

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده مهندسی مکانیک

پایان نامه کارشناسی ارشد

تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی با استفاده از شبکه‌های عصبی

نگارنده: بهنام محسنی قریه صفا

اساتید راهنما

دکتر محمود فرزانه گرد

دکتر علی جباری مقدم

استاد مشاور

مهندس امیر ابراهیمی مقدم

شهریور ۱۳۹۷

شماره: ۳۵/۸۷/۱۸۸
تاریخ: ۹۷/۷/۲

باسمه تعالی



مدیریت تحصیلات تکمیلی

فرم شماره (۳) صورتجلسه نهایی دفاع از پایان نامه دوره کارشناسی ارشد

با نام و یاد خداوند متعال، ارزیابی جلسه دفاع از پایان نامه کارشناسی ارشد آقای بهنام محسنی قریه صفا با شماره دانشجویی ۹۵۱۳۰۸۴ رشته مکانیک گرایش تبدیل انرژی تحت عنوان: تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی با استفاده از شبکه‌های عصبی که در تاریخ ۱۳۹۷/۶/۱۵ با حضور هیأت محترم داوران در دانشگاه صنعتی شاهرود برگزار گردید به شرح ذیل اعلام می‌گردد:

قبول (با درجه: عالی.....) مردود
نوع تحقیق: نظری عملی

امضاء	مرتبه علمی	نام و نام خانوادگی	عضو هیأت داوران
	استاد	دکتر محمود فرزانه گرد	۱- استاد راهنمای اول
	دانشیار	دکتر علی جباری مقدم	۲- استاد راهنمای دوم
	-	مهندس امیر ابراهیمی مقدم	۳- استاد مشاور
	دانشیار	دکتر محمد محسن شاه مردان	۴- نماینده تحصیلات تکمیلی
	استادیار	دکتر محمد ضامن	۵- استاد ممتحن اول
	استادیار	دکتر محمد حسین احمدی	۶- استاد ممتحن دوم

نام و نام خانوادگی رئیس دانشکده: دکتر محمد محسن شاه مردان

تاریخ و امضاء و مهر دانشکده:

تبصره: در صورتی که کسی مردود شود حداکثر یکبار دیگر (در مدت مجاز تحصیل) می‌تواند از پایان نامه خود دفاع نماید (دفاع مجدد نباید زودتر از ۴ ماه برگزار شود).



تقدیم اثر

این پایان نامه را ضمن تشکر و سپاس بیکران و در کمال افتخار تقدیم می نمایم به:

محضر ارز شمنذ پدر و مادر عزیزم به خاطر همه ی تلاش های محبت آمیزی که در دوران مختلف زندگی ام

انجام داده اند و بامهربانی چگونه زیستن را به من آموخته اند.

تشکر و قدردانی

بدین وسیله بر خود لازم می‌دانم از زحمات بی‌دریغ و راهمبانی‌های دلسوزانه اساتید ارجمند جناب آقای دکتر محمود

فرزانه کرد و جناب آقای دکتر علی جباری مقدم که در انجام مراحل مختلف این پایان‌نامه همواره تحقیر را مورد

لطف و راهمبانی قرار دادند، تشکر و قدردانی نمایم.

و با تشکر از جناب آقای مهندس امیر ابراهیمی مقدم و تمام کسانی که مراد این پایان‌نامه راهمبانی کرده‌اند.

این پایان‌نامه با حمایت و پشتیبانی شرکت گاز استان سمنان اجرا شده است. بدین وسیله مراتب قدردانی

خود را ابراز داشته و از بهکاری‌های جناب آقای سعید رسنگار رئیس پژوهش شرکت گاز استان سمنان و جناب

آقای سید کیوان دانشور ناظر پایان‌نامه حاضر در شرکت گاز استان سمنان، تشکر می‌نمایم.

تعمدنامه

اینجانب بهنام محسنی قریه صفا دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته تبدیل انرژی دانشکده مهندسی مکانیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان‌نامه تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی با استفاده از شبکه‌های عصبی تحت راهنمایی آقای دکتر محمود فرزانه گرد و آقای دکتر علی جباری مقدم متعهد می‌شوم.

- تحقیقات در این پایان‌نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است .
- در استفاده از نتایج پژوهش‌های محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است .
- مطالب مندرج در پایان‌نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است .
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه صنعتی شاهرود » و یا « Shahrood University of Technology » به چاپ خواهد رسید .
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان‌نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان‌نامه رعایت می‌گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان‌نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است .
- در کلیه مراحل انجام این پایان‌نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است .

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج ، کتاب ، برنامه های رایانه ای ، نرم افزارها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد . این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود . استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان‌نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی‌باشد.

چکیده

با توجه به اینکه گاز طبیعی مخلوطی از چند عنصر می‌باشد لذا برای تعیین خواص ترمودینامیکی آن بایستی اطلاع دقیقی از ترکیب عناصر موجود در گاز را داشته باشیم. بنابراین در این تحقیق خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی با استفاده از روش شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه محاسبه شده است. برای آموزش شبکه عصبی ابتدا نیاز به یک مجموعه داده می‌باشد که در این تحقیق، داده‌های مورد نیاز شبکه عصبی از استاندارد ISO 20765_1 که به‌روز شده معادله حالت AGA8 می‌باشد استخراج گردیده و سه مجموعه شبکه عصبی توسط این داده‌ها به وجود آمده‌اند به‌گونه‌ای که مجموعه شبکه عصبی اول با ورودی‌های ترکیب گاز و دما و فشار قادر به محاسبه دقیق نه خاصیت ترمودینامیکی اعم از ضریب تراکم‌پذیری، ظرفیت گرمایی ویژه در حجم و فشار ثابت، سرعت صوت، توان آیزنتروپیک، آنتالپی، آنتروپی، انرژی داخلی و ضریب ژول تامسون می‌باشد. مجموعه شبکه عصبی دوم با ورودی‌های کسر مولی، فشار و آنتالپی و مجموعه شبکه عصبی سوم با ورودی‌های کسر مولی، فشار و آنتروپی قادر به محاسبه تمام خواص ترمودینامیکی ذکرشده برای گاز طبیعی می‌باشند. از کاربردهای مجموعه شبکه‌های عصبی آموزش دیده شده می‌توان به محاسبه دقیق نرخ جریان عبوری گاز طبیعی و کالیبره کردن دستگاه‌های جریان‌سنج گاز طبیعی و تحلیل فرآیندهای ترمودینامیکی از قبیل محاسبه دقیق افت دما در شیرهای فشارشکن و توربین‌های انبساطی اشاره کرد.

کلمات کلیدی : گاز طبیعی، خواص ترمودینامیکی، معادله حالت AGA8، روابط ترمودینامیکی، شبکه‌های عصبی مصنوعی

فهرست مقالات مستخرج از پایان نامه:

نویسندگان	نام مجله، سال انتشار	عنوان مقاله
M. Farzaneh-Gord B. Mohseni-Gharyehsafa A. Toikka I. Zvereva	Journal of Natural Gas Science and Engineering, 2018	Sensitivity of natural gas flow measurement to AGA8 or GERG2008 equation of state utilization
A. Ebrahimi-Moghadam B. Mohseni-Gharyehsafa A. Jabari Moghadam M. Farzaneh-Gord Y. Bijarzehi V. Okati	Advances in Engineering and Technology (AET-18-Istanbul), 2018	Prediction of natural gas z-factor by using ANN method

فهرست مطالب

ل	فهرست جداول
م	فهرست اشکال
ع	فهرست علائم
۱	فصل ۱: مقدمه
۲	۱_۱ اهمیت گاز طبیعی
۲	۲_۱ روش‌های تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی
۳	۱_۲_۱ روش‌های آزمایشگاهی
۴	۱_۲_۲ معادلات حالت
۹	۱_۲_۳ روابط تجربی
۱۰	۱_۲_۴ روش‌های هوش مصنوعی
۱۶	۳_۱ معرفی پژوهش حاضر
۱۷	فصل ۲: معادله حالت AGA8 و استاندارد ISO 20765 – 1
۱۸	۱_۲ مقدمه
۱۸	۲_۲ تعاریف اساسی موجود در استاندارد ISO 20765_1
۱۹	۳_۲ اجزای موجود در ترکیب گاز طبیعی
۲۰	۴_۲ تغییرات لازم در معادله AGA8
۲۰	۵_۲ معادلات حاکم در استاندارد ISO 20765_1
۲۰	۱_۵_۲ انرژی آزاد هلمولتز:

۲۱ ۲_۵_۲ انرژی آزاد هلمولتز کاهیده گاز ایده‌آل:
۲۱ ۲_۵_۳ انرژی آزاد هلمولتز کاهیده گاز باقی‌مانده:
۲۵ ۲_۵_۴ خواص ترمودینامیکی
۲۷ ۲_۶ پیاده‌سازی روش
۳۱	فصل ۳: شبکه‌های عصبی مصنوعی
۳۲ ۳_۱ مقدمه
۳۲ ۳_۲ کاربردهای شبکه‌های عصبی مصنوعی
۳۳ ۳_۳ پیشینه تاریخی شبکه‌های عصبی مصنوعی
۳۴ ۳_۴ شبکه‌های عصبی زیستی
۳۶ ۳_۵ نورون عصبی مصنوعی (پرسپترون)
۳۸ ۳_۶ نحوه عملکرد شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه پیشرو
۴۱ ۳_۷ بیان ریاضی عملکرد شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه
۴۳ ۳_۸ مسئله یادگیری
۴۴ ۳_۹ آموزش شبکه عصبی
۴۴ ۱_۹_۳ الگوریتم پس انتشار خطا
۴۶ ۳_۱۰ روش‌های آموزش مرتبه دوم
۴۷ ۳_۱۱ نحوه اجرای شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه
۴۷ ۱_۱۱_۳ پیش‌پردازش داده‌ها
۴۸ ۲_۱۱_۳ شروع آموزش
۴۹ ۳_۱۱_۳ معیارهای توقف شبکه
۵۲ ۳_۱۲ شبکه‌های عصبی آموزش دیده شده در پایان‌نامه

فصل ۴: نتایج

۵۵

- ۵۶..... ۱_۴ معتبرسازی محاسبات
- ۵۷..... ۲_۴ انتخاب بهترین شبکه عصبی
- ۵۷..... ۱_۲_۴ ضریب تشخیص بهینه‌ترین شبکه عصبی
- ۵۸..... ۳_۴ اعتبارسنجی خروجی‌های شبکه عصبی
- ۵۸..... ۱_۳_۴ معتبرسازی خروجی‌های شبکه عصبی **XPT**
- ۷۵..... ۲_۳_۴ معتبرسازی خروجی‌های شبکه‌های عصبی **XPH** ، **XPS**
- ۷۶..... ۴_۴ محاسبه خواص ترمودینامیکی گازهای طبیعی ایران
- ۷۷..... ۱_۴_۴ آنتالپی
- ۷۹..... ۲_۴_۴ انرژی داخلی
- ۸۱..... ۳_۴_۴ سرعت صوت
- ۸۳..... ۴_۴_۴ آنتروپی
- ۸۵..... ۵_۴_۴ ضریب ژول تامسون
- ۸۷..... ۵_۴ کاربردهای شبکه‌های عصبی ایجادشده
- ۸۷..... ۱_۵_۴ دبی‌سنجی در جریان‌سنج‌ها
- ۸۹..... ۲_۵_۴ افت دما در شیرهای فشارشکن
- ۹۱..... ۳_۵_۴ افت دما در توربین‌های انبساطی

۹۵

فصل ۵: نتیجه‌گیری و پیشنهادات

- ۹۶..... ۱_۵ خلاصه مطالب و جمع‌بندی
- ۹۶..... ۲_۵ پیشنهادات

۹۷

۱۰۹

پیوست

مراجع

فهرست جداول

- جدول ۱-۱. روابط تجربی موجود در محاسبه خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی ۱۰
- جدول ۱-۲. درصد مولی اجزای موجود در ترکیب گاز طبیعی ۱۹
- جدول ۲-۲. انواع خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی ۲۵
- جدول ۱-۴. ضریب تشخیص خروجی‌های بهینه‌ترین شبکه عصبی XPS, XPT و XPH به تفکیک نوع داده (a) ۵۷
- جدول ۲-۴. ضریب تشخیص خروجی‌های بهینه‌ترین شبکه عصبی XPS, XPT و XPH به تفکیک نوع داده (b) ۵۸
- جدول ۳-۴. درصد ترکیبات مولی مورد استفاده در محاسبه ضریب تراکم‌پذیری ۵۹
- جدول ۴-۴. مقدار AAPRE(%) روابط موجود در تعیین ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی ۵۹
- جدول ۵-۴. مقدار AAPRE(%) روابط موجود در تعیین ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی (ادامه) ۶۰
- جدول ۶-۴. درصد ترکیبات مولی مورد استفاده در محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت ۶۵
- جدول ۷-۴. درصد ترکیبات مولی مورد استفاده در محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت ۶۶
- جدول ۸-۴. درصد ترکیبات مولی مورد استفاده در محاسبه سرعت صوت ۶۷
- جدول ۹-۴. درصد ترکیبات مولی مورد استفاده در ضریب ژول تامسون ۷۲
- جدول ۱۰-۴. AAPRE(%) خروجی‌های شبکه XPH و XPS ۷۶
- جدول ۱۱-۴. درصد ترکیبات مولی گازهای طبیعی ایران ۷۷

فهرست اشکال

- شکل ۱-۱ روش‌های تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی..... ۳
- شکل ۱-۲ روند محاسبه خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی توسط استاندارد 1 – ISO 20765..... ۳۰
- شکل ۱-۳ شماتیکی از یک نورون بیولوژیکی ساده..... ۳۵
- شکل ۲-۳ ساختار ریاضی یک نورون بیولوژیکی..... ۳۵
- شکل ۳-۳ یک نورون عصبی مصنوعی ساده (پرسپترون)..... ۳۶
- شکل ۴-۳ نحوه ارتباط بین نورون‌های در شبکه‌های عصبی مصنوعی..... ۳۸
- شکل ۵-۳ شماتیکی از شبکه‌های عصبی مصنوعی..... ۴۰
- شکل ۶-۳ تابع سیگموئید یک قطبی..... ۴۱
- شکل ۷-۳ تابع سیگموئید دو قطبی..... ۴۱
- شکل ۸-۳ روند اجرایی شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه با الگوریتم لونیگ-مارکواد..... ۵۱
- شکل ۹-۳ شبکه‌های عصبی ایجاد شده برای تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی..... ۵۳
- شکل ۱-۴ ضریب تراکم‌پذیری برای NG_1 بر حسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۵])..... ۶۰
- شکل ۲-۴ درصد خطای نسبی برای محاسبه ضریب تراکم‌پذیری مخلوط NG_2 (داده‌های آزمایشگاهی [۶۴])..... ۶۱
- شکل ۳-۴ درصد خطای نسبی برای محاسبه ضریب تراکم‌پذیری متان خالص (داده‌های آزمایشگاهی استاندارد NIST [۶۴])..... ۶۲
- شکل ۴-۴ ضریب تراکم‌پذیری برای NG_3 بر حسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۲])..... ۶۳
- شکل ۵-۴ ضریب تراکم‌پذیری برای NG_4 بر حسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۱])..... ۶۴
- شکل ۶-۴ ضریب تراکم‌پذیری برای NG_5 بر حسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۰])..... ۶۵
- شکل ۷-۴ درصد خطای نسبی برای محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت (داده‌های آزمایشگاهی [۶۶])..... ۶۶
- شکل ۸-۴ درصد خطای نسبی برای محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت (داده‌های آزمایشگاهی [۶۷])..... ۶۷
- شکل ۹-۴ سرعت صوت برای NG_1 بر حسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۵])..... ۶۸

شکل ۴-۱۰ سرعت صوت برای NG_7 برحسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۸]) ۶۹

شکل ۴-۱۱ سرعت صوت برای NG_8 برحسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۸]) ۷۰

شکل ۴-۱۲ سرعت صوت برای NG_9 برحسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۹]) ۷۰

شکل ۴-۱۳ سرعت صوت برای NG_10 برحسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۸]) ۷۱

شکل ۴-۱۴ درصد خطای نسبی برای محاسبه ضریب ژول تامسون مخلوط NG_11 (داده‌های تجربی آزمایشگاهی [۷۰]) ۷۲

شکل ۴-۱۵ درصد خطای نسبی برای محاسبه ضریب ژول تامسون برای متان خالص (داده‌های تجربی آزمایشگاهی [۷۰] و استاندارد NIST) ۷۳

شکل ۴-۱۶ درصد خطای نسبی برای محاسبه توان آیزنتروپیک، آنتالپی، آنتروپی و انرژی داخلی متان خالص (استاندارد NIST) ۷۴

شکل ۴-۱۷ آنتالپی مولار ترکیب گاز سرجه در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال ۷۸

شکل ۴-۱۸ آنتالپی مولار برای چهار ترکیب گاز خانگیران، پارس، سرخون و سرجه در حالت دما ثابت ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال ۷۹

شکل ۴-۱۹ انرژی داخلی ترکیب گاز سرخون در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال ۸۰

شکل ۴-۲۰ انرژی داخلی برای چهار ترکیب گاز خانگیران، پارس، سرخون و سرجه در حالت دما ثابت ۲۷۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال ۸۱

شکل ۴-۲۱ سرعت صوت ترکیب گاز سرخون در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال ۸۲

شکل ۴-۲۲ سرعت صوت برای سه ترکیب گاز خانگیران، پارس، سرخون در حالت دما ثابت ۲۵۰ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال ۸۳

شکل ۴-۲۳ آنتروپی ترکیب گاز پارس در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال ۸۴

شکل ۴-۲۴ آنتروپی برای چهار ترکیب گاز خانگیران، پارس، سرخون و سرجه در حالت دما ثابت ۳۰۰ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال ۸۵

شکل ۴-۲۵ ضریب ژول تامسون ترکیب گاز سرجه در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال ۸۶

شکل ۴-۲۶ ضریب ژول تامسون برای چهار ترکیب گاز خانگیران، پارس، سرخون و سرجه در حالت دما ثابت ۳۰۰ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال ۸۷

شکل ۴-۲۷ دبی جرمی بر واحد سطح برای گازهای خانگیران و پارس در سه حالت دما ثابت ۲۷۰، ۳۰۰ و ۳۳۰ کلوین و در محدوده فشار کاری بین ۴۰۰۰ تا ۷۰۰۰ کیلوپاسکال ۸۹

شکل ۴-۲۸ روند محاسبه افت دما در شیرهای فشارشکن توسط شبکه‌های عصبی ۹۰

شکل ۴-۲۹ افت دما در شیر فشارشکن برای گاز خانگیران در سه دمای اولیه ۲۷۰، ۳۰۰ و ۳۳۰ کلوین و دو فشار ثانویه ۸۰۰ و ۱۲۵۰ کیلوپاسکال ۹۱

شکل ۴-۳۰ افت دما در توربین‌های انبساطی برای گاز پارس در سه بازده آیزنتروپیک ۰/۷۵، ۰/۸۵ و ۰/۹۵ درصد و سه دمای اولیه ۳۲۰، ۳۵۰ و ۳۸۰ کلوین تا فشار ثانویه ۱۲۵۰ کیلوپاسکال ۹۲

شکل ۴-۳۱ روند محاسبه افت دما در توربین‌های انبساطی توسط شبکه‌های عصبی ۹۳

فهرست علائم

توضیح	علامت	ردیف	توضیح	علامت	ردیف
انرژی داخلی مولار (kJ/kmol)	u	۲۴	علائم انگلیسی		
سرعت صوت (m/s)	SoS	۲۵	فشار (kPa)	P	۱
ضریب ژول تامسون (k/kPa)	μ	۲۶	دما (K)	T	۲
دمای کاهیده معکوس	τ	۲۷	حجم مولار (m ³ /mol)	v	۳
توان آیزنتروپیک	κ	۲۸	دمای کاهیده	T _r	۴
چگالی کاهیده	δ	۲۹	فشار کاهیده	P _r	۵
انرژی هلمولتز کاهیده	ϕ	۳۰	ثابت جهانی گازها (kJ/kmol.K)	R	۶
بردار کسر مولی	X	۳۱	ضریب خروج از مرکزیت	ω	۷
ضریب تشخیص	R ²	۳۲	ضریب تراکم پذیری	Z	۸
ریشه میانگین مجذور خطا	RMSE	۳۳	ضریب دوم ویریا (m ³ /kmol)	B	۹
خطای نسبی	Error	۳۴	ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت (kJ/kg.K)	C _p	۱۰
قدر مطلق درصد میانگین خطاهای نسبی	AAPRE	۳۵	ظرفیت گرمایی مولار در فشار ثابت (kJ/kmol.K)	c _p	۱۱
تابع انتقال	TF	۳۶	ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت (kJ/kg.K)	C _v	۱۲
تابع فعال سازی	AF	۳۷	ظرفیت گرمایی مولار در حجم ثابت (kJ/kmol.K)	C _v	۱۳
ماتریس ژاکوبین	J	۳۸	چگالی مخصوص (kg/m ³)	D	۱۴
ماتریس هسین	H	۳۹	چگالی مولار (kmol/m ³)	ρ	۱۵
وزن	W	۴۰	انرژی آزاد هلمولتز (kJ/kmol)	f	۱۶
زیروندها			آنتالپی مخصوص (kJ/kg)	H	۱۷
دمای مرجع بی بعد (L=1K)	L	۴۱	آنتالپی مولار (kJ/kmol)	h	۱۸
قسمت ایده آل	0	۴۲	پارامتر سایز ترکیب (m ³ /kmol) ^{1/3}	K	۱۹
قسمت باقی مانده	r	۴۳	جرم مولی (kg/kmol)	M	۲۰
شماره اجزای گاز طبیعی	i	۴۴	آنتالپی مخصوص (kJ/kg.K)	S	۲۱
دما و فشار مرجع (T ₀ =298.15K، P ₀ =101.325kPa)	θ	۴۵	آنتالپی مولار (kJ/kmol.K)	s	۲۲
شمارنده حالت از ۱ تا ۵۸	n	۴۶	انرژی داخلی مخصوص (kJ/kg)	U	۲۳

توضیح	علامت	ردیف	توضیح	علامت	ردیف
ضریب گاز ایده‌آل در رابطه (۱-۱)	$G_{0,i}$	۶۶	ضرایب استاندارد ISO 20765-1		
ثابت روابط (۲-۱) و (۳-۱)	G_i	۶۷	ضریب روابط (۴-۱) و (۵-۱)	a_n	۴۷
پارامتر جهت‌گیری متقابل دودویی رابطه (۶-۱)	G_{ij}	۶۷	ضریب گاز ایده‌آل در رابطه (۷-۱)	$A_{0,1}$	۴۸
پارامتر جهت‌گیری متقابل دودویی رابطه (۸-۱)	G_{ij}^*	۶۸	ضریب گاز ایده‌آل در رابطه (۹-۱)	$A_{0,2}$	۴۹
ضریب گاز ایده‌آل در رابطه (۱۰-۱)	$H_{0,i}$	۷۰	ضریب گاز واقعی در رابطه (۱۱-۱)	b_n	۵۰
ضریب گاز ایده‌آل در رابطه (۱۲-۱)	$I_{0,i}$	۷۱	ضریب گاز ایده‌آل در رابطه (۱۳-۱)	$B_{0,i}$	۵۱
ضریب گاز ایده‌آل در رابطه (۱۴-۱)	$J_{0,i}$	۷۲	پارامتر تقابل دودویی در رابطه (۱۵-۱)	B_{nij}^*	۵۲
ثابت معادله AGA8 در رابطه (۱۶-۱)	k_n	۷۳	ضریب گاز واقعی در رابطه (۱۷-۱)	c_n	۵۳
پارامتر سائز اجزاء در رابطه (۱۸-۱) و (۱۹-۱)	K_i	۷۴	ضریب گاز ایده‌آل در رابطه (۲۰-۱)	$C_{0,i}$	۵۴
پارامتر سائز تقابل دودویی در رابطه (۲۱-۱)	K_{ij}	۷۵	ضریب گاز واقعی در رابطه (۲۲-۱)	C_n	۵۵
جرم مولی اجزاء	M_i	۷۶	ضریب گاز ایده‌آل در رابطه (۲۳-۱)	$D_{0,i}$	۵۶
ضریب روابط (۲۴-۱) و (۲۵-۱)	q_n	۷۷	پارامتر انرژی در روابط (۲۶-۱) و (۲۷-۱)	E_i	۵۷
ضریب روابط (۲۸-۱) و (۲۹-۱)	Q_i	۷۸	ضریب گاز ایده‌آل در رابطه (۳۰-۱)	$E_{0,i}$	۵۸
ضریب رابطه (۳۱-۱)	s_n	۷۹	پارامتر تقابل دودویی در رابطه (۳۲-۱)	E_{ij}	۵۹
ضریب دوقطبی رابطه (۳۳-۱)	S_i	۸۰	پارامتر تقابل دودویی در رابطه (۳۴-۱)	E_{ij}^*	۶۰
ثابت معادله AGA8 در رابطه (۳۵-۱)	u_n	۸۱	ضریب روابط (۳۶-۱) و (۳۷-۱)	f_n	۶۱
ضریب دودویی رابطه (۳۸-۱)	V_{ij}	۸۲	پارامتر دما بالا در رابطه (۳۹-۱)	F_i	۶۲
ضریب رابطه (۴۰-۱)	w_n	۸۳	ضریب گاز ایده‌آل در رابطه (۴۱-۱)	$F_{0,i}$	۶۳
ضریب انجمنی رابطه (۴۲-۱)	W_i	۸۴	ضریب روابط (۴۳-۱) و (۴۴-۱)	g_n	۶۴
مقادیر ضرایب در استاندارد ISO 270765-1 و همچنین پیوست آخر پایان‌نامه موجود می‌باشد			ثابت رابطه (۴۵-۱)	G	۶۵

فصل ۱ : مقدمه

۱-۱ اهمیت گاز طبیعی

گاز طبیعی به‌عنوان یک سوخت فسیلی در طی میلیون‌ها سال از مدفون شدن بقایای گیاهان و جانوران در اعماق زمین تحت فشارهای بالا به دست می‌آید که عمدتاً از مولکول‌های هیدروژن و کربن شامل متان و اتان و بوتان و پنتان و سایر هیدروکربن‌ها تشکیل شده است. در حال حاضر صنعت گاز طبیعی به‌عنوان سریع‌ترین مولفه انرژی در حال رشد در جهان می‌باشد به‌نحوی که مصرف گاز طبیعی از سال ۲۰۰۱ تا ۲۰۲۵ با تخمینی که انجام شده است حدود ۲/۸٪ افزایش می‌یابد که این نرخ برای سایر سوخت‌های فسیلی از قبیل نفت ۱/۸٪ و زغال سنگ ۱/۵٪ است [۱].

گاز طبیعی دارای مصارف گوناگونی می‌باشد که به‌صورت کلی می‌توان به صنعت حمل و نقل، صنعت تولید برق و مصارف صنعتی، سرمایش و گرمایش و... اشاره کرد. یکی از دلایل رشد روزافزون گاز طبیعی، پاک بودن این سوخت است که این به دلیل درصد پایین کربن و نیتروژن در ساختار گاز طبیعی نسبت به سایر منابع فسیلی می‌باشد. به‌عنوان مثال در صنعت حمل و نقل، ماشین‌هایی که با سوخت گاز طبیعی کار می‌کنند نسبت به ماشین‌هایی که دیزلی یا بنزینی می‌باشند حدود ۷۰٪ کربن مونواکسید و ۸۷٪ NOx کمتری را به جو انتقال می‌دهند [۲].

