C6H14O	77-74-7	Train	1,22	0,02	Train	8,47	0,27
546	3-PENTANOL	C5H12O	584-02-1	Train	1,38	0,18	Train	9,08	0,08
547	2-ETHYL-1-HEXANOL	C8H18O	104-76-7	Train	0,88	0,00	Train	6,70	3,00
548	2-METHYL-1-HEXANOL	C7H16O	624-22-6	Train	0,99	0,01	Train	7,38	1,63
549	3-METHYL-1-BUTANOL	C5H12O	123-51-3	Test	1,41	0,21	Train	8,57	0,43
550	3-HEPTANOL	C7H16O	589-82-2	Train	1,00	0,17	Train	7,22	0,28
551	5-METHYL-1-HEXANOL	C7H16O	627-98-5	Test	1,02	0,02	Train	6,91	0,39
552	4-METHYL-2-PENTANOL	C6H14O	108-11-2	Train	1,11	0,09	-	0,00	0,00
553	o,p-BISPHENOL A	C15H16O2	837-08-1	Train	0,59	0,01	Train	4,89	0,31
554	8-METHYL-1-NONANOL	C10H22O	55505-26-5	Train	0,72	0,05	-	0,00	0,00
555	2-ETHYL-1-BUTANOL	C6H14O	97-95-0	Train	1,15	0,05	Train	8,23	0,57
556	CYCLOHEXANOL	C6H12O	108-93-0	Train	1,24	0,04	Train	13,27	2,17
557	1-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	590-67-0	Train	1,07	0,07	Train	7,91	0,71
558	cis-2-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7443-70-1	Train	1,06	0,06	Test	9,46	2,26
559	trans-2-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7443-52-9	Train	1,06	0,06	Train	9,46	2,26
560	cis-3-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	5454-79-5	Train	1,06	0,06	Train	9,46	2,26
561	trans-3-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7443-55-2	Train	1,06	0,06	Test	9,46	2,26
562	cis-4-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7731-28-4	Train	1,06	0,06	Train	9,46	2,26
563	trans-4-METHYLCYCLOHEXANOL	C7H14O	7731-29-5	Train	1,06	0,06	Train	9,46	2,26
564	L-MENTHOL	C10H20O	2216-51-5	Train	0,81	0,01	Train	5,34	0,76
565	SITOSTEROL	C29H50O	83-46-5	Train	0,27	0,03	-	0,00	0,00
566	AGATHADIOL	C20H34O2	1857-24-5	Train	0,40	0,00	-	0,00	0,00
567	alpha-TERPINEOL	C10H18O	98-55-5	Train	0,70	0,20	Train	6,52	0,07
568	beta-TERPINEOL	C10H18O	138-87-4	Train	0,78	0,01	Test	5,78	0,77
569	2-BUTYL-NONAN-1-OL	C13H28O	51655-57-3	Train	0,55	0,06	Train	4,75	1,70
570	2-METHYL-1-UNDECANOL	C12H26O	10522-26-6	Train	0,59	0,06	Train	5,02	1,78
571	TETRAHYDROFURFURYL ALCOHOL	C5H10O2	97-99-4	Test	1,65	0,15	Train	10,46	0,76
572	ALLYL ALCOHOL	C3H6O	107-18-6	Train	2,52	0,02	Train	15,08	2,92
573	2-PHENYL-2-PROPANOL	C9H12O	617-94-7	Train	0,96	0,04	Test	7,10	1,00
574	2-BUTYL-OCTAN-1-OL	C12H26O	3913-02-8	Test	0,59	0,30	Train	5,02	1,78
575	2,3-XYLENOL	C8H10O	526-75-0	Train	1,16	0,06	Test	6,79	0,39
576	p-ISOPROPENYL PHENOL	C9H10O	4286-23-1	Train	1,00	0,01	Train	6,68	0,06
577	2,4-XYLENOL	C8H10O	105-67-9	Train	1,18	0,02	Train	7,27	0,87
578	4-METHYL-CYCLOHEXANE-METHANOL	C8H16O	34885-03-5	Train	0,95	0,25	Test	6,69	3,04
579	2,5-XYLENOL	C8H10O	95-87-4	Train	1,18	0,02	Train	7,27	0,87
580	2,6-XYLENOL	C8H10O	576-26-1	Train	1,16	0,24	Train	6,79	0,39
581	3,4-XYLENOL	C8H10O	95-65-8	Train	1,18	0,02	Train	7,27	0,87
582	3,5-XYLENOL	C8H10O	108-68-9	Train	1,14	0,04	Train	6,43	0,03
583	PROPARGYL ALCOHOL	C3H4O	107-19-7	Train	2,17	0,23	Train	52,95	4,95
584	PHENOL	C6H6O	108-95-2	Train	1,48	0,22	Test	10,56	1,96
585	o-CRESOL	C7H8O	95-48-7	Train	1,34	0,04	Train	7,53	0,07
586	m-CRESOL	C7H8O	108-39-4	Test	1,28	0,18	Train	7,87	0,27
587	p-CRESOL	C7H8O	106-44-5	Test	1,33	0,23	Train	7,88	0,28
588	o-ETHYLPHENOL	C8H10O	90-00-6	Train	1,10	0,00	Train	7,14	0,06
589	p-ETHYLPHENOL	C8H10O	123-07-9	Test	1,09	0,01	Train	7,45	0,25
590	p-tert-BUTYLPHENOL	C10H14O	98-54-4	Train	0,86	0,06	Test	5,54	0,04
591	BISPHENOL A	C15H16O2	80-05-7	Train	0,59	0,01	Train	5,01	0,01
592	NONYLPHENOL	C15H24O	25154-52-3	Test	0,54	0,04	Train	4,44	0,24
593	ETHYLENE GLYCOL	C2H6O2	107-21-1	Train	4,07	0,97	-	0,00	0,00
594	DIETHYLENE GLYCOL	C4H10O3	111-46-6	Test	1,80	0,10	-	0,00	0,00
595	TETRAETHYLENE GLYCOL	C8H18O5	112-60-7	Train	0,90	0,10	-	0,00	0,00

596	1,2-PROPYLENE GLYCOL	C3H8O2	57-55-6	Train	2,23	0,37	Train	15,21	2,71
597	1,3-PROPYLENE GLYCOL	C3H8O2	504-63-2	Train	2,55	0,05	Train	17,64	1,04
598	DIPROPYLENE GLYCOL	C6H14O3	25265-71-8	Train	1,31	0,89	Train	12,99	1,49
599	2-BUTYNE-1,4-DIOL	C4H6O2	110-65-6	Train	1,64	0,24	-	0,00	0,00
600	TRIPROPYLENE GLYCOL	C9H20O4	24800-44-0	Train	0,92	0,02	-	0,00	0,00
601	2-METHYL-1,3-PROPANEDIOL	C4H10O2	2163-42-0	Test	1,68	0,05	Test	10,66	2,84
602	1,2-BUTANEDIOL	C4H10O2	584-03-2	Train	1,71	0,19	Train	12,22	0,79
603	1,3-BUTANEDIOL	C4H10O2	107-88-0	Test	1,71	0,09	Train	10,30	2,30
604	HEXYLENE GLYCOL	C6H14O2	107-41-5	Train	1,15	0,15	Train	8,25	1,65
605	GLYCEROL	C3H8O3	56-81-5	Train	2,31	0,29	-	0,00	0,00
606	1,2,3-BUTANETRIOL	C4H10O3	4435-50-1	Train	1,58	0,03	Train	14,36	3,26
607	1,2,4-BUTANETRIOL	C4H10O3	3068-00-6	Train	1,73	0,09	Train	11,92	1,29
608	p-tert-BUTYLCA TECHOL	C10H14O2	98-29-3	Train	0,88	0,02	Train	5,90	0,10
609	2,2,4-TRIMETHYL-1,3-PENTANEDIOL	C8H18O2	144-19-4	Train	0,83	0,17	Train	6,09	1,63
610	2-METHYL-1,3-PENTANEDIOL	C6H14O2	149-31-5	Train	1,09	0,05	Train	8,02	3,48
611	2,3-BUTANEDIOL	C4H10O2	513-85-9	Train	1,64	0,26	Test	13,45	0,25
612	cis-2-BUTENE-1,4-DIOL	C4H8O2	6117-80-2	Test	2,44	0,74	Train	10,05	3,25
613	trans-2-BUTENE-1,4-DIOL	C4H8O2	821-11-4	Train	2,44	0,74	Test	10,05	3,25
614	1,4-BUTANEDIOL	C4H10O2	110-63-4	Train	1,89	0,09	Train	13,67	1,93
615	1,5-PENTANEDIOL	C5H12O2	111-29-5	Train	1,51	0,01	Train	11,24	0,34
616	1,6-HEXANEDIOL	C6H14O2	629-11-8	Train	1,25	0,05	Train	9,59	0,39
617	1,2-BENZENEDIOL	C6H6O2	120-80-9	Test	1,63	0,03	Train	9,14	0,66
618	1,3-BENZENEDIOL	C6H6O2	108-46-3	Test	1,53	0,13	Test	9,68	3,12
619	PENTAERYTHRITOL	C5H12O4	115-77-5	Test	1,45	0,15	-	0,00	0,00
620	1,2,3-BENZENETRIOL	C6H6O3	87-66-1	Train	1,66	0,04	Train	9,92	0,89
621	INOSITOL	C6H12O6	87-89-8	Train	1,41	0,09	Train	14,92	0,52
622	SORBITOL	C6H14O6	50-70-4	Train	1,01	0,49	Train	14,90	2,50
623	FORMIC ACID	CH2O2	64-18-6	Train	11,82	0,18	Train	32,15	5,85
624	n-DECANOIC ACID	C10H20O2	334-48-5	Test	0,78	0,02	Train	6,04	0,54
625	n-BUTYRIC ACID	C4H8O2	107-92-6	Train	2,14	0,14	Test	12,48	2,48
626	2-METHYLBUTYRIC ACID	C5H10O2	116-53-0	Train	1,60	0,00	Train	12,62	2,82
627	n-PENTANOIC ACID	C5H10O2	109-52-4	Train	1,66	0,06	-	0,00	0,00
628	n-NONANOIC ACID	C9H18O2	112-05-0	Train	0,87	0,03	Train	6,55	0,65
629	ISOBUTYRIC ACID	C4H8O2	79-31-2	Train	2,15	0,15	-	0,00	0,00
630	ISOVALERIC ACID	C5H10O2	503-74-2	Test	1,55	0,15	Train	9,63	0,17
631	n-HEXANOIC ACID	C6H12O2	142-62-1	Train	1,36	0,06	Train	9,03	0,27
632	2-METHYLHEXANOIC ACID	C7H14O2	4536-23-6	Train	1,12	0,01	Train	9,10	1,10
633	1,4-CYCLOHEXANEDICARBOXYLIC ACID	C8H12O4	619-82-9	Train	1,18	0,98	Train	7,84	0,38
634	n-OCTANOIC ACID	C8H16O2	124-07-2	Train	0,99	0,01	Train	7,19	0,79
635	n-UNDECANOIC ACID	C11H22O2	112-37-8	Test	0,71	0,01	Train	5,61	0,41
636	CYCLOPENTYLACETIC ACID	C7H12O2	1123-00-8	Test	1,17	0,03	Test	8,80	1,20
637	DILACTIC ACID	C6H10O5	19201-34-4	Train	1,24	0,36	-	0,00	0,00
638	n-DODECANOIC ACID	C12H24O2	143-07-7	Train	0,65	0,04	Train	5,25	0,15
639	n-TRIDECANOIC ACID	C13H26O2	638-53-9	Test	0,59	0,01	Train	4,95	0,05
640	n-TETRADECANOIC ACID	C14H28O2	544-63-8	Test	0,55	0,05	Test	4,69	0,42
641	n-HEXADECANOIC ACID	C16H32O2	57-10-3	Train	0,48	0,02	-	0,00	0,00
642	cis-CROTONIC ACID	C4H6O2	503-64-0	Train	2,20	0,10	Train	12,87	1,73
643	trans-CROTONIC ACID	C4H6O2	107-93-7	Train	2,20	0,00	Train	12,87	2,23
644	2-METHYLOCTANOIC ACID	C9H18O2	3004-93-1	Train	0,86	0,01	Train	7,23	0,58
645	n-OCTADECANOIC ACID	C18H36O2	57-11-4	Train	0,42	0,05	-	0,00	0,00
646	ACRYLIC ACID	C3H4O2	79-10-7	Train	2,67	0,27	Train	20,85	3,85
647	METHACRYLIC ACID	C4H6O2	79-41-4	Train	2,02	0,42	-	0,00	0,00
648	OLEIC ACID	C18H34O2	112-80-1	Test	0,45	0,05	-	0,00	0,00
649	LINOLEIC ACID	C18H32O2	60-33-3	Train	0,47	0,07	-	0,00	0,00
650	BENZOIC ACID	C7H6O2	65-85-0	Train	1,27	0,13	Train	10,33	2,33
651	o-TOLUIC ACID	C8H8O2	118-90-1	Train	1,17	0,03	Train	7,42	0,62
652	SALICYLIC ACID	C7H6O3	69-72-7	Train	1,38	0,28	Train	8,97	0,37
653	PHTHALIC ACID	C8H6O4	88-99-3	Train	1,19	0,11	Train	8,81	1,11
654	ISOPHTHALIC ACID	C8H6O4	121-91-5	Test	1,14	0,16	Train	9,30	1,60
655	PERACETIC ACID	C2H4O3	79-21-0	Train	5,23	0,07	Train	22,89	2,39

656	PROPIONIC ANHYDRIDE	C6H10O3	123-62-6	Train	1,49	0,01	Train	9,36	2,55
657	BUTYRIC ANHYDRIDE	C8H14O3	106-31-0	Train	1,06	0,03	Train	7,38	0,22
658	PALUSTRIC ACID	C20H30O2	1945-53-5	Train	0,46	0,05	Train	7,99	2,41
659	SUCCINIC ANHYDRIDE	C4H4O3	108-30-5	Test	2,24	0,46	Train	15,26	5,04
660	GLUTARIC ANHYDRIDE	C5H6O3	108-55-4	Train	1,76	0,24	Test	12,91	0,19
661	PTHALIC ANHYDRIDE	C8H4O3	85-44-9	Train	1,44	0,24	Train	8,92	0,29
662	MALEIC ANHYDRIDE	C4H2O3	108-31-6	Train	2,38	0,28	-	0,00	0,00
663	TRIMELLITIC ANHYDRIDE	C9H4O5	552-30-7	Train	1,15	0,15	Test	9,27	0,23
664	METHYL FORMATE	C2H4O2	107-31-3	Train	5,15	0,05	Train	21,41	1,59
665	ETHYL FORMATE	C3H6O2	109-94-4	Train	3,03	0,27	Train	15,74	0,04
666	n-PROPYL FORMATE	C4H8O2	110-74-7	Train	2,15	0,15	Train	12,54	1,24
667	n-BUTYL FORMATE	C5H10O2	592-84-7	Train	1,66	0,04	Train	10,49	2,49
668	ISOBUTYL FORMATE	C5H10O2	542-55-2	Train	1,55	0,15	Train	9,66	1,66
669	n-PENTYL FORMATE	C6H12O2	638-49-3	Test	1,36	0,06	Train	9,06	0,96
670	n-OCTYL FORMATE	C9H18O2	112-32-3	Train	0,87	0,04	Train	6,57	0,77
671	n-NONYL FORMATE	C10H20O2	5451-92-3	Train	0,78	0,02	Train	6,05	0,65
672	n-DECYL FORMATE	C11H22O2	5451-52-5	Train	0,71	0,01	Test	5,62	0,42
673	VINYL FORMATE	C3H4O2	692-45-5	Test	3,08	0,22	Train	18,31	0,49
674	METHYL ACETATE	C3H6O2	79-20-9	Train	3,11	0,02	Train	16,13	2,13
675	ETHYL ACETATE	C4H8O2	141-78-6	Train	2,19	0,01	Train	12,78	1,28
676	n-PROPYL ACETATE	C5H10O2	109-60-4	Test	1,69	0,11	-	0,00	0,00
677	n-BUTYL ACETATE	C6H12O2	123-86-4	Train	1,37	0,03	Train	9,18	1,58
678	ISOBUTYL ACETATE	C6H12O2	110-19-0	Train	1,30	0,12	Train	8,56	0,56
679	ISOPENTYL ACETATE	C7H14O2	123-92-2	Train	1,10	0,00	Train	7,63	0,63
680	ALLYL ACETATE	C5H8O2	591-87-7	Train	1,69	0,01	Test	12,10	2,80
681	ISOPROPYL ACETATE	C5H10O2	108-21-4	Train	1,67	0,09	Test	8,95	1,75
682	sec-BUTYL ACETATE	C6H12O2	105-46-4	Train	1,32	0,08	Test	8,57	0,97
683	VINYL ACETATE	C4H6O2	108-05-4	Test	2,21	0,39	Test	14,36	0,96
684	METHYL PROPIONATE	C4H8O2	554-12-1	Train	2,29	0,11	Train	13,38	0,38
685	ETHYL PROPIONATE	C5H10O2	105-37-3	Train	1,75	0,05	Train	11,04	0,04
686	n-BUTYL PROPIONATE	C7H14O2	590-01-2	Train	1,19	0,09	Train	8,31	1,51
687	n-PROPYL n-BUTYRATE	C7H14O2	105-66-8	Train	1,19	0,09	Train	8,31	0,81
688	VINYL PROPIONATE	C5H8O2	105-38-4	Train	1,77	0,07	Train	12,17	0,37
689	METHYL n-BUTYRATE	C5H10O2	623-42-7	Test	1,75	0,15	Train	11,04	2,24
690	ETHYL n-BUTYRATE	C6H12O2	105-54-4	Train	1,41	0,11	Train	9,46	1,76
691	n-PROPYL ISOBUTYRATE	C7H14O2	644-49-5	Train	1,18	0,08	Train	6,98	0,08
692	TRIOCTYL TRIMELLITATE	C33H54O6	3319-31-1	Train	0,23	0,03	Train	2,82	0,32
693	METHYL ACRYLATE	C4H6O2	96-33-3	Train	2,16	0,02	Test	14,60	0,20
694	ETHYL ACRYLATE	C5H8O2	140-88-5	Train	1,67	0,07	Train	11,83	0,83
695	n-PROPYL ACRYLATE	C6H10O2	925-60-0	Train	1,36	0,04	Train	10,01	1,01
696	n-BUTYL ACRYLATE	C7H12O2	141-32-2	Train	1,15	0,05	Test	8,71	0,71
697	n-BUTYL NONANOATE	C13H26O2	50623-57-9	Test	0,60	0,00	Train	5,05	0,75
698	n-BUTYL VALERATE	C9H18O2	591-68-4	Test	0,90	0,00	Train	6,75	0,75
699	ETHYL ISOVALERATE	C7H14O2	108-64-5	Train	1,13	0,03	Train	7,81	0,49
700	METHYL METHACRYLATE	C5H8O2	80-62-6	Test	1,72	0,02	Test	10,45	2,06
701	ETHYL METHACRYLATE	C6H10O2	97-63-2	Test	1,39	0,41	Train	9,03	0,57
702	n-PROPYL METHACRYLATE	C7H12O2	2210-28-8	Train	1,17	0,03	Train	7,99	0,31
703	DIOCTYL PHTHALATE	C24H38O4	117-81-7	Train	0,32	0,02	-	0,00	0,00
704	DIISOCTYL PHTHALATE	C24H38O4	27554-26-3	Train	0,32	0,06	Train	3,23	0,53
705	1,2-BENZENEDICARBOXYLIC ACID, HEPTYL, NONYL ESTER	C24H38O4	19295-81-9	Test	0,33	0,01	Train	3,32	0,52
706	n-PENTYL ACETATE	C7H14O2	628-63-7	Train	1,16	0,06	Train	8,10	1,00
707	2-ETHYLHEXYL ACETATE	C10H20O2	103-09-3	Train	0,75	0,01	Test	6,16	1,98
708	BENZYL ACETATE	C9H10O2	140-11-4	Train	1,02	0,02	Train	6,22	0,12
709	ISOPENTYL ISOVALERATE	C10H20O2	659-70-1	Test	0,75	0,05	Train	5,72	1,18
710	METHYL OLEATE	C19H36O2	112-62-9	Test	0,43	0,03	-	0,00	0,00
711	n-HEXYL ACETATE	C8H16O2	142-92-7	Train	1,00	0,10	Train	7,27	0,87
712	BENZYL BENZOATE	C14H12O2	120-51-4	Train	0,63	0,06	Train	4,89	0,21
713	n-BUTYL BENZOATE	C11H14O2	136-60-7	Train	0,75	0,05	Test	6,31	0,91
714	ETHYLENE CARBONATE	C3H4O3	96-49-1	Train	3,27	0,33	-	0,00	0,00