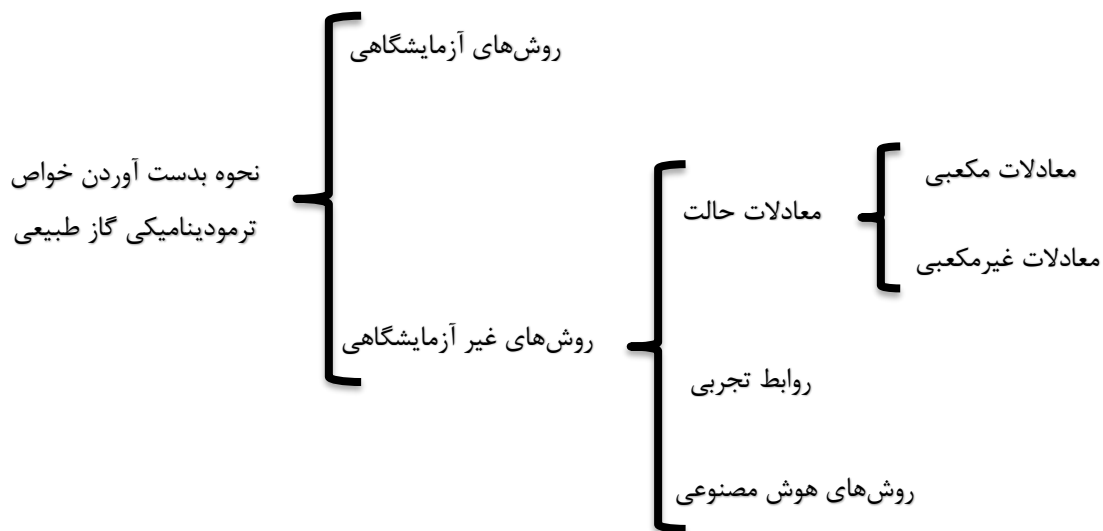
با توجه به رشد روزافزون گاز طبیعی در بخش‌های حساس و استراتژیک و در نظر گرفتن این نکته که میهن عزیزمان ایران، دارای دومین منبع از ذخایر اثبات شده گاز طبیعی و اولین منبع ذخایر گاز طبیعی اثبات نشده می‌باشد، توجه به این صنعت کمک عظیمی در رشد و بالندگی این مرز و بوم دارد. برای بهره‌برداری بیشتر از گاز طبیعی نیاز است که از خواص ترمودینامیکی^۱ آن اطلاع جامع و کامل موجود باشد به‌نحوی که نداشتن علم کافی در مورد خواص این انرژی خدادادی، باعث هدر رفت منابع و سرمایه‌های بسیاری می‌گردد.

۱-۲ روش‌های تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی

با داشتن خواص ترمودینامیکی هر ماده‌ای می‌توان به حالت آن ماده پی‌برد. در حالت کلی با داشتن دو خاصیت مستقل ترمودینامیکی از یک ماده خالص می‌توان تمام اطلاعات ترمودینامیکی آن را محاسبه کرد، اما از آنجایی که گاز طبیعی مخلوطی از چند ماده مختلف است، به‌نحوی که می‌تواند از یک ماده یعنی متان خالص تا بیش از ۲۱ ماده تشکیل شود، علاوه بر دو خاصیت مستقل، باید از ترکیب و درصد مولی اجزای تشکیل‌دهنده آن جهت به دست آوردن خواص ترمودینامیکی اطلاع داشته باشیم. ترکیبات گاز طبیعی با توجه به منطقه استحصال و شرایط آب و هوایی تغییرات زیادی می‌کند، بنابراین خاصیت گاز طبیعی وابستگی بسیار شدیدی به ترکیب و عناصر تشکیل‌دهنده آن دارد.

^۱ Thermodynamic properties

برای بدست آوردن خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی راه‌های متفاوتی وجود دارد که در یک دسته‌بندی کلی می‌توان همانند شکل ۱-۱ به دو دسته آزمایشگاهی و غیر آزمایشگاهی اشاره کرد که در روش‌های غیر آزمایشگاهی، یک رابطه ریاضی بین دما و فشار ترکیب گاز و خاصیت ترمودینامیکی ارائه می‌شود. هر کدام از این روش‌ها دارای مزایا و معایبی می‌باشند که به تفصیل به بیان آنها خواهیم پرداخت.



شکل ۱-۱ روش‌های تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی

۱_۲_۱ روش‌های آزمایشگاهی

روش‌های آزمایشگاهی از دقت بسیار بالایی برای محاسبه خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی برخوردار هستند اما باید به این نکته توجه کرد که بعضی از خواص از قبیل انرژی داخلی^۱، آنترופی^۲ و آنتالپی^۳ قابل اندازه‌گیری نبوده و باید به صورت ریاضی محاسبه شوند و نمی‌توان این قبیل خواص را با دستگاهی اندازه‌گیری کرد و از طرفی دیگر روش‌های آزمایشگاهی بسیار گران و زمان‌بر می‌باشند و علاوه بر این موارد، وسایل اندازه‌گیری خواص، باید به طور دوره‌ای تعمیر و نگهداری و کالیبره شوند که این نیز مستلزم صرف هزینه و زمان است. برای همین محققین صنعت گاز همواره در پی یافتن راهی برای محاسبه خواص با دقت بالا بدون استفاده از وسایل اندازه‌گیری می‌باشند.

^۱ Internal energy

^۲ Entropy

^۳ Enthalpy

۱_۲_۲ معادلات حالت

معادله حالت^۱، یک رابطه ریاضی بین سه خاصیت دما، فشار و حجم است که تاکنون بیش از صد نوع معادله حالت توسعه و معرفی شده‌اند. ساده‌ترین معادله حالت، معادله حالت گاز ایده‌آل بوده که به صورت زیر می‌باشد:

$$Pv = RT \quad (1-1)$$

که در معادله بالا P فشار، v حجم بر واحد مول، R ثابت جهانی گازها و T دما می‌باشد. این معادله در فشارهای پایین و دماهای بالا قادر به جوابگویی است اما در حالتی که گاز در فشار بالا و دمای پایین باشد به دلیل داشتن خطای زیاد، قابل استفاده نمی‌باشد. از این رو نیاز به اصلاح و به دست آوردن معادله‌ای جدید برای کسب نتایج دقیق احساس می‌شد، که در سال ۱۸۷۳ میلادی واندروالس^۲ نشان داد که مولکول‌های گاز در یک حجم معین، نیروهای جاذبه و دافعه‌ای به یکدیگر وارد می‌کنند که از قانون گازهای ایده‌آل پیروی نکرده و به این دلیل اولین معادله حالت برای گازهای حقیقی را ارائه کرد. معادلات حالت گازهای حقیقی در حالت کلی به دو صورت مکعبی^۳ و غیرمکعبی^۴ تقسیم‌بندی می‌شوند که در معادلات مکعبی ضریب تراکم‌پذیری به صورت یک چندجمله‌ای درجه سه به فرم کلی رابطه (۲-۱) می‌باشد.

$$Z^3 - AZ^2 + BZ - C = 0 \quad (2-1)$$

در ادامه، بیشتر به بررسی معادلات حالتی که برای محاسبه خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی در منابع استفاده می‌شود پرداخته خواهد شد.

۱_۲_۲_۱ معادله حالت واندروالس

اولین معادله حالت درجه سه توسط واندروالس، به صورت زیر ارائه گردیده است [۳]:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v^2} \quad (3-1)$$

که ترم‌های a و b بیانگر جاذبه^۵ و دافعه^۶ بین مولکول‌های گاز می‌باشد. برای محاسبه این دو ثابت با اعمال شرایط نقطه بحرانی^۷ داریم:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v}\right)_c = \left(\frac{\partial^2 P}{\partial v^2}\right)_c = 0 \quad (4-1)$$

با اعمال شرایط بحرانی در رابطه (۳-۱)، ضرایب a و b به صورت زیر تعریف می‌شوند:

^۱ Equation of state

^۲ Van der waals

^۳ Cubic

^۴ non-cubic

^۵ attraction

^۶ repulsive

^۷ Critical point

$$a = \frac{9RT_c v_c}{8} \quad (5-1)$$

$$b = \frac{v_c}{3} \quad (6-1)$$

$$P_c = \frac{3RT_c}{8v_c} \quad (7-1)$$

با قراردادن روابط فوق در فرمول (۸-۱)، می‌توان شکل Z-FORM معادله حالت واندروالس را به دست آورد که در آن ضرایب A, B, C به صورت زیر می‌باشند:

$$A = \frac{P_r}{8T_r} + 1 \quad (9-1)$$

$$B = \frac{27P_r}{64T_r^2} \quad (10-1)$$

$$C = \frac{27P_r^2}{512T_r^3} \quad (11-1)$$

تقریباً می‌توان گفت بعد از معادله حالت مکعبی واندروالس، تمام معادلات حالت مکعبی از ریشه واندروالس می‌باشند که با بهبود ضرایب این معادله که اکثراً ضریب ترم جاذبه می‌باشد، توسعه پیدا کرده‌اند.

۱_۲_۲_۲_۲ معادلات حالت RK و RKS

در سال ۱۹۴۹ میلادی، ردلیش و کووانگ^۱ [۴] با بهبود دادن ترم جاذبه در معادله حالت واندروالس، به نتایج بهتری نسبت به معادله واندروالس رسیدند. همچنین سوآو^۲ [۵] در سال ۱۹۷۲ میلادی با در نظر گرفتن ترم جاذبه معادله RK به صورت تابعی از دما و خروج از مرکزیت، دقت این معادله را افزایش داد. شکل کلی معادله RKS به صورت زیر می‌باشد:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a(T)}{v(v + b)} \quad (12-1)$$

که در آن ضرایب b و a(T) به ترتیب به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$b = \sum_{i=1}^N x_i b_i \quad (13-1)$$

$$b_i = 0.08664 \frac{RT_{ci}}{P_{ci}} \quad (14-1)$$

$$a(T) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij}) \quad (15-1)$$

^۱ Redlich-Kwong

^۲ Soave

$$a_i = a_{ci}\alpha_i \quad (16-1)$$

$$a_{ci} = 0.42748 \frac{(RT_{ci})^2}{P_{ci}} \quad (17-1)$$

$$\alpha_i^{0.5} = 1 + m_i(1 - T_{ri}^{0.5}) \quad (18-1)$$

باید به این نکته توجه کرد که در معادله RK، مقدار $a(T)$ به صورت زیر می باشد:

$$a(T) = \frac{1}{\sqrt{T}} \quad (19-1)$$

با توجه به فرمول (18-1)، ضریب m_i تابعی از فاکتور خروج از مرکزیت ω_i است و از طریق رابطه (20-1) محاسبه می شود:

$$m_i = 0.48 + 1.574\omega_i - 0.176\omega_i^2 \quad (20-1)$$

با توجه به روابط بالا و با در نظر گرفتن شرایط نقطه بحرانی که در آن مشتق اول و دوم فشار نسبت به حجم در نقطه بحرانی صفر است، فرم Z_FORM به صورت رابطه (21-1) به دست می آید:

$$Z^3 - Z^2 + (A - B - B^2)Z - AB = 0 \quad (21-1)$$

که در آن ضرایب A و B به صورت روابط (22-1) و (23-1) تعریف می شوند:

$$A = \frac{aP}{(RT)^2} \quad (22-1)$$

$$B = \frac{bP}{RT} \quad (23-1)$$

۱-۲-۳ معادله حالت پنگ رابینسون

پنگ و رابینسون^۱ در سال ۱۹۷۶ با اصلاح ترم جاذبه در معادله حالت RK فرم جدیدی از معادله حالت مکعبی را ارائه کردند که به صورت زیر می باشد [۶]:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a}{v(v + b) + b(v - b)} \quad (24-1)$$

که ضرایب a و b از طریق روابط زیر محاسبه می شوند:

$$b = \sum_{i=1}^N x_i b_i \quad (25-1)$$

$$b_i = 0.077796 \frac{RT_{ci}}{P_{ci}} \quad (26-1)$$

$$a = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i x_j (a_i a_j)^{0.5} (1 - k_{ij}) \quad (27-1)$$

$$a_i = a_{ci}\alpha_i \quad (28-1)$$

^۱ Peng-Robinson

$$a_{ci} = 0.457235 \frac{(RT_{ci})^2}{P_{ci}} \quad (29-1)$$

$$\alpha_i^{0.5} = 1 + m_i(1 - T_{ri}^{0.5}) \quad (30-1)$$

در رابطه (۳۰-۱)، پارامتر m_i که تابعی از خروج از مرکزیت می‌باشد به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$m_i = \begin{cases} 0.37464 + 1.54226\omega_i - 0.26992\omega_i^2 & (31-1) \\ 0.379642 + (1.48506 - (0.164423 - 1.016666\omega_i)\omega_i)\omega_i \end{cases}$$

که عبارت اول برای m_i برای حالات ($\omega_i \leq 0.49$) و عبارت دوم برای حالت ($\omega_i > 0.49$) می‌باشد.

با در نظر گرفتن شرایط نقطه بحرانی، شکل Z_FORM معادله حالت پنگ رایینسون به صورت رابطه (۳۲-۱) حاصل می‌شود:

$$Z^3 + (1 - B)Z^2 + (A - 2B - 3B^2)Z - (AB - B^2 - B^3) = 0 \quad (32-1)$$

که ضرایب A و B به صورت زیر می‌باشند:

$$A = \frac{aP}{(RT)^2} \quad (33-1)$$

$$B = \frac{bP}{RT} \quad (34-1)$$

۱-۲-۴ معادله حالت اشمیت ونزل

در سال ۱۹۸۰، اشمیت و ونزل^۱ یک معادله حالتی به فرم معادله حالت واندروالس را بیان کردند که در آن ترم دافعه معادله واندروالس تغییری نکرده ولی ترم جاذبه آن تغییر یافته به نحوی که به صورت یک چندجمله‌ای درجه دو می‌باشد. معادله اشمیت-ونزل به صورت زیر تعریف می‌شود [۷]:

$$P = \frac{RT}{v - b} - \frac{a_c \alpha}{v^2 + (1 + 3\omega)bv - 3wb^2} \quad (35-1)$$

که در رابطه بالا α تابعی از دما و b مستقل از دما است. معادله حالت اشمیت-ونزل فرم عمومی معادلات حالت PR و RKS می‌باشد به نحوی که اگر ضریب خروج از مرکزیت برابر صفر باشد، معادله اشمیت-ونزل تبدیل به معادله پنگ رایینسون و اگر برابر $1/3$ باشد، تبدیل به معادله RKS خواهد شد.

پارامترهای a_c و b با توجه به صفر بودن مشتق اول و دوم فشار نسبت به حجم در نقطه بحرانی به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$a_c = \Omega_{ac} \frac{R^2 T_c^2}{P_c} \quad (36-1)$$

^۱ Schmidt and Wenzel

$$b = \Omega_b \frac{RT_c}{P_c} \quad (37-1)$$

$$\Omega_{ac} = [1 - \chi(1 - q)]^3 \quad (38-1)$$

$$\Omega_b = \chi q \quad (39-1)$$

که عبارت q و χ به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$q = 0.25989 - 0.0217\omega + 0.00375\omega^2 \quad (40-1)$$

$$\chi = \frac{1}{[3(1 + q\omega)]} \quad (41-1)$$

و همچنین عبارت α برابر است با:

$$\alpha = 1 - (0.4774 + 1.328\omega)\ln T_r \quad (42-1)$$

۱-۲-۲-۵ معادله حالت ویریا

یکی از مشهورترین معادلات حالت غیر مکعبی، معادله حالت ویریا^۱ می‌باشد که این معادله براساس اصول مکانیک آماری بنا نهاده شده است. نسخه اصلی معادله ابتدا توسط اونز^۲ در سال ۱۹۰۱ ارائه شده که به صورت رابطه (۴۳-۱) می‌باشد [۸]:

$$Z = \frac{PV}{RT} = 1 + \frac{B}{v} + \frac{C}{v^2} + \frac{D}{v^3} + \dots \quad (43-1)$$

که در آن B, C, D, \dots به ترتیب ضرایب دوم و سوم و چهارم و ... ویریا می‌باشند. باید توجه کرد که پارامتر B وابسته به تقابل بین دو مولکول و پارامتر C وابسته به اثر متقابل سه مولکول و... است که همه این ضرایب وابسته به دما می‌باشند. معادله حالت ویریا در تئوری یک بسط نامحدود است اما در عمل بیشتر از ضریب سوم محاسبه نمی‌شود. داده‌های بسیاری برای ضریب دوم از مواد مختلف موجود می‌باشد اما برای ضریب سوم ویریا این داده‌ها بسیار محدود است.

برای مواد سبک از قبیل نئون و هیدروژن مقدار ضریب دوم ویریا در دمای اتاق مثبت است ولی برای مولکول‌های سنگین‌تر این مقدار منفی خواهد شد و به دمایی که در آن ضریب دوم ویریا صفر گردد، دمای بویل گویند که در این دما گاز رفتاری دقیقاً مشابه گاز ایده‌آل را دارد.

۱-۲-۲-۶ معادله حالت بندیکت وب روبین

یکی دیگر از معادلات مشهور غیر مکعبی، معادله حالت بندیکت -وب -روبین^۳ می‌باشد که این معادله از بسط تجربی معادله ویریا به دست آمده و به صورت زیر تعریف می‌گردد [۹]:

$$P = RT\rho_M + (B_0RT - A_0 - C_0T^{-2})\rho_M^2 + (bRT - a)\rho_M^6 + cT^{-2}\rho_M^3(1 + \gamma\rho_M^2)\exp(-\gamma\rho_M^2) \quad (44-1)$$

^۱ Virial equation of state

^۲ Onnes

^۳ Benedict-Webb-Rubin

و حالت Z_FORM آن به صورت رابطه (۴۵-۱) حاصل می‌شود:

$$Z = 1 + \frac{B_0 RT - A_0 - C_0/T^2}{RTv} + \frac{bRT - a}{RTv^2} + \frac{a\alpha}{RTv^5} \quad (45-1)$$

$$+ \frac{c}{RT^3 v^2} \left(1 + \frac{\gamma}{v^2}\right) \exp\left(\frac{-\gamma}{v^2}\right)$$

که در آن چگالی مولار است و ثابت‌های معادله، برای هر ماده متفاوت می‌باشد. این معادله برای ترکیبات با چگالی بالا و بیشتر برای فازهای مایع و گاز در نواحی بحرانی و فوق بحرانی کاربرد داشته و اکثراً در صنعت نفت و گاز استفاده می‌گردد.

۱-۲-۲-۱ معادله حالت AGA8

یکی از مهم‌ترین معادله‌های حالت ایجادشده تا کنون، معادله حالت AGA8 می‌باشد. این معادله توسط انجمن گاز آمریکا^۱ پیاده‌سازی و اجرا شده است و به‌روز سانی‌های مختلفی روی آن انجام شده که یکی از این به‌روزرسانی‌ها، استاندارد ISO 20765_1 می‌باشد که درباره‌ی این معادله حالت به‌طور کاملاً مفصل در فصل دوم بحث خواهد شد.

۱-۲-۳ روابط تجربی

روابط تجربی^۲ در تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی، روابطی می‌باشند که با استفاده از روش‌های آماری برآزش نقاط به‌دست‌آمده‌اند بدین صورت که با در نظر گرفتن ورودی‌ها که عمدتاً دما و فشار کاهیده^۳ می‌باشد ($T_r = \frac{T}{T_{\text{Critical point}}}$, $P_r = \frac{P}{P_{\text{Critical point}}}$)، یک مدل ریاضی بر روی داده‌ها برآزش می‌گردد و مجموعه داده‌هایی که برای برآزش استفاده می‌کنند عمدتاً از منابع مشخصی می‌باشند که عبارتند از: نمودارهای استاندینگ^۴ و استاندینگ-کاتز^۵ [۱۰]، داده‌های آزمایشگاهی و معادلات حالات. در ادامه، روابط تجربی معروف در محاسبه خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی که عمدتاً ضریب تراکم‌پذیری می‌باشد که در جدول ۱-۱ ارائه شده است. شایان ذکر است که، هر معادله تجربی دارای ورودی‌های با محدوده مشخص در فرآیند برآزش مطابق جدول ۱-۱ می‌باشد.

^۱ American Gas association

^۲ Empirical correlations

^۳ Reduced temperature and pressure

^۴ Standing

^۵ Standing-Katz

جدول ۱-۱. روابط تجربی موجود در محاسبه خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی

سال	محدوده دمایی و فشاری	روابط تجربی	سال	محدوده دمایی و فشاری	روابط تجربی
۱۹۷۳	$1.05 \leq T_r \leq 3$ $0.2 \leq P_r \leq 30$	درانچاک-پرویز-رابینسون ^۱ [۱۱]	۲۰۱۰	$1.1 \leq T_r \leq 2$ $0.2 \leq P_r \leq 11$	عزیزی و همکاران ^۲ [۱۸]
۱۹۷۳	$1.2 \leq T_r \leq 3$ $0 \leq P_r \leq 15$	هال-یاربورو ^۳ [۱۲]	۲۰۱۰	$1.2 \leq T_r \leq 3$ $0.2 \leq P_r \leq 15$	حیدریان و همکاران ^۴ (a) [۱۹]
۱۹۷۳	$1.15 \leq T_r \leq 2.4$ $0.2 \leq P_r \leq 15$	بگز-بریل ^۵ [۱۳]	۲۰۱۰	$1.2 \leq T_r \leq 3$ $0.2 \leq P_r \leq 15$	حیدریان و همکاران ^۴ (b) [۲۰]
۱۹۷۵	$1 \leq T_r \leq 3$ $0.2 \leq P_r \leq 30$	درانچاک-ابوقاسم ^۶ [۱۴]	۲۰۱۲	$1 \leq T_r \leq 3$ $0.1 \leq P_r \leq 15$	سنجری-لای ^۷ [۲۱]
۱۹۷۹	$1.2 \leq T_r \leq 3$ $0 \leq P_r \leq 15$	پاپ ^۸ [۱۵]	۲۰۱۳	$1 \leq T_r \leq 2.5$ $0 \leq P_r \leq 30$	محمود ^۹ [۲۳]
۲۰۰۳	$1.08 \leq T_r \leq 4.32$ $0.07 \leq P_r \leq 28.47$	شرکت نفتی شل ^{۱۰} [۱۶]	۲۰۱۵	$1.05 \leq T_r \leq 3$ $0.2 \leq P_r \leq 15$	لطیف و همکاران ^{۱۱} [۲۴]
۲۰۰۷	$1.05 \leq T_r \leq 2.4$ $0.2 \leq P_r \leq 16$	بهادری و همکاران ^{۱۲} [۱۷]	۲۰۱۷	$1.1 \leq T_r \leq 2$ $0.2 \leq P_r \leq 15$	عزیزی و بهبهانی ^{۱۳} [۲۵]

۱_۲_۴ روش‌های هوش مصنوعی

در دهه‌های گذشته از مدل‌های شبکه‌های عصبی مصنوعی^{۱۴} در اکثر کاربردهای صنعت نفت و گاز، با توجه به توانایی‌های این مدل استفاده فراوانی شده است. از کاربردهای شبکه‌های عصبی مصنوعی در

^۱ Dranchuk-Purvis-Robinson

^۲ Azizi et al.

^۳ Hall-Yarborough

^۴ Heidaryan et al.(a)

^۵ Beggs-Brill

^۶ Dranchuk-Aboukasssem

^۷ Sanjari-Lay

^۸ Papp

^۹ Mahmoud

^{۱۰} Shell oil company

^{۱۱} Lateef et al.

^{۱۲} Bahadori et al.

^{۱۳} Azizi-Behbahani

^{۱۴} Artificial neural networks

این حوزه می‌توان به تعیین خواص ترمودینامیکی، تحلیل تست‌های چاه‌های نفت، تشخیص شکست لوله‌های پمپاژ، تعیین مکان‌های حفاری و غیره اشاره کرد. در ادامه به هجده مورد از کاربرد روش‌های هوش مصنوعی و شبکه‌های عصبی در تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی پرداخته خواهد شد.

در سال ۱۹۹۳ میلادی نورمندین و همکاران^۱ [۲۶] اولین پژوهش را در زمینه تعیین خواص PVT با استفاده از روش شبکه‌های عصبی انجام دادند. آنها با استفاده از شبکه‌های جلو رونده^۲ و با بهره‌گیری از ۲۰۰۰ داده تجربی حاوی ضریب تراکم‌پذیری گازهای نیتروژن، آرگون، پروپان، کربن دی‌اکسید و آب، دو معادله حالت عصبی را تشکیل داده‌اند که معادله عصبی دوم برای فقط حالت بحرانی و معادله اول برای تمام حالات به غیر از حالت بحرانی می‌تواند ضریب تراکم‌پذیری را براساس دما و فشار بحرانی و ضریب خروج از مرکزیت تخمین بزنند.

مقدسی و همکاران^۳ [۲۷] در سال ۲۰۰۹ میلادی با استفاده از داده‌های تجربی گازهای خالص موجود در هندبوک مهندسان شیمی پری^۴ [۲۸]، سه شبکه عصبی پرسپترون چندلایه^۵ با الگوریتم‌های آموزش لونیگ-مارکواد (LM)^۶، گرادیان توام مقیاس شده (SCG)^۷ و پس انتشار ارتجاعی (RP)^۸ را جهت محاسبه ضریب تراکم‌پذیری گازهای خالص با دو ورودی دما و فشار کاهیده آموزش دادند، که در بین این آموزش‌ها، الگوریتم LM بهترین عملکرد با توجه به میانگین مربعات خطای (MSE)^۹ ۰/۰۰۰۶۰۶ را دارا می‌باشد و همچنین با بررسی داده‌های آموزش داده نشده جهت تست شبکه‌ها، الگوریتم‌های به ترتیب LM، SCG و RP بهترین عملکرد را در این پژوهش از خود نشان داده‌اند.

در سال ۲۰۱۰ میلادی کامیاب و همکاران^{۱۰} [۲۹] با استفاده از نمودارهای استاندینگ-کاتز و کاتز^{۱۱} اقدام به آموزش دو شبکه عصبی پرسپترون چندلایه با دو لایه مخفی کرده که در شبکه اول ۵ نورون^{۱۲} در هر لایه و در شبکه دوم ۱۰ نورون در هر لایه مخفی با ورودی‌های دما و فشار کاهیده می‌باشد و با مقایسه نتیجه شبکه‌های عصبی و رابطه تجربی درانچاک-ابوقاسم با داده‌هایی که در فرآیند آموزش شرکت نکرده‌اند به این نتیجه رسیدند که شبکه‌های عصبی توانایی بیشتری نسبت به

^۱ Normandin et al.

^۲ Feedforward

^۳ Moghadassi et al.

^۴ Perry's Chemical Engineers' Handbook

^۵ Multi-layer perceptron neural networks

^۶ Levenberg-Marquardt

^۷ Scaled Conjugate Gradient

^۸ Resilient Backpropagation

^۹ Mean Square Error

^{۱۰} Kamyab et al.

^{۱۱} Katz

^{۱۲} Neuron

معادله تجربی مذکور داشته و در بین شبکه‌های عصبی، شبکه 1-10-10-2 بهتر از شبکه 1-5-5-2 می‌تواند ضریب تراکم‌پذیری را پیش‌بینی کند.

الانازی و القریشی^۱ در سال ۲۰۱۰ میلادی [۳۰] با به‌کارگیری برنامه‌نویسی ژنتیک^۲ اقدام به مدل‌سازی ضریب تراکم‌پذیری با استفاده از ۹۷۷ داده تجربی از دما و فشار کاهیده گاز طبیعی نمودند. از این مجموعه داده تجربی، حدود ۳۰۰ داده را برای آموزش و اعتبار سنجی و مابقی را برای تست به‌کاربرده که حدوداً ۱۰۰۰ نسل^۳ با ماکزیمم ۵۰۰ جمعیت^۴ برای آموزش برنامه استفاده شده است. آنها نتایج مدل خود را با ۴ معادله حالت واندروالس، ردلیش کووانگ، پنگ رابینسون و لوال-لیک-سیلبرگ^۵ [۳۱] و ۶ معادله تجربی درانچاک-پرویز-رابینسون، درانچاک-ابو قاسم، هال-یاربورو، بگز-بریل، شرکت نفت شل و گوپال^۶ [۳۲] مورد بررسی قرار داده و نتیجه گرفتند که مدل برنامه‌نویسی ژنتیک بهتر از سایر مدل‌های مورد بررسی می‌باشد.

در سال ۲۰۱۲ میلادی سنجری و لای [۳۳] یک شبکه عصبی پرسپترون با یک لایه پنهان را توسط الگوریتم آموزش لونبرگ-مارکواد با استفاده از ۵۵۰۰ داده تجربی استخراج‌شده از کارهای گذشته جهت محاسبه ضریب تراکم‌پذیری با دو ورودی دما و فشار کاهیده را آموزش دادند و به مقایسه نتایج کار خود با دو رابطه تجربی درانچاک-ابوقاسم، حیدریان و همکاران (b) و دو معادله حالت پنگ رابینسون و تئوری سیالات آماری^۷ [۳۴] پرداختند و نتیجه‌ای که حاصل گشت نشان از برتری شبکه عصبی ایجادشده نسبت به روابط بررسی‌شده دارد.