715	n-HEPTYL ACETATE	C9H18O2	112-06-1	Train	0,88	0,02	Train	6,62	0,82
716	n-OCTYL ACETATE	C10H20O2	112-14-1	Train	0,79	0,01	Train	6,09	0,69
717	n-NONYL ACETATE	C11H22O2	143-13-5	Train	0,71	0,01	Train	5,66	0,66
718	n-DECYL ACETATE	C12H24O2	112-17-4	Train	0,65	0,01	Train	5,29	0,59
719	DIISODECYL PHTHALATE	C28H46O4	26761-40-0	Train	0,28	0,01	Test	2,93	0,53
720	DI-n-HEPTYL PHTHALATE	C22H34O4	3648-21-3	Train	0,37	0,03	Train	3,53	0,33
721	METHYL SALICYLATE	C8H8O3	119-36-8	Train	1,16	0,04	Train	7,62	0,42
722	DI-n-NONYL PHTHALATE	C26H42O4	84-76-4	Test	0,31	0,01	Train	3,15	0,55
723	DI-n-PROPYL PHTHALATE	C14H18O4	131-16-8	Train	0,60	0,00	Train	4,97	0,34
724	DIISOBUTYL PHTHALATE	C16H22O4	84-69-5	Test	0,50	0,03	Train	4,25	0,15
725	DIMETHYL ISOPHTHALATE	C10H10O4	1459-93-4	Train	0,87	0,13	Train	6,83	1,03
726	DI-n-DECYL PHTHALATE	C28H46O4	84-77-5	Train	0,28	0,02	Test	3,00	0,50
727	DI-n-UNDECYL PHTHALATE	C30H50O4	3648-20-2	Train	0,26	0,04	Train	2,87	0,57
728	DI-n-HEXYL PHTHALATE	C20H30O4	84-75-3	Train	0,41	0,01	Test	3,78	0,28
729	DI-n-OCTYL TEREPHTHALATE	C24H38O4	4654-26-6	Train	0,33	0,03	Train	3,32	0,32
730	n-BUTYL STEARATE	C22H44O2	123-95-5	Test	0,35	0,05	Test	3,45	0,75
731	DIBUTYL SEBACATE	C18H34O4	109-43-3	Test	0,45	0,01	Test	4,15	1,46
732	n-BUTYL n-BUTYRATE	C8H16O2	109-21-7	Test	1,02	0,02	Train	7,44	1,34
733	2-ETHYLHEXYL ACRYLATE	C11H20O2	103-11-7	Train	0,68	0,02	Train	5,97	2,23
734	ETHYLENE GLYCOL DIACETATE	C6H10O4	111-55-7	Train	1,62	0,02	Test	9,56	1,16
735	ISOBUTYL METHACRYLATE	C8H14O2	97-86-9	Train	0,97	0,03	Train	6,83	0,57
736	n-BUTYL METHACRYLATE	C8H14O2	97-88-1	Train	1,01	0,01	Test	7,19	0,81
737	METHYL BENZOATE	C8H8O2	93-58-3	Train	1,08	0,01	Train	8,53	1,83
738	ETHYL BENZOATE	C9H10O2	93-89-0	Test	0,94	0,06	Train	7,61	1,51
739	DIETHYL OXALATE	C6H10O4	95-92-1	Train	1,50	0,00	Train	13,91	1,91
740	DIETHYL MALONATE	C7H12O4	105-53-3	Train	1,30	0,00	Train	10,39	0,92
741	METHYL DECANOATE	C11H22O2	110-42-9	Train	0,72	0,02	-	0,00	0,00
742	ISOPROPYL MYRISTATE	C17H34O2	110-27-0	Train	0,45	0,22	Train	4,04	0,86
743	DIMETHYL-1,4-CYCLOHEXANEDICARBOXYLATE	C10H16O4	94-60-0	Train	0,77	0,00	Train	5,61	0,01
744	TRI-n-HEPTYL TRIMELLITATE	C30H48O6	1528-48-9	Train	0,27	0,03	Train	2,98	0,48
745	1,2-BENZENE DICARBOXYLIC ACID, HEPTYL, UNDECYL ESTER	C26H42O4	65185-88-8	Test	0,31	0,01	Train	3,15	0,55
746	DIMETHYL ETHER	C2H6O	115-10-6	Train	3,99	0,69	Train	22,14	4,06
747	DIETHYL ETHER	C4H10O	60-29-7	Train	1,93	0,23	-	0,00	0,00
748	DI-sec-BUTYL ETHER	C8H18O	6863-58-7	Train	0,77	0,13	Train	7,24	0,16
749	METHYL ETHYL ETHER	C3H8O	540-67-0	Test	2,59	0,59	-	0,00	0,00
750	METHYL n-PROPYL ETHER	C4H10O	557-17-5	Train	1,92	0,22	Train	12,77	2,03
751	ISOPROPYL BUTYL ETHER	C7H16O	1860-27-1	Test	1,03	0,17	Train	8,19	0,11
752	METHYL ISOBUTYL ETHER	C5H12O	625-44-5	Train	1,43	0,20	Train	9,79	1,49
753	METHYL ISOPROPYL ETHER	C4H10O	598-53-8	Train	1,77	0,03	Test	11,52	2,78
754	DI-n-HEXYL ETHER	C12H26O	112-58-3	Train	0,62	0,02	Train	5,52	0,02
755	METHYL n-BUTYL ETHER	C5H12O	628-28-4	Test	1,52	0,29	-	0,00	0,00
756	DIVINYL ETHER	C4H6O	109-93-3	Train	1,72	0,02	Train	27,15	0,15
757	ETHYL PROPYL ETHER	C5H12O	628-32-0	Test	1,53	0,17	-	0,00	0,00
758	DINONYL ETHER	C18H38O	2456-27-1	Train	0,42	0,02	Test	4,03	1,47
759	PHTHALAN	C8H8O	496-14-0	Train	1,18	0,18	Train	7,39	2,81
760	ANETHOLE	C10H12O	104-46-1	Train	0,92	0,02	Train	6,23	0,97
761	1,4-DIOXANE	C4H8O2	123-91-1	Train	2,15	0,15	Train	24,32	2,32
762	TRIOXANE	C3H6O3	110-88-3	Test	3,50	0,10	-	0,00	0,00
763	DI-tert-BUTYL ETHER	C8H18O	6163-66-2	Train	0,91	0,01	Train	6,21	0,59
764	DI-n-OCTYL ETHER	C16H34O	629-82-3	Train	0,47	0,03	Test	4,40	1,10
765	DI-n-PENTYL ETHER	C10H22O	693-65-2	Train	0,75	0,05	Train	6,42	0,42
766	METHYL sec-BUTYL ETHER	C5H12O	6795-87-5	Test	1,38	0,12	-	0,00	0,00
767	METHYL tert-PENTYL ETHER	C6H14O	994-05-8	Train	1,21	0,01	Train	8,87	1,77
768	METHYL n-PENTYL ETHER	C6H14O	628-80-8	Test	1,26	0,06	Train	9,17	0,33
769	ETHYL tert-PENTYL ETHER	C7H16O	919-94-8	Train	1,04	0,04	Train	8,48	0,58
770	METHYLAL	C3H8O2	109-87-5	Test	2,69	0,15	Train	20,98	2,48
771	ACETAL	C6H14O2	105-57-7	Train	1,19	0,41	Train	13,50	3,10
772	ISOPROPYL ISOBUTYL ETHER	C7H16O	78448-33-6	Train	0,99	0,11	Train	7,71	0,29
773	ETHYL ISOBUTYL ETHER	C6H14O	627-02-1	Train	1,20	0,17	-	0,00	0,00

774	1,2-EPOXY-3-PHENOXYPROPANE	C9H10O2	122-60-1	Train	0,95	0,07	Train	9,56	0,60
775	METHYL HYDROPEROXIDE	CH4O2	3031-73-0	Train	7,20	0,04	Train	44,80	1,00
776	ETHYL HYDROPEROXIDE	C2H6O2	3031-74-1	Train	3,64	0,03	Train	24,93	2,27
777	3,5-DIMETHYLBENZOFURAN	C10H10O	10410-35-2	Train	0,79	0,12	-	0,00	0,00
778	1,2-EPOXY-2-METHYLPROPANE	C4H8O	558-30-5	Train	1,50	0,00	Train	13,49	0,01
779	ETHYLENE OXIDE	C2H4O	75-21-8	Train	3,53	0,53	-	0,00	0,00
780	1,2-PROPYLENE OXIDE	C3H6O	75-56-9	Train	2,19	0,01	Test	34,93	0,57
781	1,3-PROPYLENE OXIDE	C3H6O	503-30-0	Train	2,47	0,33	Train	29,20	7,80
782	ETHYL VINYL ETHER	C4H8O	109-92-2	Train	1,90	0,23	-	0,00	0,00
783	DI-n-PROPYL ETHER	C6H14O	111-43-3	Test	1,27	0,27	Test	10,06	0,56
784	BUTYL VINYL ETHER	C6H12O	111-34-2	Train	1,25	0,05	Train	14,13	2,83
785	n-BUTYL ETHYL ETHER	C6H14O	628-81-9	Train	1,27	0,24	-	0,00	0,00
786	BIS(alpha-METHYLBENZYL) ETHER	C16H18O	93-96-9	Train	0,55	0,27	-	0,00	0,00
787	n-PROPYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C9H12O2	60956-33-4	Train	0,90	0,08	Test	8,04	1,54
788	n-BUTYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C10H14O2	99172-63-1	Train	0,80	0,06	Test	7,23	1,09
789	TRIETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	C8H18O4	112-49-2	Train	0,99	0,01	Train	12,38	0,98
790	1,2-DIMETHOXYETHANE	C4H10O2	110-71-4	Train	1,97	0,37	-	0,00	0,00
791	DIETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	C6H14O3	111-96-6	Test	1,32	0,02	Train	13,76	0,45
792	TETRAETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	C10H22O5	143-24-8	Train	0,79	0,01	Test	11,28	1,38
793	DIETHYLENE GLYCOL DIETHYL ETHER	C8H18O3	112-36-7	Train	0,98	0,08	Train	11,89	1,79
794	DIETHYLENE GLYCOL DI-n-BUTYL ETHER	C12H26O3	112-73-2	Train	0,64	0,04	Train	7,02	0,02
795	BENZYL ETHYL ETHER	C9H12O	539-30-0	Train	0,96	0,06	Train	7,43	0,73
796	ANISOLE	C7H8O	100-66-3	Train	1,28	0,08	Train	9,71	0,71
797	PHENETOLE	C8H10O	103-73-1	Train	1,09	0,09	Train	8,50	0,70
798	DIBENZYL ETHER	C14H14O	103-50-4	Train	0,60	0,00	Train	6,00	0,00
799	ALLYL GLYCIDYL ETHER	C6H10O2	106-92-3	Train	1,27	0,14	Train	17,32	1,98
800	DIPHENYL ETHER	C12H10O	101-84-8	Train	0,80	0,00	Train	6,00	0,00
801	1-METHYL-3-(METHYLETHOXY)BENZENE	C10H14O	19177-04-9	Train	0,83	1,43	Train	5,94	1,58
802	2,3,4,5,2',3',4',5'-OCTAHYDRO-BIFURYL-(3,3')	C8H14O2	106538-38-9	Train	1,04	0,02	Test	9,72	0,73
803	1,1-DIMETHOXYETHANE	C4H10O2	534-15-6	Train	1,74	0,73	Train	16,03	3,07
804	PENTAETHYLENE GLYCOL DIMETHYL ETHER	C12H26O6	1191-87-3	Test	0,66	0,01	-	0,00	0,00
805	METHYL VINYL ETHER	C3H6O	107-25-5	Train	2,53	0,07	Train	32,61	6,40
806	1,2-EPOXYBUTANE	C4H8O	106-88-7	Train	1,86	0,16	Train	16,27	2,03
807	CUMENE HYDROPEROXIDE	C9H12O2	80-15-9	Train	0,96	0,06	Train	6,72	0,22
808	CYCLOHEXYL HYDROPEROXIDE	C6H12O2	766-07-4	Train	1,25	0,05	-	0,00	0,00
809	DICUMYL PEROXIDE	C18H22O2	80-43-3	Train	0,46	0,04	-	0,00	0,00
810	p-MENTHANE HYDROPEROXIDE	C10H20O2	80-47-7	Train	0,67	0,13	Test	6,66	0,24
811	2,5-DIHYDROFURAN	C4H6O	1708-29-8	Test	2,00	0,10	Train	20,42	0,42
812	FURAN	C4H4O	110-00-9	Train	2,12	0,12	Train	19,65	3,35
813	TETRAHYDROFURAN	C4H8O	109-99-9	Train	1,90	0,10	-	0,00	0,00
814	DIBENZOFURAN	C12H8O	132-64-9	Train	0,62	0,18	Train	6,88	0,48
815	BENZOYL PEROXIDE	C14H10O4	94-36-0	Test	0,63	0,07	Test	5,97	0,27
816	DI-t-BUTYL PEROXIDE	C8H18O2	110-05-4	Train	0,93	0,19	Train	6,69	1,51
817	n-BUTYLHYDROPEROXIDE	C4H10O2	4813-50-7	Train	1,83	0,07	-	0,00	0,00
818	m-DIISOPROPYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C12H18O2	26762-93-6	Train	0,66	0,04	Test	5,04	0,96
819	2-METHYLBENZOFURAN	C9H8O	4265-25-2	Train	1,16	0,16	Test	7,90	0,70
820	p-DIISOPROPYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C12H18O2	98-49-7	Train	0,67	0,03	Train	5,04	0,96
821	ALLYL-TERT-BUTYLPEROXIDE	C7H14O2	39972-78-6	Train	1,08	0,05	-	0,00	0,00
822	1-tert-BUTOXY-2-[2-(tert-BUTOXY)PROPOXY]PROPANE	C14H30O3	00-00-00	Train	0,47	0,07	Train	5,03	1,63
823	1,2-DIMETHOXYPROPANE	C5H12O2	7778-85-0	Train	1,41	0,26	Train	12,72	0,68
824	sec-BUTYL-tert-BUTYL ETHER	C8H18O	32970-45-9	Train	0,79	0,13	Train	6,58	0,48
825	ISOBUTYL-tert-BUTYL ETHER	C8H18O	33021-02-2	Train	0,89	0,03	Test	6,74	0,32
826	2-METHYL-1,3-DIOXOLANE	C4H8O2	497-26-7	Train	2,05	0,02	Train	16,13	0,43
827	VINYL CHLORIDE	C2H3Cl	75-01-4	Train	3,78	0,18	Train	23,98	9,02
828	1,4-DICHLORO-trans-2-BUTENE	C4H6Cl2	110-57-6	Train	2,87	1,37	-	0,00	0,00
829	cis-1,3-DICHLOROPROPENE	C3H4Cl2	10061-01-5	Train	4,06	1,24	Test	14,42	0,08
830	trans-1,3-DICHLOROPROPENE	C3H4Cl2	10061-02-6	Train	4,06	1,36	Train	14,42	1,92
831	1,4-DICHLOROBUTANE	C4H8Cl2	110-56-5	Test	2,14	0,64	-	0,00	0,00
832	1,5-DICHLOROPENTANE	C5H10Cl2	628-76-2	Test	1,66	0,04	Train	10,32	1,72