شکیر و همکاران^۸ در سال ۲۰۱۲ میلادی [۳۵] با استفاده از برنامه‌نویسی ژنتیک اقدام به محاسبه دما و فشار کاهیده و سپس ضریب تراکم‌پذیری نموده که برای این کار از ۱۲۷۰ مجموعه داده تجربی به‌دست‌آمده از کارهای گذشته در پیاده‌سازی مدل ژنتیکی خود استفاده کردند. آنها در ادامه با استفاده از روش مونت کارلو^۹ به تحلیل حساسیت ورودی‌های مدل خود پرداخته و اثر هر یک را مورد بررسی قرار دادند.

در سال ۲۰۱۳ میلادی شاتری و همکاران [۳۶] با استفاده از متد ویلکاکسون^{۱۰} بهبودیافته در شبکه‌های عصبی شعاعی^{۱۱} (RBF) به محاسبه ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی پرداختند. آنها در این

^۱ Al-anazi – Al-quraishi

^۲ Genetic programmin

^۳ Generations

^۴ Populations

^۵ Lawal-Lake-Silberberg

^۶ Gopal

^۷ Statistical Associating Fluid Theory

^۸ Shokir et al.

^۹ Monte Carlo

^{۱۰} Wilcoxon

^{۱۱} Radial Basis function

تحقیق ۹۷۸ مجموعه داده تجربی برای فرآیند آموزش این شبکه استفاده کردند که ۵۰ درصد از این داده‌ها را برای آموزش و مابقی را برای تست شبکه عصبی در نظر گرفتند. مقدار AAPRE گزارش شده از این شبیه‌سازی برای داده‌های آموزش و آزمایش به ترتیب ۲/۳۵٪ و ۲/۳۶٪ می‌باشد. علاوه بر این آنها مدل خود را با ۹ رابطه تجربی و پنج معادله حالت مقایسه و نتیجه گرفتند که مدل شبیه‌سازی شده خود بهتر از سایر روابط بررسی شده نتایج را پیش‌بینی می‌کند.

در سال ۲۰۱۳ میلادی چمکلانی و همکاران^۱ [۳۷] با استفاده از ۴۷۵۶ داده از نمودار استاندینگ-کاتز اقدام به آموزش یک مدل LSSVM^۲ با استفاده از الگوریتم آنالیز شبیه‌سازی شده همراه^۳ جهت محاسبه ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی با دو ورودی دما و فشار کاهیده نموده و با مقایسه این مدل نسبت به ۶ معادله تجربی شامل درانچاک-ابوقاسم، حیدریان و همکاران(a)، حیدریان و همکاران(b)، عزیزی-بهبهانی، سنجر-لای و هال-ایگیلسیاس سیلوا به این نتیجه رسیدند که مدل بکار برده شده CSA_LSSVM با داشتن $R^2 = 0.999$ توانایی بیشتری نسبت به سایر مدل‌های مورد بررسی در تخمین ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی را دارد.

چمکلانی و همکاران در سال ۲۰۱۳ میلادی [۳۸] با استفاده از ۶۳۷۸ داده ضریب تراکم‌پذیری به‌دست‌آمده از نمودار استاندینگ-کاتز اقدام به پی‌ریزی دو شبکه عصبی پرسپترون چندلایه ترکیب با الگوریتم‌های تکاملی ژنتیک (GA) و بهینه‌سازی ازدحام ذرات^۴ (PSO) با استفاده از دو ورودی دما و فشار کاهیده نموده و نتایج آزمایش شبکه‌های عصبی حاکی از آن است که روش‌های GA-ANN و PSO-ANN دقت بالاتری نسبت به معادلات تجربی پایای، بگز-بریل، شرکت نفتی شل، بهادری و همکاران، حیدریان و همکاران(b)، عزیزی و همکاران، سنجر-لای، شکیر و همکاران، هال-یاربورو، درانچاک-پرویز-رابینسون، درانچاک-ابوقاسم و هال-ایگیلسیاس سیلوا^۵ [۳۹] داشته و در بین خود شبکه‌های عصبی ایجادشده، روش PSO-ANN با داشتن $R^2 = 0.996875$ و $MSE = 0.000334$ بهترین عملکرد را دارد.

در سال ۲۰۱۳ میلادی کمری و همکاران^۶ [۴۰] با استفاده از ۹۰۰ داده آزمایشگاهی از ضریب تراکم‌پذیری گاز ترش اقدام به شبیه‌سازی مدل LSVVM با استفاده از الگوریتم CSA جهت محاسبه ضریب تراکم‌پذیری با دو ورودی دما و فشار کاهیده کرده و با انتخاب حدود ۲۰٪ از داده‌های تجربی جمع‌آوری شده از مقالات، نتایج حاصل از تخمین مدل خود و معادلات تجربی گوپال، شرکت نفتی شل، بگز-بریل، هال-یاربورو، درانچاک-پرویز-رابینسون و درانچاک-ابوقاسم و دو معادله تجربی واندروالس و پنگ رابینسون را با مقادیر تجربی بررسی کرده‌اند و نتایج این بررسی نشان‌دهنده این

^۱ Chamkalani et al.

^۲ Least Square Support Vector Machine

^۳ Coupled simulating annealing

^۴ Particle Swarm Optimization

^۵ Hall-Iglesias silva

^۶ Kamari et al.

است که مدل مورد استفاده در این تحقیق کمترین خطا را نسبت به سایر معادلات در پیش‌بینی ضریب تراکم‌پذیری دارد.

الانازی و همکاران^۱ [۴۱] در سال ۲۰۱۳ میلادی با استفاده از ۹۷۷ داده تجربی شامل ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی استخراج‌شده از مقالات یک شبکه عصبی پرسپترون چندلایه با یک لایه مخفی شامل سه نورون و دو ورودی دما و فشار کاهیده طراحی کردند. آنها در مقایسه نتایج حاصل از داده‌هایی که در آموزش دخیل نبودند با مدل‌های شبکه عصبی بکار برده شده در این تحقیق و معادلات تجربی هال-یاربورو، درانچاک و همکاران، درانچاک-ابوقاسم، بگز-بریل، شرکت نفتی شل، گوپال و معادلات حالت ردلیش-کووانگ، پنگ رابینسون، لوال-لیک-سیلبربرگ به این نتیجه رسیدند که مدل شبکه عصبی توانایی خوبی در محاسبه ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی دارد.

در سال ۲۰۱۴ میلادی فیاضی و همکاران^۲ [۴۲] با استفاده از ۲۲۴۹ داده تجربی شامل ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی استخراج‌شده از مقالات، یک مدل LSSVM با استفاده از متد CSA برای تخمین ضریب تراکم‌پذیری آموزش داده و با بررسی نتایج حاصل از تست این مدل با معادلات تجربی بگز-بریل، شرکت نفتی شل، حیدریان و همکاران (b)، عزیز و همکاران و سنجر-لای می‌توان به توانایی روش هوشمند بکار برده شده در این تحقیق پی برد که این روش با داشتن $RMSE = 0.004$ بیشترین دقت را در بین سایر معادله‌های تجربی مورد بررسی دارد.

صرافی و همکاران^۳ در سال ۲۰۱۵ میلادی [۴۳] با استفاده از داده‌های نمودار استاندینگ-کاتز اقدام به آموزش یک شبکه تطبیقی مبتنی بر رابط فازی^۴ (ANFIS) با دو ورودی دما و فشار کاهیده برای محاسبه ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی کردند. نتایج مقایسه شده این کار با شبکه‌های عصبی آموزش‌دیده توسط کامیاب و رابطه تجربی درانچاک-ابوقاسم نشان می‌دهد که مدل فازی توانایی بهتری نسبت به سایر روش‌های مقایسه شده برای محاسبه ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی دارد.

در سال ۲۰۱۵ میلادی محمدی باغ مولایی و همکاران^۵ [۴۴] با سه روش هوشمند شبکه‌های عصبی، ANFIS و FIS^۶ اقدام به مدل‌سازی ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی کردند و حدوداً با استفاده از ۱۰۳۸ داده تجربی به ارزیابی کیفیت مدل‌های شبیه‌سازی‌شده و همچنین ۵ معادله تجربی شامل هال-یاربورو، سنجر-لای و پای^۷ [۴۵] پرداخته که نتایج حاکی از برتری روش‌های هوشمند نسبت به معادلات تجربی دارد و در میان سه روش هوشمند بکار برده شده، شبکه عصبی با مقدار $R^2 = 0.9999$ دارای بهترین دقت در شبیه‌سازی می‌باشد.

^۱ Al_anazi et al.

^۲ Fayazi et al.

^۳ Sarrafi et al.

^۴ Adaptive Network-Based Fuzzy Inference System

^۵ Mohamadibaghmolaei et al.

^۶ Fuzzy Inference System

^۷ Papay

محققان و همکاران^۱ [۴۶] در سال ۲۰۱۵ میلادی با توجه به اهمیت کربن دی‌اکسید در افزایش بازیافت نفت، به شبیه‌سازی یک مدل پایدار با استفاده از شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه برای محاسبه ضریب تراکم‌پذیری کربن دی‌اکسید اقدام کردند. داده‌هایی که آنها در این تحقیق برای آموزش شبکه عصبی استفاده نموده‌اند از داده‌های آزمایشگاهی به تعداد ۲۱۱۸ مجموعه داده بوده که به سه قسمت داده آموزش و اعتبار سنجی و تست تقسیم و با استفاده از الگوریتم لونیوم-مارکواک اقدام به آموزش شبکه کرده و نتایج مدل خود را با شش معادله حالت ردلیش کوانگ، سوآو-ردلیش-کوانگ، پنگ رابینسون، اشمیت-ونزل، پاتل-تجا^۲ [۴۷] و لوال-لیک-سیلبربرگ و دو معادله تجربی بهادری و همکاران و ویریل بررسی و نتیجه گرفته که شبکه عصبی توانایی بیشتری در پیش‌بینی ضریب تراکم‌پذیری کربن دی‌اکسید دارد.

در سال ۲۰۱۵ میلادی، محققان و همکاران [۴۸] با استفاده از ۱۷۸ داده تجربی از ضریب تراکم‌پذیری کربن دی‌اکسید با محدوده دمایی حداکثر ۱۲۷۳/۱۵ کلوین و فشاری حداکثر ۵۰ مگا پاسکال به دست آمده از هندبوک مهندسان شیمی پری، اقدام به پی‌ریزی یک مدل CSA-LSSVM برای محاسبه ضریب تراکم‌پذیری کربن دی‌اکسید کرده و نتایج خود را با شش معادله حالت ردلیش کوانگ، سوآو-ردلیش-کوانگ، پنگ رابینسون، اشمیت-ونزل، پاتل-تجا و لوال-لیک-سیلبربرگ و دو معادله تجربی بهادری و همکاران و ویریل مقایسه و به این نتیجه رسیدند که در بین همه‌ی این مدل‌ها، CSA-LSSVM بهترین دقت را با $R^2 = 0.9983$ دارد.

در سال ۲۰۱۶ میلادی، کمری و همکاران [۴۹] با استفاده از ۹۰۰ داده آزمایشگاهی از ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی مدلی را براساس برنامه‌نویسی ژنتیک جهت تخمین ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی با دو ورودی دما و فشار کاهیده ایجاد کرده که پس از انتخاب ۲۰٪ از داده‌های بیان شده به‌عنوان داده تست و بررسی نتایج حاصل از این مدل ژنتیکی با معادلات تجربی گوپال، شرکت نفتی شل، بگز-بریل، هال-یاربورو، درانچاک-پرویز-رابینسون، درانچاک-ابوقاسم، سنجر-لای، حیدریان و همکاران (b)، عزیزی و همکاران و همچنین معادلات حالت پنگ رابینسون، واندروالس، پاتل-تجا، سوآو-ردلیش-کوانگ و لوال-لیک-سیلبربرگ به این نتیجه رسیدند که مدل ژنتیکی با داشتن $R^2 = 0.898$ دارای بالاترین دقت و عملکرد می‌باشد.

عزیزی و همکاران^۳ [۵۰] در سال ۲۰۱۷ میلادی با استفاده از ۴۱۸۵ داده از ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی استخراج شده از نمودار استاندینگ-کاتز، یک شبکه عصبی پرسپترون چندلایه با دو لایه مخفی و با ورودی‌های دما و فشار کاهیده (1-5-5-2) با استفاده از الگوریتم آموزش LM را ایجاد کردند و از این تعداد داده، حدود ۱۵٪ را جهت تست به صورت تصادفی انتخاب و خروجی را با توجه به خروجی‌های معادلات تجربی هال-یاربورو، شرکت نفتی شل، بگز-بریل، پاپ، لطیف و همکاران

^۱ Mohagheghian et al.

^۲ Patel-Teja

^۳ Azizi et al.

مقایسه و نتیجه حاصل از این بررسی نشان‌دهنده این است که شبکه عصبی با مقدار $R^2 = 0.9999$ دقت بیشتری در محاسبه ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی دارد.

۱_۳ معرفی پژوهش حاضر

تمام روش‌های ذکر شده برای محاسبه خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی اعم از روش‌های آزمایشگاهی و غیر آزمایشگاهی مستلزم آن است که دما و فشار ترکیب گاز مورد نظر مشخص باشد اما در فرآیندهای ترمودینامیکی نظیر فرآیندهای جاری در توربین‌ها، کمپرسورها و شیرهای فشارشکن و ... اینگونه نمی‌باشد به نحوی که مشخصه‌های ترمودینامیکی دیگری نظیر آنترופی و آنتالپی موجود است و از طریق این خواص موجود باید سایر خواص ترمودینامیکی محاسبه شود، لذا هدف اصلی این پایان‌نامه، تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی با استفاده از روش شبکه‌های عصبی براساس سه مدل خواص ورودی شامل: (ترکیب گاز، دما و فشار)، (ترکیب گاز، آنتالپی و فشار) و (ترکیب گاز، آنترופی و فشار) می‌باشد که داده‌های مورد استفاده در آموزش شبکه عصبی از معادله حالت AGA8 و فرم به روز شده‌ی آن، استاندارد ISO 20765-1 بدست آمده است لذا در فصل دوم به بررسی استاندارد ISO 20765-1 پرداخته و در فصل سوم توضیحی درباره‌ی شبکه‌های عصبی و پارامترها و الگوریتم‌های آموزش شبکه ارائه می‌شود و در فصل چهارم به معتبرسازی خروجی‌های شبکه و نتایج و کاربردهای شبکه‌های عصبی آموزش دیده‌شده پرداخته می‌شود.

فصل ۲ : معادله حالت AGA8 و

استاندارد 1 – ISO 20765

۲_۱ مقدمه

در ابتدا معادله حالت AGA8 [۵۱] در سال ۱۹۹۲ توسط کمیته اندازه‌گیری انتقال انجمن گاز آمریکا جهت محاسبه دقیق ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی پیاده‌سازی شد. با توجه به توانایی که این معادله حالت در تعیین ضریب تراکم‌پذیری از خود نشان می‌داد، استفاده از آن برای تخمین سایر خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی به دلیل اینکه ضریب تراکم‌پذیری به‌طور مستقیم در محاسبه سایر خواص دخیل می‌باشد مورد توجه قرار گرفت. اما با توجه به تحقیقات صورت گرفته بر روی این معادله در تخمین سایر خواص ترمودینامیکی، نیاز به تغییر در معادله AGA8 جهت استحصال نتایج دقیق‌تر احساس می‌شد و به این خاطر به‌روزرسانی‌های زیادی بر روی این معادله صورت گرفت که می‌توان به استانداردهایی از قبیل ISO 12213_2 ، ISO 7504 ، ISO 31_4 ، ISO 14532 و ISO 20765_1 اشاره کرد که در این تحقیق استاندارد ISO 20765_1 پیاده‌سازی شده است [۵۲].

۲_۲ تعاریف اساسی موجود در استاندارد ISO 20765_1

ابتدا لازم است چند تعریف مهم را که در استاندارد ISO 20765_1 و همچنین سایر استانداردها از قبیل ISO 31_4 ، ISO 7504 ، ISO 14532 به وفور استفاده می‌گردد به‌صورت زیر شرح داده شوند:

خاصیت کالریک^۱: مشخصه‌ای از یک گاز یا مخلوط همگنی از گاز که از معادله اساسی حالت قابل محاسبه باشد را خاصیت کالریک گویند. خواص کالریک بیان‌شده در استاندارد ISO 20765_1 عبارتند از: انرژی داخلی^۲، آنتالپی^۳، آنتروپی^۴، ظرفیت حرارتی در حجم ثابت^۵، ظرفیت حرارتی در فشار ثابت^۶، ضریب ژول تامسون^۷، توان آیزنتروپیک^۸ و سرعت صوت^۹.

خاصیت حجمی^{۱۰}: مشخصه‌ای از یک گاز یا مخلوط همگنی از گاز که توسط معادله حجمی حالت محاسبه می‌شود، که در استاندارد ISO 20765-1 خواص حجمی عبارتند از: ضریب تراکم‌پذیری^{۱۱} و چگالی^{۱۲}.

خاصیت ترمودینامیکی: خاصیت کالریک یا حجمی را خاصیت ترمودینامیکی گویند.

^۱ Caloric Property

^۲ Internal energy(U)

^۳ Enthalpy(H)

^۴ Entropy(S)

^۵ Isochoric heat capacity(Cv)

^۶ Isobaric heat capacity(Cp)

^۷ Joule-Thomson coefficient(JT, μ)

^۸ Isentropic exponent(K)

^۹ Speed of sound(SoS)

^{۱۰} Volumetric Property

^{۱۱} Compressibility factor(Z)

^{۱۲} Density

خاصیت باقی مانده^۱: خاصیت باقی مانده یک گاز عبارت است از اختلاف بین خاصیت یک گاز یا مخلوط همگنی از یک گاز در حالت واقعی نسبت به آن خاصیت در حالت ایده آل، در همان حالت از دما و چگالی یکسان.

معادله حالت: رابطه‌ی ریاضی بین متغیرهای حالت یک گاز یا ترکیبی همگن از گاز را معادله حالت گویند البته باید توجه کرد که در استاندارد ISO 20765_1 دو نوع معادله حالت تعریف شده است که اولین آن معادله حالت حجمی^۲ می باشد که عبارت است از رابطه بین متغیرهای دما و فشار و حجم اشغال شده توسط گاز و دومین نوع از معادله حالت، معادله بنیادی حالت^۳ است که رابطه‌ای بین چگالی و دما و انرژی آزاد هلمهولتز^۴ می باشد.

ایده استفاده از روش ISO 20765_1 بر این اساس می باشد که برای محاسبه خواص گاز طبیعی در لوله انتقال باید عناصر تشکیل دهنده‌ی آن و متغیرهای حالت که دما و چگالی می باشند را دانست اما در عمل متغیرهای حالتی که به عنوان ورودی در نظر گرفته می شود و به راحتی قابل اندازه گیری می باشند، دما و فشار است پس باید ابتدا این متغیرها را به دما و چگالی تبدیل نماییم. تعاریف تمامی ضرایب و ثابت‌های استاندارد ISO 20765-1 در فهرست علائم و مقادیر آنها در مرجع [۵۲] و پیوست پایان نامه موجود می باشد.

۲-۳ اجزای موجود در ترکیب گاز طبیعی

برای جامع بودن کار، تمام ۲۱ عنصر اصلی و فرعی دخیل در ترکیب گاز که به صورت جدول ذیل می باشند در محاسبات در نظر گرفته شده اند.

جدول ۲-۱. درصد مولی اجزای موجود در ترکیب گاز طبیعی

شماره i	اجزاء	محدوده کسر مولی	شماره i	اجزاء	محدوده کسر مولی
1	Nitrogen	$0 \leq x_{N_2} \leq 20$	12+13+14	n-octane+n-nonane+n-decane	$0 \leq x_{C_8+} \leq 0.05$
2	Carbon dioxide	$0 \leq x_{CO_2} \leq 20$	15	Hydrogen	$0 \leq x_{H_2} \leq 10$
3	Methane	$70 \leq x_{CH_4} \leq 100$	16	Oxygen	$0 \leq x_{O_2} \leq 0.02$
4	Ethane	$0 \leq x_{C_2H_6} \leq 10$	17	Carbon monoxide	$0 \leq x_{CO} \leq 3$
5	Propane	$0 \leq x_{C_3H_8} \leq 3.5$	18	Water	$0 \leq x_{H_2O} \leq 0.015$
6+7	n-butane+iso-butane	$0 \leq x_{C_4H_{10}} \leq 1.5$	19	Hydrogen sulfide	$0 \leq x_{H_2S} \leq 0.02$
8+9	n-pentane+iso-pentane	$0 \leq x_{C_5H_{12}} \leq 0.5$	20	Helium	$0 \leq x_{He} \leq 0.5$
10	n-hexane	$0 \leq x_{C_6H_{14}} \leq 0.1$	21	Argon	$0 \leq x_{Ar} \leq 0.02$
11	n-heptane	$0 \leq x_{C_7H_{16}} \leq 0.05$			

^۱ Residual Property

^۲ Volumetric equation of state

^۳ Fundamental equation of state

^۴ Helmholtz free energy

۲_۴ تغییرات لازم در معادله AGA8

به منظور بهبود در روابط تعیین خواص ترمودینامیکی جهت استحصال نتایج دقیق تر، معادله حالت AGA8 نیازمند دو تغییر اساسی می باشد:

۱. معادله AGA8 اصلی ابتدا به صورت صریح براساس خواص حجمی است که باید براساس انرژی آزاد هلمولتز باقی مانده شکل گیرد. دلیل این امر آن است که تمام خواص ترمودینامیکی را می توان براساس انرژی آزاد هلمولتز و مشتقات آن با توجه به شرایط حالت و چگالی بیان کرد.

۲. برای محاسبه خواص کالریک ابتدا به رابطه ای برای انرژی آزاد هلمولتز گاز ایده آل برحسب دما نیاز می باشد و باید توجه کرد، روابطی که در گذشته برای گاز ایده آل استفاده می کردند همگی به صورت صریح براساس ظرفیت گرمایی در فشار ثابت بوده اند پس لازم است که این روابط براساس انرژی آزاد هلمولتز و مشتقات آن شکل گیرند.

جنبه ی اصلی فرمول های ارائه شده برای بخش ایده آل و باقی مانده انرژی آزاد هلمولتز این است که مشتقات آن کاملاً تحلیلی می باشد و از هیچ روش عددی برای محاسبه آنها استفاده نشده است .

۲_۵ معادلات حاکم در استاندارد ISO 20765_1

در این قسمت معادلات و توابع موجود در استاندارد ISO 20765_1 به صورت کامل تشریح می شود. ابتدا اجزاء و پارامترهای انرژی آزاد هلمولتز بیان و سپس مشتقات دخیل این انرژی در تعیین خواص محاسبه و در آخر معادلات تمام خواص ترمودینامیکی براساس انرژی آزاد هلمولتز و مشتقات آن بیان می گردد.

۲_۵_۱ انرژی آزاد هلمولتز:

انرژی آزاد هلمولتز مخلوط یک گاز طبیعی در یک دما و فشار ثابت به صورت ترکیبی از قسمت ایده آل (f_0) و قسمت باقی مانده (f_r) به صورت زیر می باشد:

$$f(\rho, T, X) = f_0(\rho, T, X) + f_r(\rho, T, X) \quad (1-2)$$

که با در نظر گرفتن فرم بی بعد انرژی آزاد کاهیده ($\varphi = f/(R \cdot T)$) داریم:

$$\varphi(\delta, \tau, X) = \varphi_0(\delta, \tau, X) + \varphi_r(\delta, \tau, X) \quad (2-2)$$

که بردار X معرف ترکیب عناصر تشکیل دهنده می باشد و پارامتر بی بعد $\tau = \frac{L}{T_r}$ معرف معکوس دمای کاهیده ($L = 1 K$) و چگالی کاهیده (δ) تابعی از چگالی مولار (ρ) و پارامتر ترکیب سایز می باشد (K):

$$\delta = K^3 \rho \quad (3-2)$$

که پارامتر ترکیب سایز یک ماتریس مشخص می باشد که در استاندارد ISO 20765_1 [۵۲] موجود است. با توجه به مفاهیم ترمودینامیک آماری، انرژی آزاد هلمولتز نتیجه ای از تعداد و انواع اثرات

متقابل بین مولکول‌ها در ترکیبات می‌باشد بنابراین انرژی آزاد هلمولتز تابعی از چگالی مولار و اجزای مولی ترکیبات و دما است .

۲_۵_۲ انرژی آزاد هلمولتز کاهیده گاز ایده‌آل:

انرژی هلمولتز کاهیده گاز ایده‌آل به صورت $\varphi_0 = f_0 / (R \cdot T)$ که f_0 انرژی هلمولتز کاهیده برای گاز ایده‌آل و تابعی از آنتالپی و آنتروپی است و به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$f_0(\rho, T, X) = h_0(T, X) - R \cdot T - T \cdot s_0(\rho, T, X) \quad (۴-۲)$$

که آنتالپی و آنتروپی می‌توانند برحسب ظرفیت گرمایی فشار ثابت به صورت زیر بیان شوند:

$$h_0(T, X) = \int c_{p,0} dT + h_{0,\theta} \quad (۵-۲)$$

$$s_0(\rho, T, X) = \int \frac{c_{p,0}}{T} dT - R \cdot \ln\left(\frac{\rho}{\rho_\theta}\right) - R \cdot \ln\left(\frac{T}{T_\theta}\right) + s_{0,\theta} - R \cdot \sum_{i=1}^N x_i \cdot \ln x_i \quad (۶-۲)$$

حالت مرجع برای آنتالپی و آنتروپی صفر در دما $T_\theta = 298.15 \text{ K}$ و فشار $P_\theta = 101.325 \text{ kPa}$ و چگالی مرجع $\rho_\theta = P_\theta / (R \cdot T_\theta)$ به صورت ρ_θ تعریف می‌گردد.

با ترکیب فرمول‌های بالا ، برای انرژی آزاد هلمولتز کاهیده فرمول زیر را داریم:

$$\varphi_0(\delta, \tau, X) = -\tau \int \frac{c_{p,0}}{R \cdot \tau^2} d\tau + \frac{h_{0,\theta} \cdot \tau}{R \cdot L} - 1 + \int \frac{c_{p,0}}{R \cdot \tau} d\tau + \ln\left(\frac{\delta}{\delta_\theta}\right) + \ln\left(\frac{\tau_\theta}{\tau}\right) - \frac{s_{0,\theta}}{R} + \sum_{i=1}^N x_i \cdot \ln x_i \quad (۷-۲)$$

۳_۵_۲ انرژی آزاد هلمولتز کاهیده گاز باقی مانده :

با نوشتن معادله ضریب تراکم‌پذیری برحسب تابعی از چگالی کاهیده و دمای کاهیده معکوس، معادله AGA8 به فرم زیر خواهد شد:

$$Z = 1 + \frac{B \cdot \delta}{K^3} - \delta \sum_{n=13}^{18} C_n \cdot \tau^{u_n} + \sum_{n=13}^{58} C_n \cdot \tau^{u_n} \cdot \delta^{b_n} (b_n - c_n \cdot k_n \cdot \delta^{k_n}) \exp(-c_n \cdot \delta^{k_n}) \quad (۸-۲)$$

که در معادله بالا B ضریب دوم ویرال و C_n, k_n, u_n, b_n ضرایب معادله که تابعی از ترکیب گاز می‌باشد.

ضریب تراکم‌پذیری را می‌توان به فرم خلاصه‌شده زیر نوشت که با انرژی آزاد کاهیده باقی مانده مرتبط است:

$$Z = 1 + \delta \cdot \varphi_{r,\delta} \quad (۹-۲)$$

که در آن $\varphi_{r,\delta}$ مشتق جزئی φ_r نسبت به چگالی کاهیده در ترکیب و دمای معکوس کاهیده ثابت می‌باشد.

قسمت باقی‌مانده انرژی هلمولتز کاهیده به‌صورت زیر تعریف می‌گردد:

$$\varphi_r(\delta, \tau, X) = \frac{B \cdot \delta}{K^3} - \delta \sum_{n=13}^{18} C_n \cdot \tau^{u_n} + \sum_{n=13}^{58} C_n \cdot \tau^{u_n} \cdot \delta^{b_n} \exp(-c_n \cdot \delta^{k_n}) \quad (10-2)$$

با توجه به عبارات بیان‌شده برای انرژی آزاد هلمولتز کاهیده برای قسمت ایده‌آل و قسمت باقی‌مانده، می‌توان انرژی آزاد هلمولتز کاهیده کلی را به‌صورت زیر تعریف کرد که توسط آن قادر خواهیم بود تمام خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned} \varphi(\delta, \tau, X) = & -\tau \int \frac{c_{p,0}}{R \cdot \tau^2} d\tau + \frac{h_{0,\theta} \cdot \tau}{R \cdot L} - 1 + \int \frac{c_{p,0}}{R \cdot \tau} d\tau + \ln\left(\frac{\delta}{\delta_\theta}\right) + \ln\left(\frac{\tau_\theta}{\tau}\right) \quad (11-2) \\ & - \frac{s_{0,\theta}}{R} + \sum_{i=1}^N x_i \cdot \ln x_i + \frac{B \cdot \delta}{K^3} - \delta \sum_{n=13}^{18} C_n \cdot \tau^{u_n} \\ & + \sum_{n=13}^{58} C_n \cdot \tau^{u_n} \cdot \delta^{b_n} (b_n - c_n \cdot k_n \cdot \delta^{k_n}) \exp(-c_n \cdot \delta^{k_n}) \end{aligned}$$

با داشتن تابع انرژی آزاد هلمولتز می‌توان تمام خاصیت‌های ترمودینامیکی را محاسبه کرد ولی در ابتدا باید آن را از فرم انتگرالی خارج و با داشتن مشتقات مرتبه اول و دوم آن، می‌توان خواص را محاسبه کرد.

ابتدا برای انرژی آزاد هلمولتز گاز ایده‌آل، مقدار ظرفیت گرمایی فشار ثابت در یک عنصر را می‌توان از طریق رابطه‌ی زیر محاسبه کرد:

$$\begin{aligned} \frac{(c_{p,0})_i}{R} = & B_{0,i} + C_{0,i} \left[\frac{D_{0,i} \cdot \tau}{\sinh(D_{0,i} \cdot \tau)} \right]^2 + E_{0,i} \left[\frac{F_{0,i} \cdot \tau}{\sinh(F_{0,i} \cdot \tau)} \right]^2 \quad (12-2) \\ & + G_{0,i} \left[\frac{H_{0,i} \cdot \tau}{\sinh(H_{0,i} \cdot \tau)} \right]^2 + I_{0,i} \left[\frac{J_{0,i} \cdot \tau}{\sinh(J_{0,i} \cdot \tau)} \right]^2 \end{aligned}$$

و برای بسط دادن رابطه (12-2) در ترکیبات، می‌توان فرمول زیر را استفاده کرد:

$$\frac{c_{p,0}}{R} = \sum_{i=1}^N x_i \frac{(c_{p,0})_i}{R} \quad (13-2)$$

با جایگذاری رابطه (12-2) در رابطه (7-2) مقدار φ_0 به‌صورت زیر حاصل خواهد شد:

$$\begin{aligned} \varphi_0 = & \sum_{i=1}^N x_i \left\{ (A_{0,1})_i + (A_{0,2})_i \cdot \tau + B_{0,i} \cdot \ln \tau + C_{0,i} \cdot \ln[\sinh(D_{0,i} \cdot \tau)] \right. \\ & - E_{0,i} \cdot \ln[\cosh(F_{0,i} \cdot \tau)] + G_{0,i} \cdot \ln[\sinh(H_{0,i} \cdot \tau)] \\ & \left. - I_{0,i} \cdot \ln[\cosh(J_{0,i} \cdot \tau)] + \ln x_i \right\} + \ln\left(\frac{\delta}{\delta_\theta}\right) + \ln\left(\frac{\tau_\theta}{\tau}\right) \quad (14-2) \end{aligned}$$

که عبارات $(A_{0,1})_i$ و $(A_{0,2})_i$ مقادیر ثابت انتگرال می‌باشند و به‌صورت زیر محاسبه خواهند شد:

$$(A_{0,1})_i = -(s_{0,\theta})_i / R + B_{0,i} - 1 \quad (15-2)$$

$$(A_{0,2})_i = (h_{0,\theta})_i / R \cdot L \quad (16-2)$$

برای نمونه مشتق اول و دوم φ_0 نسبت τ در δ و x_i ثابت به صورت زیر می باشد:

$$\varphi_{0,\tau} = \left(\frac{\partial \varphi_0}{\partial \tau}\right)_{\delta, x_i} \quad (17-2)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^N x_i \cdot \left[(A_{0,2})_i + \frac{(B_{0,i} - 1)}{\tau} + C_{0,i} \cdot D_{0,i} \frac{\cosh(D_{0,i} \cdot \tau)}{\sinh(D_{0,i} \cdot \tau)} \right. \\ &- E_{0,i} \cdot F_{0,i} \frac{\sinh(F_{0,i} \cdot \tau)}{\cosh(F_{0,i} \cdot \tau)} + G_{0,i} \cdot H_{0,i} \frac{\cosh(H_{0,i} \cdot \tau)}{\sinh(H_{0,i} \cdot \tau)} \\ &\left. - I_{0,i} \cdot J_{0,i} \frac{\sinh(J_{0,i} \cdot \tau)}{\cosh(J_{0,i} \cdot \tau)} \right] \end{aligned}$$

$$\varphi_{0,\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2 \varphi_0}{\partial \tau^2}\right)_{\delta, x_i} \quad (18-2)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{i=1}^N x_i \cdot \left\{ -\frac{(B_{0,i} - 1)}{\tau^2} - C_{0,i} \left[\frac{D_{0,i}}{\sinh(D_{0,i} \cdot \tau)} \right]^2 \right. \\ &- E_{0,i} \left[\frac{F_{0,i}}{\cosh(F_{0,i} \cdot \tau)} \right]^2 - G_{0,i} \left[\frac{H_{0,i}}{\sinh(H_{0,i} \cdot \tau)} \right]^2 \\ &\left. - I_{0,i} \left[\frac{J_{0,i}}{\cosh(J_{0,i} \cdot \tau)} \right]^2 \right\} \end{aligned}$$

مشتقات اول و دوم مورد نیاز برای محاسبه خواص به صورت زیر تعریف می شوند:

$$\varphi_{\tau\tau} = \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tau^2}\right)_{\delta, X} \quad (19-2)$$

$$\varphi_{\delta} = \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \delta}\right)_{\tau, X} \quad (20-2)$$

$$\varphi_{\delta\delta} = \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \delta^2}\right)_{\tau, X} \quad (21-2)$$

$$\varphi_{\tau\delta} = \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \delta}\right)_{\tau, X} \right]_{\delta, X} \quad (22-2)$$

تمام مشتقات ذکر شده شامل دو بخش ایده آل و باقی مانده می باشد. برای ساده سازی روابط محاسبه خواص عبارات زیر در نظر گرفته شده اند:

$$\tau \cdot \varphi_{\tau} = \tau \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \tau}\right)_{\delta, X} \quad (23-2)$$

$$\begin{aligned} &= \tau \cdot \varphi_{0,\tau} + \frac{\delta}{K^3} \cdot \sum_{n=1}^{18} u_n \cdot B_n^* \cdot \tau^{u_n} \\ &- \delta \sum_{n=13}^{18} u_n \cdot C_n \cdot \tau^{u_n} \\ &+ \sum_{n=13}^{58} u_n \cdot C_n \cdot \tau^{u_n} \cdot \delta^{b_n} \cdot \exp(-c_n \cdot \delta^{k_n}) \end{aligned}$$

$$\tau^2 \cdot \varphi_{\tau\tau} = \tau^2 \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \tau^2} \right)_{\delta, X} \quad (24-2)$$

$$= \tau^2 \cdot \varphi_{o, \tau\tau} + \frac{\delta}{K^3} \cdot \sum_{n=1}^{18} (u_n^2 - u_n) \cdot B_n^* \cdot \tau^{u_n} \\ - \delta \sum_{n=13}^{18} (u_n^2 - u_n) \cdot C_n \cdot \tau^{u_n} \\ + \sum_{n=13}^{58} (u_n^2 - u_n) \cdot C_n \cdot \tau^{u_n} \cdot \delta^{b_n} \cdot \exp(-c_n \cdot \delta^{k_n})$$

$$\delta \cdot \varphi_{\delta} = \delta \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \delta} \right)_{\tau, X} \quad (25-2)$$

$$= 1 + \frac{B \cdot \delta}{K^3} - \delta \sum_{n=13}^{18} C_n \cdot \tau^{u_n} \\ + \sum_{n=13}^{58} C_n \cdot \tau^{u_n} \cdot \delta^{b_n} (b_n - c_n \cdot k_n \cdot \delta^{k_n}) \cdot \exp(-c_n \cdot \delta^{k_n})$$

$$\varphi_1 = (\delta^2 \cdot \varphi_{\delta})_{\delta} = \left[\frac{\partial (\delta^2 \cdot \varphi_{\delta})}{\partial \delta} \right]_{\tau, X} \quad (26-2)$$

$$= 1 + 2 \cdot \frac{B \cdot \delta}{K^3} - 2 \cdot \delta \sum_{n=13}^{18} C_n \cdot \tau^{u_n} \\ + \sum_{n=13}^{58} C_n \cdot \tau^{u_n} \cdot \delta^{b_n} \cdot [b_n - (1 + k_n) c_n \cdot k_n \cdot \delta^{k_n} \\ + (b_n - c_n \cdot k_n \cdot \delta^{k_n})^2] \exp(-c_n \cdot \delta^{k_n})$$

$$\varphi_2 = -\tau^2 (\delta \cdot \varphi_{\delta} / \tau)_{\tau} = -\tau^2 \left[\frac{\partial (\delta \cdot \varphi_{\delta} / \tau)}{\partial \tau} \right]_{\delta, X} \quad (27-2)$$

$$= 1 + \frac{\delta}{K^3} \sum_{n=1}^{18} (1 - u_n) \cdot B_n^* \cdot \tau^{u_n} \\ - \delta \sum_{n=13}^{18} (1 - u_n) \cdot C_n \cdot \tau^{u_n} \\ + \sum_{n=13}^{58} (1 - u_n) \cdot C_n \cdot \tau^{u_n} \cdot \delta^{b_n} \cdot (b_n - c_n \cdot k_n \cdot \delta^{k_n}) \exp(-c_n \cdot \delta^{k_n})$$

معادلات برای محاسبه خواص ترمودینامیکی به صورت روابط (28-2) تا (36-2) می‌باشند، با توجه به این نکته که در روابط ذکر شده کمیت‌های با حروف کوچک انگلیسی برحسب مولار و کمیت‌های با حروف بزرگ برحسب جرم می‌باشند که برای تبدیل متغیرهای برحسب واحد مولار به متغیرهای

برحسب واحد جرمی باید آن را بر جرم مولکولی کل ترکیب که برابر است با $M = \sum_{i=1}^N x_i \cdot M_i$ تقسیم کرد.

۲_۵_۴ خواص ترمودینامیکی

خواص ترمودینامیکی، خواصی می‌باشند که با داشتن آنها می‌توان به حالت ماده پی برد و اگر ماده خالص باشد با در اختیار داشتن دو خاصیت مستقل می‌توان بقیه خواص را محاسبه کرد و برای موادی که خالص نمی‌باشند مانند گاز طبیعی که معمولاً ترکیبی از چند ماده است، علاوه بر داشتن دو خاصیت ترمودینامیکی مستقل، باید درصد اجزای تشکیل‌دهنده ترکیب را دانست و سپس با در اختیار داشتن این سه مقدار به محاسبه سایر خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی اقدام کرد. خاصیت‌های ترمودینامیکی که در استاندارد 1 – ISO 20765 مورد بررسی قرار گرفته‌اند به صورت جدول ۲-۲ می‌باشند:

جدول ۲-۲. انواع خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی

واحد	خاصیت	نماد	واحد	خاصیت	نماد
kJ/(kg. K)	آنتروپی مخصوص	S	-	ضریب تراکم‌پذیری	Z
kJ/(kmol. K)	ظرفیت گرمایی حرارتی مولار در حجم ثابت	C_v	kmol/m ³	چگالی مولار	ρ
kJ/(kg. K)	ظرفیت گرمایی حرارتی مخصوص در حجم ثابت	C_v	kg/m ³	چگالی	D
kJ/(kmol. K)	ظرفیت گرمایی حرارتی مولار در فشار ثابت	C_p	kJ/kmol	انرژی داخلی مولار	u
kJ/(kg. K)	ظرفیت گرمایی حرارتی مخصوص در فشار ثابت	C_p	kJ/kg	انرژی داخلی مخصوص	U
K/kPa	ضریب ژول تامسون	μ	kJ/kmol	آنتالپی مولار	h
-	توان آیزنتروپیک	κ	kJ/kg	آنتالپی مخصوص	H
m/s	سرعت صوت	SoS	kJ/(kmol. K)	آنتروپی مولار	s

۲_۵_۴_۱ ضریب تراکم‌پذیری:

ضریب تراکم‌پذیری را می‌توان از رابطه (۲-۸) طبق استاندارد 1 – ISO 20765 محاسبه نمود. و برای محاسبه چگالی مولار یک ترکیب از رابطه زیر استفاده می‌شود:

$$\rho = D/M = p/(Z \cdot R \cdot T) \quad (2-28)$$

۲_۵_۴_۲ انرژی داخلی:

برای محاسبه انرژی داخلی گاز طبیعی از فرمول زیر استفاده می‌گردد:

$$\frac{u}{R \cdot T} = \frac{U \cdot M}{R \cdot T} = \tau \cdot \varphi_{\tau} \quad (2-29)$$

۲_۵_۴_۳ آنتالپی:

برای محاسبه آنتالپی از فرمول زیر استفاده می‌گردد:

$$\frac{h}{R.T} = \frac{H.M}{R.T} = \tau \cdot \varphi_{\tau} + \delta \cdot \varphi_{\delta} = \frac{u}{R.T} + Z = \frac{U.M}{R.T} + Z \quad (30-2)$$

۲_۵_۴_۴ آنترופی:

برای محاسبه آنترופی از فرمول زیر استفاده می‌گردد:

$$\frac{s}{R} = \frac{S.M}{R} = \tau \cdot \varphi_{\tau} - \varphi = \frac{u}{R.T} - \varphi = \frac{U.M}{R.T} - \varphi \quad (31-2)$$

۲_۵_۴_۵ ظرفیت حرارتی در حجم ثابت:

برای محاسبه ظرفیت حرارتی در حجم ثابت از فرمول زیر استفاده می‌گردد:

$$\frac{c_v}{R} = \frac{C_v.M}{R} = -\tau^2 \cdot \varphi_{\tau\tau} \quad (32-2)$$

۲_۵_۴_۶ ظرفیت حرارتی در فشار ثابت:

ظرفیت حرارتی در فشار ثابت از فرمول زیر محاسبه می‌گردد:

$$\frac{c_p}{R} = \frac{C_p.M}{R} = -\tau^2 \cdot \varphi_{\tau\tau} + \frac{\varphi_2^2}{\varphi_1} = \frac{c_v}{R} + \frac{\varphi_2^2}{\varphi_1} = \frac{C_v.M}{R} + \frac{\varphi_2^2}{\varphi_1} \quad (33-2)$$

۲_۵_۴_۷ ضریب ژول تامسون:

ضریب ژول تامسون از فرمول زیر محاسبه می‌گردد:

$$\begin{aligned} \mu \cdot R \cdot \rho &= \frac{\mu \cdot R \cdot D}{M} = \frac{\varphi_2 - \varphi_1}{\varphi_2^2 - (\tau^2 \cdot \varphi_{\tau\tau} \cdot \varphi_1)} = \frac{R}{c_p} \left(\frac{\varphi_2}{\varphi_1} - 1 \right) \\ &= \frac{R}{c_p \cdot M} \left(\frac{\varphi_2}{\varphi_1} - 1 \right) \end{aligned} \quad (34-2)$$

۲_۵_۴_۸ توان آیزنتروپیک:

توان آیزنتروپیک از فرمول زیر محاسبه می‌گردد:

$$\begin{aligned} \kappa &= \frac{\varphi_1 - \frac{\varphi_2^2}{\tau^2 \cdot \varphi_{\tau\tau}}}{\delta \cdot \varphi_{\delta}} = \frac{\varphi_1 + \frac{R}{c_v} \varphi_2^2}{Z} = \frac{\varphi_1 + \frac{R}{C_v \cdot M} \varphi_2^2}{Z} \\ &= \frac{\varphi_1}{Z} \cdot \frac{c_p}{c_v} = \frac{\varphi_1}{Z} \cdot \frac{C_p}{C_v} \end{aligned} \quad (35-2)$$

۲_۵_۴ سرعت صوت:

سرعت صوت از فرمول زیر محاسبه می‌گردد:

$$\frac{SoS^2 \cdot M}{R \cdot T} = \varphi_1 - \frac{\varphi_2^2}{r^2 \cdot \varphi_{\tau\tau}} = Z \cdot \kappa = \varphi_1 \frac{c_p}{c_v} = \varphi_1 \frac{C_p}{C_v} \quad (۳۶-۲)$$

۲_۶ پیاده‌سازی روش

در این قسمت نحوه پیاده‌سازی و اجرای برنامه به صورت گام‌به‌گام مطابق با شکل ۱-۲ توضیح داده خواهد شد.

مرحله اول: در این مرحله لازم است که ترکیب گاز و دما و فشار مطلق را برای برنامه تعریف شود. باید به این نکته توجه کرد که واحد دما کلوین و واحد فشار کیلوپاسکال می‌باشد و در صورتی که ترکیب گاز مورد نظر خاصیت‌های ابتدایی آنها یعنی دما و فشار در واحد دیگری می‌باشند، باید به این واحدها تبدیل شوند و ترکیب گاز باید به صورت اجزای مولی بیان گردد به نحوی که مجموع کسر مولی آنها برابر با یک شود.

مرحله دوم:

الف) با توجه به ترکیب گاز انتخاب شده، روابط زیر مطابق با توضیحات باید محاسبه گردند: برای محاسبه انرژی آزاد هلمولتز کاهیده (φ)، ابتدا باید B_n^* و B_{nij}^* محاسبه شود که به صورت زیر می‌باشد:

$$B_n^* = a_n \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N x_i \cdot x_j \cdot B_{nij}^* \cdot E_{ij}^{un} \cdot (K_i \cdot K_j)^{3/2} \quad (۳۷-۲)$$

$$B_{nij}^* = (G_{ij} + 1 - g_n)^{g_n} (Q_i Q_j + 1 - q_n)^{q_n} (\sqrt{F_i F_j} + 1 - f_n)^{f_n} (S_i S_j + 1 - s_n)^{s_n} (W_i W_j + 1 - w_n)^{w_n} \quad (۳۸-۲)$$

ب) در این مرحله باید مقادیر $C_n (n=13 \text{ to } 58) (X)$ محاسبه گردد که فرمول‌های زیر را داریم:

$$V^5 = \left[\sum_{i=1}^N x_i \cdot E_i^{5/2} \right]^2 + 2 \cdot \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N x_i x_j \cdot (V_{ij}^5 - 1) (E_i E_j)^{5/2} \quad (۳۹-۲)$$

$$G = \sum_{i=1}^N x_i G_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N x_i \cdot x_j \cdot (G_{ast,ij} - 1) (G_i + G_j) \quad (۴۰-۲)$$

$$Q = \sum_{i=1}^N x_i \cdot Q_i \quad (۴۱-۲)$$

$$F = \sum_{i=1}^N x_i^2 \cdot F_i \quad (۴۲-۲)$$

$$C_n(X) = a_n(G + 1 - g_n)^{g_n}(Q^2 + 1 - q_n)^{q_n}(F + 1 - f_n)^{f_n}V^{u_n} \quad (43-2)$$

ج) در این مرحله باید پارامتر سایز ترکیب $K(X)$ محاسبه شود:

$$K(X)^5 = \left[\sum_{i=1}^N x_i \cdot K_i^{5/2} \right]^2 + 2 \cdot \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N x_i x_j \cdot (K_{ij}^5 - 1)(K_i K_j)^{5/2} \quad (44-2)$$

د) در این مرحله باید دما کاهیده و چگالی کاهیده در شرایط $T_\theta = 298.15 \text{ K}$ و فشار $P_\theta = 101.325 \text{ kPa}$ محاسبه شود و به شرح زیر می‌باشد:

$$\tau_\theta = \frac{L(L = 1K)}{T_\theta} \quad (45-2)$$

$$\rho_\theta = P_\theta / (R \cdot T_\theta) \quad (46-2)$$

$$\delta_\theta = K^3 \rho_\theta \quad (47-2)$$

مرحله سوم:

الف) محاسبه دمای کاهیده معکوس با توجه به دمای ورودی گزارش شده و محاسبه ضریب دوم ویريال با توجه به رابطه زیر:

$$B(\tau, X) = \sum_{n=1}^{18} B_n^* \cdot \tau^{u_n} \quad (48-2)$$

ب) محاسبه مقدار $C_n(X) \cdot \tau^{u_n}$ با توجه به دمای ورودی گزارش شده.

مرحله چهارم: در تمامی محاسبات استاندارد ISO 20765 – 1 ورودی‌هایی که توابع می‌گیرند براساس سه متغیر دما کاهیده و ترکیب گاز و چگالی کاهیده می‌باشد که دما کاهیده از دما ورودی و ترکیب گاز از ورودی‌های مستقیم کاربر محاسبه می‌گردد ولی یکی از ورودی‌هایی که کاربر در ابتدا وارد می‌کند فشار مطلق می‌باشد، پس باید به دنبال راه حلی برای محاسبه چگالی کاهیده براساس فشار بود که می‌توان از فرمول زیر استفاده کرد:

$$p = \frac{\delta \cdot R \cdot L}{\tau \cdot K^3} \left[1 + \frac{B \cdot \delta}{K^3} - \delta \sum_{n=13}^{18} C_n \cdot \tau^{u_n} + \sum_{n=13}^{58} C_n \cdot \tau^{u_n} \cdot \delta^{b_n} (b_n - c_n \cdot k_n \cdot \delta^{k_n}) \exp(-c_n \cdot \delta^{k_n}) \right] \quad (49-2)$$

برای به دست آوردن چگالی کاهیده از روی فشار ابتدا یک حدس برای چگالی که معمولاً برای گاز ایده‌آل است زده می‌شود و مقدار فشار را از فرمول بالا محاسبه می‌کنند و فشار محاسبه شده را با فشار ورودی کاربر مقایسه کرده و اگر خطای گزارش شده آن مقدار مطلوب $|(p_{calc} - p_{input})/p_{input}| <$

10^{-6} را ارضا کرد آنگاه چگالی آن ترکیب در دما گزارش شده به دست آمده و اگر مقدار خطا بیشتر از این مقدار باشد به صورت تکراری این حلقه تکرار می پذیرد تا به چگالی مطلوب برسد.

مرحله پنجم: جایگذاری مقدار δ و δ_0 در رابطه (۲-۱۴) و محاسبه مقدار انرژی هلمولتز کاهیده قسمت ایده آل (φ_0) با توجه به مقدار دمای معکوس کاهیده و همچنین محاسبه مقدار مشتق اول و دوم انرژی هلمولتز کاهیده ایده آل با توجه به روابط (۲-۱۷) و (۲-۱۸).

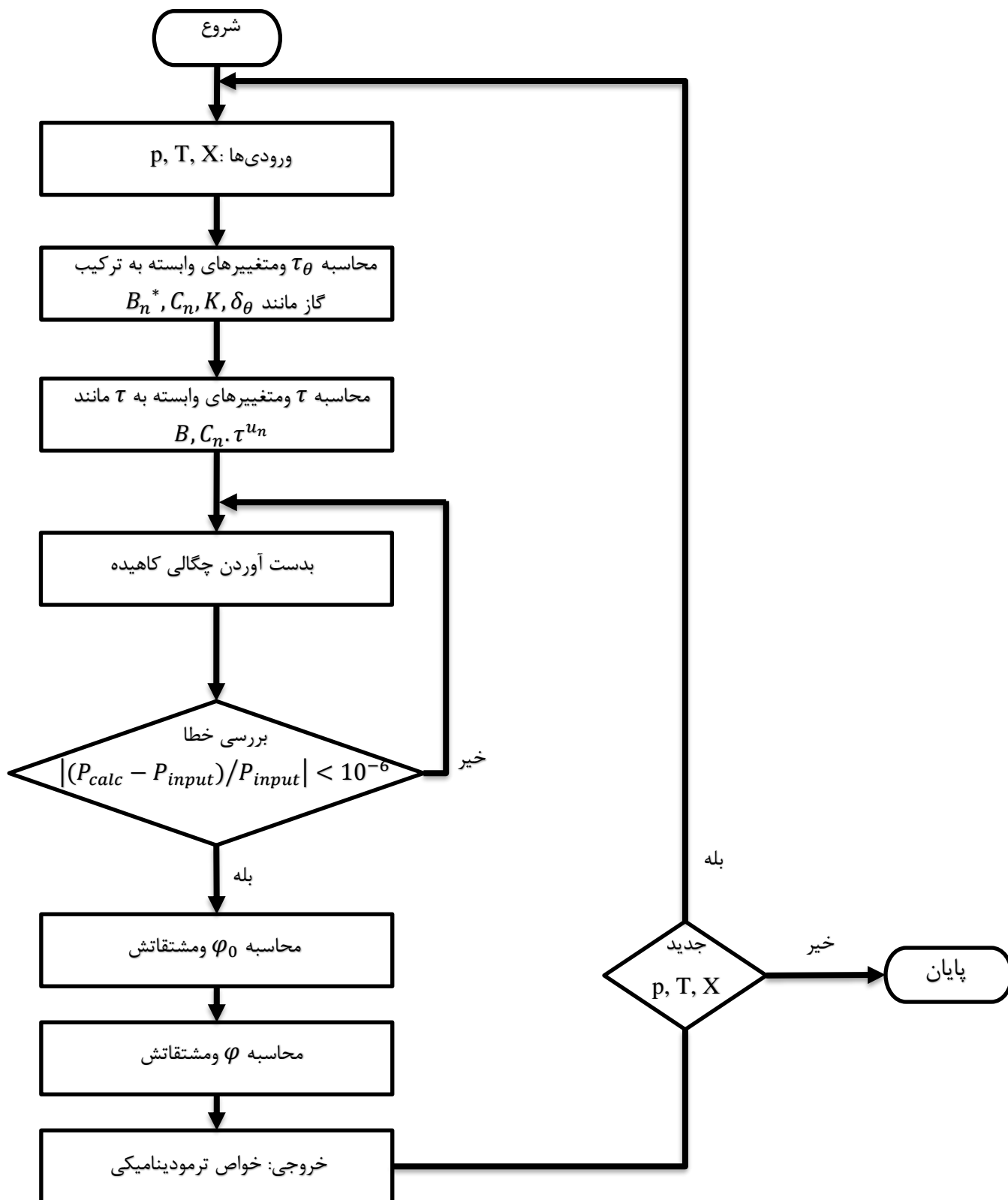
مرحله ششم: محاسبه انرژی هلمولتز کاهیده کلی با توجه به فرمول زیر:

$$\varphi = \varphi_0 + \frac{B \cdot \delta}{K^3} - \delta \sum_{n=13}^{18} C_n \cdot \tau^{u_n} + \sum_{n=13}^{58} C_n \cdot \tau^{u_n} \cdot \delta^{b_n} \exp(-c_n \cdot \delta^{k_n}) \quad (2-50)$$

و محاسبه عبارات شامل مشتق اول و دوم انرژی هلمولتز کاهیده با توجه به روابط (۲-۲۳) تا (۲-۲۷).

مرحله هفتم: محاسبه خاصیت های ترمودینامیکی شامل ضریب تراکم پذیری، چگالی، انرژی داخلی، آنتالپی، آنتروپی، ظرفیت گرمایی در حجم ثابت، ظرفیت گرمایی در فشار ثابت، ضریب ژول تامسون و سرعت صوت با توجه به روابط (۲-۲۸) تا (۲-۳۶).

مرحله هشتم: پایان یا بازگشت به مرحله اول با متغیرهای ورودی جدید.



شکل ۱-۲ روند محاسبه خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی توسط استاندارد 1 – ISO 20765

فصل ۳: شبکه‌های عصبی مصنوعی

۳_۱ مقدمه

پیدایش محاسبات هوشمند و هوش مصنوعی از زمانی آغاز شد که محققین با مطالعه بعضی از رفتارهای پیچیده و خارق‌العاده انسان از قبیل ادراک، استدلال، صحبت کردن و ... سعی در بیان این رفتارها به صورت منطقی و ریاضی داشته‌اند و علاوه بر این گسترش روزافزون علم دیجیتال منطقی از قبیل رایانه‌ها، این سوال در ذهن بشر ایجاد گشت که آیا می‌توان رایانه‌ها را وادار به کارهایی کرد که انسان‌ها در حال حاضر آن را بهتر انجام می‌دهند. برای همین شبکه‌های عصبی مصنوعی با برداشت ایده‌ای از سیستم‌های عصبی بیولوژیکی مغز انسان به وجود آمدند [۵۳].