833	DICHLOROMETHANE	CH2Cl2	75-09-2	Test	13,27	0,73	Train	19,05	2,95
834	1,1-DICHLOROETHANE	C2H4Cl2	75-34-3	Train	5,46	0,06	-	0,00	0,00
835	1,2-DICHLOROPROPANE	C3H6Cl2	78-87-5	Train	3,04	0,26	Train	13,22	1,28
836	1,1,1-TRICHLOROETHANE	C2H3Cl3	71-55-6	Train	5,24	2,26	Train	11,09	1,41
837	1,1,1,2-TETRACHLOROETHANE	C2H2Cl4	630-20-6	Train	6,42	1,52	Train	11,76	0,34
838	ISOPROPYL CHLORIDE	C3H7Cl	75-29-6	Train	2,94	0,14	Train	10,95	0,25
839	PROPARGYL CHLORIDE	C3H3Cl	624-65-7	Train	2,33	0,03	Train	96,58	3,42
840	1,2,3-TRICHLOROPROPANE	C3H5Cl3	96-18-4	Train	3,41	0,21	Train	14,23	1,63
841	ISOBUTYL CHLORIDE	C4H9Cl	513-36-0	Test	1,84	0,16	Train	10,54	1,74
842	tert-BUTYL CHLORIDE	C4H9Cl	507-20-0	Train	1,90	0,00	Train	9,10	0,00
843	1,2-DICHLOROBUTANE	C4H8Cl2	616-21-7	Train	2,15	0,05	Train	10,94	0,64
844	2,3-DICHLOROBUTANE	C4H8Cl2	7581-97-7	Train	2,38	0,18	Train	10,42	0,08
845	TRICHLOROETHYLENE	C2HCl3	79-01-6	Train	11,96	0,04	Train	27,84	1,16
846	3-CHLOROPROPENE	C3H5Cl	107-05-1	Train	2,73	0,02	-	0,00	0,00
847	HEXACHLORO-1,3-BUTADIENE	C4Cl6	87-68-3	Train	3,56	0,66	Train	15,81	0,11
848	BENZYL CHLORIDE	C7H7Cl	100-44-7	Train	1,29	0,19	Train	8,52	1,42
849	3-CHLORO-o-XYLENE	C8H9Cl	608-23-1	Train	1,27	0,58	Train	6,41	0,94
850	4-CHLORO-o-XYLENE	C8H9Cl	615-60-1	Train	1,29	0,15	Train	6,83	1,36
851	o-DICHLOROBENZENE	C6H4Cl2	95-50-1	Train	2,14	0,06	Train	7,80	1,40
852	m-DICHLOROBENZENE	C6H4Cl2	541-73-1	Test	1,98	0,18	Train	8,17	0,37
853	p-DICHLOROBENZENE	C6H4Cl2	106-46-7	Train	2,10	0,30	Train	8,18	0,38
854	HEXACHLOROBENZENE	C6Cl6	118-74-1	Train	3,45	0,05	Train	7,11	0,41
855	BENZOTRICHLORIDE	C7H5Cl3	98-07-7	Train	1,57	0,03	Train	7,26	0,76
856	o-CHLOROTOLUENE	C7H7Cl	95-49-8	Test	1,49	0,19	Train	7,05	1,25
857	p-CHLOROTOLUENE	C7H7Cl	106-43-4	Test	1,47	0,17	Train	7,35	0,95
858	2,4-DICHLOROTOLUENE	C7H6Cl2	95-73-8	Train	1,75	0,25	Train	7,52	1,02
859	cis-1,2-DICHLOROETHYLENE	C2H2Cl2	156-59-2	Train	6,95	0,15	Test	18,94	3,44
860	trans-1,2-DICHLOROETHYLENE	C2H2Cl2	156-60-5	Train	6,95	0,15	Train	18,94	3,64
861	CHLOROPRENE	C4H5Cl	126-99-8	Train	2,16	0,34	-	0,00	0,00
862	sec-BUTYL CHLORIDE	C4H9Cl	78-86-4	Train	2,00	0,10	Train	10,37	0,47
863	1-CHLORONAPHTHALENE	C10H7Cl	90-13-1	Test	0,89	0,11	Test	6,35	0,65
864	1,1-DICHLOROETHYLENE	C2H2Cl2	75-35-4	Train	5,43	1,07	Train	19,40	3,90
865	1,2,4-TRICHLOROBENZENE	C6H3Cl3	120-82-1	Test	2,71	0,21	Train	8,40	1,80
866	1,4-DICHLORO-cis-2-BUTENE	C4H6Cl2	1476-11-5	Train	2,87	0,37	Test	11,73	0,97
867	2-CHLOROPROPENE	C3H5Cl	557-98-2	Train	2,60	1,90	Train	14,15	1,85
868	3,4-DICHLORO-1-BUTENE	C4H6Cl2	760-23-6	Train	2,57	0,07	Train	13,02	0,82
869	(Z)-1,3-DICHLORO-2-BUTENE	C4H6Cl2	10075-38-4	Train	2,65	0,25	Train	13,85	1,65
870	BENZYL DICHLORIDE	C7H6Cl2	98-87-3	Train	1,48	0,02	Train	8,32	1,58
871	CHLOROFLUOROMETHANE	CH2ClF	593-70-4	Train	14,51	0,11	Train	29,35	2,85
872	1,4-DIBROMOBENZENE	C6H4Br2	106-37-6	Train	2,19	0,23	Train	11,09	2,48
873	PENTAFLUOROETHYL METHYL ETHER	C3H3F5O	22410-44-2	Train	10,28	0,22	Train	16,00	2,50
874	DIFLUOROMETHANE	CH2F2	75-10-5	Train	13,20	0,10	Train	27,80	1,50
875	1,1,1-TRIFLUOROETHANE	C2H3F3	420-46-2	Train	6,30	1,10	Train	15,17	1,83
876	1,1,1,3,3,3-HEXAFLUOROPROPANE	C3H2F6	690-39-1	Train	5,33	0,79	-	0,00	0,00
877	HEXAFLUORO-1,3-BUTADIENE	C4F6	685-63-2	Train	4,20	0,54	Train	29,27	2,07
878	1,1-DIFLUOROETHYLENE	C2H2F2	75-38-7	Train	5,89	1,19	Train	23,93	2,43
879	TETRAFLUOROETHYLENE	C2F4	116-14-3	Train	9,56	0,44	Test	48,29	1,71
880	1,1-DIFLUOROETHANE	C2H4F2	75-37-6	Train	5,90	1,55	Train	19,52	2,02
881	2-BROMOPROPANE	C3H7Br	75-26-3	Train	2,66	0,54	Train	12,15	1,65
882	1,1-DIBROMOETHANE	C2H4Br2	557-91-5	Train	5,13	1,23	Train	18,95	1,55
883	m-DIBROMOBENZENE	C6H4Br2	108-36-1	Train	2,06	0,16	Test	11,07	1,27
884	DIMETHYLAMINE	C2H7N	124-40-3	Train	2,85	0,05	Test	16,15	1,75
885	TRIMETHYLAMINE	C3H9N	75-50-3	Train	2,08	0,08	Train	14,12	2,52
886	ETHYLAMINE	C2H7N	75-04-7	Train	2,91	0,21	Train	16,86	2,86
887	2-METHYL-2-AMINOBUTANE	C5H13N	594-39-8	Train	1,35	0,02	Test	8,76	0,32
888	TRIETHYLAMINE	C6H15N	121-44-8	Train	1,19	0,01	Test	9,07	1,07
889	N,N-DIMETHYL-n-BUTYLAMINE	C6H15N	927-62-8	Train	1,13	0,03	Test	8,56	1,26
890	N,N-DIETHYLMETHYLAMINE	C5H13N	616-39-7	Train	1,33	0,00	Train	9,80	1,48
891	n-PROPYLAMINE	C3H9N	107-10-8	Train	2,08	0,08	Train	13,22	2,82
892	n-BUTYLAMINE	C4H11N	109-73-9	Train	1,62	0,08	Train	10,94	1,14

893	n-PENTYLAMINE	C5H13N	110-58-7	Train	1,33	0,01	Test	9,38	1,68
894	ISOBUTYLAMINE	C4H11N	78-81-9	Test	1,52	0,08	Train	10,04	0,76
895	CYCLOPROPYLAMINE	C3H7N	765-30-0	Train	2,11	0,17	Train	15,01	1,59
896	DIISOBUTYLAMINE	C8H19N	110-96-3	Train	0,76	0,14	Train	6,78	2,32
897	ISOPROPYLAMINE	C3H9N	75-31-0	Train	2,14	0,14	Train	11,36	0,96
898	n-TETRADECYLAMINE	C14H31N	2016-42-4	Train	0,51	0,00	Train	4,52	0,42
899	PYRROLE	C4H5N	109-97-7	Train	2,27	0,27	-	0,00	0,00
900	MONOETHANOLAMINE	C2H7NO	141-43-5	Train	3,02	0,02	Train	14,19	1,09
901	DIETHANOLAMINE	C4H11NO2	111-42-2	Train	1,50	0,20	Test	10,61	0,81
902	TRIETHANOLAMINE	C6H15NO3	102-71-6	Train	1,20	0,00	Train	8,62	1,28
903	sec-BUTYLAMINE	C4H11N	13952-84-6	Train	1,59	0,01	Train	10,73	0,88
904	tert-BUTYLAMINE	C4H11N	75-64-9	Train	1,68	0,02	Train	9,19	0,29
905	CYCLOHEXYLAMINE	C6H13N	108-91-8	Train	1,20	0,54	Test	9,88	0,48
906	DEHYDROABIETYLAMINE	C20H31N	1446-61-3	Train	0,37	0,03	-	0,00	0,00
907	HEXAMETHYLENEDIAMINE	C6H16N2	124-09-4	Train	1,04	0,34	Train	7,18	0,88
908	BENZYLAMINE	C7H9N	100-46-9	Train	1,20	0,00	Train	7,80	0,00
909	TRIETHYLENEDIAMINE	C6H12N2	280-57-9	Train	1,16	0,04	Train	7,47	1,73
910	o-TOLUIDINE	C7H9N	95-53-4	Train	1,30	0,20	Train	7,39	0,21
911	m-TOLUIDINE	C7H9N	108-44-1	Train	1,24	0,04	Test	7,71	0,11
912	p-TOLUIDINE	C7H9N	106-49-0	Train	1,29	0,19	Test	7,72	1,12
913	TRIETHYLENETETRAMINE	C6H18N4	112-24-3	Train	1,00	0,00	Test	7,23	2,27
914	ALLYLAMINE	C3H7N	107-11-9	Train	2,08	0,05	-	0,00	0,00
915	ETHYLENEDIAMINE	C2H8N2	107-15-3	Train	2,53	0,03	Train	12,52	0,52
916	ETHYLENEIMINE	C2H5N	151-56-4	Train	3,96	0,36	Train	36,49	9,51
917	DIISOPROPYLAMINE	C6H15N	108-18-9	Train	1,10	0,00	Test	8,50	0,00
918	DI-n-BUTYLAMINE	C8H19N	111-92-2	Train	0,81	0,03	Train	7,53	2,09
919	PIPERIDINE	C5H11N	110-89-4	Train	1,63	0,23	-	0,00	0,00
920	p-AMINODIPHENYLAMINE	C12H12N2	101-54-2	Train	0,73	0,03	Test	5,42	0,39
921	QUINOLINE	C9H7N	91-22-5	Train	1,22	0,02	Test	6,65	0,35
922	HEXAMETHYLENETETRAMINE	C6H12N4	100-97-0	Train	1,12	0,02	-	0,00	0,00
923	1,2-PROPANEDIAMINE	C3H10N2	78-90-0	Train	1,84	0,06	Train	10,28	0,82
924	N,N-DIETHYLANILINE	C10H15N	91-66-7	Train	0,85	0,05	Train	6,26	0,14
925	N-METHYLPYRROLE	C5H7N	96-54-8	Train	1,58	0,02	Test	11,02	2,98
926	PYRAZINE	C4H4N2	290-37-9	Train	2,24	0,46	-	0,00	0,00
927	DIPHENYLAMINE	C12H11N	122-39-4	Train	0,71	0,01	Train	5,70	0,30
928	PHENYLHYDRAZINE	C6H8N2	100-63-0	Train	1,46	0,16	Train	10,44	0,94
929	MELAMINE	C3H6N6	108-78-1	Train	2,27	0,21	Train	22,95	0,25
930	QUINALDINE	C10H9N	91-63-4	Test	0,76	0,13	Train	6,54	0,34
931	NITROMETHANE	CH3NO2	75-52-5	Train	7,30	0,00	Train	63,00	0,00
932	NITROETHANE	C2H5NO2	79-24-3	Train	3,38	0,02	Test	17,37	0,07
933	1-NITROPROPANE	C3H7NO2	108-03-2	Train	2,32	0,12	Train	13,52	0,28
934	2-NITROPROPANE	C3H7NO2	79-46-9	Train	2,50	0,00	Train	11,00	0,00
935	HYDRACRYLONITRILE	C3H5NO	109-78-4	Train	2,30	0,00	Test	12,10	0,00
936	MORPHOLINE	C4H9NO	110-91-8	Train	2,30	0,63	-	0,00	0,00
937	PYRROLIDINE	C4H9N	123-75-1	Train	2,02	0,42	-	0,00	0,00
938	N-METHYLPYRROLIDINE	C5H11N	120-94-5	Train	1,45	0,25	Train	11,46	1,96
939	1-NITROBUTANE	C4H9NO2	627-05-4	Train	1,76	0,14	Train	11,14	0,24
940	ACETONITRILE	C2H3N	75-05-8	Train	4,65	1,65	Train	21,58	4,58
941	PROPIONITRILE	C3H5N	107-12-0	Train	2,65	0,45	Train	16,63	2,63
942	METHACRYLONITRILE	C4H5N	126-98-7	Train	2,00	0,11	Train	10,83	0,17
943	SUCCINONITRILE	C4H4N2	110-61-2	Train	2,10	0,00	Train	14,40	0,00
944	ADIPONITRILE	C6H8N2	111-69-3	Train	1,21	0,21	-	0,00	0,00
945	o-NITROTOLUENE	C7H7NO2	88-72-2	Train	1,36	0,84	Test	8,31	0,71
946	p-NITROTOLUENE	C7H7NO2	99-99-0	Train	1,35	0,25	Train	8,76	1,16
947	m-NITROTOLUENE	C7H7NO2	99-08-1	Train	1,30	0,00	Train	8,74	1,14
948	GLUTARONITRILE	C5H6N2	544-13-8	Train	1,45	0,15	Train	9,18	2,32
949	n-BUTYRONITRILE	C4H7N	109-74-0	Train	1,95	0,38	Train	13,08	0,38
950	VALERONITRILE	C5H9N	110-59-8	Train	1,54	0,04	Test	10,85	1,25
951	MALONONITRILE	C3H2N2	109-77-3	Train	3,06	0,16	Train	21,34	2,34
952	HEXANENITRILE	C6H11N	628-73-9	Test	1,28	0,02	Train	9,32	1,12

953	ISOBUTYRONITRILE	C4H7N	78-82-0	Train	1,22	0,35	-	0,00	0,00
954	trans-CROTONITRILE	C4H5N	627-26-9	Train	2,17	0,47	Train	10,70	1,90
955	PYRIDINE	C5H5N	110-86-1	Test	1,80	0,00	Train	12,62	0,62
956	ANILINE	C6H7N	62-53-3	Train	1,43	0,13	Test	10,26	0,74
957	2,4-TOLUENE DIISOCYANATE	C9H6N2O2	584-84-9	Train	0,84	0,06	Test	9,91	0,41
958	HEXAMETHYLENEIMINE	C6H13N	111-49-9	Train	1,36	0,22	-	0,00	0,00
959	N-METHYLANILINE	C7H9N	100-61-8	Train	1,31	0,11	Test	9,27	0,67
960	N,N-DIMETHYLANILINE	C8H11N	121-69-7	Train	1,10	0,10	Train	7,53	0,53
961	2-METHYLPYRIDINE	C6H7N	109-06-8	Train	1,40	0,00	Train	8,60	0,00
962	cis-CROTONITRILE	C4H5N	1190-76-7	Train	2,17	0,47	Test	10,70	1,90
963	ETHYL MERCAPTAN	C2H6S	75-08-1	Test	2,72	0,08	Train	17,49	0,51
964	n-PROPYL MERCAPTAN	C3H8S	107-03-9	Train	1,99	0,19	Train	13,58	0,02
965	tert-BUTYL MERCAPTAN	C4H10S	75-66-1	Train	1,40	0,00	-	0,00	0,00
966	ISOBUTYL MERCAPTAN	C4H10S	513-44-0	Train	1,47	0,07	-	0,00	0,00
967	sec-BUTYL MERCAPTAN	C4H10S	513-53-1	Train	1,40	0,00	-	0,00	0,00
968	n-HEXYL MERCAPTAN	C6H14S	111-31-9	Test	1,10	0,10	Train	8,38	0,02
969	n-NONYL MERCAPTAN	C9H20S	1455-21-6	Train	0,76	0,06	Test	6,24	0,14
970	n-OCTYL MERCAPTAN	C8H18S	111-88-6	Train	0,85	0,05	Train	6,80	0,10
971	ISOPROPYL MERCAPTAN	C3H8S	75-33-2	Train	1,81	0,01	-	0,00	0,00
972	CYCLOHEXYL MERCAPTAN	C6H12S	1569-69-3	Train	1,10	0,00	-	0,00	0,00
973	BENZYL MERCAPTAN	C7H8S	100-53-8	Train	1,10	0,00	-	0,00	0,00
974	METHYL ETHYL SULFIDE	C3H8S	624-89-5	Train	1,81	0,01	Train	14,84	0,94
975	METHYL n-PROPYL SULFIDE	C4H10S	3877-15-4	Train	1,45	0,05	Train	11,99	0,49
976	METHYL t-BUTYL SULFIDE	C5H12S	6163-64-0	Train	1,18	0,02	Train	8,91	0,91
977	METHYL t-PENTYL SULFIDE	C6H14S	13286-92-5	Train	1,01	0,01	Train	8,51	1,41
978	DI-n-PROPYL SULFIDE	C6H14S	111-47-7	Train	1,14	0,14	Train	8,91	0,31
979	DIETHYL SULFIDE	C4H10S	352-93-2	Test	1,64	0,24	Train	12,24	0,74
980	DIMETHYL SULFIDE	C2H6S	75-18-3	Train	2,39	0,19	Train	19,72	0,02
981	THIOPHENE	C4H4S	110-02-1	Train	1,61	0,11	Train	13,36	0,86
982	2-MERCAPTOBENZOTHAZOLE	C7H5NS2	149-30-4	Train	1,00	0,00	-	0,00	0,00
983	DIETHYL DISULFIDE	C4H10S2	110-81-6	Test	1,47	0,27	Train	13,99	1,51
984	UNDECYL MERCAPTAN	C11H24S	5332-52-5	Train	0,63	0,03	Train	5,39	0,19
985	n-DECYL MERCAPTAN	C10H22S	143-10-2	Train	0,69	0,09	Test	5,78	0,18
986	n-PENTYL MERCAPTAN	C5H12S	110-66-7	Train	1,29	0,09	Train	9,55	0,05
987	DIMETHYL DISULFIDE	C2H6S2	624-92-0	Train	1,75	0,15	Train	24,05	1,85
988	DI-n-PROPYL DISULFIDE	C6H14S2	629-19-6	Train	1,05	0,15	Train	9,74	2,26
989	4,6-DIMETHYLDIBENZOTHIOPHENE	C14H12S	1207-12-1	Train	0,58	0,03	Test	7,72	0,64
990	DI-n-OCTYL SULFIDE	C16H34S	2690-08-6	Test	0,45	0,05	Train	4,23	0,43
991	DICYCLOHEXYL SULFIDE	C12H22S	7133-46-2	Train	0,60	0,00	Train	7,48	0,02
992	3-ETHYL-2,5-DIMETHYLTHIOPHENE	C8H12S	55735-23-4	Train	0,78	0,13	-	0,00	0,00
993	THIAINDAN	C8H8S	4565-32-6	Train	1,31	0,32	-	0,00	0,00
994	2-METHYL THIAINDAN	C9H10S	6165-55-5	Train	1,10	0,23	-	0,00	0,00
995	n-DODECYL MERCAPTAN	C12H26S	112-55-0	Train	0,58	0,08	Train	5,07	0,27
996	tert-OCTYL MERCAPTAN	C8H18S	141-59-3	Train	0,78	0,02	-	0,00	0,00
997	n-HEPTYL MERCAPTAN	C7H16S	1639-09-4	Train	0,96	0,06	Train	7,49	0,01
998	DIALLYL SULFIDE	C6H10S	592-88-1	Train	1,14	2,64	Train	11,07	0,73
999	n-BUTYL MERCAPTAN	C4H10S	109-79-5	Train	1,57	0,17	Train	11,18	0,12
1000	PHENYL MERCAPTAN	C6H6S	108-98-5	Train	1,20	0,00	-	0,00	0,00
1001	TETRAHYDROTHIOPHENE	C4H8S	110-01-0	Train	1,48	0,38	Train	14,05	1,75
1002	ACETYL CHLORIDE	C2H3ClO	75-36-5	Train	7,30	0,00	-	0,00	0,00
1003	CHLOROACETIC ACID	C2H3ClO2	79-11-8	Train	6,25	1,75	-	0,00	0,00
1004	DICHLOROACETYL CHLORIDE	C2HCl3O	79-36-7	Train	11,90	0,00	Train	31,17	0,53
1005	BENZOYL CHLORIDE	C7H5ClO	98-88-4	Train	1,41	0,21	-	0,00	0,00
1006	p-CHLOROBENZOTRIFLUORIDE	C7H4ClF3	98-56-6	Train	1,78	0,02	Train	7,99	2,71
1007	o-CHLOROANILINE	C6H6ClN	95-51-2	Test	1,78	0,28	Test	8,23	0,57
1008	FLUOROBENZENE	C6H5F	462-06-6	Train	1,78	0,18	Train	10,75	1,85
1009	CHLOROMETHYL METHYL ETHER	C2H5ClO	107-30-2	Train	4,64	0,14	Test	25,37	2,57
1010	3-CHLORO-1,2-PROPANEDIOL	C3H7ClO2	96-24-2	Train	2,42	0,68	Train	16,59	0,71
1011	1,3-DICHLORO-2-PROPANOL	C3H6Cl2O	96-23-1	Test	2,61	0,89	Train	14,52	0,68
1012	2,3-DICHLORO-1-PROPANOL	C3H6Cl2O	616-23-9	Train	3,09	0,41	Train	12,87	2,33