۳_۲ کاربردهای شبکه‌های عصبی مصنوعی

مسائل بسیار مختلفی موجود می‌باشند که قابلیت شبیه‌سازی و حل توسط روش شبکه‌های عصبی مصنوعی را دارند و به طور کلی این مسائل به چهار بخش تقسیم می‌گردند که به شرح زیر می‌باشند [۵۴]:

۱. مدل‌سازی و تخمین تابع^۱: اصلی‌ترین و ابتدایی‌ترین ویژگی شبکه‌های عصبی، مدل‌سازی و تخمین تابع است به گونه‌ای که شبکه می‌تواند یک مدل ریاضی را بر روی یک مجموعه از ورودی و خروجی نگاشت نماید حتی در صورتی که رابطه بین ورودی‌ها و خروجی‌ها به شدت بدرفتار و غیرخطی باشد.
۲. یادگیری الگو^۲: یکی از کاربردهای مهم شبکه‌های عصبی مصنوعی یادگیری الگو می‌باشد که انسان‌ها به طور غریزی این ویژگی را دارند به عنوان مثال چهره یک فردی که در گذشته ملاقات کرده‌ایم ولی با گذشت زمان تغییرات محسوسی در چهره این فرد ایجاد شده است را می‌توان تشخیص داد. از کاربردهای دیگر شبکه‌های عصبی مصنوعی در زمینه یادگیری الگو، تشخیص خط می‌باشد به نحوی که نوشته یک فردی که تعمداً با یک نوع دست خط دیگر نوشته شده باشد را بتواند تشخیص دهد.
۳. استخراج ویژگی^۳: یکی دیگر از کاربردهای شبکه‌های عصبی مصنوعی در استخراج ویژگی می‌باشد به عنوان یک مثال کاربردی می‌توان به تشخیص زوج و فرد بودن پلاک ماشین‌ها در محدوده طرح ترافیک اشاره کرد که با شناسایی پلاک خودرو توسط دوربین، اعداد روی پلاک به طور واضح مشخص و ویژگی آن یعنی زوج و فرد بودن خودرو به صورت اتوماتیک تشخیص داده شود.

^۱ Function approximation

^۲ Pattern recognition

^۳ Feature extraction

۴. حافظه‌های انجمنی^۱: شبکه‌های عصبی مصنوعی را می‌توان طوری آموزش داد که بتوان با آن یک سری اطلاعات مخدوش شده را دریافت و آن اطلاعات را تحلیل و تکمیل کند به‌عنوان مثال یک متنی که به‌صورت دست خط نوشته شده درحالی‌که قسمتی از آن مخدوش شده یا بد خط باشد، نزدیک‌ترین حرفی که می‌توان به آن نسبت داد را پیدا کند که این همان مفهوم حافظه‌های انجمنی می‌باشد.

باید به این نکته توجه کرد که کار شبکه‌های عصبی مصنوعی به‌طور کلی بیان پدیده‌ها به‌صورت ریاضی است یعنی مدل‌سازی و تخمین تابع از یک سری ورودی و خروجی و همه کاربردهای شبکه عصبی در واقع یک نوع تخمین تابع می‌باشد.

۳_۳ پیشینه تاریخی شبکه‌های عصبی مصنوعی

اولین قدم در شبکه‌های عصبی مصنوعی توسط وارن مک کلاک^۲ دانشمند علوم اعصاب و ریاضی‌دان والتر پیتس^۳ در سال ۱۹۴۳ میلادی برداشته شد که آنها به مطالعه نورون‌های عصبی انسان پرداخته و بیان کردند که هر تابع قابل محاسبه پیچیده را می‌توان توسط سیستم نورونی عصبی پیاده‌سازی کرد. دونالد هب^۴ در سال ۱۹۴۹ در کتاب سازمان‌دهی رفتار^۵ خود به شرح عملکرد نورون‌ها پرداخته و با بیان قوانین مبتنی بر رفتارهای مشاهده شده از نورون‌ها به گسترش این عرصه کمک‌های شایانی کرد. در دهه ۱۹۵۰ با پیشرفت‌های گسترده در زمینه ساخت رایانه، اولین و ساده‌ترین مدل شبکه‌های عصبی توسط IBM^۶ پیاده‌سازی شد. در سال ۱۹۵۸ قوانین مربوط به آموزش نورون‌های عصبی مصنوعی که پرسپترون نام گرفته بودند توسط روزنبلانت^۷ پی‌ریزی شد. وی با استفاده از یک شبکه پرسپترون یک لایه اقدام به حل مسئله دسته‌بندی کرد. مینسکی و پاپرت^۸ در سال ۱۹۶۹ به این قضیه پی بردند که پرسپترون‌های یک لایه توانایی حل مسائل پیچیده را ندارد و علاوه بر این شبکه پرسپترون باید توسط یک الگوریتم ویژه‌ای جهت استحصال جواب‌های دقیق‌تر آموزش ببیند. در سال ۱۹۸۶ مسئله پس انتشار خطا که قبلاً در سال ۱۹۶۳ توسط برایسون^۹ و همکاران فقط معرفی شده بود، مورد توجه ویژه‌ای قرار گرفت و با ترمیم کردن این الگوریتم مطالعات جدید بر روی شبکه‌های عصبی با توجه به جواب‌های دقیق‌تری که شبکه ارائه می‌داد شروع شد ([۵۳], [۵۵]).

^۱ Associative memory

^۲ Warren McCloch

^۳ Walter Pitts

^۴ Donald Hebb

^۵ Organization of behaviour

^۶ International Business Machines

^۷ Rosenblatt

^۸ Minsky and Papert

^۹ Bryson

۳_۴ شبکه‌های عصبی زیستی

در مقایسه‌ای ساده بین زمان پاسخ‌گویی یک سلول عصبی انسان نسبت به یک واحد دیجیتال مانند یک ترانزیستور سیلیکونی، سلول عصبی انسان در حد یک میلی ثانیه به یک سیگنال جواب می‌دهد در حالی که یک ترانزیستور سیلیکونی در کمتر از یک نانو ثانیه یک سیگنال خارجی را دریافت و پاسخ می‌دهد. ریشه این اتفاق در این است که در سلول‌های عصبی انسان فرآیندها به صورت شیمیایی الکتریکی اتفاق می‌افتد که انجام شیمیایی ورودی و خروجی‌ها باعث کندی در پاسخ‌دهی می‌شود در حالی که در یک ترانزیستور سیلیکونی فرآیندها کاملاً الکترونی و دیجیتال می‌باشند، اما با این وجود شاهد این امر هستیم که ذهن انسان و حتی سایر جانوران فرآیندهایی از قبیل تشخیص چهره، تشخیص بو، فرآیندهای مبتنی بر گراف مانند تشخیص مسیر و ... را سریع‌تر از رایانه‌ها انجام می‌دهند. علت این امر چیست؟ در پاسخ به این سوال باید نوع تحلیل فرآیندها در سیستم‌های دیجیتال و مصنوعی و سیستم‌های زیستی بررسی کرد که سیستم‌های زیستی تحلیل و پردازش را به صورت کاملاً موازی انجام داده ولی سیستم‌های دیجیتال ذاتاً سری هستند و در یک سلول زیستی مانند انسان برای تحلیل یک فرآیند حداقل صد نرون تا بیش از میلیون‌ها نرون درگیر و فرآیندها را پردازش می‌کنند در حالی که در یک واحد دیجیتالی تعداد نرون‌های بسیار کمتری در این امر دخیل هستند [۵۶].

با توجه به توضیحات ذکر شده، برای بیان این‌که چگونه رایانه‌های دیجیتال منطقی می‌توانند کارهایی را که سیستم‌های بیولوژیکی به صورت بسیار راحت و ساده انجام می‌دهند را شبیه‌سازی کنند، ابتدا باید به بررسی اجزا و نحوه عملکرد سلول‌های زیستی از قبیل یک نرون عصبی مغز انسان پرداخت و به چگونگی برداشت ایده و پیاده‌سازی آن در رایانه‌ها صحبت کرد.

در سیستم‌های عصبی زیستی انسان، نرون اصلی‌ترین عضو آن می‌باشد به نحوی که ده درصد از مغز انسان را نرون تشکیل می‌دهد و به طور متوسط در بدن انسان بیش از صد تریلیون نرون وجود دارد. وظیفه نرون‌ها در حالت کلی دریافت اطلاعات و پردازش و انتشار اطلاعات به قسمت‌های دیگر می‌باشد. نرون‌های عصبی به طور کلی از سه قسمت مشخص همانند شکل ۳-۱ به نام‌های دندریت^۱، بدنه سلول^۲ و آکسون^۳ تشکیل شده‌اند که به بیان وظایف این قسمت‌ها و نحوه عملکرد آنها خواهیم پرداخت [۵۶].

دندریت‌ها قسمت‌هایی از نرون‌های عصبی هستند که به عنوان دریچه‌های ورودی عمل می‌کنند به نحوی که اطلاعات را به صورت الکتروشیمیایی در محلی به نام سیناپس^۴ از آکسون نرون دیگر دریافت و آن را به بدنه سلول که سوما^۵ نام دارد انتقال می‌دهد. در بدنه سلول سیگنال‌ها با یک عمل

^۱ Dendrite

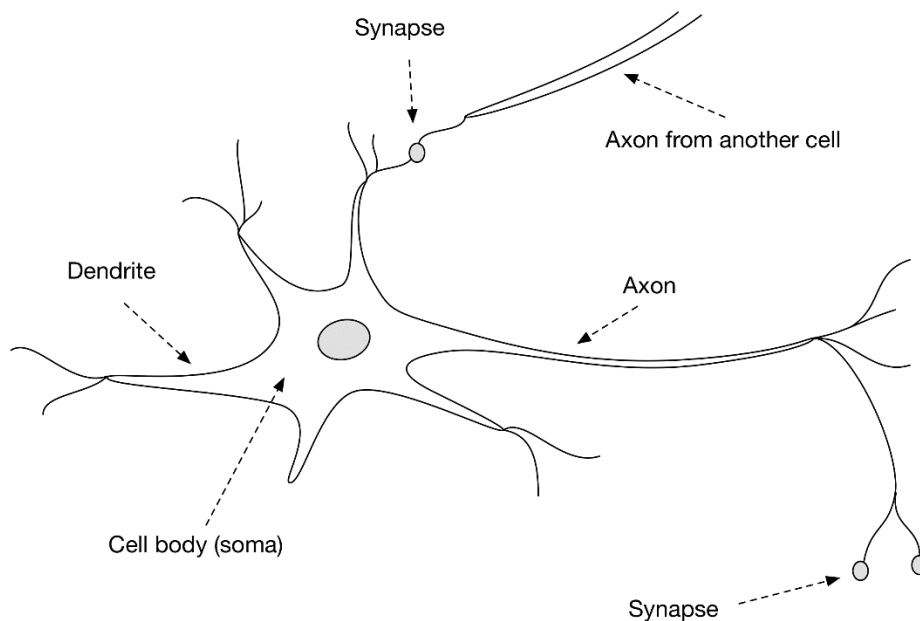
^۲ Cell body

^۳ Axon

^۴ Synapse

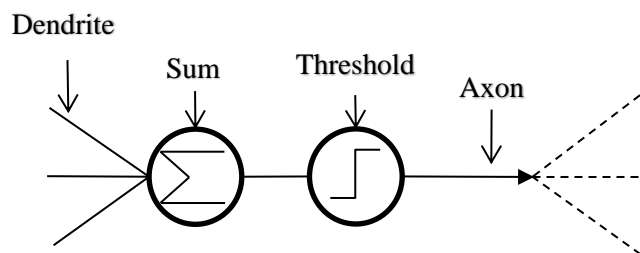
^۵ Soma

جمع جبری ساده و سپس با رسیدن به سطح‌های آستانه^۱ تعریف شده فعالیت نورون را آغاز می‌کند و به اصطلاح نورون آتش می‌گیرد و سیگنالی را از بدنه سلول به سمت آکسون سلول عصبی انتقال می‌دهد. آکسون‌ها رشته‌های طولی تری نسبت به دندریت‌ها هستند که وظیفه آنها انتقال اطلاعات پردازش شده به سلول عصبی دیگر است که این کار در سیناپس انجام می‌گیرد.



شکل ۱-۳ شماتیکی از یک نورون بیولوژیکی ساده

اختلاف پتانسیلی که باعث جابجایی سیگنال‌ها از سیناپس به سمت دندریت است به دلیل وجود مایعات مختلف در بدن انسان می‌باشد به نحوی که یون‌های مثبت و منفی که در سیناپس وجود دارند باعث انتقال اطلاعات می‌شود و یکی از راه‌های مختل کردن یا تشدید فرآیند ارسال اطلاعات، تغییر میزان بار الکتریکی در سیناپس‌ها می‌باشد به نحوی که می‌تواند باعث شود که نورون هیچ اطلاعاتی را دریافت و انتقال ندهد. ساختار ریاضی یک نورون عصبی همانند شکل ۲-۳ می‌باشد به نحوی که شبکه‌های عصبی چندلایه با برداشتی از ایده پردازش شبکه‌های عصبی زیستی شکل گرفته‌اند [۵۶].



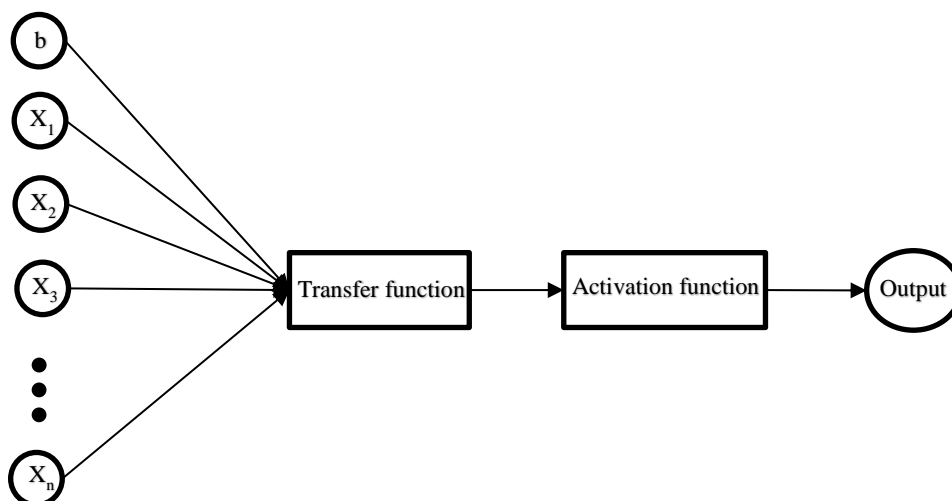
شکل ۲-۳ ساختار ریاضی یک نورون بیولوژیکی

^۱ Threshold

۳_۵ نورون عصبی مصنوعی (پرسپترون)

با توجه به مطالب بالا در مورد نورون‌های زیستی و نحوه عملکرد آنها، یک نورون عصبی مصنوعی که پرسپترون نام دارد با برداشت ایده‌ی عملکردی نوع زیستی نورون، همانند شکل ۳-۳ می‌باشد. همان‌طور که در شکل زیر مشاهده می‌شود یک پرسپترون از یک بردار ورودی، مجموعه وزن‌های ورودی و ثابت بایاس، واحد پردازش شامل توابع انتقال^۱ و توابع فعال‌سازی^۲ و قسمت خروجی تشکیل شده است. در واقع وزن‌ها حکم شدت پتانسیل موجود در سیناپس‌های نورون‌های زیستی، بردارهای ورودی همانند دندریت‌ها، واحد پردازش مانند بدنه سلول (سوما) و خروجی پرسپترون وظیفه‌ای همانند آکسون دارد. نحوه تولید خروجی در یک پرسپترون تنها، بدین صورت است که حاصل مجموع ضرب تک تک بردارهای ورودی با بردار وزن، با یک عدد ثابت به نام بایاس جمع می‌شود و این عدد ابتدا وارد تابع انتقال (TF) شده سپس حاصل این تابع وارد تابع فعال‌ساز می‌شود و خروجی تابع فعال‌ساز، خروجی پرسپترون می‌باشد.

با توجه به ضعف پرسپترون تنها در پاسخ‌گویی و پایین بودن دقت آن، مطابق با اطلاعات گفته‌شده در پیشینه تاریخی، یک شبکه به هم پیوسته از پرسپترون‌ها در چندلایه ایجاد گشته به نحوی که تا به حال توانایی شبیه‌سازی هر مسئله‌ای با توجه به انتخاب بهینه پارامترهای موثر آن را دارد [۵۳].



شکل ۳-۳ یک نورون عصبی مصنوعی ساده (پرسپترون)

به‌طور کلی یک شبکه عصبی مصنوعی پرسپترون چندلایه از سه لایه مجزا به نام‌های لایه ورودی^۳ که تعداد نورون‌های لایه ورودی همان تعداد متغیرهای مستقل مسئله می‌باشد، لایه‌های پنهان^۴ که

^۱ Transfer function

^۲ Activation function

^۳ Input layer

^۴ Hidden layers

وظیفه برقراری ارتباط بین ورودی‌های مسئله و خروجی موردنظر را دارد. تعداد این لایه‌های پنهان بستگی به پیچیدگی مسئله موردبررسی اعم از بدرفتار بودن و غیرخطی بودن رابطه بین ورودی‌ها و خروجی دارد که طی یک عمل سعی و خطا می‌توان این تعداد لایه‌های پنهان را پیدا کرد ولی عمدتاً با توجه به مسائل شبیه‌سازی‌شده، تعداد لایه‌های پنهان بین یک الی سه لایه در نظر گرفته شده است. لایه خروجی^۱ نیز حاوی خروجی‌ها یعنی متغیرهای وابسته مسئله می‌باشد که تعداد نورون‌ها در این لایه همان تعداد خروجی‌های مسئله است [۵۷].

نحوه ارتباط بین نورون‌ها در شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه همانند شکل ۳-۴ با توجه به کاربرد آن متفاوت می‌باشد. در حالت کلی دو نوع ارتباط بین پرسپترون‌ها وجود دارد که عبارتند از پیشرو^۲ و غیر پیشرو^۳ که در حالت پیشرو خروجی یک نورون در یک لایه به ورودی یک نورون در لایه بعدی متصل می‌گردد که این مدل در مسائل تخمین تابع بیشتر استفاده می‌شود. اما در حالت غیر پیشرو خود به دو صورت مجزا یا ترکیبی باهم می‌باشد که یا خروجی یک نورون در یک لایه به نورون دیگر در همان لایه (عرضی^۴) برمی‌گردد و یا خروجی یک نورون در یک لایه به نورونی دیگر در یک لایه قبلی بازمی‌گردد (پس‌خور^۵) [۵۳].

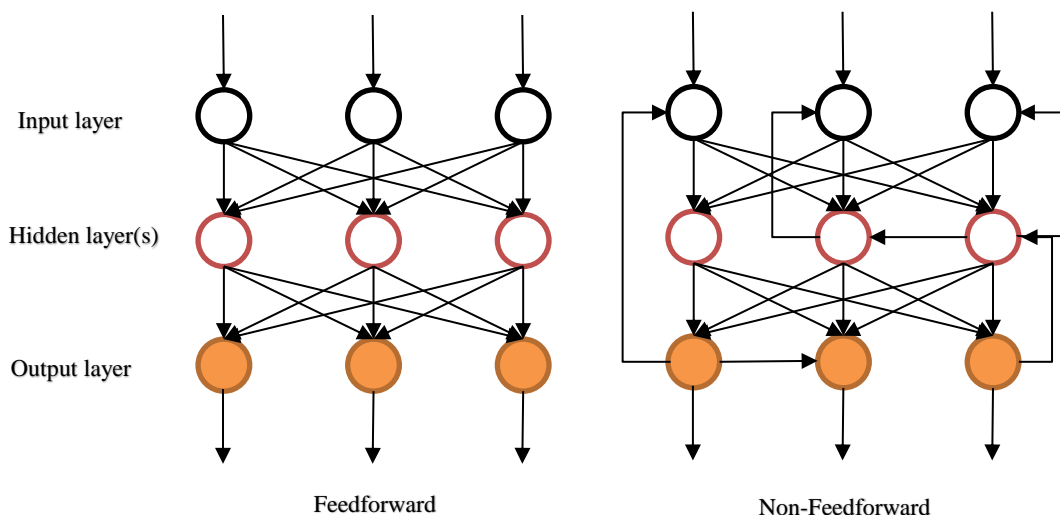
^۱ Output Layer

^۲ Feedforward

^۳ Non-feedforward

^۴ Lateral

^۵ Feedbackward



شکل ۳-۴ نحوه ارتباط بین نورون‌های در شبکه‌های عصبی مصنوعی

۳_۶ نحوه عملکرد شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه پیشرو

در نگاهی دقیق‌تر به شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه، این شبکه‌ها همانند شکل ۳-۵ که یک شبکه عصبی تشکیل شده از یک لایه میانی و یک خروجی است، دارای چهار جزء اصلی به ترتیب زیر می‌باشند [۵۳]:

وزن و بایاس (W): وزن‌ها و بایاس‌ها ضریب‌های تطبیقی هستند که قدرت و اثرپذیری ورودی‌ها را مشخص می‌کنند. در ابتدا شروع شبکه عصبی این وزن‌ها و بایاس‌ها به صورت اتفاقی انتخاب می‌شوند ولی در طول فرآیند شبکه توسط یک فرآیند آموزشی، باید بهترین مقدار را جهت تولید خروجی کسب کنند.

تابع انتقال (TF): توابع انتقال مختلفی در شبکه‌های عصبی وجود دارد ولی متنوع‌ترین آنها در شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه، تابع جمع ساده می‌باشد به صورتی که این تابع مقادیر حاصل از ضرب تک تک بردارهای ورودی در وزن‌ها را با بردار بایاس جمع می‌کند که خروجی این تابع (net) آرگومان تابع فعال‌سازی را تشکیل می‌دهد.

تابع فعال‌سازی (AF): نتایج بدست آمده از تابع انتقال که معمولاً تابع جمع می‌باشد وارد تابع فعال‌سازی می‌شود که در حالت بیولوژیکی این تابع یک تابع حد آستانه است یعنی اگر مقدار خروجی تابع انتقال از مقدار آستانه تعریف شده بزرگ‌تر باشد، خروجی این تابع فعال‌سازی یک است ولی اگر مقدار خروجی تابع انتقال کوچک‌تر از مقدار آستانه باشد، خروجی تابع فعال‌سازی صفر می‌شود. توابع فعال‌سازی که در شبکه‌های عصبی مصنوعی برای تخمین تابع و شبیه‌سازی استفاده می‌شود به دو صورت خطی و غیرخطی می‌باشند.

توابع فعال‌ساز غیرخطی معمولاً برای لایه‌های پنهان استفاده می‌گردد که نوع رایج آن تابع سیگموئید^۱ است. تابع سیگموئید همانند نمودارهای شکل ۳-۶ و شکل ۳-۷ به دو صورت یک‌قطبی که خروجی‌های آن بین صفر و ۱ می‌باشد (فرمول (۳-۱)) و به صورت دوقطبی که خروجی‌های آن بین ۱- و ۱ است (فرمول (۳-۲)) تشکیل می‌شود. به‌طور کلی به دلیل کارایی بیشتری که سیگموئید دوقطبی با ضریب $a = 2$ در تخمین تابع از خود نشان داده است از این تابع به‌صورت فراوان استفاده می‌گردد. شایان ذکر است که تابع سیگموئید دوقطبی با ضریب $a = 2$ همان تابع تانژانت هایپربولیک می‌باشد.

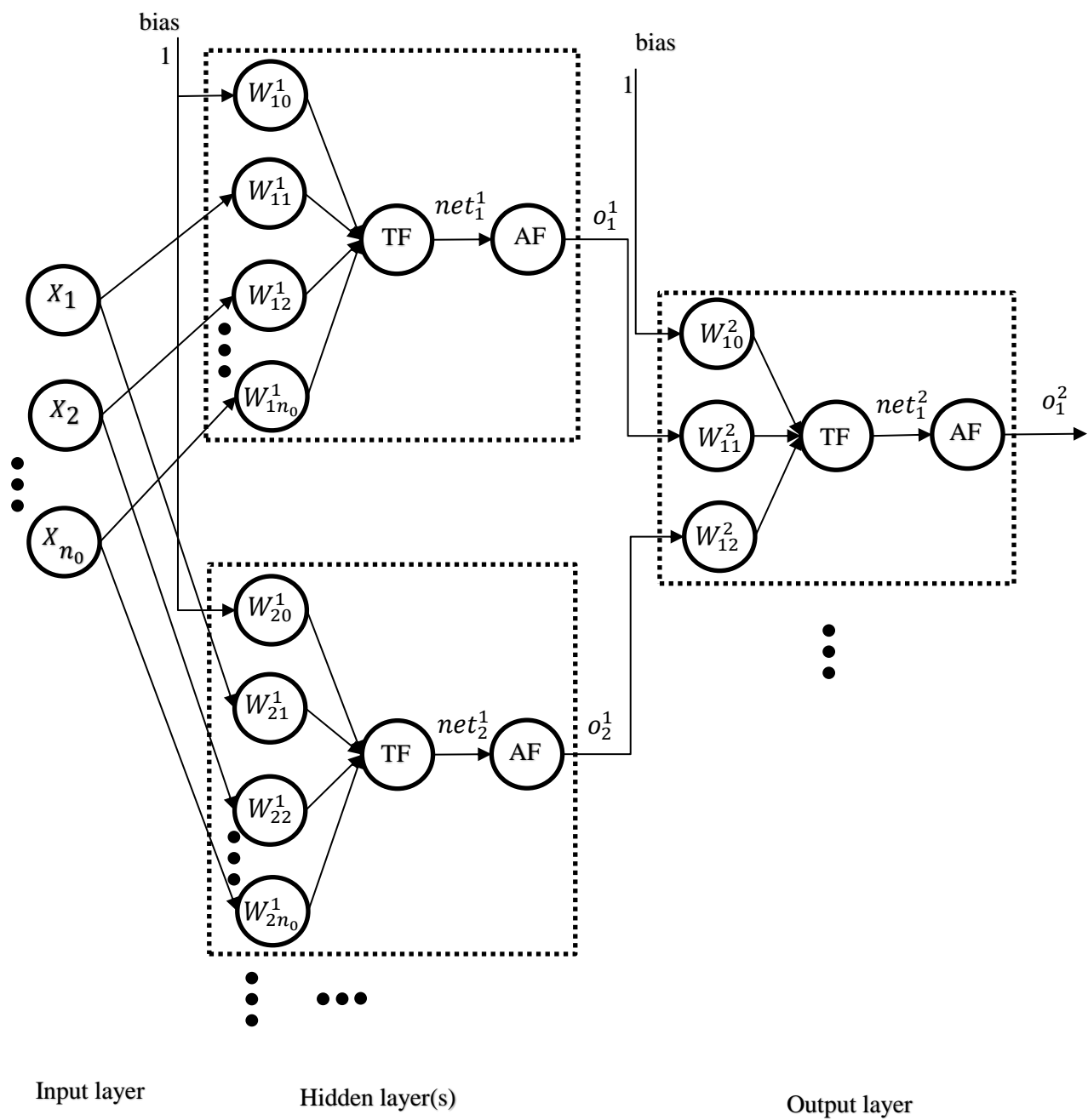
$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-ax}} \quad (۱-۳)$$

$$f(x) = \frac{1 - e^{-ax}}{1 + e^{-ax}} \quad (۲-۳)$$

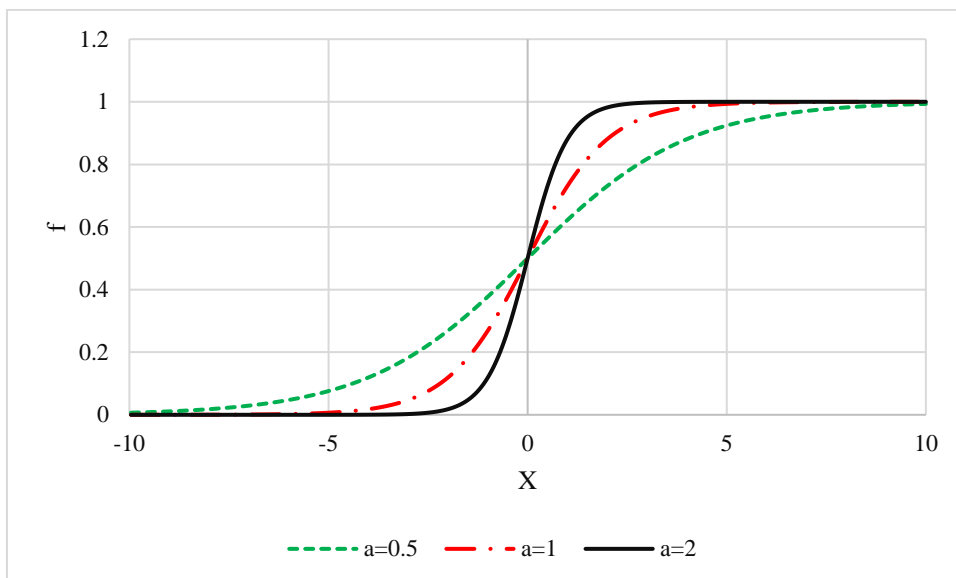
توابع فعال‌ساز خطی در شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه که در لایه خروجی استفاده می‌گردد بیشتر تابع همانی است (فرمول (۳-۳)) یعنی همان خروجی تابع انتقال را در لایه خروجی را برمی‌گرداند.

$$f(x) = x \quad (۳-۳)$$

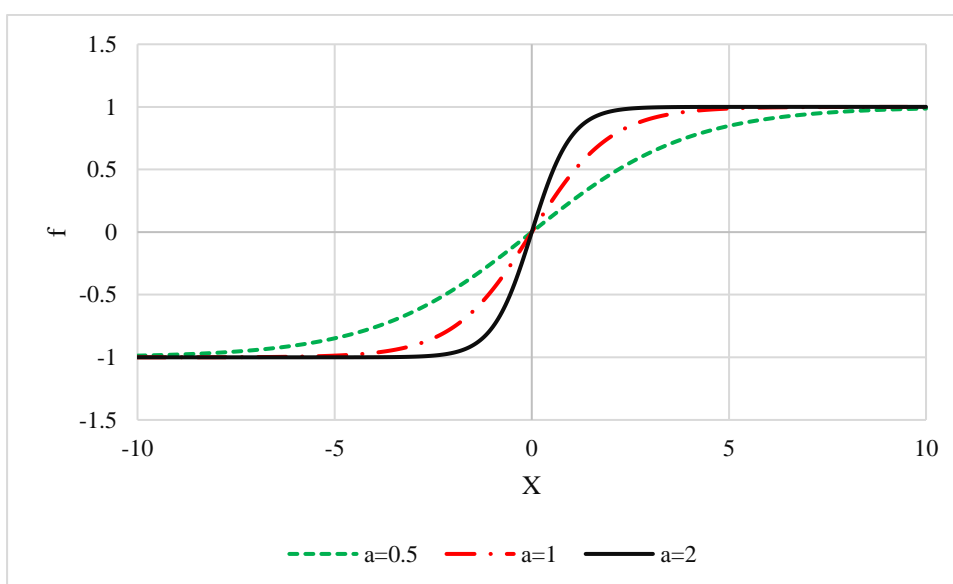
^۱ Sigmoid



شکل ۳-۵ شماتیکی از شبکه‌های عصبی مصنوعی



شکل ۳-۶ تابع سیگموئید یک قطبی



شکل ۳-۷ تابع سیگموئید دو قطبی

۳_۷ بیان ریاضی عملکرد شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه

با توجه به تعریف اجزاء شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه در این قسمت فرم ریاضی عملکرد یک شبکه پرسپترون مطابق شکل ۳-۵ که دو نورون در لایه پنهان و یک خروجی در لایه آخر دارد را بیان می‌کنیم.