1013	DI(2-CHLOROETHYL)ETHER	C4H8Cl2O	111-44-4	Train	2,23	0,23	Train	17,55	2,25
1014	3-(METHYLMERCAPTO)PROPANAL	C4H8OS	3268-49-3	Train	1,56	0,04	-	0,00	0,00
1015	6-AMINOHEXANOL	C6H15NO	4048-33-3	Train	1,13	0,07	Train	8,13	1,07
1016	GLYCINE	C2H5NO2	56-40-6	Train	4,01	0,01	Train	23,76	0,26
1017	3-MERCAPTOPROPIONIC ACID	C3H6O2S	107-96-0	Train	2,20	0,00	-	0,00	0,00
1018	o-CHLOROBENZOIC ACID	C7H5ClO2	118-91-2	Train	1,53	0,03	Train	8,27	0,57
1019	4-METHOXYPHENYLACETIC ACID	C9H10O3	104-01-8	Train	1,02	0,02	Train	8,10	0,00
1020	N,N-DIMETHYLFORMAMIDE	C3H7NO	68-12-2	Train	2,31	0,01	Train	17,28	1,28
1021	UREA	CH4N2O	57-13-6	Train	5,29	0,31	Train	34,67	0,63
1022	2-METHACRYLAMIDE	C4H7NO	79-39-0	Train	1,93	0,07	Train	12,61	2,49
1023	ACRYLAMIDE	C3H5NO	79-06-1	Train	2,52	0,18	Test	19,63	0,97
1024	epsilon-CAPROLACTAM	C6H11NO	105-60-2	Train	1,44	0,04	-	0,00	0,00
1025	alpha-EPICHLOROHYDRIN	C3H5ClO	106-89-8	Train	2,73	0,23	Train	25,79	4,79
1026	ACETONE CYANOHYDRIN	C4H7NO	75-86-5	Train	2,20	0,00	Train	12,00	0,00
1027	TRIPHENYLPHOSPHINE	C18H15P	603-35-0	Train	0,50	0,00	-	0,00	0,00
1028	NITROBENZENE	C6H5NO2	98-95-3	Test	1,50	0,30	-	0,00	0,00
1029	GLYCOLIC ACID	C2H4O3	79-14-1	Train	5,66	0,36	Train	22,22	1,28
1030	ACETALDOL	C4H8O2	107-89-1	Test	1,85	0,25	Train	12,06	0,14
1031	FURFURAL	C5H4O2	98-01-1	Train	2,10	0,00	Test	19,30	0,00
1032	alpha-HYDROXYISOBUTYRIC ACID	C4H8O3	594-61-6	Train	2,07	0,13	Test	12,16	1,06
1033	ACETOMETHOXANE	C8H14O4	828-00-2	Train	0,62	0,48	Train	6,90	1,58
1034	ETHYLENE GLYCOL DIACRYLATE	C8H10O4	2274-11-5	Train	1,11	0,09	Train	8,61	0,29
1035	PROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER ACETATE	C6H12O3	108-65-6	Train	1,34	0,04	Train	9,61	3,49
1036	DIPROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER ACETATE	C9H18O4	88917-22-0	Train	0,83	0,07	Train	8,05	0,25
1037	METHOXYDIHYDROPYRAN	C6H10O2	4454-05-1	Train	1,42	0,02	Train	14,83	5,27
1038	DICHLOROSILANE	Cl2H2Si	4109-96-0	Train	4,82	0,12	Train	100,59	4,59
1039	TRICHLOROSILANE	Cl3HSi	10025-78-2	Train	7,15	0,15	Train	85,33	2,33
1040	HEXAMETHYLDISILAZANE	C6H19NSi2	999-97-3	Train	0,82	0,02	Train	23,03	0,17
1041	HEXAMETHYLCYCLOTETRAISILOXANE	C6H18O3Si3	541-05-9	Train	1,02	0,08	Train	19,76	1,68
1042	METHYL VINYL DICHLOROSILANE	C3H6Cl2Si	124-70-9	Test	2,04	0,96	-	0,00	0,00
1043	[3-(MERCAPTO)PROPYL]TRIETHOXSILANE	C9H22O3SSi	14814-09-6	Train	0,77	0,26	-	0,00	0,00
1044	3-(TRIMETHOXSILYL)-1-PROPANETHIOL	C6H16O3SSi	4420-74-0	Train	1,11	1,73	-	0,00	0,00
1045	TETRAMETHYLSILANE	C4H12Si	75-76-3	Test	1,39	0,39	-	0,00	0,00
1046	OCTAMETHYLCYCLOTETRAISILOXANE	C8H24O4Si4	556-67-2	Test	0,78	0,03	-	0,00	0,00
1047	GLUTARALDEHYDE	C5H8O2	111-30-8	Test	1,73	0,03	Train	12,09	5,42
1048	n-TRIACONTANE	C30H62	638-68-6	Test	0,25	0,05	Test	2,77	0,33
1049	n-DOTRIACONTANE	C32H66	544-85-4	Train	0,23	0,07	Train	2,67	0,33
1050	3-OCTANONE	C8H16O	106-68-3	Train	0,96	0,22	Train	6,99	0,89
1051	4-OCTANONE	C8H16O	589-63-9	Test	0,96	0,12	Train	6,99	0,89
1052	3-NONANONE	C9H18O	925-78-0	Test	0,85	0,15	Train	6,39	1,06
1053	n-HEXATRIACONTANE	C36H74	630-06-8	Train	0,21	0,01	Test	2,50	0,30
1054	4-NONANONE	C9H18O	4485-09-0	Test	0,85	0,02	Test	6,39	1,06
1055	2-CYCLOHEXENE-1-ONE	C6H8O	930-68-7	Test	1,32	0,12	Test	11,43	0,97
1056	2,6,8-TRIMETHYL-4-NONANONE	C12H24O	123-18-2	Train	0,58	0,05	Test	4,88	0,15
1057	2,4-DIMETHYLOCTANE	C10H22	4032-94-4	Train	0,69	0,01	Train	5,56	0,46
1058	2,5-DIMETHYLOCTANE	C10H22	15869-89-3	Train	0,69	0,01	Train	5,56	0,46
1059	2,6-DIMETHYLOCTANE	C10H22	2051-30-1	Train	0,69	0,13	Test	5,56	0,46
1060	2,7-DIMETHYLOCTANE	C10H22	1072-16-8	Test	0,70	0,12	Train	5,32	0,22
1061	m-ETHYLPHENOL	C8H10O	620-17-7	Train	1,06	0,04	Test	7,44	0,16
1062	2,6-DI-tert-BUTYL-p-CRESOL	C15H24O	128-37-0	Train	0,45	0,05	Train	4,10	0,30
1063	2-PHENYLETHANOL	C8H10O	60-12-8	Test	1,04	0,06	Test	7,80	0,80
1064	2,6-DIMETHYL-4-HEPTANOL	C9H20O	108-82-7	Train	0,74	0,04	Test	5,60	2,10
1065	1-PHENYL-1-PROPANOL	C9H12O	93-54-9	Train	0,98	0,02	Train	7,77	1,37
1066	1-PHENYL-2-PROPANOL	C9H12O	698-87-3	Test	0,87	0,13	Train	6,98	0,18
1067	2-PHENYL-1-PROPANOL	C9H12O	1123-85-9	Train	0,95	0,05	Train	7,16	0,86
1068	3-PHENYL-1-PROPANOL	C9H12O	122-97-4	Train	0,91	0,09	Train	7,04	0,64
1069	beta-CHOLESTEROL	C27H46O	57-88-5	Train	0,29	0,01	-	0,00	0,00
1070	p-TOLUALCOHOL	C8H10O	589-18-4	Train	1,14	0,04	Train	7,46	0,06
1071	o-TOLUALCOHOL	C8H10O	89-95-2	Train	1,16	0,06	Train	7,16	0,05

1072	m-TOLUALCOHOL	C8H10O	587-03-1	Train	1,11	0,01	Test	7,46	0,14
1073	p-tert-OCTYLPHENOL	C14H22O	140-66-9	Train	0,58	0,02	Train	4,41	0,71
1074	p-tert-AMYLPHENOL	C11H16O	80-46-6	Train	0,77	0,03	Train	5,49	0,29
1075	p-CUMYLPHENOL	C15H16O	599-64-4	Train	0,57	0,09	Train	5,18	1,18
1076	DINONYLPHENOL	C24H42O	1323-65-5	Train	0,33	0,03	-	0,00	0,00
1077	2,4-PENTANEDIOL	C5H12O2	625-69-4	Train	1,29	0,21	Train	8,82	2,38
1078	3-METHYL-trans-2-PENTENE	C6H12	616-12-6	Test	1,34	0,14	Test	9,05	0,45
1079	5-METHYL-1-HEXENE	C7H14	3524-73-0	Train	1,01	0,09	Test	7,52	1,62
1080	DECAN-1,10-DIOL	C10H22O2	112-47-0	Train	0,75	0,07	Train	6,25	1,59
1081	1,4-CYCLOHEXANEDIMETHANOL	C8H16O2	105-08-8	Test	1,01	0,01	-	0,00	0,00
1082	NEOABIETIC ACID	C20H30O2	471-77-2	Train	0,46	0,06	-	0,00	0,00
1083	2-METHYL-1-OCTENE	C9H18	4588-18-5	Test	0,83	0,03	Test	6,16	0,56
1084	2-METHYL-1-HEPTENE	C8H16	15870-10-7	Train	0,94	0,04	Train	6,71	0,19
1085	TRIMELLITIC ACID	C9H6O6	528-44-9	Train	1,08	0,22	Train	10,38	3,32
1086	TRILACTIC ACID	C9H14O7	78024-33-6	Train	0,97	0,13	Train	7,77	0,53
1087	LINOLENIC ACID	C18H30O2	463-40-1	Test	0,50	0,10	-	0,00	0,00
1088	ABIETIC ACID	C20H30O2	514-10-3	Train	0,46	0,05	-	0,00	0,00
1089	NEOPENTANOIC ACID	C5H10O2	75-98-9	Train	1,71	0,11	Train	10,51	2,41
1090	n-PENTADECANOIC ACID	C15H30O2	1002-84-2	Train	0,51	0,00	-	0,00	0,00
1091	2-ETHYL HEXANOIC ACID	C8H16O2	149-57-5	Train	0,97	0,07	Test	8,04	0,60
1092	n-HEPTANOIC ACID	C7H14O2	111-14-8	Train	1,14	0,04	Train	7,99	0,79
1093	NEOHEXANOIC ACID	C6H12O2	595-37-9	Train	1,37	0,07	Train	9,94	2,24
1094	NEOHEPTANOIC ACID	C7H14O2	1185-39-3	Train	1,16	0,06	Test	8,66	1,76
1095	DEHYDROABIETIC ACID	C20H28O2	1740-19-8	Train	0,43	0,03	-	0,00	0,00
1096	n-HEPTADECANOIC ACID	C17H34O2	506-12-7	Test	0,45	0,05	-	0,00	0,00
1097	n-NONADECANOIC ACID	C19H38O2	646-30-0	Train	0,40	0,23	-	0,00	0,00
1098	n-EICOSANIC ACID	C20H40O2	506-30-9	Train	0,38	0,30	-	0,00	0,00
1099	FUMARIC ACID	C4H4O4	110-17-8	Train	2,75	0,15	Train	15,40	3,30
1100	CINNAMIC ACID	C9H8O2	140-10-3	Train	1,07	0,07	Train	7,40	0,00
1101	ACETOXYACETIC ACID	C4H6O4	13831-30-6	Test	2,58	0,50	Train	15,08	5,02
1102	CITRACONIC ACID	C5H6O4	498-23-7	Train	2,02	0,08	Train	14,75	0,15
1103	ITACONIC ACID	C5H6O4	97-65-4	Train	2,01	0,09	Train	11,98	2,42
1104	2-ETHYL BUTYRIC ACID	C6H12O2	88-09-5	Train	1,31	0,01	Train	10,54	2,14
1105	PYROMELLITIC ACID	C10H6O8	89-05-4	Train	1,01	0,19	Train	9,30	1,50
1106	IBUPROFEN	C13H18O2	15687-27-1	Train	0,64	0,06	Train	5,31	0,01
1107	1-METHYL-4-VINYLCYCLOHEXENE	C9H14	17699-86-4	Train	0,57	0,33	Train	5,08	0,63
1108	2,6-NAPHTHALENEDICARBOXYLIC ACID	C12H8O4	1141-38-4	Train	0,73	0,17	Train	6,49	0,89
1109	METHYL MALEIC ANHYDRIDE	C5H4O3	616-02-4	Train	1,75	0,45	Train	11,09	2,39
1110	sec-BUTYL FORMATE	C5H10O2	589-40-2	Test	1,50	0,10	Train	10,71	1,01
1111	tert-BUTYL FORMATE	C5H10O2	762-75-4	Test	1,59	0,01	Train	9,19	0,19
1112	n-HEXYL FORMATE	C7H14O2	629-33-4	Test	1,15	0,05	Train	8,01	0,91
1113	n-HEPTYL FORMATE	C8H16O2	112-23-2	Test	0,99	0,01	Train	7,21	0,81
1114	1,2-HEXADIENE	C6H10	592-44-9	Train	1,18	0,12	Train	11,17	0,27
1115	CYCLOHEXYL FORMATE	C7H12O2	4351-54-6	Train	1,20	0,00	Train	8,00	0,00
1116	tert-BUTYL ACETATE	C6H12O2	540-88-5	Train	1,39	0,01	Train	7,62	0,02
1117	METHYL ISOBUTYRATE	C5H10O2	547-63-7	Train	1,73	0,13	Train	8,68	0,32
1118	ETHYL ISOBUTYRATE	C6H12O2	97-62-1	Train	1,40	0,10	Train	7,72	0,08
1119	ISOPROPYL ACRYLATE	C6H10O2	689-12-3	Train	1,29	0,11	Train	9,26	0,26
1120	BENZYL FORMATE	C8H8O2	104-57-4	Train	1,16	0,04	Test	6,94	0,04
1121	CETYL METHACRYLATE	C20H38O2	2495-27-4	Test	0,38	0,02	-	0,00	0,00
1122	ALLYL METHACRYLATE	C7H10O2	96-05-9	Test	1,17	0,03	Test	8,71	0,99
1123	DIMETHYL-2,6-NAPHTHALENEDICARBOXYLATE	C14H12O4	840-65-3	Train	0,61	0,09	Train	5,30	0,30
1124	CYCLOHEXYL ACETATE	C8H14O2	622-45-7	Train	0,59	0,41	Train	8,32	1,42
1125	PROPYLENE CARBONATE	C4H6O3	108-32-7	Train	2,24	0,34	Test	14,08	0,22
1126	GLYCERYL TRIACRYLATE	C9H14O6	102-76-1	Train	1,06	0,04	Train	6,66	1,04
1127	n-NONYL n-UNDECYL PHTHALATE	C28H46O4	65185-89-9	Test	0,28	0,01	Test	3,00	0,53
1128	DIISONONYL PHTHALATE	C26H42O4	28553-12-0	Test	0,30	0,00	Train	3,07	0,57
1129	DIETHYL PHTHALATE	C12H14O4	84-66-2	Train	0,72	0,03	Train	5,64	0,34
1130	DI-n-BUTYL PHTHALATE	C16H22O4	84-74-2	Train	0,52	0,02	Train	4,47	0,03

1131	DIMETHYL PHTHALATE	C10H10O4	131-11-3	Train	0,90	0,00	Train	6,59	1,61
1132	DIETHYL SUCCINATE	C8H14O4	123-25-1	Train	1,11	0,01	-	0,00	0,00
1133	DIHEXYL ADIPATE	C18H34O4	110-33-8	Train	0,45	0,05	Test	4,15	1,46
1134	ETHYLIDENE DIACETATE	C6H10O4	542-10-9	Train	1,55	0,05	Train	8,80	0,30
1135	DIALLYL MALEATE	C10H12O4	999-21-3	Test	0,92	0,02	Train	7,14	0,76
1136	DIBUTYL MALEATE	C12H20O4	105-76-0	Train	0,74	0,04	Train	5,42	0,28
1137	ISOBUTYL ACRYLATE	C7H12O2	106-63-8	Train	1,10	0,10	Train	8,16	0,16
1138	METHYL DODECANOATE	C13H26O2	111-82-0	Train	0,60	0,00	-	0,00	0,00
1139	DIETHYL MALEATE	C8H12O4	141-05-9	Train	1,23	0,13	Train	7,55	0,15
1140	DIMETHYL MALEATE	C6H8O4	624-48-6	Train	1,85	0,10	Test	9,66	0,74
1141	DIPROPYL MALEATE	C10H16O4	2432-63-5	Test	0,92	0,02	Test	6,28	0,12
1142	sec-BUTYL ACRYLATE	C7H12O2	2998-08-5	Test	1,07	0,16	Train	8,86	1,81
1143	VINYL PIVALATE	C7H12O2	3377-92-2	Train	1,20	0,01	Train	7,77	0,43
1144	DIMETHYL CARBONATE	C3H6O3	616-38-6	Train	3,02	0,08	Train	20,34	0,16
1145	n-PROPYL BENZOATE	C10H12O2	2315-68-6	Train	0,84	0,06	Test	6,89	1,29
1146	DIISOBUTYL ETHER	C8H18O	628-55-7	Train	0,87	0,03	Train	6,97	0,43
1147	1-HEPTYNE	C7H12	628-71-7	Train	0,99	0,01	Train	11,84	1,36
1148	ETHYL ISOPROPYL ETHER	C5H12O	625-54-7	Train	1,44	0,06	Train	10,83	0,77
1149	ETHYL n-HEXYL ETHER	C8H18O	5756-43-4	Train	0,94	0,04	Train	7,78	0,58
1150	1,3-DIOXANE	C4H8O2	505-22-6	Train	2,15	0,05	Train	24,32	2,82
1151	ETHYLAL	C5H12O2	462-95-3	Train	1,57	0,07	Train	16,73	2,03
1152	1,2-DIETHOXYETHANE	C6H14O2	629-14-1	Train	1,30	0,10	Train	13,14	1,24
1153	2,3-DIHYDROFURAN	C4H6O	1191-99-7	Train	2,00	0,10	-	0,00	0,00
1154	1-ETHYL-2-ISOPROPYLBENZENE	C11H16	18970-44-0	Test	0,71	0,01	Train	5,44	0,74
1155	1,1-DICHLOROPROPANE	C3H6Cl2	78-99-9	Train	3,14	0,04	Train	14,18	0,32
1156	1,3-DICHLOROPROPANE	C3H6Cl2	142-28-9	Test	3,02	0,38	Train	15,33	0,83
1157	2,3-DICHLOROPROPENE	C3H4Cl2	78-88-6	Train	3,49	0,18	-	0,00	0,00
1158	n-PENTADECYLBENZENE	C21H36	2131-18-2	Train	0,37	0,13	Train	3,63	0,37
1159	n-HEXADECYLBENZENE	C22H38	1459-09-2	Train	0,35	0,15	Train	3,51	0,39
1160	n-HEPTADECYLBENZENE	C23H40	14752-75-1	Test	0,33	0,17	Train	3,41	0,39
1161	n-OCTADECYLBENZENE	C24H42	4445-07-2	Test	0,32	0,08	Test	3,31	0,39
1162	1,2,3-TRICHLOROBENZENE	C6H3Cl3	87-61-6	Train	2,63	0,13	Train	7,74	1,24
1163	1,3,5-TRICHLOROBENZENE	C6H3Cl3	108-70-3	Train	2,50	0,00	Train	7,26	0,66
1164	3,3,3-TRIFLUOROPROPENE	C3H3F3	677-21-4	Train	4,55	0,15	Train	14,90	1,40
1165	1,1,2-TRIFLUOROETHANE	C2H3F3	430-66-0	Train	5,84	0,36	Test	21,09	1,51
1166	1,1,2,2,3-PENTAFLUOROPROPANE	C3H3F5	679-86-7	Train	8,02	0,32	-	0,00	0,00
1167	BENZOTRIFLUORIDE	C7H5F3	98-08-8	Train	1,46	0,14	Train	9,30	0,90
1168	1,2-DIFLUOROETHANE	C2H4F2	624-72-6	Train	3,71	0,44	Train	19,18	0,18
1169	1,1-DICHLORO-1-FLUOROETHANE	C2H3Cl2F	1717-00-6	Train	9,00	0,00	Train	15,40	0,00
1170	p-BROMOTOLUENE	C7H7Br	106-38-7	Train	1,49	0,14	Train	8,27	0,67
1171	CHLOROTRIFLUOROETHYLENE	C2ClF3	79-38-9	Train	8,94	0,54	Train	38,69	0,02
1172	VINYL BROMIDE	C2H3Br	593-60-2	Train	6,60	0,00	Test	13,50	0,00
1173	1-CHLORO-1,1-DIFLUOROETHANE	C2H3ClF2	75-68-3	Train	6,20	0,00	-	0,00	0,00
1174	VINYL FLUORIDE	C2H3F	75-02-5	Train	3,89	0,48	Test	27,22	2,22
1175	n-HEXYLAMINE	C6H15N	111-26-2	Train	1,13	0,03	Train	8,25	1,45
1176	n-HEPTYLAMINE	C7H17N	111-68-2	Test	0,98	0,02	Test	7,39	1,19
1177	n-OCTYLAMINE	C8H19N	111-86-4	Train	0,86	0,17	Train	6,72	2,92
1178	n-NONYLAMINE	C9H21N	112-20-9	Test	0,77	0,17	Train	6,17	2,43
1179	n-DECYLAMINE	C10H23N	2016-57-1	Train	0,70	0,00	Train	5,73	0,73
1180	n-DODECYLAMINE	C12H27N	124-22-1	Train	0,59	0,01	Test	5,03	0,53
1181	N-ETHYL-2-METHYLALLYLAMINE	C6H13N	18328-90-0	Train	1,05	0,15	Train	9,62	0,62
1182	PENTAETHYLENE HEXAMINE	C10H28N6	4067-16-7	Train	0,54	0,06	Train	6,26	2,44
1183	TRIALLYLAMINE	C9H15N	102-70-5	Train	0,80	0,00	Train	8,19	0,69
1184	TRI-n-BUTYLAMINE	C12H27N	102-82-9	Train	0,60	0,16	Train	5,27	0,91
1185	DIETHYLENETRIAMINE	C4H13N3	111-40-0	Train	1,76	0,24	Train	7,86	1,16
1186	TETRAETHYLENEPENTAMINE	C8H23N5	112-57-2	Train	0,70	0,10	-	0,00	0,00
1187	TRIPROPYLAMINE	C9H21N	102-69-2	Train	0,80	0,10	Train	6,57	0,97
1188	VINYLACETONITRILE	C4H5N	109-75-1	Train	1,95	0,05	Test	15,46	0,14
1189	AMINOCAPRONITRILE	C6H12N2	2432-74-8	Train	1,16	0,06	Train	9,35	0,05
1190	n-BUTYL ISOCYANATE	C5H9NO	111-36-4	Train	1,35	0,05	Train	11,12	1,12

1191	o-ETHYLANILINE	C8H11N	578-54-1	Test	1,07	0,07	Train	7,02	0,32
1192	o-PHENYLENEDIAMINE	C6H8N2	95-54-5	Test	1,52	0,02	Train	8,71	1,09
1193	PROPYLENEIMINE	C3H7N	75-55-8	Train	2,54	0,09	Train	16,31	1,21
1194	m-PHENYLENEDIAMINE	C6H8N2	108-45-2	Train	1,43	0,13	Train	9,19	0,61
1195	N,N'-DI-tert-BUTYLETHYLENEDIAMINE	C10H24N2	4062-60-6	Test	0,58	0,12	Test	5,98	1,08
1196	CYCLOPENTYLAMINE	C5H11N	1003-03-8	Train	1,40	0,00	-	0,00	0,00
1197	DICYCLOHEXYLAMINE	C12H23N	101-83-7	Train	0,62	0,02	Train	5,32	0,28
1198	N-METHYLCYCLOHEXYLAMINE	C7H15N	100-60-7	Train	0,99	0,01	Train	7,82	0,22
1199	N-AMINOETHYL ETHANOLAMINE	C4H12N2O	111-41-1	Train	1,62	0,62	Train	9,01	1,01
1200	cis-DICYANO-1-BUTENE	C6H6N2	2141-58-4	Train	1,55	0,15	Train	8,96	2,64
1201	trans-DICYANO-1-BUTENE	C6H6N2	2141-59-5	Train	1,55	0,15	Train	8,96	2,64
1202	1,4-DICYANO-2-BUTENE	C6H6N2	1119-85-3	Train	1,56	0,16	Train	10,37	1,23
1203	DIPHENYLMETHANE-4,4'-DIISOCYANATE	C15H10N2O2	101-68-8	Train	0,52	0,08	-	0,00	0,00
1204	N,N'-DIPHENYL-p-PHENYLENEDIAMINE	C18H16N2	74-31-7	Train	0,48	0,02	Train	4,04	0,36
1205	DIALYLAMINE	C6H11N	124-02-7	Train	1,04	0,11	Train	12,26	1,94
1206	o-DINITROBENZENE	C6H4N2O4	528-29-0	Test	1,69	0,11	Test	12,15	2,35
1207	p-DINITROBENZENE	C6H4N2O4	100-25-4	Test	1,66	0,14	-	0,00	0,00
1208	2,4-DINITROTOLUENE	C7H6N2O4	121-14-2	Test	1,43	0,07	-	0,00	0,00
1209	2,6-DINITROTOLUENE	C7H6N2O4	606-20-2	Train	1,41	0,09	Train	10,13	1,93
1210	3,4-DINITROTOLUENE	C7H6N2O4	610-39-9	Train	1,43	0,07	-	0,00	0,00
1211	2,5-DINITROTOLUENE	C7H6N2O4	619-15-8	Train	1,43	0,07	-	0,00	0,00
1212	3,5-DINITROTOLUENE	C7H6N2O4	618-85-9	Train	1,37	0,13	Train	9,27	1,07
1213	p-PHENYLENEDIAMINE	C6H8N2	106-50-3	Train	1,49	0,01	Test	9,21	0,59
1214	PHENYL ISOCYANATE	C7H5NO	103-71-9	Train	1,10	0,20	-	0,00	0,00
1215	PIPERAZINE	C4H10N2	110-85-0	Train	2,47	1,53	-	0,00	0,00
1216	PYRIDAZINE	C4H4N2	289-80-5	Test	2,24	0,14	-	0,00	0,00
1217	PYRIMIDINE	C4H4N2	289-95-2	Train	2,24	0,14	-	0,00	0,00
1218	MALEONITRILE	C4H2N2	928-53-0	Train	2,65	0,35	Train	10,33	1,73
1219	FUMARONITRILE	C4H2N2	764-42-1	Train	2,65	0,15	Train	10,33	0,13
1220	2,2'-IMINOBIS-ACETONITRILE	C4H5N3	628-87-5	Train	1,89	0,01	Train	14,77	0,47
1221	o-NITROANILINE	C6H6N2O2	88-74-4	Test	1,60	0,10	Train	10,12	0,32
1222	p-NITROANILINE	C6H6N2O2	100-01-6	Train	1,57	0,07	Train	10,82	1,02
1223	m-NITROANILINE	C6H6N2O2	99-09-2	Test	1,51	0,19	Train	10,80	1,00
1224	HYDRAZOBENZENE	C12H12N2	122-66-7	Train	0,79	0,07	Train	6,63	0,98
1225	ISOQUINOLINE	C9H7N	119-65-3	Train	1,00	0,00	Train	7,00	0,00
1226	p-AMINOAZOBENZENE	C12H11N3	60-09-3	Train	0,70	0,00	-	0,00	0,00
1227	p-AMINODIPHENYL	C12H11N	92-67-1	Train	0,85	0,15	Train	5,47	0,03
1228	1,5-NAPHTHALENE DIISOCYANATE	C12H6N2O2	3173-72-6	Train	0,55	0,25	Train	8,12	0,42
1229	NICOTINONITRILE	C6H4N2	100-54-9	Train	1,41	0,19	Train	11,42	0,22
1230	2,6-DIETHYLANILINE	C10H15N	579-66-8	Train	0,83	0,03	Train	6,12	0,48
1231	ACROLEIN CYANOHYDRIN	C4H5NO	5809-59-6	Train	2,24	0,14	Train	14,92	2,82
1232	2,4,6-TRIMETHYLPYRIDINE	C8H11N	108-75-8	Train	1,02	0,02	Train	6,91	0,29
1233	2,6-DIMETHYLPYRIDINE	C7H9N	108-48-5	Train	1,20	0,00	Test	8,20	0,00
1234	3-METHYLPYRIDINE	C6H7N	108-99-6	Train	1,51	0,21	Train	8,23	0,47
1235	METHYLGLUTARONITRILE	C6H8N2	4553-62-2	Train	0,92	0,62	-	0,00	0,00
1236	4-METHYLPYRIDINE	C6H7N	108-89-4	Train	1,30	0,00	Test	8,70	0,00
1237	1,6-HEXAMETHYLENE DIISOCYANATE	C8H12N2O2	822-06-0	Train	0,83	0,07	Train	8,46	1,04
1238	THIACYCLOPROPANE	C2H4S	420-12-2	Test	2,30	0,10	Train	21,42	0,52
1239	METHYL n-BUTYL SULFIDE	C5H12S	628-29-5	Train	1,21	0,01	Train	10,11	0,31
1240	ETHYL t-BUTYL SULFIDE	C6H14S	14290-92-7	Train	1,10	0,10	Train	7,99	0,89
1241	TRIMETHYLENE SULFIDE	C3H6S	287-27-4	Test	1,80	0,20	Test	16,92	1,02
1242	DIBENZOTHIOPHENE	C12H8S	132-65-0	Train	0,89	0,19	-	0,00	0,00
1243	tert-DODECYL MERCAPTAN	C12H26S	25103-58-6	Train	0,57	0,03	-	0,00	0,00
1244	tert-NONYL MERCAPTAN	C9H20S	25360-10-5	Train	0,72	0,02	Train	5,30	0,00
1245	2-METHYLTHIOPHENE	C5H6S	554-14-3	Train	1,29	0,01	Train	10,29	0,21
1246	3-METHYLTHIOPHENE	C5H6S	616-44-4	Test	1,29	0,01	Train	10,29	0,21
1247	CAMPHOR	C10H16O	76-22-2	Train	0,73	0,13	-	0,00	0,00
1248	FORMAMIDE	CH3NO	75-12-7	Train	7,17	0,17	Test	30,95	1,65
1249	N-METHYLFORMAMIDE	C2H5NO	123-39-7	Train	3,81	0,01	Train	18,01	0,21
1250	ACETAMIDE	C2H5NO	60-35-5	Train	3,75	0,15	Test	23,28	2,78