بردار وزن‌ها که شامل وزن و بایاس با زیر وند صفر می‌باشد به ترتیب در نورون‌های اول و دوم لایه پنهان و سپس در لایه آخر به صورت زیر است:

$$\begin{cases} W_{10}^1, W_{11}^1, W_{12}^1, \dots, W_{1n_0}^1: \text{نورون اول لایه پنهان} & (4-3) \\ W_{20}^1, W_{21}^1, W_{22}^1, \dots, W_{2n_0}^1: \text{نورون دوم لایه پنهان} \\ W_{10}^1, W_{11}^1, W_{12}^1, \dots, W_{1n_0}^1: \text{لایه آخر} \end{cases}$$

خروجی‌های توابع انتقال و فعال‌سازی هر نورون به صورت زیر می‌باشد:

$$\text{neuron}_1^1 = \begin{cases} \text{net}_1^1 = \sum_{i=1}^{n_0} W_{1i}^1 \times X_i & (5-3) \\ o_1^1 = f(\text{net}_1^1) \end{cases}$$

$$\text{neuron}_2^1 = \begin{cases} \text{net}_2^1 = \sum_{i=1}^{n_0} W_{2i}^1 \times X_i & (6-3) \\ o_2^1 = f(\text{net}_2^1) \end{cases}$$

$$\text{neuron}_1^2 = \begin{cases} \text{net}_1^2 = \sum_{i=1}^{n_0} W_{1i}^2 \times X_i & (7-3) \\ o_1^2 = f(\text{net}_1^2) \end{cases}$$

برای ساده‌سازی می‌توان این روابط را به شکل برداری به صورت زیر نشان داد:

$$W_1^1 \triangleq [W_{10}^1, W_{11}^1, W_{12}^1, \dots, W_{1n_0}^1]^T \quad (8-3)$$

$$W_1^2 \triangleq [W_{10}^2, W_{11}^2, W_{12}^2, \dots, W_{1n_0}^2]^T \quad (9-3)$$

$$W_2^1 \triangleq [W_{20}^1, W_{21}^1, W_{22}^1, \dots, W_{2n_0}^1]^T \quad (10-3)$$

$$W_1 \triangleq [W_1^1, W_1^2] \quad (11-3)$$

$$W_2 \triangleq [W_2^1] \quad (12-3)$$

$$X \triangleq [1, X_1, X_2, \dots, X_{n_0}]^T \quad (13-3)$$

$$\text{net}_1 = (W_1)^T X \quad (14-3)$$

$$o_1 = f_1(\text{net}_1) \quad (15-3)$$

$$O_1 \triangleq [1, (o_1)^T]^T \quad (16-3)$$

$$\text{net}_2 = (W_2)^T O_1 \quad (17-3)$$

$$O_2 = f_2(\text{net}_2) \quad (18-3)$$

۳_۸ مسئله یادگیری

مسائل یادگیری به دو دسته کلی یادگیری نظارت‌شده^۱ و یادگیری غیر نظارت‌شده^۲ تقسیم می‌شوند که یادگیری غیر نظارت‌شده خود به دو صورت غیر نظارت‌شده محض و یادگیری تقویتی^۳ می‌باشد. باید خاطر نشان کرد که مسائل یادگیری در بین رشته‌های مختلف به صورت فراوان وجود داشته به‌عنوان مثال در رشته روان‌شناسی به‌طور کامل به این مسائل یادگیری به‌صورت فرضیه‌ای پرداخته می‌شود و این مسائل تنها مختص به شبکه‌های عصبی مصنوعی نمی‌باشد [۵۲].

مسائل یادگیری نظارت‌شده بدین صورت است که یک دسته داده ورودی به همراه خروجی‌ها به یک پردازشگر داده که حال می‌خواهد یک شبکه عصبی باشد یا یک رگرسیون چندجمله‌ای یا غیره ارائه می‌گردد به‌نحوی که این پردازشگر داده با استفاده از مقایسه بین خروجی تولیدشده و خروجی هدف یک بازخوردی به پردازشگر جهت تنظیم پارامترهای آن فرستاده می‌شود و پردازشگر بهترین حالت خود را پیدا می‌کند.

مسائل یادگیری غیر نظارت‌شده همان‌طور که اشاره شد به دو صورت محض و تقویتی تقسیم‌بندی می‌شود که در حالت غیر نظارت‌شده محض بدین صورت می‌باشد که هیچ معلم یا ناظری سیگنالی را در مورد مطلوبیت پردازشگر را ارسال نمی‌کند به‌عبارتی دیگر به پردازشگر گفته نمی‌شود که خروجی هدف چه می‌باشد که در این حالت پردازشگر با استفاده از طبقه‌بندی بین الگوهای ورودی، ارتباطی بین الگوهای ورودی و خروجی را پیدا می‌کند. یک مثال بارز از این نوع مسئله یادگیری را می‌توان به بعضی از تست‌های هوش اشاره کرده که چند تصویر را با یک الگوی خاصی تغییر داده و سپس خروجی یک تصویر خام با توجه به الگوهای استفاده‌شده در تصاویر قبلی را سوال می‌کند که در اینجا هیچ گونه آموزش ثابتی برای این گونه تست‌های هوش وجود ندارد و فقط باید با طبقه‌بندی و استخراج ویژگی‌ها قبلی به جواب رسید.

اما مسائل یادگیری تقویتی ترکیبی بین یادگیری نظارت‌شده و غیر نظارت‌شده محض می‌باشد به‌صورتی که توسط یادگیری غیر نظارت‌شده به یک الگویی می‌رسد که ارزش این الگو با استفاده از یک پاداش یا مجازات تعیین می‌گردد.

اکثر علمی که بشر در ابتدا یاد گرفته به‌صورت غیر نظارت‌شده می‌باشد به‌عنوان مثال می‌توان به کشف قوانین موجود در طبیعت یا مسائل موجود در زمینه‌های پزشکی اشاره کرد. یادگیری مسائل غیر نظارت‌شده با توجه به ویژگی‌های خاص موجودات زنده همانند انسان بسیار ساده‌تر است تا پیاده‌سازی آن توسط یک شبکه عصبی مصنوعی و مسائل یادگیری که در زمینه‌های فنی مهندسی توسط روش‌های شبکه‌های عصبی قابل حل می‌باشند همانند این پایان‌نامه عمدتاً به‌صورت یادگیری

^۱ Supervised learning

^۲ Unsupervised learning

^۳ Recurrent learning

نظارت شده است یعنی یک مجموعه ورودی و خروجی از قبل بدست آمده به شبکه عصبی داده می شود و شبکه رابطه ای ریاضی بین این ورودی و خروجی ها را پیدا می کند.

۳_۹ آموزش شبکه عصبی

فرآیند آموزش^۱ در مسائل یادگیری به صورت نظارت شده در روش شبکه های عصبی مصنوعی دارای الگوریتم های گوناگونی می باشد و باید به این نکته توجه کرد که در ابتدا برای بکار بردن شبکه های عصبی مصنوعی پرسپترون چندلایه، وزن ها و بایاس ها در لایه های پنهان و خروجی به صورت تصادفی انتخاب می شوند و با توجه به خروجی های تولید شده از شبکه و خروجی هدف، باید در جهت رسیدن به خروجی مطلوب تر یعنی نزدیک کردن خروجی های شبکه به خروجی های هدف، وزن ها و بایاس هایی که ابتدا به صورت تصادفی انتخاب شده بودند باید اصلاح شوند و در اصطلاح شبکه آموزش می بیند که بهترین وزن ها و بایاس ها را جهت دریافت نتیجه ی دقیق پیدا کند. برای آموزش شبکه الگوریتم های متفاوتی موجود می باشند که یکی از این الگوریتم ها، الگوریتم پس انتشار خطا^۲ است.

۳_۹_۱ الگوریتم پس انتشار خطا

هدف اصلی در این الگوریتم کمینه سازی تابع هزینه^۳ است که تابع هزینه برابر نصف میانگین مجذور اختلاف های بین خروجی هدف و خروجی شبکه می باشد (فرمول (۳-۱۹)). برای این کار روش ها و الگوریتم های متفاوتی وجود دارد که ابتدایی ترین آن ها روش کاهش شیب^۴ است. به عنوان مثالی از این الگوریتم یک شبکه عصبی پرسپترون همانند شکل ۳-۵ در نظر بگیرید که وزن های بهبود یافته آن در لایه ی آخر و لایه ی پنهان به صورت رابطه (۳-۲۰) و رابطه (۳-۲۱) می باشد.

$$E_{\text{cost_func}}^{(k)} = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N (Y_i - O_{2i})^2 \quad (۳-۱۹)$$

وزن های جدید برای لایه ی آخر و لایه ی پنهان بر اساس وزن های قدیمی و مشتق تابع هزینه نسبت به وزن به ترتیب به صورت زیر به دست می آیند:

$$W_2^{(k+1)} = W_2^{(k)} + (-\alpha \times \frac{\partial E_{\text{cost_func}}^{(k)}}{\partial W_2^{(k)}}) \quad (۳-۲۰)$$

$$W_1^{(k+1)} = W_1^{(k)} + (-\alpha \times \frac{\partial E_{\text{cost_func}}^{(k)}}{\partial W_1^{(k)}}) \quad (۳-۲۱)$$

^۱ Training process

^۲ Back-Propagation algorithm

^۳ Cost function

^۴ Gradient descent

که α گام آموزش می‌باشد.

برای محاسبه وزن‌های جدید لایه‌ی آخر مطابق با رابطه (۲۰-۳)، ابتدا باید مشتق تابع هزینه نسبت به وزن‌های قدیم محاسبه شود که با در نظر گرفتن روابط (۲۲-۳) تا (۲۴-۳)، ساده‌شده مشتق‌های زنجیره‌ای عبارت تابع هزینه به صورت رابطه (۲۹-۳) تبدیل می‌گردد:

$$\text{net}_2 = (W_2)^T O_1 \quad (22-3)$$

$$O_2 = f_2(\text{net}_2) \quad (23-3)$$

$$f_2(x) = x \rightarrow f_2'(x) = 1 \quad (24-3)$$

$$\frac{\partial E_{\text{cost_func}}^{(k)}}{\partial W_2^{(k)}} = \frac{\partial E_{\text{cost_func}}^{(k)}}{\partial O_2^{(k)}} \times \frac{\partial O_2^{(k)}}{\partial \text{net}_2^{(k)}} \times \frac{\partial \text{net}_2^{(k)}}{\partial W_2^{(k)}} \quad (25-3)$$

$$\frac{\partial E_{\text{cost_func}}^{(k)}}{\partial O_2^{(k)}} = \frac{-1}{N} \sum_{i=1}^N (Y_i - O_{2i}) = -e \quad (26-3)$$

$$\frac{\partial O_2^{(k)}}{\partial \text{net}_2^{(k)}} = f_2'(\text{net}_2^{(k)}) \quad (27-3)$$

$$\frac{\partial \text{net}_2^{(k)}}{\partial W_2^{(k)}} = O_1 \quad (28-3)$$

$$\frac{\partial E_{\text{cost_func}}^{(k)}}{\partial W_2^{(k)}} = -ef_2'(\text{net}_2^{(k)})O_1 \quad (29-3)$$

برای محاسبه وزن‌های جدید لایه اول همانند رابطه (۲۱-۳) ابتدا باید مشتق تابع هزینه نسبت به وزن‌های لایه اول محاسبه گردد که به صورت زیر می‌باشد:

$$\text{net}_1 = (W_1)^T X \quad (30-3)$$

$$O_1 = f_1(\text{net}_1) \quad (31-3)$$

$$\text{net}_2 = (W_2)^T O_1 \quad (32-3)$$

$$f_1(x) = \frac{1 - e^{-ax}}{1 + e^{-ax}} \rightarrow f_1'(x) = \frac{2ae^{-ax}}{(1 + e^{-ax})^2} \quad (33-3)$$

$$\frac{\partial E_{\text{cost_func}}^{(k)}}{\partial W_1^{(k)}} = \frac{\partial E_{\text{cost_func}}^{(k)}}{\partial O_2^{(k)}} \times \frac{\partial O_2^{(k)}}{\partial \text{net}_2^{(k)}} \times \frac{\partial \text{net}_2^{(k)}}{\partial O_1^{(k)}} \times \frac{\partial O_1^{(k)}}{\partial \text{net}_1^{(k)}} \times \frac{\partial \text{net}_1^{(k)}}{\partial W_1^{(k)}} \quad (34-3)$$

که دو عبارت اول رابطه (۳۴-۳) قبلاً بیان شده است و عبارت‌های بعدی به صورت زیر محاسبه می‌گردند:

$$\frac{\partial \text{net}_2^{(k)}}{\partial O_1^{(k)}} = (W_2)^T \quad (35-3)$$

$$\frac{\partial O_1^{(k)}}{\partial \text{net}_1^{(k)}} = f_1'(\text{net}_1^{(k)}) \quad (36-3)$$

$$\frac{\partial \text{net}_1^{(k)}}{\partial W_1^{(k)}} = X \quad (37-3)$$

شکل ساده‌شده‌ی رابطه (۳۴-۳) به صورت زیر حاصل می‌گردد:

$$\frac{\partial E_{\text{cost_func}}^{(k)}}{\partial W_1^{(k)}} = -e f_2'(\text{net}_2^{(k)}) (W_2)^T f_1'(\text{net}_1^{(k)}) X \quad (38-3)$$

با توجه به روابط (۳۰-۳) و (۳۱-۳) مقدار ضریب α یکی از عوامل بسیار مهم در به‌روزرسانی وزن‌ها است به نحوی که انتخاب یک مقدار پایین برای این ضریب، باعث کاهش سرعت همگرایی به وزن‌های مطلوب و انتخاب یک مقدار زیاد برای این ضریب باعث نوسان حول یک بازه می‌شود پس باید به دنبال یک روشی جهت پیدا کردن یک مقدار بهینه برای α باشیم و باید این نکته را اشاره کنیم که صرف‌نظر از پیدا کردن این مقدار بهینه، روش گرادیان نزولی یک روش مشتق مرتبه اول می‌باشد در مسائل بدرفتار و غیرخطی به‌خوبی جواب نمی‌دهد اما روش‌های کاهش شیب خطا که مشتق دوم شیب را محاسبه می‌کنند و به آنها روش‌های آموزش مرتبه دوم می‌گویند به‌خوبی می‌توانند مسائل غیرخطی را شبیه‌سازی کند.

۳_۱۰ روش‌های آموزش مرتبه دوم

همان‌طور که اشاره شده، روش‌های مرتبه دوم از مشتق دوم در به‌روزرسانی وزن‌ها استفاده می‌کند که برای محاسبه مشتق دوم ابتدا باید بسط تیلور تابع هزینه محاسبه و از آن نسبت به وزن‌ها تا مرتبه دوم مشتق گرفته شود که به صورت زیر می‌باشد:

$$\text{بسط تیلور هر تابعی مانند } f(x) \text{ در همسایگی } X = X_0 \text{ به صورت زیر تعریف می‌شود:} \quad (39-3)$$

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n$$

با در نظر گرفتن تابع هزینه به صورت رابطه (۴۰-۳)، بسط تیلور تابع هزینه تا مرتبه دوم به صورت رابطه (۴۱-۳) محاسبه می‌گردد:

$$E_{\text{cost_func}}^{(k)} = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N (Y_i - O_{2i})^2 \quad (40-3)$$

$$= \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N (Y_i - f(W\bar{X}))^2$$

$$E_{\text{cost_func}}^{(k)} = E_{\text{cost_func}}^{(k)}(W_0) + \frac{W - W_0}{1!} g \quad (41-3)$$

$$+ \frac{(W - W_0)^2}{2!} H$$

که g و H به ترتیب ماتریس‌های ژاکوبین و هسین می‌باشند که به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$g = \left. \frac{\partial E_{\text{cost_func}}^{(k)}}{\partial W} \right|_{W=W_0} \quad (42-3)$$

$$H = \left. \frac{\partial^2 E_{\text{cost_func}}^{(k)}}{\partial W^2} \right|_{W=W_0} \quad (43-3)$$

با گرفتن مشتق بسط تیلور تابع هزینه نسبت به وزن به رابطه زیر خواهیم رسید:

$$\frac{\partial E_{\text{cost_func}}^{(k)}}{\partial W} = g + H(W - W_0) = 0 \quad (44-3)$$

$$W = W_0 - H^{-1}g \quad (45-3)$$

ولی در عمل ما ماتریس هسین را محاسبه نکرده بلکه آن را توسط رابطه (46-3) تخمین می‌زنیم:

$$H = J^T \cdot J + \mu I \quad (46-3)$$

$$W^{(K+1)} = W^{(K)} - (J^T \cdot J + \mu I)^{-1} \cdot (J^T \cdot e) \quad (47-3)$$

فرم بالا موسوم به الگوریتم لونبرگ می‌باشد ولی الگوریتم لونبرگ-مارکواد همان الگوریتم لونبرگ می‌باشد که به جای ماتریس I ، یک ماتریس قطری استفاده می‌شود که درایه‌های آن قطر اصلی ماتریس $J^T \cdot J$ است. شایان ذکر است که با انتخاب یک مقدار بزرگ برای μ الگوریتم به الگوریتم گرادیان نزولی تبدیل می‌شود و همچنین با انتخاب یک مقدار کوچک برای μ ، یک الگوریتم مرتبه دوم دیگری به نام نیوتن حاصل می‌گردد [58].

۳_۱۱ نحوه اجرای شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه

گام‌هایی که در به‌کارگیری روش شبکه‌های عصبی مصنوعی در یادگیری نظارت‌شده انجام می‌شود، مطابق با شکل ۳-۸ و به شرح زیر می‌باشند [59]:

۳_۱۱_۱ پیش‌پردازش داده‌ها

جهت استحصال نتیجه‌ای بهتر در شبکه‌های عصبی مصنوعی، داده‌هایی که برای فرآیند آموزش شبکه عصبی به آن داده می‌شود باید در سه مرحله پیش‌پردازش شوند که به شرح زیر می‌باشند:

^۱ Jacobian matrix

^۲ Hessian matrix

مرحله اول: به طور معمول در هر مسئله شبیه‌سازی و تخمین تابع توسط شبکه‌های عصبی مصنوعی، داده‌هایی که به شبکه داده می‌شوند، به صورت طبیعی در یک مقیاس نمی‌باشند و برای این که شبکه در فرآیند آموزش دارای یک شیوه واحد جهت تغییر وزن‌ها و همچنین کاهش بار محاسباتی مسئله داشته باشد، این داده‌ها پیش‌پردازش می‌گردند، بدین صورت که باید تمام داده‌های ورودی و خروجی با استفاده از فرمول‌های (۳-۴۸) و (۳-۴۹) در یک بازه قرار بگیرند که در واقع نرمال‌سازی داده‌ها بین ۱- و ۱ می‌باشد و همچنین برای تخمین جدید از رابطه (۳-۵۰) استفاده می‌شود.

$$\text{Normalize}(X) = 2 \times \frac{X - \min(X)}{\max(X) - \min(X)} - 1 \quad (۳-۴۸)$$

$$\text{Normalize}(Y) = 2 \times \frac{Y - \min(Y)}{\max(Y) - \min(Y)} - 1 \quad (۳-۴۹)$$

$$\begin{aligned} \text{Denormalize}_{\text{predict}}(Y) & \quad (۳-۵۰) \\ &= \frac{(\text{Normalize}(Y) + 1)(\max(Y) - \min(Y))}{2} \\ &+ \min(Y) \end{aligned}$$

مرحله دوم: در این مرحله داده‌های نرمال شده باید به هم‌ریخته^۱ شوند تا شبکه دچار بیش‌برازش^۲ نگردد یعنی شبکه عصبی از الگو خاصی جهت شبیه‌سازی داده‌ها استفاده نکند.

مرحله سوم: در این مرحله داده‌های نرمال شده باید به سه دسته داده آموزش^۳، داده اعتبار سنجی^۴ و داده تست^۵ تقسیم‌بندی شوند که داده‌های آموزش داده‌هایی هستند که شبکه از طریق آنها آموزش می‌بیند یعنی وزن‌ها و بایاس‌های بهینه از طریق این داده‌ها پیدا می‌شود. داده‌های اعتبار سنجی داده‌هایی هستند که جهت سنجشی از عدم بیش‌برازش شدن شبکه استفاده می‌شود و در تعیین وزن‌ها هیچ دخالتی ندارند ولی یکی از معیارهای توقف فرآیند آموزش می‌باشند. داده‌های تست داده‌هایی هستند که شبکه اصلاً آنها را ندیده و جواب شبکه را می‌خواهیم نسبت به این داده‌ها سنجیده شود.

۳_۱۱_۲ شروع آموزش

در این مرحله آموزش شبکه عصبی صورت می‌گیرد بدین صورت که ابتدا با یک وزن و بایاس تصادفی، شبکه جواب خود را تولید می‌کند و سپس با توجه به الگوریتم‌های آموزش که در این پایان‌نامه از الگوریتم سریع و کارای لونیبرگ-مارکوود استفاده شده است، تابع هزینه را مینیموم

^۱ Shuffle

^۲ Over-fitting

^۳ Training data

^۴ Validation data

^۵ Test data

کرده و بهترین وزن و بایاس برای شبکه که در آن کمترین خطا به دست آید را ذخیره می‌کند و هنگام رسیدن به مطلوب موردنظر، آموزش شبکه متوقف می‌شود که توقف آموزش شبکه خود دارای معیارهای متفاوتی می‌باشد که اگر شبکه به هر کدام از این معیارها در فرآیند آموزش رسید، آموزش شبکه متوقف می‌شود.

۳_۱۱_۳ معیارهای توقف شبکه

شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه از طریق الگوریتم آموزش لونیگ-مارکواد، دارای معیارهای مختلفی به صورت زیر جهت توقف فرآیند آموزش می‌باشد که البته بعضی از این معیار در سایر الگوریتم‌های آموزش مشترک می‌باشند.

ایپاک^۱: به هر بار تکرار در به‌روزرسانی تمام وزن‌ها و بایاس‌ها یک ایپاک می‌گویند. در شبکه‌های عصبی مصنوعی جهت مسائل تخمین تابع با هر فرآیند آموزشی یک مقدار برای این پارامتر در نظر گرفته می‌شود که معمولاً بین ۱۰۰ تا ۱۰۰۰ می‌باشد به نحوی که در این بازه، اگر ایپاک یا سایر عوامل توقف به حد در نظر گرفته شده برسند، فرآیند آموزش متوقف می‌شود.

عملکرد^۲: مقدار تابع هزینه بر روی داده‌های آموزش را عملکرد گویند که حد این تابع به دقت مورد درخواست و نوع داده‌ها بستگی داشته ولی به‌طور مرسوم صفر در نظر می‌گیرند.

گرادیان^۳: یکی دیگر از پارامترهای توقف فرآیند آموزش شبکه عصبی، شیب تابع هزینه نسبت به وزن‌ها می‌باشد که به‌طور تعریف شده در الگوریتم آموزش لونیگ-مارکواد اگر مقدار گرادیان از $1e - 7$ کمتر شود، آموزش شبکه عصبی متوقف می‌شود.

گام^۴: پارامتر گام در الگوریتم لونیگ-مارکواد یک از عوامل مهم در رسیدن به آموزشی مطلوب می‌باشد که در این الگوریتم، پارامتر گام ابتدا با مقدار $0/001$ شروع می‌شود و در هر مرحله‌ای که تابع هزینه کاهش نیابد، این پارامتر در 10 ضرب می‌گردد که در واقع الگوریتم لونیگ-مارکواد می‌خواهد توجه بیشتری به بخش کاهش شیب خود داشته باشد و با گام‌های کمتری حرکت کند ($\frac{1}{\mu}$) و در حالتی که تابع هزینه کاهش یابد، پارامتر گام تقسیم بر 10 می‌گردد و الگوریتم با سرعت بیشتری به آموزش ادامه می‌دهد. هنگامی که این عدد به 10 برسد، آموزش متوقف می‌شود.