1251	DIACETONE ALCOHOL	C6H12O2	123-42-2	Train	1,35	0,45	Train	8,51	1,61
1252	FURFURYL ALCOHOL	C5H6O2	98-00-0	Train	1,47	0,33	Train	17,10	0,80
1253	N,N-DIMETHYLACETAMIDE	C4H9NO	127-19-5	Train	1,80	0,00	Train	11,50	0,00
1254	ACETAMINOPHEN	C8H9NO2	103-90-2	Train	1,13	0,03	Train	6,88	0,42
1255	BIS(DIFLUOROMETHYL)ETHER	C2H2F4O	1691-17-4	Train	6,03	2,37	Train	29,50	8,01
1256	p-METHOXYPHENOL	C7H8O2	150-76-5	Train	1,37	0,07	Train	8,99	0,61
1257	2-METHOXYETHANOL	C3H8O2	109-86-4	Train	2,36	0,04	Train	24,21	3,61
1258	2-ETHOXYETHANOL	C4H10O2	110-80-5	Train	1,78	0,08	Train	17,14	1,54
1259	2-BUTOXYETHANOL	C6H14O2	111-76-2	Test	1,20	0,10	Train	11,05	1,65
1260	2-(2-METHOXYETHOXY)ETHANOL	C5H12O3	111-77-3	Test	1,47	0,09	Test	16,45	6,25
1261	2-(2-ETHOXYETHOXY)ETHANOL	C6H14O3	111-90-0	Train	1,23	0,03	Train	14,99	1,01
1262	2-AMINOETHOXYETHANOL	C4H11NO2	929-06-6	Train	1,57	0,43	Train	17,23	1,73
1263	ACETALDOXIME	C2H5NO	107-29-9	Train	3,60	0,00	Train	23,00	0,00
1264	2-(DIFLUOROMETHOXY)-1,1,1-TRIFLUOROETHANE	C3H3F5O	1885-48-9	Train	5,56	0,56	Train	20,30	6,20
1265	SUCCINIMIDE	C4H5NO2	123-56-8	Train	2,41	0,10	Train	14,03	0,27
1266	4-CARBOXYBENZALDEHYDE	C8H6O3	619-66-9	Train	1,20	0,10	Train	8,69	1,19
1267	THIOGLYCOLIC ACID	C2H4O2S	68-11-1	Train	3,10	0,00	-	0,00	0,00
1268	2-HYDROXYETHYL METHACRYLATE	C6H10O3	868-77-9	Train	1,40	0,10	-	0,00	0,00
1269	2-METHOXY PROPANOL-1	C4H10O2	1589-47-5	Train	1,78	0,08	Train	12,26	1,66
1270	TRIAKETONE ALCOHOL	C9H18O3	3682-91-5	Train	0,84	0,06	Test	6,66	2,54
1271	BENZAMIDE	C7H7NO	55-21-0	Train	1,29	0,00	Train	8,38	0,00
1272	alpha-METHYLBENZYL ALCOHOL FORMATE	C9H10O2	7775-38-4	Train	1,05	0,05	Train	6,45	0,05
1273	2-FORMYL BENZOIC ACID	C8H6O3	119-67-5	Train	1,22	0,08	Train	8,25	3,75
1274	4-HYDROXYBUTYRALDEHYDE	C4H8O2	25714-71-0	Train	2,06	0,06	Train	12,28	4,62
1275	2-HYDROXYACETOPHENONE	C8H8O2	118-93-4	Train	1,21	0,01	Train	7,47	0,27
1276	4-HYDROXYACETOPHENONE	C8H8O2	99-93-4	Train	1,19	0,01	Train	7,81	0,61
1277	4-HYDROXYSTYRENE	C8H8O	2628-17-3	Train	1,01	0,19	Train	8,94	0,84
1278	ACETYSALICYLIC ACID	C9H8O4	50-78-2	Train	1,02	0,08	Train	7,27	0,67
1279	p-PHENETIDINE	C8H11NO	156-43-4	Train	1,12	0,12	Test	7,79	0,51
1280	ACETOL	C3H6O2	116-09-6	Train	2,90	0,00	Train	15,70	0,00
1281	ISOAGATHOLAL	C20H32O2	17990-11-3	Train	0,44	0,57	-	0,00	0,00
1282	o-CHLOROPHENOL	C6H5ClO	95-57-8	Test	1,85	0,15	Train	8,41	0,39
1283	m-CHLOROPHENOL	C6H5ClO	108-43-0	Train	1,73	0,03	Train	8,85	0,05
1284	p-CHLOROPHENOL	C6H5ClO	106-48-9	Test	1,82	0,12	Train	8,87	0,07
1285	PENTAFLUOROPHENOL	C6F5OH	771-61-9	Train	6,37	0,00	Train	13,32	0,28
1286	1-ISOPROPOXY-2-PROPANOL	C6H14O2	3944-36-3	Train	1,33	0,03	Train	12,20	1,40
1287	2-CHLOROETHANOL	C2H5ClO	107-07-3	Train	4,42	0,48	Test	17,77	1,87
1288	ISOPHTHALOYL CHLORIDE	C8H4Cl2O2	99-63-8	Train	1,39	0,11	Train	6,71	0,19
1289	4-FORMYLMORPHOLINE	C5H9NO2	4394-85-8	Train	1,20	0,00	Train	8,21	0,01
1290	3-ETHYL HEPTANAL	C9H18O	2570-97-0	Train	0,81	0,05	Train	6,66	1,70
1291	DIAMYL KETONE	C11H22O	927-49-1	Test	0,69	0,06	Train	5,50	0,02
1292	2-BUTYL-1-DECANOL	C14H30O	21078-81-9	Test	0,51	0,07	Train	4,51	1,64
1293	2-METHYL-1-TRIDECANOL	C14H30O	32480-16-3	Train	0,51	0,07	Test	4,51	1,64
1294	2-METHYL-DODECAN-1-OL	C13H28O	22663-61-2	Train	0,55	0,09	-	0,00	0,00
1295	4-METHYL-1-OCTANOL	C9H20O	38514-03-3	Train	0,78	0,04	-	0,00	0,00
1296	6-METHYL-1-OCTANOL	C9H20O	38514-05-5	Train	0,78	0,04	-	0,00	0,00
1297	3-ETHYL-1-HEPTANOL	C9H20O	3525-25-5	Train	0,78	0,00	Train	6,16	2,02
1298	THYMOL	C10H14O	89-83-8	Train	0,82	0,01	Train	6,21	0,74
1299	1-METHYL-3-HYDROXY-5-ISOPROPYL BENZENE	C10H14O	3228-03-3	Train	0,80	0,02	Train	5,62	1,33
1300	1-METHYL-3-HYDROXY-6-ISOPROPYL BENZENE	C10H14O	3228-02-2	Test	0,82	1,16	Train	6,21	0,74
1301	cis-1,8-TERPIN	C10H20O2	565-48-0	Train	0,70	0,08	Test	5,69	0,38
1302	trans-1,8-TERPIN	C10H20O2	565-50-4	Train	0,70	0,08	Train	5,69	0,38
1303	7-METHYL-1-OCTENE	C9H18	13151-06-9	Train	0,80	0,00	Train	6,26	1,06
1304	ACETOACETIC ACID	C4H6O3	541-50-4	Test	2,56	0,14	Train	12,58	0,42
1305	m-TOLUIC ACID	C8H8O2	99-04-7	Test	1,12	0,25	-	0,00	0,00
1306	OCTAHYDRO-PENTALENE-1-CARBOXYLIC ACID	C9H14O2	7403-22-7	Train	0,92	0,02	Train	6,30	0,11
1307	DODECANEDIOIC ACID	C12H22O4	693-23-2	Train	0,68	0,39	Train	5,51	0,01

1308	TETRADECANEDIOIC ACID	C14H26O4	821-38-5	Train	0,62	0,42	Train	5,17	0,09
1309	2-METHYL-1-NONENE	C10H20	2980-71-4	Test	0,75	0,05	Train	5,72	0,08
1310	8-METHYL-1-NONENE	C10H20	26741-24-2	Test	0,72	0,02	Train	5,79	0,89
1311	cis-2-DECENE	C10H20	20348-51-0	Train	0,77	0,07	Train	5,69	0,69
1312	trans-2-DECENE	C10H20	20063-97-2	Train	0,77	0,07	Train	5,69	0,69
1313	cis-2-DODECENE	C12H24	7206-26-0	Test	0,64	0,04	Test	5,00	0,40
1314	trans-2-DODECENE	C12H24	7206-13-5	Train	0,64	0,04	Train	5,00	0,40
1315	CYCLOPROPANE CARBOXYLIC ACID	C4H6O2	1759-53-1	Train	2,11	0,62	Test	14,58	0,17
1316	4-HYDROXYMETHYL BENZOIC ACID	C8H8O3	3006-96-0	Train	1,17	0,05	Train	8,88	0,26
1317	ISOBUTYRIC ANHYDRIDE	C8H14O3	97-72-3	Train	1,11	0,02	Train	8,82	1,12
1318	2,2,4-TRIMETHYL-1,3-PENTANEDIOL DIISOBUTYRATE	C16H30O4	6846-50-0	Train	0,47	0,03	-	0,00	0,00
1319	n-CROTYL ACETATE	C6H10O2	628-08-0	Train	1,49	0,20	Train	9,09	1,89
1320	sec-BUTENYL ACETATE	C6H10O2	6737-11-7	Train	1,46	0,12	-	0,00	0,00
1321	ETHYL TRIMETHYL ACETATE	C7H14O2	3938-95-2	Train	1,19	0,00	Train	7,35	0,56
1322	DI(2-ETHYLHEXYL)TEREPHTHALATE	C24H38O4	6422-86-2	Train	0,32	0,02	-	0,00	0,00
1323	PHTHALIDE	C8H6O2	87-41-2	Train	1,30	0,51	Test	8,07	1,34
1324	ALLYL ACRYLATE	C6H8O2	999-55-3	Train	1,36	0,14	Train	11,26	1,54
1325	DIALLYL PHTHALATE	C14H14O4	131-17-9	Train	0,60	0,46	-	0,00	0,00
1326	METHYL STEARATE	C19H38O2	112-61-8	Train	0,41	0,31	Train	3,82	0,83
1327	METHYL MYRISTATE	C15H30O2	124-10-7	Train	0,52	0,41	-	0,00	0,00
1328	METHYL PALMITATE	C17H34O2	112-39-0	Train	0,46	0,43	Train	4,13	0,95
1329	ETHYL PHENYL ACETATE	C10H12O2	101-97-3	Train	0,41	0,00	Train	6,14	0,00
1330	VINYLETHYLENE CARBONATE	C5H6O3	4427-96-7	Train	0,90	0,40	-	0,00	0,00
1331	DIMETHYL SUCCINATE	C6H10O4	106-65-0	Train	1,58	0,00	-	0,00	0,00
1332	DIOCTYL ADIPATE	C22H42O4	123-79-5	Train	0,36	0,04	-	0,00	0,00
1333	DI(2-ETHYLHEXYL)ADIPATE	C22H42O4	103-23-1	Test	0,35	0,05	-	0,00	0,00
1334	BENZENE-1,2,4-TRICARBOXYLIC ACID TRIMETHYL ESTER	C12H12O6	2459-10-1	Train	0,75	0,09	-	0,00	0,00
1335	DIMETHYLMALONATE	C5H8O4	108-59-8	Test	2,00	1,36	-	0,00	0,00
1336	1,3,5-TRIETHYLBENZENE	C12H18	102-25-0	Train	0,67	0,03	Train	5,12	0,28
1337	1,2-DIBROMODODECANE	C12H24Br2	55334-42-4	Train	0,65	0,09	Train	5,15	1,23
1338	DIFLUOROMETHYL METHYL ETHER	C2H4F2O	359-15-9	Train	6,47	0,16	-	0,00	0,00
1339	DIFLUOROMETHYL TRIFLUOROMETHYL ETHER	C2HF5O	3822-68-2	Train	6,46	2,09	-	0,00	0,00
1340	CYCLOPROPANECARBOXAMIDE	C4H7NO	6228-73-5	Train	1,99	0,00	Train	14,40	0,01
1341	CYCLOPROPYL CYANIDE	C4H5N	5500-21-0	Train	2,06	0,00	Train	13,70	0,00
1342	6-AMINOHEXANAMIDE	C6H14N2O	373-04-6	Train	1,13	0,05	Train	9,36	0,43
1343	1,5-PENTANEDIAMINE	C5H14N2	462-94-2	Train	1,21	0,06	Train	7,98	0,35
1344	HEXANAMIDE	C6H13NO	628-02-4	Train	1,24	0,01	Train	9,33	0,51
1345	2,4-DIMETHYLANILINE	C8H11N	95-68-1	Test	1,15	0,05	Train	7,14	2,59
1346	2,6-DIETHYLNAPHTHALENE	C14H16	59919-41-4	Train	0,58	0,02	Train	4,91	0,09
1347	3-(N,N-DIMETHYLAMINO) PROPYLAMINE	C5H14N2	109-55-7	Train	1,20	0,70	Test	9,82	0,88
1348	4-[2-(2-AMINOETHOXY)ETHYL]MORPHOLINE	C8H18N2O2	20207-13-0	Train	0,85	0,10	-	0,00	0,00
1349	2-(N-MORPHOLINO)-2'- HYDROXYDIETHYLETHER	C8H17NO3	3603-45-0	Train	0,87	0,15	-	0,00	0,00
1350	1-n-PENTYLNAPHTHALENE	C15H18	86-89-5	Train	0,53	0,07	Train	4,71	0,39
1351	8-METHYLQUINOLINE	C10H9N	611-32-5	Train	0,90	0,07	-	0,00	0,00
1352	TRI-n-OCTYLAMINE	C24H51N	1116-76-3	Train	0,31	0,01	Train	3,23	0,73
1353	2-BUTOXIME	C4H9NO	96-29-7	Train	1,90	0,00	Test	12,30	0,00
1354	DIAMYLAMINE	C10H23N	2050-92-2	Train	0,66	0,04	Train	6,26	0,96
1355	TRIAMYLAMINE	C15H33N	621-77-2	Train	0,49	0,01	Train	4,46	0,54
1356	UNDECYLAMINE	C11H25N	7307-55-3	Test	0,64	0,04	Train	5,35	0,65
1357	NIACIN	C6H5NO2	59-67-6	Train	1,55	0,05	-	0,00	0,00
1358	L-PHENYLALANINE	C9H11NO2	63-91-2	Train	0,91	0,09	Train	7,84	0,84
1359	DI-n-OCTYLAMINE	C16H35N	1120-48-5	Test	0,43	0,02	-	0,00	0,00
1360	DI-2-ETHYLHEXYLAMINE	C16H35N	106-20-7	Train	0,41	0,04	Train	4,39	1,11
1361	TETRAMETHYLETHYLENEDIAMINE	C6H16N2	110-18-9	Train	1,04	0,04	Train	8,91	0,09
1362	ACRIDINE	C13H9N	260-94-6	Train	0,80	0,00	Train	6,30	0,00
1363	1,3-PROPANEDIAMINE	C3H10N2	109-76-2	Train	1,81	0,09	Train	10,43	0,18
1364	4,4'-DINITRODIPHENYLAMINE	C12H9N3O4	1821-27-8	Train	0,78	0,02	Train	5,98	0,08

1365	4,4'-DINITROTRIPHENYLAMINE	C18H13N3O4	1100-10-3	Train	0,58	0,08	Train	5,92	1,58
1366	BENZIDINE	C12H12N2	92-87-5	Train	0,87	0,53	Train	5,22	0,58
1367	2,6-TOLUENE DIISOCYANATE	C9H6N2O2	91-08-7	Train	0,84	0,06	Test	8,96	0,84
1368	N-ETHYLANILINE	C8H11N	103-69-5	Train	1,11	0,49	Test	8,17	1,33
1369	DI-tert-BUTYL DISULFIDE	C8H18S2	110-06-5	Train	0,74	0,01	Train	9,45	0,10
1370	DI-tert-BUTYL SULFIDE	C8H18S	107-47-1	Train	0,81	0,01	-	0,00	0,00
1371	2-METHYLTHIACYCLOPENTANE	C5H10S	1795-09-1	Train	1,22	0,06	Train	9,82	0,15
1372	2-PENTANETHIOL	C5H12S	2084-19-7	Train	1,18	0,03	Train	8,70	0,00
1373	METHYL ISOPROPYL SULFIDE	C4H10S	1551-21-9	Train	1,37	0,09	Train	10,89	0,66
1374	2-ETHYL-TETRAHYDROTHIOPHENE	C6H12S	1551-32-2	Test	1,12	0,03	Train	7,72	0,73
1375	2-PROPYLBENZOTHIOPHENE	C11H12S	16587-32-9	Train	0,97	0,24	Test	7,59	0,77
1376	2-BUTYLBENZOTHIOPHENE	C12H14S	17890-53-8	Train	0,86	0,19	Train	6,87	0,68
1377	2-ETHYLTHIOPHENE	C6H8S	872-55-9	Train	1,03	0,18	Train	10,47	3,37
1378	2-n-PROPYLTHIOPHENE	C7H10S	1551-27-5	Train	0,90	0,14	Train	9,05	2,45
1379	ETHYL METHYL DISULFIDE	C3H8S2	20333-39-5	Train	1,60	0,01	Train	17,61	0,59
1380	ETHYL PROPYL DISULFIDE	C5H12S2	30453-31-7	Train	1,22	0,13	Train	11,44	2,06
1381	METHYL PHENYL SULFIDE	C7H8S	100-68-5	Train	1,10	0,01	Test	8,39	0,57
1382	DI-n-BUTYL SULFIDE	C8H18S	544-40-1	Train	0,87	0,05	Train	7,12	0,31
1383	2,7-DIMETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	16587-40-9	Train	1,01	0,20	Train	7,77	0,11
1384	DIISOPENTYLSULFIDE	C10H22S	544-02-5	Test	0,66	0,01	Train	5,55	0,50
1385	DIPHENYL DISULFIDE	C12H10S2	882-33-7	Train	0,64	0,01	Test	5,85	0,66
1386	4-METHYL DIBENZOTHIOPHENE	C13H10S	7372-88-5	Train	0,70	0,04	Test	8,34	0,48
1387	ETHYL PROPYL SULFIDE	C5H12S	4110-50-3	Train	1,34	0,13	Train	10,28	0,47
1388	METHYL PENTYL SULFIDE	C6H14S	1741-83-9	Train	1,04	0,00	Train	8,79	0,24
1389	2-ETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	1196-81-2	Train	1,11	0,30	Train	8,50	0,19
1390	2,3-DIMETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	4923-91-5	Train	1,09	0,28	Train	9,03	0,72
1391	ETHYL n-PENTYL SULFIDE	C7H16S	26158-99-6	Test	0,98	0,06	Train	7,90	0,32
1392	DIISOPROPYL SULFIDE	C6H14S	625-80-9	Train	1,04	0,00	Train	12,20	0,00
1393	2,3-DIMETHYLTHIOPHENE	C6H8S	632-16-6	Train	1,00	0,21	Train	11,32	0,22
1394	3-ETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	31283-14-4	Train	1,11	0,30	Train	8,50	1,47
1395	3,5-DIMETHYLBENZOTHIOPHENE	C10H10S	1964-45-0	Train	1,12	0,31	Test	7,35	1,49
1396	ETHYLENE GLYCOL 2-ETHYLHEXYL ETHER	C10H22O2	1559-35-9	Test	0,70	0,10	-	0,00	0,00
1397	PROPYLENE GLYCOL ETHYL ETHER ACETATE	C7H14O3	54839-24-6	Train	1,14	0,06	Train	9,14	2,96
1398	DIPROPYLENE GLYCOL t-BUTYL ETHER	C10H22O3	132739-31-2	Train	0,70	0,10	-	0,00	0,00
1399	DICHLOROACETIC ACID	C2H2Cl2O2	79-43-6	Train	12,31	0,41	Test	40,27	3,03
1400	DIPROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER	C7H16O3	34590-94-8	Train	0,98	0,12	Train	8,90	2,00
1401	PROPYLENE GLYCOL 1-tert-BUTYL ETHER	C7H16O2	57018-52-7	Train	1,15	0,55	-	0,00	0,00
1402	TRIPROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER	C10H22O4	25498-49-1	Train	0,68	0,12	Train	7,57	0,93
1403	PROPYLENE GLYCOL 2-tert-BUTYL ETHER	C7H16O2	94023-15-1	Train	1,01	0,09	Train	7,20	1,50
1404	DIETHYLENE GLYCOL MONOPROPYL ETHER	C7H16O3	6881-94-3	Train	1,05	0,20	Train	12,08	0,62
1405	p-CHLOROANILINE	C6H6ClN	106-47-8	Train	1,74	0,46	Train	8,66	0,14
1406	PROPYLENE GLYCOL MONOALLYL ETHER	C6H12O2	21460-36-6	Train	1,41	0,22	Train	16,25	1,45
1407	2,3-EPOXY-1-PROPANOL	C3H6O2	556-52-5	Train	2,52	0,38	Test	21,38	3,22
1408	2-HEXOXYETHANOL	C8H18O2	112-25-4	Test	0,91	0,01	Train	8,31	1,69
1409	2-(2-HEXOXYETHOXY)ETHANOL	C10H22O3	112-59-4	Test	0,74	0,06	-	0,00	0,00
1410	MONOOLEIN	C21H40O4	111-03-5	Train	0,39	0,01	Train	3,99	0,89
1411	DIPROPYLENE GLYCOL n-PROPYL ETHER	C9H20O3	29911-27-1	Test	0,86	0,04	-	0,00	0,00
1412	PROPYLENE GLYCOL n-PROPYL ETHER	C6H14O2	1569-01-3	Test	1,41	0,11	Test	13,62	3,02
1413	DIETHYLENE GLYCOL MONOBUTYL ETHER ACETATE	C10H20O4	124-17-4	Train	0,81	0,05	Test	8,09	2,61
1414	3-HYDROXY-2-METHYL PROPIONALDEHYDE	C4H8O2	38433-80-6	Train	1,88	0,22	Train	13,57	0,43
1415	HYDROXYACETONITRILE	C2H3NO	107-16-4	Train	4,22	0,08	Train	22,02	1,48
1416	AMINOACETONITRILE	C2H4N2	540-61-4	Train	3,34	0,06	Train	21,47	2,03
1417	N,N-DIETHYLHYDROXYLAMINE	C4H11NO	3710-84-7	Train	1,76	0,06	Test	12,24	1,04
1418	DI-n-BUTYL SULFATE	C8H18O4S	625-22-9	Train	0,91	0,11	-	0,00	0,00
1419	DIOLEIN	C39H72O5	2465-32-9	Train	0,21	0,01	-	0,00	0,00
1420	TRIOLEIN	C57H104O6	122-32-7	Train	0,14	0,04	-	0,00	0,00
1421	CROTYL GLYCOL ETHER	C6H12O2	52458-04-5	Train	1,29	0,12	Train	10,91	4,39
1422	sec-BUTENYL GLYCOL ETHER	C6H12O2	100524-60-5	Train	1,22	0,07	Train	13,53	2,93
1423	SUCROSE	C12H22O11	57-50-1	Train	0,86	0,06	Train	8,18	1,32

1424	DIETHYLSULFITE	C4H10O3S	623-81-4	Train	1,60	0,00	-	0,00	0,00
1425	TRIPHENYLPHOSPHINE OXIDE	C18H15OP	791-28-6	Train	0,50	0,00	-	0,00	0,00
1426	1,2-ETHANE DIPHOSPHONIC ACID	C2H8O6P2	6145-31-9	Train	2,60	0,00	-	0,00	0,00
1427	BIS-2-CHLOROETHYL-2-CHLOROETHYL PHOSPHONATE	C6H12Cl3O3P	6294-34-4	Train	1,40	0,00	-	0,00	0,00
1428	N-METHYLTHIOPYRROLIDONE	C5H9NS	10441-57-3	Train	1,30	0,00	-	0,00	0,00
1429	PENTAFLUOROETHYL TRIFLUOROVINYL ETHER	C4F8O	10493-43-3	Train	7,51	0,00	Train	26,53	0,73
1430	DIPROPYLENE GLYCOL MONOETHYL ETHER	C8H18O3	30025-38-8	Train	0,97	0,16	Train	12,59	2,90
1431	TRIPROPYLENE GLYCOL MONOETHYL ETHER	C11H24O4	75899-69-3	Test	0,68	0,32	Train	9,92	0,77
1432	1-ETHOXY-2-PROPANOL	C5H12O2	1569-02-4	Test	1,74	0,44	-	0,00	0,00
1433	1-tert-BUTOXY-2-[2-(HYDROXY)PROPOXY]PROPANE	C10H22O3	58797-58-3	Test	0,75	0,02	Train	8,13	0,78
1434	METHYL GLYCOLATE	C3H6O3	96-35-5	Train	3,28	0,06	Test	20,06	0,44
1435	tert-BUTYL METHACRYLATE	C8H14O2	585-07-9	Test	0,99	0,03	Test	6,61	0,75
1436	TETRAETHOXSILANE	C8H20O4Si	78-10-4	Train	0,96	0,34	-	0,00	0,00
1437	gamma-AMINOPROPYLTRIETHOXSILANE	C9H23NO3Si	919-30-2	Train	0,78	0,51	-	0,00	0,00
1438	HEXADECAMETHYLCYCLOOCTASILOXANE	C16H48O8Si8	556-68-3	Train	0,41	0,03	-	0,00	0,00
1439	(3-METHYLACRYLOXYPROPYL)TRICHLOROSILANE	C7H11Cl3O2Si	7351-61-3	Train	1,11	1,05	-	0,00	0,00
1440	METHYL DICHLOROSILANE	CH4Cl2Si	75-54-7	Train	3,12	0,28	Train	74,35	12,65
1441	METHYL TRICHLOROSILANE	CH3Cl3Si	75-79-6	Test	5,59	0,49	-	0,00	0,00
1442	VINYLTRICHLOROSILANE	C2H3Cl3Si	75-94-5	Train	3,24	0,24	-	0,00	0,00
1443	3-(TRIETHOXSILYL)PROPIONITRILE	C9H19NO3Si	919-31-3	Train	0,85	0,09	-	0,00	0,00
1444	TRIS(2-METHOXYETHOXY)VINYLSILANE	C11H24O6Si	1067-53-4	Train	0,70	1,30	-	0,00	0,00
1445	METHYL SILICATE	C4H12O4Si	681-84-5	Train	1,94	0,28	Train	31,62	1,12
1446	3-CHLOROPROPYLTRIMETHOXSILANE	C6H15ClO3Si	2530-87-2	Train	1,31	0,84	-	0,00	0,00
1447	[3-(2,3-EPOXYPROXY)PROPYL]TRIMETHOXSILANE	C9H20O5Si	2530-83-8	Train	0,84	0,69	-	0,00	0,00
1448	BIS[3-(TRIMETHOXSILYL)PROPYL]DISULFIDE	C12H30O6S2Si2	35112-74-4	Test	0,57	0,35	-	0,00	0,00
1449	METHYL SILANE	CH6Si	992-94-9	Train	4,30	0,00	-	0,00	0,00
1450	DIMETHYL SILANE	C2H8Si	1111-74-6	Train	1,76	0,94	Train	74,57	8,43
1451	TRIMETHYL SILANE	C3H10Si	993-07-7	Train	1,47	0,17	-	0,00	0,00
1452	DIMETHYLCHLOROSILANE	C2H7ClSi	1066-35-9	Train	1,99	1,31	-	0,00	0,00
1453	TRIMETHYLCHLOROSILANE	C3H9ClSi	75-77-4	Train	1,85	0,05	-	0,00	0,00
1454	DIMETHYLDICHLOROSILANE	C2H6Cl2Si	75-78-5	Train	2,78	0,62	-	0,00	0,00
1455	DECAMETHYLCYCLOPENTASILOXANE	C10H30O5Si5	541-02-6	Train	0,64	0,00	Train	12,31	0,91
1456	DODECAMETHYLCYCLOHEXASILOXANE	C12H36O6Si6	540-97-6	Train	0,54	0,06	-	0,00	0,00
1457	DIPHENYLDICHLOROSILANE	C12H10Cl2Si	80-10-4	Test	0,77	0,04	-	0,00	0,00
1458	DICHLORODIETHYLSILANE	C4H10Cl2Si	1719-53-5	Test	1,58	0,45	-	0,00	0,00
1459	ETHYLBENZENE HYDROPEROXIDE	C8H10O2	3071-32-7	Train	1,13	0,03	Train	8,13	0,37
1460	2,6-DIAMINOTOLUENE	C7H10N2	823-40-5	Train	1,29	0,19	Train	7,70	2,20
1461	ACETOVANILLONE	C9H10O3	498-02-2	Train	1,10	0,10	Train	8,10	0,40
1462	VANILLIN	C8H8O3	121-33-5	Train	1,26	0,06	Train	9,24	0,44
1463	DIGLYCOLIC ACID	C4H6O5	110-99-6	Train	2,65	0,15	Train	23,20	2,90
1464	LEVULINIC ACID	C5H8O3	123-76-2	Train	1,90	0,10	Train	10,52	0,08
1465	MALIC ACID	C4H6O5	6915-15-7	Train	2,61	0,19	Train	15,07	1,73
1466	GUAIACOL	C7H8O2	90-05-1	Train	1,39	0,09	Train	8,52	1,08
1467	ETHYLENE GLYCOL MONOPROPYL ETHER	C5H12O2	2807-30-9	Train	1,44	0,18	Test	13,38	2,42
1468	2-(2-BUTOXYETHOXY)ETHANOL	C8H18O3	112-34-5	Train	0,92	0,07	-	0,00	0,00
1469	m-CHLOROANILINE	C6H6ClN	108-42-9	Test	1,66	0,16	Train	8,65	0,15
1470	4-CHLORO-3-NITROBENZOTRIFLUORIDE	C7H3ClF3NO2	121-17-5	Train	1,94	0,14	Train	10,07	0,03
1471	3-NITROBENZOTRIFLUORIDE	C7H4F3NO2	98-46-4	Train	1,53	0,07	Test	9,73	0,73
1472	TRICHLOROACETALDEHYDE	C2HCl3O	75-87-6	Train	8,14	0,34	Train	13,88	0,82
1473	TRICHLOROACETIC ACID	C2HCl3O2	76-03-9	Train	11,84	0,36	Test	15,75	1,45
1474	CHLOROACETALDEHYDE	C2H3ClO	107-20-0	Train	5,48	0,22	-	0,00	0,00
1475	DICHLOROACETALDEHYDE	C2H2Cl2O	79-02-7	Train	8,69	0,31	Train	29,27	0,27
1476	1-CHLORO-2,4-DINITROBENZENE	C6H3ClN2O4	97-00-7	Test	2,02	0,02	-	0,00	0,00
1477	p-DIMETHYLAMINOBENZALDEHYDE	C9H11NO	100-10-7	Train	1,05	0,05	Train	6,69	0,59
1478	ETHYL CHLOROFORMATE	C3H5ClO2	541-41-3	Train	3,50	0,00	Train	15,56	2,76
1479	METHOXYACETIC ACID	C3H6O3	625-45-6	Train	3,10	0,00	Train	20,20	0,00

1480	METHYL CHLOROFORMATE	C2H3ClO2	79-22-1	Test	6,68	0,02	Train	21,07	4,94
1481	3,4-DICHLOROANILINE	C6H5Cl2N	95-76-1	Train	2,15	0,65	Train	8,91	1,71
1482	1,2-DICHLORO-4-NITROBENZENE	C6H3Cl2NO2	99-54-7	Train	2,31	0,21	Train	10,40	2,00
1483	DEXTROSE	C6H12O6	50-99-7	Train	1,54	0,04	-	0,00	0,00
1484	o-CHLORONITROBENZENE	C6H4ClNO2	88-73-3	Train	1,89	0,42	Train	9,45	0,65
1485	TRIETHYL PHOSPHATE	C6H15O4P	78-40-0	Train	1,20	0,50	Train	9,73	0,27
1486	TRIMETHYL PHOSPHATE	C3H9O4P	512-56-1	Train	2,33	0,13	Train	18,17	0,07
1487	CYCLOHEXANONE OXIME	C6H11NO	100-64-1	Train	1,30	0,00	Train	9,80	0,00
1488	VINYLTRIMETHOXSILANE	C5H12O3Si	2768-02-7	Train	1,52	0,12	Train	18,36	5,58
1489	TRIMETHOXSILANE	C3H10O3Si	2487-90-3	Train	2,40	0,00	Train	11,00	0,00
1490	DIMETHYLDIMETHOXSILANE	C4H12O2Si	1112-39-6	Test	1,84	0,34	-	0,00	0,00
1491	PHENYLTRICHLOROSILANE	C6H5Cl3Si	98-13-5	Train	1,54	0,06	-	0,00	0,00
1492	PHENYLMETHYLDICHLOROSILANE	C7H8Cl2Si	149-74-6	Train	1,21	0,01	-	0,00	0,00
1493	TRIMETHYL SILANOL	C3H10OSi	1066-40-6	Train	1,72	0,27	Train	30,50	3,00
1494	PYRUVIC ACID	C3H4O3	127-17-3	Test	4,04	0,44	Train	14,85	1,75
1495	TRI-o-CRESYL PHOSPHATE	C21H21O4P	78-30-8	Train	0,43	0,03	Train	3,29	0,11
1496	TRIPHENYL PHOSPHATE	C18H15O4P	115-86-6	Train	0,47	0,03	Train	4,36	0,06
1497	BIS(CHLOROMETHYL)ETHER	C2H4Cl2O	542-88-1	Train	6,00	0,50	Test	22,72	0,82
1498	BIS(CYANOETHYL)ETHER	C6H8N2O	1656-48-0	Train	1,35	0,05	Train	14,51	2,11
1499	3-AMINO-1-PROPANOL	C3H9NO	156-87-6	Train	2,20	0,00	Train	10,61	0,01
1500	1-AMINO-2-PROPANOL	C3H9NO	78-96-6	Train	1,88	0,02	Train	11,84	1,44
1501	METHYL CHLOROACETATE	C3H5ClO2	96-34-4	Train	3,92	0,08	Train	13,65	4,85
1502	ETHYL THIOLACETATE	C4H8OS	625-60-5	Train	1,90	0,53	-	0,00	0,00
1503	ACETOACETANILIDE	C10H11NO2	102-01-2	Train	0,89	0,01	Train	6,11	0,01
1504	OXAZOLE	C3H3NO	288-42-6	Train	2,84	0,36	Train	27,32	1,72
1505	ACETANILIDE	C8H9NO	103-84-4	Train	1,07	0,03	Test	7,27	0,37
1506	8-HYDROXYQUINOLINE	C9H7NO	148-24-3	Train	1,02	0,02	Train	7,28	0,28
1507	LACTONITRILE	C3H5NO	78-97-7	Train	2,59	0,11	Train	15,19	2,71
1508	LYSINE	C6H14N2O2	56-87-1	Train	1,13	0,07	Train	9,27	0,83
1509	DIMETHYL SULFATE	C2H6O4S	77-78-1	Train	3,54	0,06	Train	23,20	0,01
1510	DIETHYL SULFATE	C4H10O4S	64-67-5	Train	1,80	0,20	-	0,00	0,00
1511	L-GLUTAMIC ACID	C5H9NO4	56-86-0	Train	1,67	0,03	Test	12,26	0,94
1512	ASCORBIC ACID	C6H8O6	50-81-7	Train	1,69	0,01	Train	14,96	0,46
1513	6-HYDROXYHEXANOIC ACID	C6H12O3	1191-25-9	Train	1,36	0,04	Train	8,88	0,28
1514	LACTIC ACID	C3H6O3	50-21-5	Train	2,64	0,46	Test	16,72	1,28
1515	TARTARIC ACID	C4H6O6	133-37-9	Train	2,38	0,62	Test	20,27	1,57
1516	HYDROXYCAPROIC ACID	C6H12O3	6064-63-7	Train	1,27	0,13	Train	9,35	0,65
1517	2-ETHOXYETHYL ACETATE	C6H12O3	111-15-9	Test	1,41	0,21	Train	11,60	0,90
1518	DIETHYLENE GLYCOL ETHYL ETHER ACETATE	C8H16O4	112-15-2	Train	1,04	0,06	-	0,00	0,00
1519	METHYL CYANOACETATE	C4H5NO2	105-34-0	Train	2,28	0,02	Train	12,91	0,09
1520	3-METHOXYPROPIONITRILE	C4H7NO	110-67-8	Train	2,01	0,11	Train	15,99	0,82
1521	ISOXAZOLE	C3H3NO	288-14-2	Train	2,84	0,24	Train	27,32	1,58
1522	1,4-BENZENEDICARBOXYLIC ACID,BIS(2,3-DIHYDROXYPROPYL)ESTER	C14H18O8	66032-51-7	Train	0,72	0,03	Test	10,64	2,66
1523	ETHYL HYDROGEN SULFATE	C2H6O4S	540-82-9	Train	4,82	0,07	-	0,00	0,00
1524	TEREPHTHALOYL CHLORIDE	C8H4Cl2O2	100-20-9	Train	1,45	0,03	Train	6,72	1,00
1525	1-CHLORO-2-PROPANOL	C3H7ClO	127-00-4	Test	2,39	2,82	Train	13,47	2,27
1526	ACRYLOXY PROPIONIC ACID	C6H8O4	24615-84-7	Train	1,51	0,12	Train	11,29	2,48
1527	tert-BUTYLFORMAMIDE	C5H11NO	2425-74-3	Train	1,44	0,06	Test	8,59	1,11
1528	N-METHYLACETAMIDE	C3H7NO	79-16-3	Train	2,40	0,00	Test	13,90	0,00
1529	THIODIGLYCOL	C4H10O2S	111-48-8	Train	1,66	0,06	-	0,00	0,00
1530	DIMERCAPTOETHYL ETHER	C4H10OS2	2150-02-9	Train	1,39	0,09	-	0,00	0,00
1531	2-MERCAPTOETHANOL	C2H6OS	60-24-2	Test	2,76	0,46	Train	16,85	1,15
1532	ETHYLTHIOETHANOL	C4H10OS	110-77-0	Test	1,65	0,15	-	0,00	0,00
1533	1,2-ETHANEDITHIOL	C2H6S2	540-63-6	Train	1,90	0,00	-	0,00	0,00
1534	DIETHYLETHANOLAMINE	C6H15NO	100-37-8	Train	1,19	0,21	Train	8,92	2,78
1535	METHYLETHANOLAMINE	C3H9NO	109-83-1	Train	2,11	0,09	Test	11,25	3,95
1536	DIMETHYLETHANOLAMINE	C4H11NO	108-01-0	Train	1,63	0,23	Train	11,26	0,94
1537	DIISOPROPANOLAMINE	C6H15NO2	110-97-4	Train	0,93	0,27	Train	8,32	1,48
1538	3-METHOXYISOPROPYLAMINE	C4H11NO	37143-54-7	Train	1,63	0,07	Test	12,52	1,42