^۱ Epoch

^۲ Performance

^۳ Gradient

^۴ Step

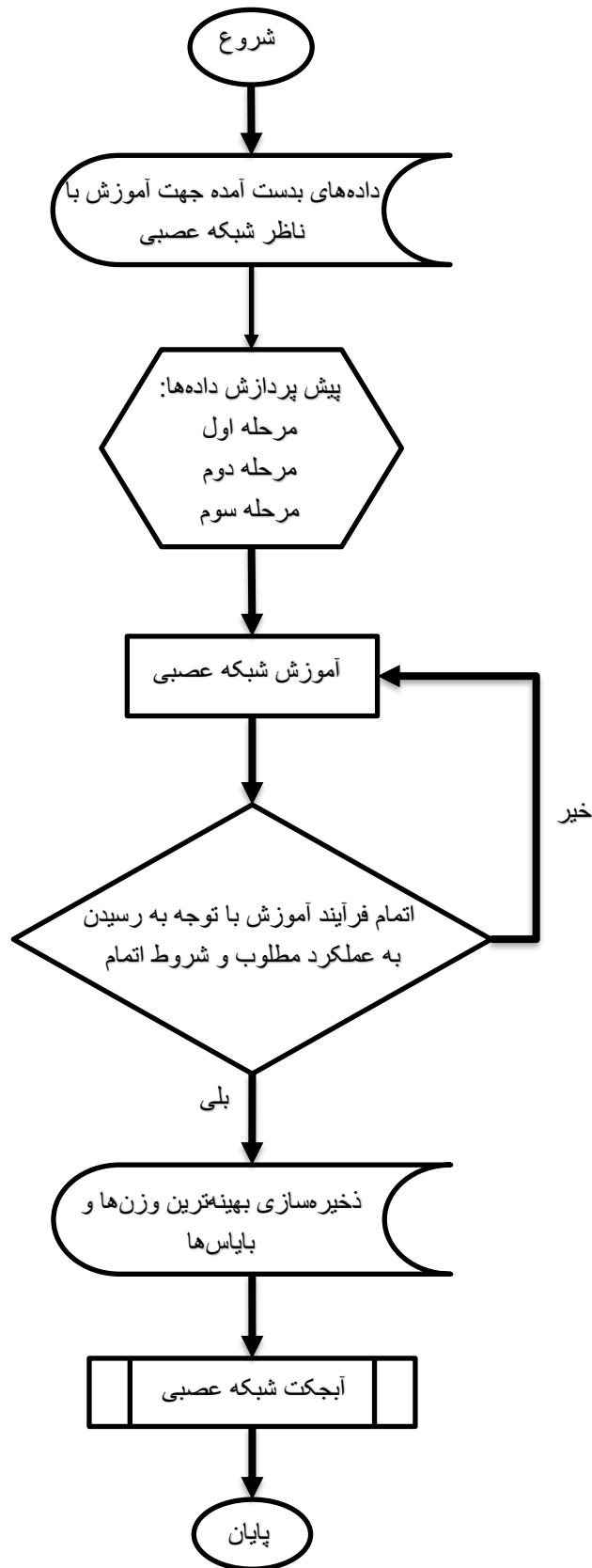
سنجش اعتبار^۱: در هر بار طی شدن یک اپیاک مقدار تابع هزینه برای داده‌های اعتبار سنجی محاسبه می‌گردد که معیاری برای نشان دادن عدم بیش برآزش شدن می‌باشد به نحوی که اگر میانگین مجذور اختلافات خروجی برای داده‌های اعتبار سنجی بسیار بیش‌تر از داده‌های آموزش باشد نشان‌دهنده‌ی این است که شبکه فقط به داده‌های آموزش بسنده کرده و در واقع دچار بیش‌آموزشی^۲ شده است اما پس از رسیدن به یک مقدار مطلوب با توجه به میانگین مجذور اختلافات خروجی برای داده‌های آموزش، اگر مقدار میانگین مجذور اختلافات خروجی تا معمولاً به‌طور پیش‌فرض ۶ اپیاک بیشتر شود، فرآیند آموزش متوقف می‌شود.

زمان^۳: در بعضی مسائل یک پارامتر ساعت نیز برای آموزش در نظر می‌گیرند که آموزش به‌عنوان مثال چند ساعت طول بکشد که بعد از رسیدن به این مقدار فرآیند آموزش متوقف می‌شود.

^۱ Validation check

^۲ Over-train

^۳ Time



شکل ۳-۸ روند اجرایی شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه با الگوریتم لونیبرگ-مارکواد

۳_۱۲ شبکه‌های عصبی آموزش دیده شده در پایان نامه

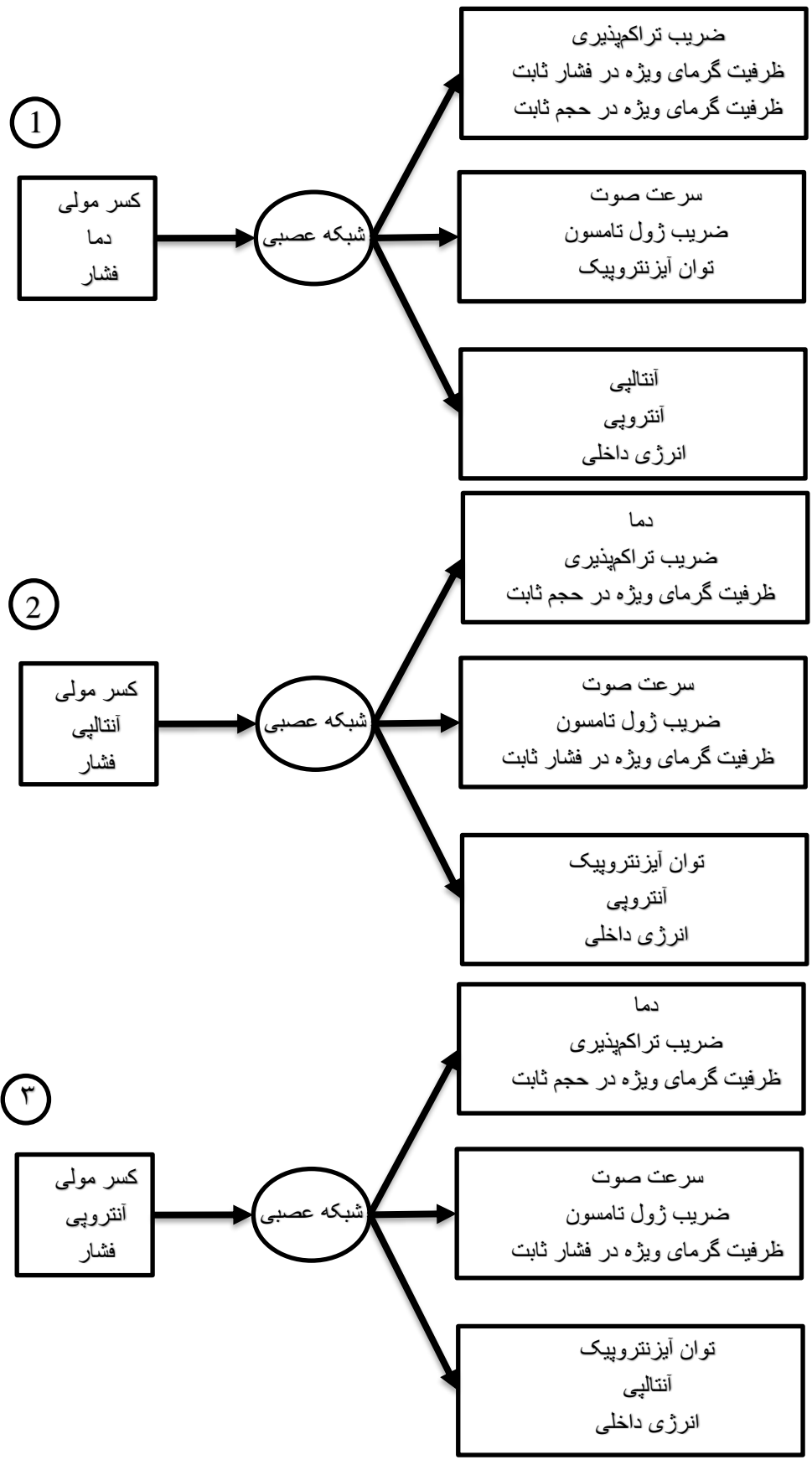
در این پایان نامه سه مجموعه شبکه عصبی پرپسترون چندلایه مطابق با شکل ۳-۹ آموزش دیده شده‌اند که هر کدام از شبکه‌های عصبی دارای ۲۳ ورودی و با توجه به بدرفتار و غیرخطی بودن روابط بین متغیرها، دو لایه پنهان و در هر لایه پنهان ۲۲ نورون در هر کدام از مجموعه شبکه‌ها در نظر گرفته شده است. داده‌های مورد استفاده در فرآیند آموزش شبکه عصبی از طریق استاندارد ISO 20765 – 1 به صورت تصادفی به دست آمده که برای تمام مجموعه شبکه عصبی حدود 30000 داده می‌باشد که ۷۵٪ از این مجموعه برای داده‌های آموزش، ۱۵٪ برای داده‌های اعتبارسنجی و مابقی داده‌ها برای تست استفاده شده است.

هر مجموعه شبکه عصبی خود دارای سه شبکه با خروجی‌های متفاوت سه گانه می‌باشد که این کار جهت سبک کردن بار محاسباتی شبکه‌ها می‌باشد و در واقع ۹ شبکه عصبی با ورودی و خروجی متفاوت آموزش دیده شده‌اند.

مجموعه شبکه عصبی اول، دارای ورودی‌های کسر مولی و دما و فشار که ۲۳ عدد متغیر ورودی می‌باشد و خروجی‌ها به ترتیب زیر شبکه‌های درون این مجموعه عبارتند از: (U, H, S) و (SoS, Jt, K) ، (Z, Cv, Cp) .

مجموعه شبکه عصبی دوم، دارای ورودی‌های کسر مولی و آنتالپی و فشار که ۲۳ عدد متغیر ورودی می‌باشد و خروجی‌ها به ترتیب زیر شبکه‌های درون این مجموعه عبارتند از: (U, K, S) و (Cp, SOS, Jt) ، (T, Z, Cv) .

مجموعه شبکه عصبی سوم، دارای ورودی‌های کسر مولی و آنتروپی و فشار که ۲۳ عدد متغیر ورودی می‌باشد و خروجی‌ها به ترتیب زیر شبکه‌های درون این مجموعه عبارتند از: (U, K, H) و (Cp, SOS, Jt) ، (T, Z, Cv) .



شکل ۳-۹ شبکه‌های عصبی ایجاد شده برای تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی

فصل ۴ : نتایج

۴-۱ معبرسازی محاسبات

در این قسمت به بررسی نتایج حاصل از شبیه‌سازی تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی توسط شبکه‌های عصبی می‌پردازیم به‌گونه‌ای که در ابتدا بهترین مدل از جهت تعداد لایه‌های مخفی و نورون‌های آن در شبکه‌های عصبی را پیدا کرده و پارامترهای آماری جهت سنجش کیفیت معبرسازی شبکه‌های عصبی را ارائه و سپس با توجه به خروجی هر شبکه اقدام به سنجش نتایج خروجی شبکه‌های عصبی با نتایج حاصل از پژوهش‌ها و کارهای آزمایشگاهی گذشته خواهد شد. برای بررسی صحت مدل‌سازی شبکه عصبی و اعتبار سنجی خروجی‌های آن چهار پارامتر آماری R^2 , RMSE, AAPRE(%) و Error(%) تعیین شده‌اند که به‌صورت زیر می‌باشند:

ضریب تشخیص (R^2)^۱ بیان‌گر میزان احتمال همبستگی بین دو دسته داده می‌باشد و نشان می‌دهد که چند درصد تغییرات متغیر وابسته نسبت به متغیر مستقل، تبیین می‌شود و هر چه که این ضریب به یک نزدیک‌تر باشد نشان‌دهنده این است که متغیرهای مشاهده شده و متغیرهای برازش شده با دقت بسیار بالایی به یکدیگر نزدیک می‌باشند. مقدار ضریب تشخیص از رابطه (۴-۱) محاسبه می‌شود:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (t_i - o_i)}{\sum_{i=1}^n (t_i - t_m)}, \quad t_m = \frac{\sum_{i=1}^n t_i}{n} \quad (۴-۱)$$

RMSE^۲ معیار بهتری نسبت به میانگین مجذور اختلافات می‌باشد چون در مواقعی که دقت‌های بسیار بالایی در یک شبیه‌سازی مورد نیاز است، MSE خطاهای کوچک را مجذور می‌کند که کمی باعث گمراهی در شبیه‌سازی می‌شود. مقدار RMSE از رابطه (۴-۲) قابل محاسبه می‌باشد:

$$RMSE = \left(\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (t_i - o_i)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \quad (۴-۲)$$

قدر مطلق درصد میانگین خطاهای نسبی (AAPRE(%)^۳) بیانگر میانگین میزان انحرافات نسبی می‌باشد که از رابطه (۴-۳) محاسبه می‌گردد:

$$AAPRE(\%) = \frac{\sum_{i=1}^n \left(\frac{|t_i - o_i|}{t_i} \right)}{n} \times 100 \quad (۴-۳)$$

Error(%) بیان‌گر درصد خطای نسبی نقطه به نقطه است که با استفاده از رابطه (۴-۴) محاسبه می‌گردد:

$$Error(\%) = \frac{t - o}{t} \times 100 \quad (۴-۴)$$

در تمام روابط (۴-۱) تا (۴-۴)، t خروجی مرجع که در معبرسازی آماری شبکه عصبی همان داده‌های اصلی داده‌شده به شبکه هستند اما در معبرسازی با نتایج آزمایشگاهی، پارامتر t بیان‌گر مقدار تجربی ارائه‌شده می‌باشد و پارامتر o خروجی تخمینی شبکه عصبی و n تعداد داده است.

^۱ Coefficient of determination

^۲ Root Mean Square Error

^۳ Average Absolute Percent Relative Error

۲_۴ انتخاب بهترین شبکه عصبی

در این قسمت مناسب‌ترین شبکه عصبی از لحاظ تعداد لایه‌های مخفی و نورون‌های آن مورد بررسی قرار خواهد گرفت. از سه مجموعه شبکه عصبی آموزش دیده شده شامل شبکه‌های XPT، XPH و XPS که هر کدام نه خروجی دارد با توجه به پارامتر خطای RMSE به دست آمده برای داده‌های اعتبار سنجی از هر مدل شبکه، می‌توان نتیجه گرفت که در هر مجموعه شبکه عصبی در تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی با ۲۳ ورودی، با انتخاب دو لایه مخفی در هر شبکه به طوری که هر لایه مخفی شامل ۲۲ نورون باشد می‌توان به بهترین دقت دست یافت. شایان ذکر است که با افزایش تعداد نورون بیش از ۲۲ نورون تغییر محسوسی در نتایج شبکه ایجاد نخواهد شد لذا از آوردن این مدل‌ها صرف نظر شده است.

اطلاعات مربوط به انتخاب بهترین ساختار برای شبکه‌های عصبی در پیوست (ج) موجود می‌باشد.

۲_۴_۱ ضریب تشخیص بهینه‌ترین شبکه عصبی

در این قسمت بعد از مناسب‌ترین مدل برای شبکه عصبی که دو لایه مخفی و در هر لایه ۲۲ نورون می‌باشد، ضریب تشخیص خروجی‌های هر مجموعه شبکه عصبی بهینه را به تفکیک نوع داده آموزش و اعتبار سنجی و تست به صورت زیر می‌باشد:

جدول ۱-۴. ضریب تشخیص خروجی‌های بهینه‌ترین شبکه عصبی XPT، XPS و XPH به تفکیک نوع داده (a)

Output	Data	XPT	XPH	XPS
		R ²	R ²	R ²
Z	Train	0.999999	0.999999	0.999999
	Validation	0.999999	0.999999	0.999999
	Test	0.999999	0.999999	0.999999
C _v	Train	0.999992	0.999903	0.999643
	Validation	0.999984	0.999859	0.999646
	Test	0.999983	0.999871	0.999657
C _p	Train	0.999996	0.999884	0.999997
	Validation	0.999992	0.999811	0.999996
	Test	0.999988	0.999763	0.999997
SoS	Train	0.999999	0.999991	0.999934
	Validation	0.999998	0.999991	0.999904
	Test	0.999985	0.999991	0.9999
Jt	Train	0.999996	0.999999	0.999999
	Validation	0.999982	0.999996	0.999996
	Test	0.999959	0.999968	0.999991
K	Train	0.999999	0.999999	0.999999
	Validation	0.999982	0.999999	0.999999
	Test	0.999983	0.999999	0.999999
U	Train	0.999999	0.999999	0.999999
	Validation	0.999999	0.999999	0.999999
	Test	0.999999	0.999999	0.999999

جدول ۴-۲. ضریب تشخیص خروجی‌های بهینه‌ترین شبکه عصبی XPT، XPS و XPH به تفکیک نوع داده (b)

Output	Data	R ²		
		Train	Validation	Test
XPT	H	0.999999	0.999999	0.999999
	S	0.999999	0.999998	0.999999
XPS	T	0.999978	0.999974	0.999976
	H	0.999999	0.999999	0.999999
XPH	T	0.999993	0.999991	0.999992
	S	0.999998	0.999998	0.999998

۴_۳ اعتبارسنجی خروجی‌های شبکه عصبی

با توجه به انتخاب بهترین مدل از شبکه‌های عصبی برای تعیین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی، در ادامه به معتبرسازی خروجی‌های شبکه‌های عصبی ایجادشده با نتایج تجربی و نتایج استانداردهای معتبر خواص مواد پرداخته خواهد شد.

۴_۳_۱ معتبرسازی خروجی‌های شبکه عصبی XPT

۴_۳_۱_۱ ضریب تراکم‌پذیری

در این قسمت ضریب تراکم‌پذیری پنج مخلوط گاز طبیعی به همراه متان خالص توسط شبکه عصبی آموزش‌دیده و سه معادله حالت شامل پنگ رابینسون، واندروالس و سوآوو-ردلیش-کوانگ و چهارده رابطه تجربی و سه رابطه هوشمند ژنتیکی محاسبه گردیده است. نتایج شبکه عصبی و معادلات حالت، روابط تجربی و روابط هوشمند با نتایج گزارش‌شده آزمایشگاهی مقایسه گردیده است و مقدار AAPRE(%) هر مدل مطابق با جدول ۴-۴ می‌باشد. جدول ۴-۳ ترکیب مولی مخلوط‌های گاز طبیعی در محاسبه‌ی ضریب تراکم‌پذیری را نشان می‌دهد. (تمام روابط تجربی و هوشمند ژنتیکی در پیوست موجود می‌باشد)

جدول ۴-۳. درصد ترکیبات مولی مورد استفاده در محاسبه ضریب تراکم پذیری

Compositions	NG_1[۶۵]	NG_2[۶۴]	Pure Methane[۶۳]	NG_3[۶۲]	NG_4[۶۱]	NG_5[۶۰]	
						NG1	NG2
Methane	87.9427	84.84	100	62.65	81.299	90.362	92.436
Nitrogen	1.502	5.6	-	12.09	13.575	1.474	5.751
Carbon dioxide	2.013	0.66	-	0	0.994	0.647	0.052
Ethane	6	8.4	-	25.26	3.294	5.708	1.285
Propane	2.043	0.5	-	-	0.637	1.124	0.348
Iso-butane	0.1995	-	-	-	0.101	0.301	0.041
n-Butane	0.2998	-	-	-	0.1	0.169	0.046
Iso-pentane	-	-	-	-	-	0.059	0.015
n-Pentane	-	-	-	-	-	0.029	0.014
n-Hexane	-	-	-	-	-	0.058	0.012
n-Heptane	-	-	-	-	-	0.035	-
n-Octane	-	-	-	-	-	0.008	-
Oxygen	-	-	-	-	-	0.011	-
Helium	-	-	-	-	-	0.015	-

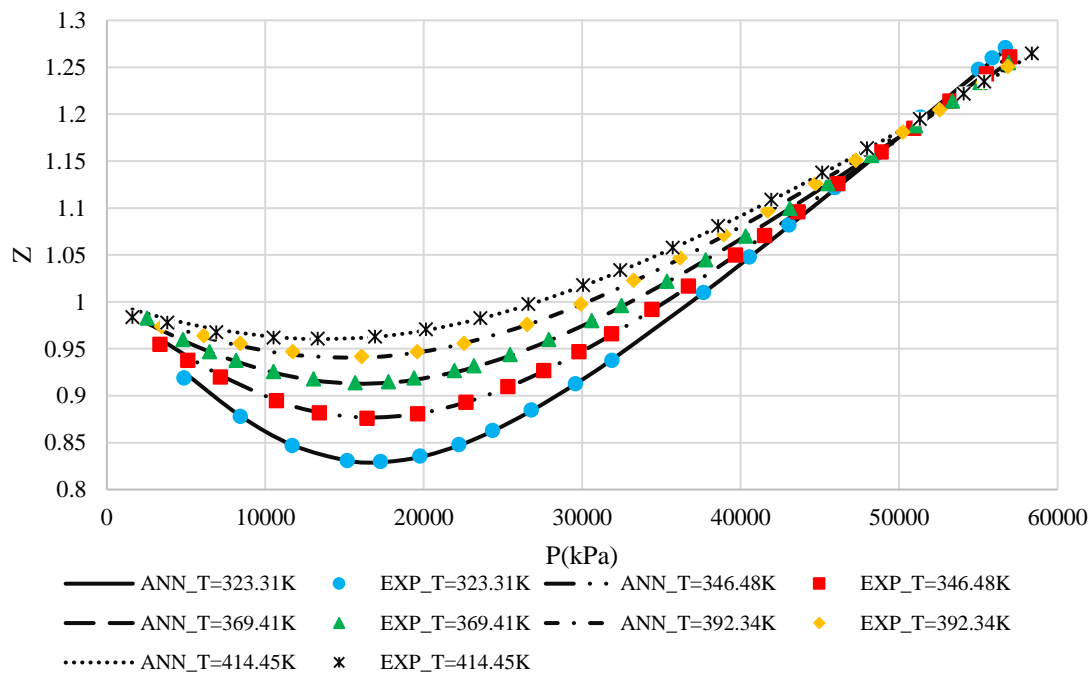
جدول ۴-۴. مقدار AAPRE(%) روابط موجود در تعیین ضریب تراکم پذیری گاز طبیعی

NG_5[۶۰]	NG_4[۶۱]	NG_3[۶۲]	PURE Methane[۶۳]	NG_2[۶۴]	NG_1[۶۵]	روابط
0.0503	0.2140	0.0205	0.0223	0.0626	0.1965	شبکه عصبی
3.0756	1.6763	1.1284	1.1109	1.6371	2.0825	الانازی و القریشی [۳۰]
11.7125	17.4180	14.9419	14.0101	12.3499	13.2641	عزیزی و همکاران [۱۸]
0.9781	0.8285	0.5874	0.7869	1.1773	0.9202	حیدریان و همکاران (a) [۱۹]
4.7973	2.2840	4.2502	42.1265	44.1827	20.5617	کمری و همکاران [۴۹]
2.2339	5.4989	1.6322	1.1405	1.6424	4.7607	محمود [۲۳]
1.1834	25.8018	0.3022	0.2325	0.2658	36.2996	سنجری- لای [۲۱]
3.1124	4.3434	1.5533	2.4031	3.3510	3.1908	شکیر و همکاران [۳۵]
1.7707	1.9804	0.5112	0.2933	0.8362	0.9228	سوآوو- ردیلیش - کوانگ [۵]
2.8520	5.5801	1.8646	1.1714	2.2506	3.0530	واندروالس [۳]
1.4637	0.9714	0.8390	0.9654	1.7423	1.2296	لطیف و همکاران [۲۴]
2.0703	1.4523	0.5241	0.7153	1.4134	1.2586	پاپ [۱۵]
1.2783	1.0683	0.7364	0.5733	0.9227	0.9812	شرکت نفتی شل [۱۶]
1.0589	0.9478	0.8200	0.5991	0.8657	0.8914	هال- یاربورو [۱۲]

جدول ۴-۵. مقدار AAPRE(%) روابط موجود در تعیین ضریب تراکم‌پذیری گاز طبیعی(ادامه)

روابط	NG_1[۶۵]	NG_2[۶۴]	PURE Methane[۶۳]	NG_3[۶۲]	NG_4[۶۱]	NG_5[۶۰]
درانچاک و همکاران[۱۱]	1.0499	1.2540	0.9046	0.9238	0.7764	1.0250
درانچاک-ابوقاسم[۱۴]	1.0172	1.1924	0.8345	0.8666	0.8783	0.9615
بگز-بریل[۱۳]	0.9510	0.9170	0.3947	0.4207	1.8307	0.8390
پنگ رابینسون[۶]	1.7433	1.3221	0.9218	1.5077	3.6153	1.8172
بهداری و همکاران[۱۷]	5.6156	4.6437	6.2092	6.3278	2.5895	4.9676
حیدریان و همکاران(b)[۲۰]	3.6402	4.9323	3.5845	3.7035	2.1306	4.5651
عزیزی و بههبانی[۲۵]	5.4077	4.7799	3.7332	2.2073	0.9690	8.2403

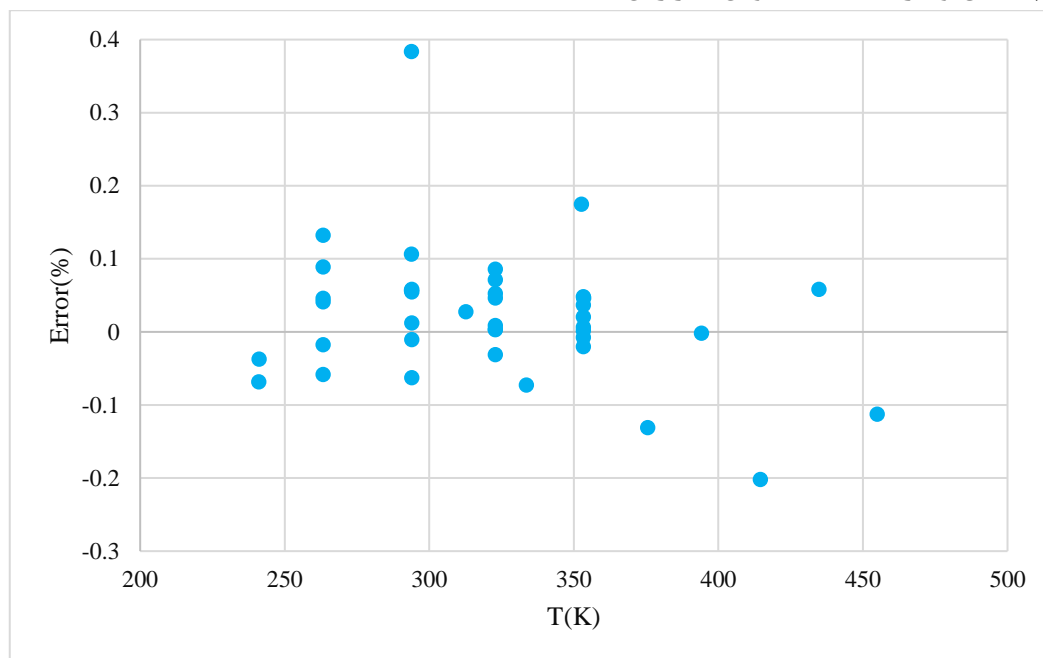
برای مخلوط گاز طبیعی NG_1 با ترکیب مولی نشان داده شده در جدول ۴-۳، ضریب تراکم‌پذیری برای حالت‌های دما ثابت ۳۲۳/۳۱، ۳۴۶/۴۸، ۳۶۹/۴۱، ۳۹۲/۳۴ و ۴۱۴/۴۵ کلوین در محدوده فشاری ۱۳۰۱ تا ۵۸۳۷۴ کیلوپاسکال محاسبه شده است. با توجه به جدول ۴-۴ بیشترین دقت برای محاسبه این ترکیب گاز ابتدا برای شبکه عصبی با ۰/۱۹۶۵٪ مقدار برای AAPRE(%) و کمترین دقت برای رابطه تجربی لطیف و همکاران با ۲۰/۵۶۱٪ مقدار برای AAPRE(%) می‌باشد. نمودار شکل ۴-۱ نشان‌دهنده مقادیر تجربی و نتایج حاصل از شبکه عصبی در ۵ حالت دما ثابت و محدوده فشاری ذکر شده می‌باشد.