1539	ETHYLENE GLYCOL MONOBUTYL ETHER ACETATE	C8H16O3	112-07-2	Train	1,02	0,14	Train	8,59	0,05
1540	ETHYL VANILLIN	C9H10O3	121-32-4	Train	1,08	0,08	Train	8,14	0,34
1541	2-HYDROXYETHYL ACRYLATE	C5H8O3	818-61-1	Train	1,68	0,12	Train	13,30	0,40
1542	2-HYDROXYPROPYL METHACRYLATE	C7H12O3	923-26-2	Train	1,37	0,17	Test	9,93	1,23
1543	ETHYL-3-ETHOXYPROPIONATE	C7H14O3	763-69-9	Train	1,21	0,16	Train	10,18	0,38
1544	BIS-(2-HYDROXYETHYL) TEREPHTHALATE	C12H14O6	959-26-2	Train	0,73	0,07	-	0,00	0,00
1545	2-HYDROXYPROPYL ACRYLATE	C6H10O3	999-61-1	Train	1,64	0,09	Train	13,55	1,45
1546	DI-(2-CHLOROETHOXY)METHANE	C5H10Cl2O2	111-91-1	Test	1,77	0,96	-	0,00	0,00
1547	SACCHARIN	C7H5NO3S	81-07-2	Train	1,27	0,00	Test	12,00	0,00
1548	1-METHYLVINYL ACETATE	C5H8O2	108-22-5	Train	1,75	0,15	Train	10,33	0,33
1549	2-PENTOXYETHANOL	C7H16O2	6196-58-3	Train	1,03	0,02	Train	9,46	1,24
1550	1-CHLORO-3-PROPANOL	C3H7ClO	627-30-5	Test	2,76	0,27	Train	13,75	1,06
1551	TRIFLUOROACETAMIDE	C2H2F3NO	354-38-1	Train	6,25	0,21	-	0,00	0,00
1552	METHOXYACETONE	C4H8O2	5878-19-3	Test	2,24	0,24	Train	12,88	0,42
1553	DILACTIDE (dl)	C6H8O4	95-96-5	Train	1,49	0,14	Train	8,29	1,66
1554	STIGMASTEROL	C29H48O	83-48-7	Train	0,29	0,02	-	0,00	0,00
1555	2-(2-PENTOXYETHOXY)ETHANOL	C9H20O3	18912-81-7	Train	0,82	0,39	Train	8,84	2,16
1556	METHYL-4-FORMYLBENZOATE	C9H8O3	1571-08-0	Train	1,03	0,07	Train	7,43	1,38
1557	HYDROXYPIVALYL HYDROXYPIVALATE	C10H20O4	1115-20-4	Train	0,78	0,03	Train	5,75	0,12
1558	TETRAETHYLENE GLYCOL MONOBUTYL ETHER	C12H26O5	1559-34-8	Test	0,63	0,02	Train	8,83	3,07
1559	METHYL para-TOLUATE	C9H10O2	99-75-2	Test	1,00	0,00	Train	6,76	2,74
1560	PHENYL ACETATE	C8H8O2	122-79-2	Train	1,07	0,07	Train	8,20	0,50
1561	4-[(TETRAHYDRO-2-FURANYL)OXY]-1-BUTANOL	C8H16O3	64001-06-5	Train	0,99	0,02	Train	10,70	0,73
1562	PROPYLENE GLYCOL n-BUTYL ETHER	C7H16O2	5131-66-8	Train	1,18	0,08	-	0,00	0,00
1563	DIPROPYLENE GLYCOL n-BUTYL ETHER	C10H22O3	29911-28-2	Train	0,77	0,17	-	0,00	0,00
1564	MONOBUTYL SULFATE	C4H10O4S	15507-13-8	Train	2,09	0,37	-	0,00	0,00
1565	TRIETHYLENE GLYCOL BIS(2-ETHYLHEXANOATE)	C22H42O6	94-28-0	Train	0,36	0,17	-	0,00	0,00
1566	4,6-DINITRO-o-sec-BUTYLPHENOL	C10H12N2O5	88-85-7	Train	0,66	0,25	Train	9,02	0,13
1567	t-BUTYL ACETOACETATE	C8H14O3	1694-31-1	Train	0,98	0,26	Train	6,13	0,15
1568	TRIETHYLENE GLYCOL n-PROPYL ETHER	C9H20O4	23305-64-8	Train	0,83	0,04	Train	11,03	1,57
1569	TRIETHYLENE GLYCOL n-HEXYL ETHER	C12H26O4	25961-89-1	Train	0,62	0,03	Train	7,43	3,27
1570	1,3-DIMETHYL UREA	C3H8N2O	96-31-1	Train	2,24	0,00	Train	15,60	0,00
1571	MONOMETHYL UREA	C2H6N2O	598-50-5	Train	3,19	0,00	Test	22,20	0,00
1572	BIS-(2-AMINOETHYL)ETHER	C4H12N2O	2752-17-2	Test	1,48	0,12	Train	14,86	2,24
1573	4-(2-AMINOETHYL)MORPHOLINE	C6H14N2O	2038-03-1	Train	1,08	0,22	-	0,00	0,00
1574	N-ETHYLMORPHOLINE	C6H13NO	100-74-3	Train	1,17	0,17	Train	11,47	1,67
1575	PROPYLENE GLYCOL alpha-METHYLBENZYL ETHER	C11H16O2	871518-84-2	Train	0,85	0,08	-	0,00	0,00
1576	2-(alpha-METHYLBENZYLOXY)-1-PROPANOL	C11H16O2	857237-25-3	Train	0,77	0,00	Test	5,88	0,41
1577	METHYL-3-MERCAPTOPROPIONATE	C4H8O2S	2935-90-2	Test	1,86	0,17	Train	13,81	2,39
1578	MONOMETHYL TEREPHTHALATE	C9H8O4	1679-64-7	Train	1,01	0,99	-	0,00	0,00
1579	ETHYL LEVULINATE	C7H12O3	539-88-8	Test	1,30	0,21	Train	8,35	1,05
1580	SUCROSE ACETATE ISOBUTYRATE	C40H62O19	126-13-6	Train	0,13	0,48	-	0,00	0,00
1581	4-(2-METHOXYETHYL)MORPHOLINE	C7H15NO2	10220-23-2	Train	1,03	0,05	Train	11,18	0,58
1582	4-(2-HYDROXYETHYL)MORPHOLINE	C6H13NO2	622-40-2	Train	1,18	0,14	Test	11,21	4,69
1583	1-n-NONYLNAPHTHALENE	C19H26	26438-26-6	Train	0,41	0,10	Train	3,93	1,08
1584	1-n-DECYLNAPHTHALENE	C20H28	26438-27-7	Train	0,39	0,09	Train	3,79	1,07
1585	2-ETHYLHEXANAL	C8H16O	123-05-7	Train	0,93	0,08	Train	7,59	0,99
1586	trans-CROTONALDEHYDE	C4H6O	123-73-9	Train	2,25	0,15	Train	15,70	0,20
1587	p-TOLUALDEHYDE	C8H8O	104-87-0	Train	1,18	0,04	Train	7,34	0,64
1588	gamma-BUTYROLACTONE	C4H6O2	96-48-0	Train	2,06	0,06	-	0,00	0,00
1589	2-PENTANOL	C5H12O	6032-29-7	Train	1,38	0,18	Train	9,08	0,08
1590	2-METHYL-2-BUTANOL	C5H12O	75-85-4	Train	1,47	0,27	Train	9,68	0,68
1591	2-HEXANOL	C6H14O	626-93-7	Test	1,16	0,13	Train	8,02	0,01
1592	3-METHYL-2-BUTANOL	C5H12O	598-75-4	Train	1,38	0,18	Train	8,85	2,05
1593	1-HEPTANOL	C7H16O	111-70-6	Train	1,06	0,06	Train	7,28	0,08
1594	2-HEPTANOL	C7H16O	543-49-7	Train	1,00	0,16	Train	7,22	0,28
1595	1-OCTANOL	C8H18O	111-87-5	Train	0,93	0,09	Train	6,63	0,23

1596	2-OCTANOL	C8H18O	123-96-6	Test	0,88	0,08	Train	6,58	0,82
1597	1-NONANOL	C9H20O	143-08-8	Test	0,83	0,15	Train	6,10	0,00
1598	2-NONANOL	C9H20O	628-99-9	Test	0,79	0,11	Train	6,06	0,58
1599	1-UNDECANOL	C11H24O	112-42-5	Test	0,68	0,24	Train	5,30	0,10
1600	1-DODECANOL	C12H26O	112-53-8	Train	0,62	0,26	Train	4,99	0,11
1601	1-TRIDECANOL	C13H28O	112-70-9	Test	0,57	0,03	Train	4,72	0,28
1602	1-TETRADECANOL	C14H30O	112-72-1	Train	0,53	0,03	Train	4,48	0,52
1603	1-PENTADECANOL	C15H32O	629-76-5	Test	0,50	0,00	Test	4,28	0,92
1604	1-HEXADECANOL	C16H34O	36653-82-4	Test	0,46	0,25	Train	4,10	0,90
1605	1-HEPTADECANOL	C17H36O	1454-85-9	Train	0,44	0,04	Train	3,93	1,07
1606	1-OCTADECANOL	C18H38O	112-92-5	Train	0,41	0,01	Train	3,79	1,21
1607	1-EICOSANOL	C20H42O	629-96-9	Train	0,37	0,03	Train	3,54	1,46
1608	1-NONANOL	C19H40O	1454-84-8	Test	0,39	0,01	Train	3,66	1,34
1609	BENZYL ALCOHOL	C7H8O	100-51-6	Train	1,26	0,04	Test	9,78	1,42
1610	p-HYDROQUINONE	C6H6O2	123-31-9	Test	1,60	0,40	-	0,00	0,00
1611	NEOPENTYL GLYCOL	C5H12O2	126-30-7	Train	1,43	0,09	-	0,00	0,00
1612	TRIMETHYLOLPROPANE	C6H14O3	77-99-6	Test	1,21	0,09	Train	7,66	2,05
1613	OXALIC ACID	C2H2O4	144-62-7	Train	8,03	0,47	Train	29,16	1,84
1614	p-TOLUIC ACID	C8H8O2	99-94-5	Train	1,15	0,00	Train	7,76	0,31
1615	ADIPIC ACID	C6H10O4	124-04-9	Train	1,54	0,06	Train	9,98	0,93
1616	TEREPHTHALIC ACID	C8H6O4	100-21-0	Train	1,18	0,51	-	0,00	0,00
1617	ACETIC ANHYDRIDE	C4H6O3	108-24-7	Train	2,70	0,00	Train	11,14	1,14
1618	DIMETHYL TEREPHTHALATE	C10H10O4	120-61-6	Test	0,89	0,09	-	0,00	0,00
1619	METHYL tert-BUTYL ETHER	C5H12O	1634-04-4	Test	1,46	0,23	Test	9,30	0,90
1620	tert-BUTYL ETHYL ETHER	C6H14O	637-92-3	Test	1,23	0,20	Train	8,87	2,12
1621	ETHYL CHLORIDE	C2H5Cl	75-00-3	Train	4,34	0,54	Train	18,49	3,09
1622	PROPYL CHLORIDE	C3H7Cl	540-54-5	Train	2,73	0,13	Train	14,16	3,06
1623	n-BUTYL CHLORIDE	C4H9Cl	109-69-3	Train	1,99	0,19	Train	11,55	1,45
1624	1-CHLOROPENTANE	C5H11Cl	543-59-9	Train	1,57	0,17	Train	9,81	1,21
1625	ETHYL FLUORIDE	C2H5F	353-36-6	Train	3,74	0,59	Train	17,89	0,39
1626	BROMOETHANE	C2H5Br	74-96-4	Train	5,08	1,72	-	0,00	0,00
1627	1-BROMOPROPANE	C3H7Br	106-94-5	Train	3,00	1,60	-	0,00	0,00
1628	1-BROMOBUTANE	C4H9Br	109-65-9	Train	2,13	0,47	-	0,00	0,00
1629	1-BROMOHEPTANE	C7H15Br	629-04-9	Train	1,14	0,34	Test	7,49	1,55
1630	n-PROPYL IODIDE	C3H7I	107-08-4	Train	1,67	0,00	Train	10,63	0,37
1631	ACRYLONITRILE	C3H3N	107-13-1	Train	2,63	0,42	Train	15,42	1,58
1632	BENZONITRILE	C7H5N	100-47-0	Train	1,17	0,27	Train	11,79	0,21
1633	CYANOGEN	C2N2	460-19-5	Train	6,10	0,50	Train	30,65	1,35
1634	ETHYL n-OCTYL SULFIDE	C10H22S	3698-94-0	Train	0,70	0,03	Train	5,99	0,33
1635	BENZOTHIOPHENE	C8H6S	95-15-8	Train	1,83	1,27	-	0,00	0,00
1636	2-METHYL BENZOTHIOPHENE	C9H8S	1195-14-8	Train	1,43	0,52	-	0,00	0,00
1637	alpha-METHYLBENZYL ALCOHOL	C8H10O	98-85-1	Train	1,13	0,04	Train	8,74	0,02
1638	AZELAIC ACID	C9H16O4	123-99-9	Train	0,95	0,01	Test	6,98	0,32
1639	PIMELIC ACID	C7H12O4	111-16-0	Train	1,28	0,02	Train	8,69	0,49
1640	SUBERIC ACID	C8H14O4	505-48-6	Train	1,09	0,01	Train	7,73	0,53
1641	SEBACIC ACID	C10H18O4	111-20-6	Train	0,83	0,03	Train	6,41	0,41
1642	SUCCINIC ACID	C4H6O4	110-15-6	Train	2,99	0,39	Train	14,20	0,21
1643	GLUTARIC ACID	C5H8O4	110-94-1	Train	1,95	0,05	Test	11,79	0,29
1644	n-HEXYL IODIDE	C6H13I	638-45-9	Train	0,99	0,01	Train	7,26	0,70
1645	n-BUTYL IODIDE	C4H9I	542-69-8	Train	1,36	0,00	Test	9,16	0,11
1646	TRIETHYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER	C7H16O4	112-35-6	Train	1,07	0,03	Train	14,47	2,17
1647	2-ACETOACETOXY ETHYL METHACRYLATE	C10H14O5	21282-97-3	Train	0,87	0,16	Train	5,72	0,02
1648	METHYL LACTATE	C4H8O3	547-64-8	Train	2,12	0,08	Train	12,15	2,30
1649	2-METHYL-, 3-HYDROXY-2,2,4-TRIMETHYLPENTYL PROPANOATE	C12H24O3	77-68-9	Train	0,60	0,15	Train	4,61	0,41
1650	MALONIC ACID	C3H4O4	141-82-2	Train	3,90	0,00	Train	25,00	0,00
1651	1-BROMODODECANE	C12H25Br	143-15-7	Train	0,64	0,37	Train	5,07	0,96
1652	PROPYLENE GLYCOL MONOMETHYL ETHER	C4H10O2	107-98-2	Train	2,28	0,38	-	0,00	0,00
1653	TRIETHYLENE GLYCOL n-BUTYL ETHER	C10H22O4	143-22-6	Train	0,75	0,05	Train	9,45	2,45
1654	TRIETHYLENE GLYCOL MONOETHYL ETHER	C8H18O4	112-50-5	Test	0,94	0,06	Train	13,35	0,05

1655	HEXACOSAMETHYLDODECASILOXANE	C ₂₆ H ₇₈ O ₁₁ Si ₁₂	2471-08-1	Train	0,26	0,04	-	0,00	0,00
1656	TETRADECAMETHYLHEXASILOXANE	C ₁₄ H ₄₂ O ₅ Si ₆	107-52-8	Train	0,46	0,07	Test	8,25	0,89
1657	CITRIC ACID	C ₆ H ₈ O ₇	77-92-9	Train	2,04	0,16	Train	10,58	1,12
1658	ETHYL LACTATE	C ₅ H ₁₀ O ₃	97-64-3	Train	1,65	0,05	Train	10,22	1,18
1659	METHYL ACETOACETATE	C ₅ H ₈ O ₃	105-45-3	Train	1,69	0,11	Train	9,14	1,14
1660	ETHYL ACETOACETATE	C ₆ H ₁₀ O ₃	141-97-9	Train	1,37	0,03	Test	8,07	1,43
1661	2-METHYL-1-PROPANOL	C ₄ H ₁₀ O	78-83-1	Train	1,74	0,04	Test	9,81	1,19
1662	ETHANOL	C ₂ H ₆ O	64-17-5	Train	3,83	0,53	Train	16,18	2,82
1663	DIETHYL CARBONATE	C ₅ H ₁₀ O ₃	105-58-8	Train	1,66	0,26	Train	12,19	0,49

Résumé

Les propriétés d'inflammabilité sont un problème de sécurité important pour les procédés industriels. Une certaine quantité de données sur ces propriétés pour les composés purs est disponible dans la littérature, mais pour des applications industrielles, il existe différentes combinaisons de carburants dans des conditions standard et non standard dans lesquelles les données des propriétés d'inflammabilité sont rares et parfois indisponibles. Dans le cadre de cette thèse, nous avons effectué des nouvelles méthodes de contribution de groupe pour l'estimation de ces propriétés des composés organiques purs. Méthodes avancées pour le paramètre l'estimation en utilisant une régression robuste et un traitement des valeurs aberrantes ont été appliquées avec précision. Dans l'ensemble, la capacité de prédire les propriétés d'inflammabilités est analysé et testé à partir de la déviation des erreurs et l'incertitude correspondante à la prédiction, En outre, des comparaisons des méthodes utilise avec des autre dans la littérature, qu'elles confirment la puissance de ces méthodes.

Mots clés: Contribution de groupe, Limites d'inflammabilités, Point d'éclair, Point d'auto-inflammation, prédiction.

Abstract

Flammability properties are an important safety issue for industrial processes. An amount of data of these properties for pure compounds is available in the literature, but for industrial applications, there are different combinations of fuels under standard and non-standard conditions in which flammability data are limited and sometimes unavailable. In this thesis, new methods of group contribution for the estimation of these properties of pure organic compounds are developed. These advanced methods for estimating parameter using robust regression and outlier processing were applied accurately. Overall, the ability of prediction of flammability properties is analysed and tested from errors deviations and the uncertainty corresponding to the prediction, In addition, comparisons of the methods used with others in the literature, which they confirm the power of these methods.

Keywords: Group contribution, Flammability limit, Flash point, Auto ignition point, prediction.