شکل ۴-۱ ضریب تراکم‌پذیری برای NG_1 برحسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و

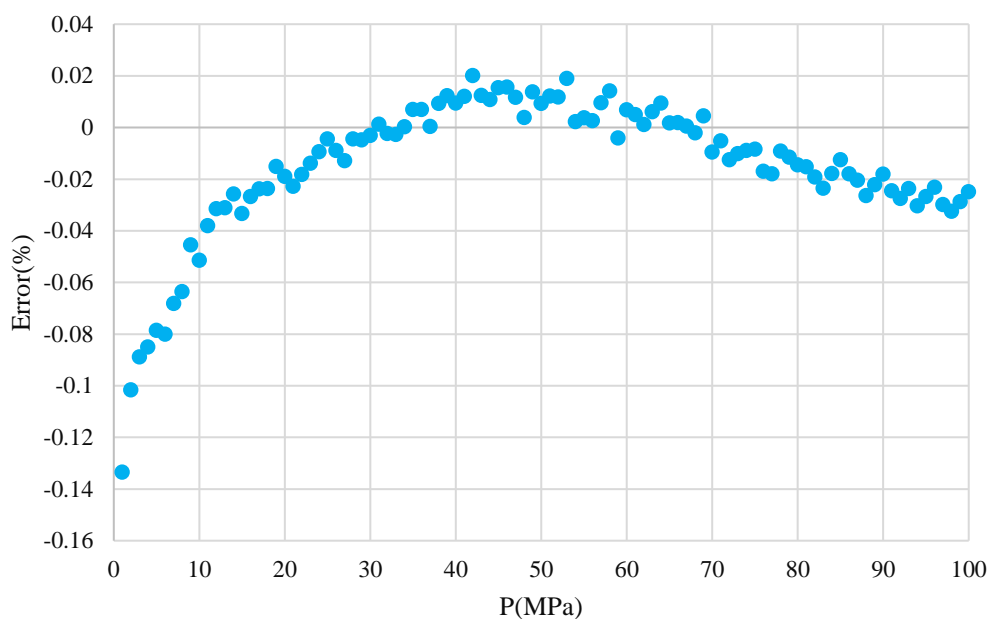
به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۵])

برای مخلوط گاز طبیعی NG_2 با ترکیبات متان، اتان، پروپان، کربن دی‌اکسید و نیتروژن با درصدهای مولی نشان داده شده در جدول ۳-۴، ضریب تراکم‌پذیری برای محدوده دمایی از ۲۴۱ تا ۴۵۵ کلوین محاسبه شده است. کمترین میزان خطای (AAPRE(%)) مطابق با جدول ۴-۴ برای این ترکیب به ترتیب برای شبکه عصبی و رابطه تجربی سنجری-لای با مقادیر ۰/۰۶۲۶٪ و ۰/۲۶۵۸٪ می‌باشد و همچنین کمترین دقت برای این ترکیب گاز، رابطه تجربی لطیف و همکاران با درصد خطای ۴۴/۱۸٪ است. نمودار شکل ۲-۴ نشان‌دهنده مقدار خطای نسبی در محاسبه ضریب تراکم‌پذیری می‌باشد و با توجه به این نمودار حداکثر اختلاف برابر ۰/۳۸٪ که در فشار ۱۰۰۸۰ کیلوپاسکال و در دما ۲۹۳ کلوین گزارش شده است.



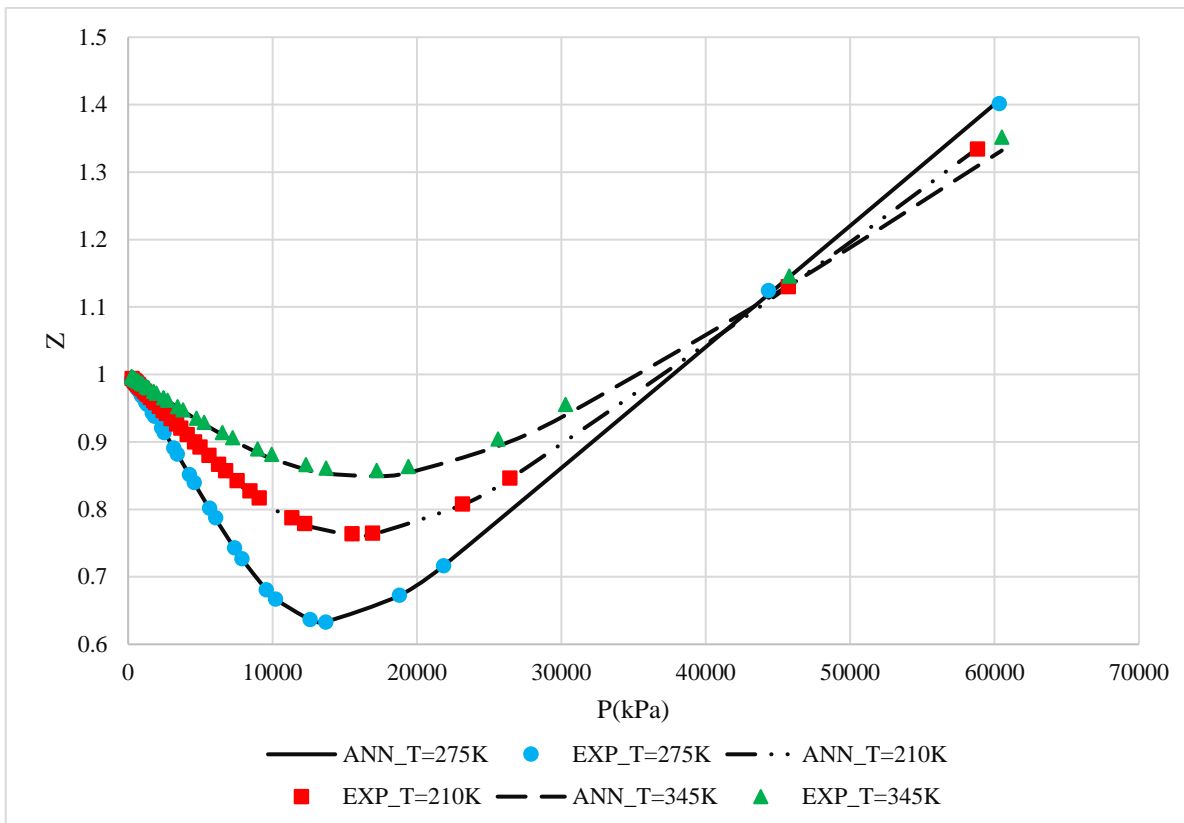
شکل ۲-۴ درصد خطای نسبی برای محاسبه ضریب تراکم‌پذیری مخلوط NG_2 (داده‌های آزمایشگاهی [۶۴])

برای متان خالص به دلیل تک عنصری بودن مخلوط، به‌طور کلی روابط با دقت خوبی نتایج را شبیه‌سازی کردند به‌نحوی که مطابق با جدول ۴-۴ شبکه عصبی با ۰/۰۲۲۳٪ و رابطه تجربی نعمتی و لای با مقدار خطا ۰/۲۳۲۵٪، بهترین دقت در شبیه‌سازی را دارا می‌باشند اما با وجود این که گاز طبیعی مورد بررسی دارای فقط یک عنصر است، بعضی از روابط دقت مناسبی را از خود نشان نداده به‌عنوان مثال رابطه عزیزی و همکاران دارای ۱۴/۰۱۰۱٪ خطا می‌باشد. نمودار شکل ۳-۴ نشان‌دهنده مقدار خطای نسبی در محاسبه ضریب تراکم‌پذیری می‌باشد و با توجه به این نمودار حداکثر اختلاف برابر ۰/۱۳٪ که در فشار ۲۰۰ کیلوپاسکال و در دما ۲۲۰ کلوین گزارش شده است.



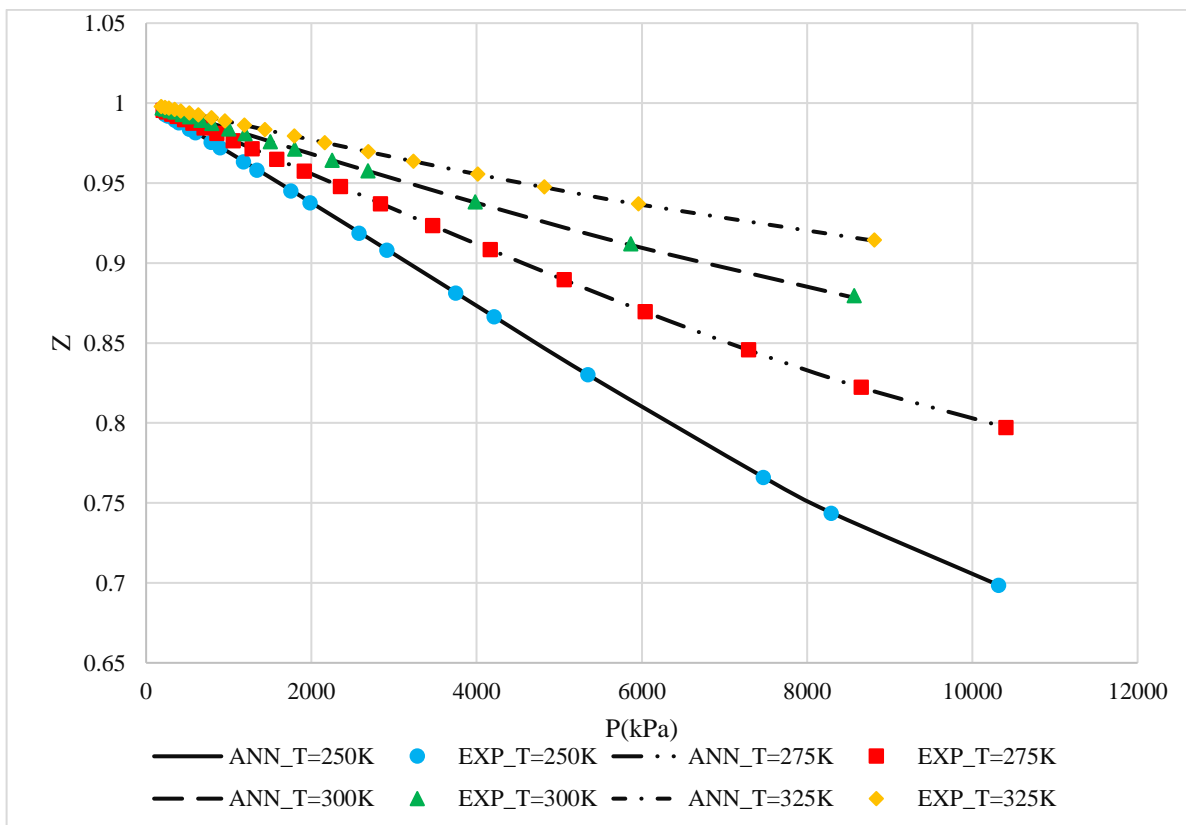
شکل ۴-۳ درصد خطای نسبی برای محاسبه ضریب تراکم‌پذیری متان خالص (داده‌های آزمایشگاهی استاندارد NIST [۶۴])

برای مخلوط گاز طبیعی NG_3 شامل متان، نیتروژن و اتان، ضریب تراکم‌پذیری در حالت‌های دما ثابت ۲۷۵، ۳۱۰ و ۳۴۵ کلوین و محدوده فشاری ۲۲۳ تا ۶۰۴۹۹ کیلوپاسکال محاسبه شده است. نتایج حاصل از شبیه‌سازی این ترکیب در مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی، حاکی از این است که رابطه‌های تجربی عزیززی و همکاران و بهادری و همکاران دارای کمترین دقت با درصد خطای به ترتیب ۱۴/۹۴۱۹٪ و ۶/۳۲۷۸٪ و شبکه عصبی و رابطه تجربی سنجری-لای دارای بالاترین دقت با درصد خطای به ترتیب ۰/۰۲۰۵٪ و ۰/۰۳۰۲۲٪ می‌باشند. نمودار شکل ۴-۴ نشان‌دهنده مقادیر تجربی و نتایج حاصل از شبکه عصبی در ۳ حالت دما ثابت و محدوده فشاری ذکر شده است.



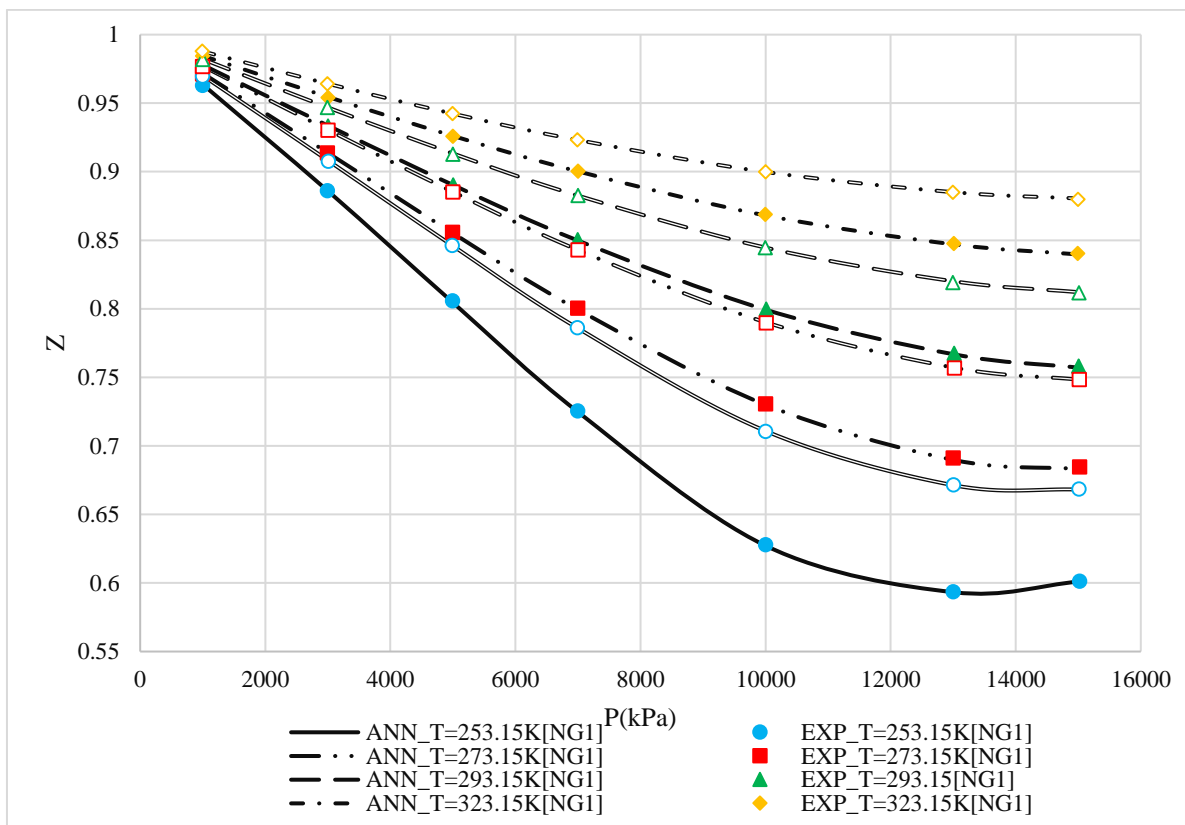
شکل ۴-۴ ضریب تراکم‌پذیری برای NG_3 بر حسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه‌شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۲]).

برای مخلوط گاز طبیعی NG_4 با درصد‌های مولی گزارش‌شده در جدول ۴-۳، برای حالت‌های دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین در محدوده فشاری ۱۸۳ تا ۱۰۴۰۷ کیلوپاسکال، ضریب تراکم‌پذیری توسط شبکه عصبی و سایر معادلات محاسبه شده است که با مقایسه درصد خطاهای به دست آمده مطابق با جدول ۴-۴ و جدول ۴-۵، شبکه عصبی و رابطه پرویز-درانچاک دارای کمترین خطا با مقادیر به ترتیب ۰/۲۱۴٪ و ۰/۷۷۶۴٪ و رابطه سنجری-لای دارای بیشترین خطا با مقدار ۲۵/۸۰۱۸٪ می‌باشد. نمودار شکل ۴-۵ نشان‌دهنده مقادیر تجربی و نتایج حاصل از شبکه عصبی در حالت دما ثابت و محدوده فشاری ذکر شده است.



شکل ۴-۵ ضریب تراکم‌پذیری برای NG_4 برحسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه‌شده توسط شبکه عصبی و به‌صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۱])

برای مخلوط گازی طبیعی NG_5 که از دو ترکیب مجزا مطابق جدول ۴-۳ تشکیل شده است، ضریب تراکم‌پذیری برای حالت‌های دما ثابت ۲۵۳/۱۵، ۲۷۳/۱۵، ۲۹۳/۱۵ و ۳۲۳/۱۵ کلوین و محدوده فشاری ۹۹۶ تا ۱۵۰۲۳ کیلوپاسکال محاسبه و با توجه به دقت‌های به‌دست‌آمده از نتایج شبیه‌سازی‌های موردبررسی مطابق با جدول ۴-۴ و جدول ۴-۵، رابطه تجربی عزیززی و همکاران و رابطه لطیف و همکاران (b) دارای درصد خطای بالاتری نسبت به مدل‌ها می‌باشند و شبکه عصبی و رابطه تجربی حیدریان و همکاران (a) با دارا بودن درصد خطای به ترتیب ۰/۰۱۵۰۳٪ و ۰/۰۹۷۸۱٪ بالاترین دقت در مدل‌سازی ضریب تراکم‌پذیری این ترکیب گاز را دارند. نمودار شکل ۴-۶ نشان‌دهنده مقادیر تجربی و نتایج حاصل از شبکه عصبی برای دو ترکیب موردبررسی در ۴ حالت دما ثابت و محدوده فشاری ذکرشده می‌باشد.



شکل ۴-۶ ضریب تراکم‌پذیری برای NG_5 برحسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه‌شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۰]).

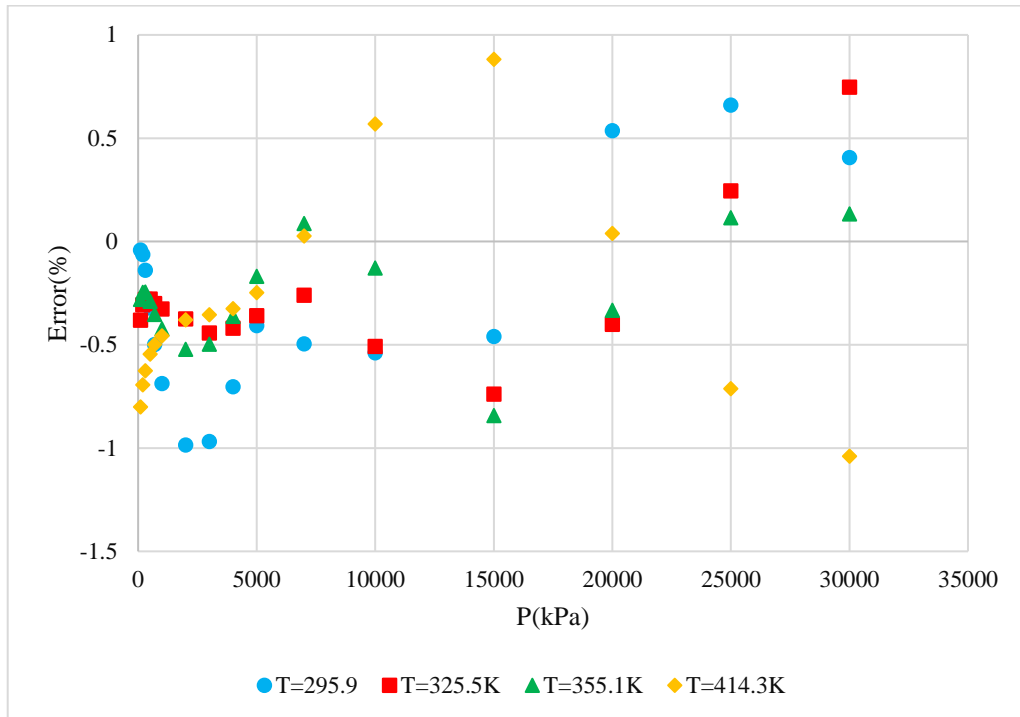
۴_۳_۱_۲ ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت

در این قسمت ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت برای یک مخلوط گاز طبیعی توسط شبکه عصبی محاسبه شده است. در ادامه میزان خطای نسبی در هر دما و فشار با توجه به مقدار تجربی آن ارائه می‌شود. جدول ۴-۶ درصد مولی اجزای ترکیب موردبررسی جهت محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت را نشان می‌دهد.

جدول ۴-۶. درصد ترکیبات مولی مورد استفاده در محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت

Compositions	NG_6[۶۶]
Methane	71.5
Nitrogen	1.8
Carbon dioxide	4
Ethane	11
Propane	6.5
Isobutane	0.9
n-Butane	1.9
Isopentane	0.4
n-Pentane	0.4
Hydrogen sulfide	1.6

برای مخلوط گاز طبیعی NG_6 با ترکیبات مولی نشان داده شده در جدول ۴-۶، ظرفیت گرمایی ویژه در فشار برای چهار حالت دما ثابت ۲۹۵/۹، ۳۲۵/۵، ۳۵۵/۱ و ۴۱۴/۳ کلوین تا فشار ۳۰۰۰۰ کیلوپاسکال توسط شبکه عصبی محاسبه شده است و با توجه به نمودار شکل ۴-۷ که نشان دهنده خطای نسبی داده‌های محاسبه شده نسبت به مقادیر تجربی می‌باشد، حداکثر خطا در حالت دما ثابت ۴۱۴/۳ کلوین رخ داده که این مقدار خطا برابر با ۱/۰۳٪- است.



شکل ۴-۷ درصد خطای نسبی برای محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت (داده‌های آزمایشگاهی [۶۶])

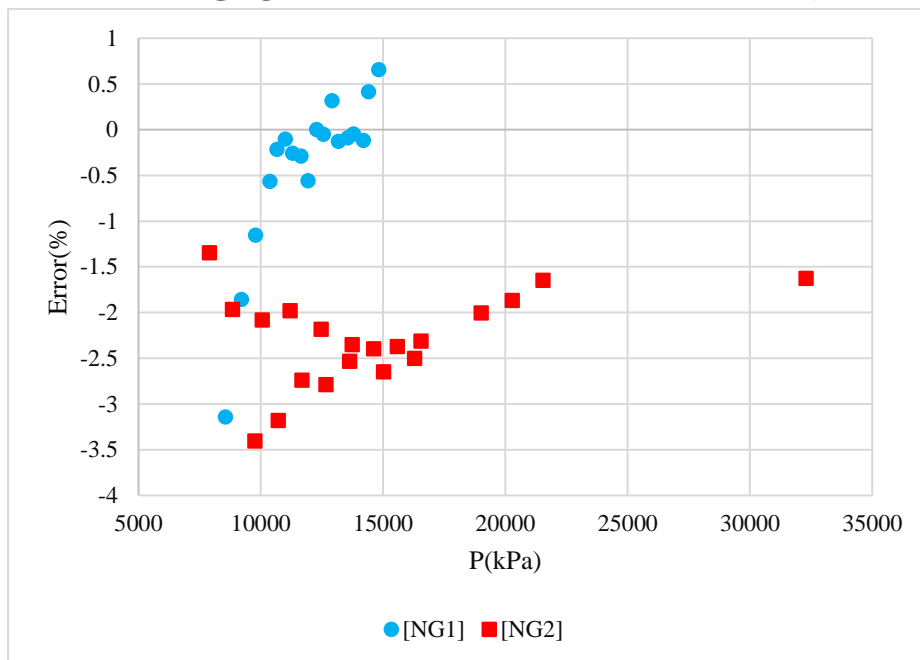
۳-۱-۳-۴ ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت

در این قسمت ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت برای مخلوط گازی با دو ترکیب دوتایی متان و اتان مشخص شده در جدول ۴-۷، در محدوده دمایی ۲۵۶ تا ۳۲۱ کلوین و محدوده فشاری ۷۹۱۰ تا ۱۴۸۳۰ کیلوپاسکال برای ترکیب اول و ۷۹۰۰ تا ۳۲۳۰۰ کیلوپاسکال برای ترکیب دوم محاسبه شده است.

جدول ۴-۷. درصد ترکیبات مولی مورداستفاده در محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه در حجم ثابت

Compositions	NG_6[۶۷]	
	NG1	NG2
Methane	68.526	50.217
Ethane	31.474	49.783

نمودار شکل ۴-۸ درصد خطای نسبی در محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه در حالت حجم ثابت را نشان می‌دهد. با توجه به نمودار شکل ۴-۸، حداکثر درصد خطا برای ترکیب گاز اول ۳/۱۳٪- می‌باشد و برای ترکیب گاز دوم برابر ۳/۴٪- که در فشار ۱۰۰۰۰ کیلوپاسکال رخ می‌دهد.



شکل ۴-۸ درصد خطای نسبی برای محاسبه ظرفیت گرمایی ویژه در فشار ثابت (داده‌های آزمایشگاهی [۶۷])

۴-۱-۳-۴ سرعت صوت

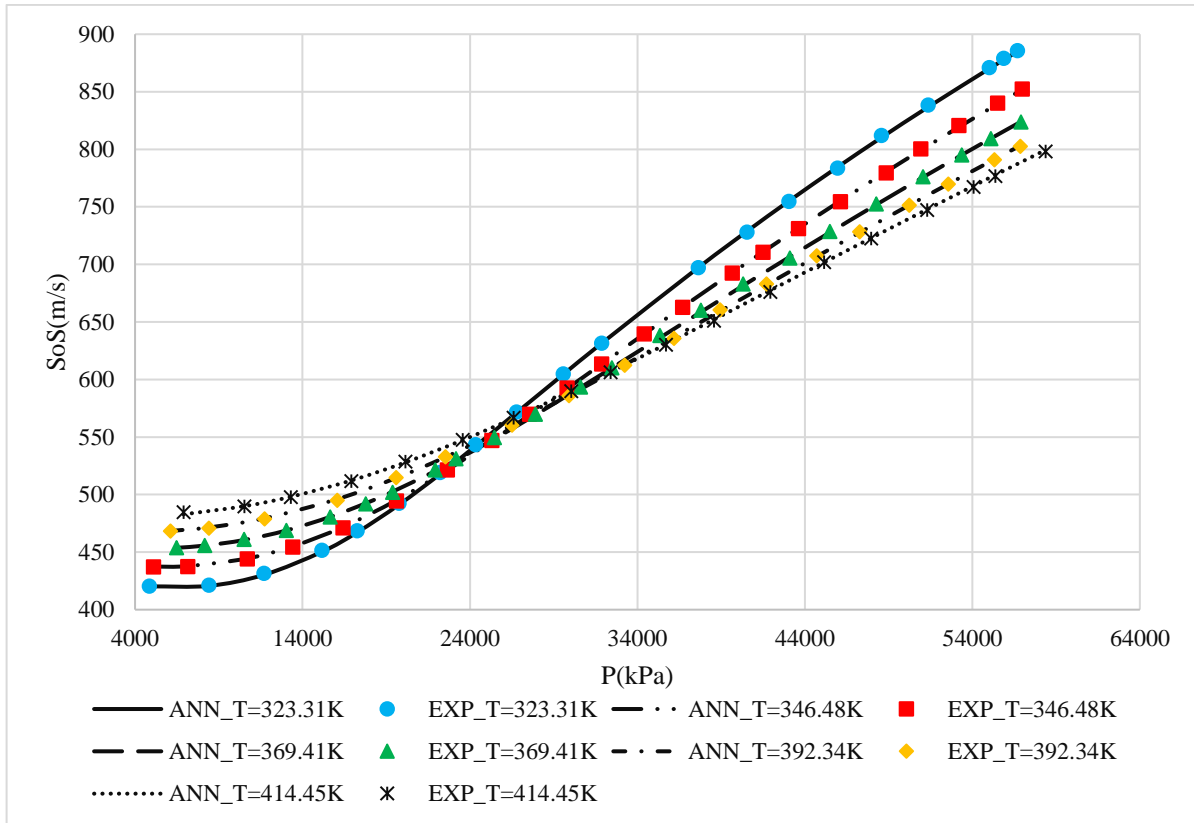
در این قسمت سرعت صوت سه ترکیب گاز دوتایی و دو مخلوط توسط شبکه عصبی محاسبه شده است. در ادامه به مقایسه نتایج شبکه با مقادیر تجربی پرداخته خواهد شد و درصد مولی اجزای ترکیب‌های گاز طبیعی برای محاسبه سرعت صوت در جدول ۴-۸ موجود می‌باشد.

جدول ۴-۸. درصد ترکیبات مولی مورد استفاده در محاسبه سرعت صوت

Compositions	NG_1[۶۵]	NG_7[۶۸]	NG_8[۶۸]	NG_9[۶۹]	NG_10[۶۸]
Methane	87.9427	84.902	89.999	80.001	80.051
Nitrogen	1.502	-	-	19.999	9.922
Carbon dioxide	2.013	-	-	-	2
Ethane	6	15.098	10.001	-	5.023
Propane	2.043	-	-	-	3.004
Isobutane	0.1995	-	-	-	-
n-Butane	0.2998	-	-	-	-
AAPRE(%)	0.1838	0.3323	0.2695	0.2179	0.0982

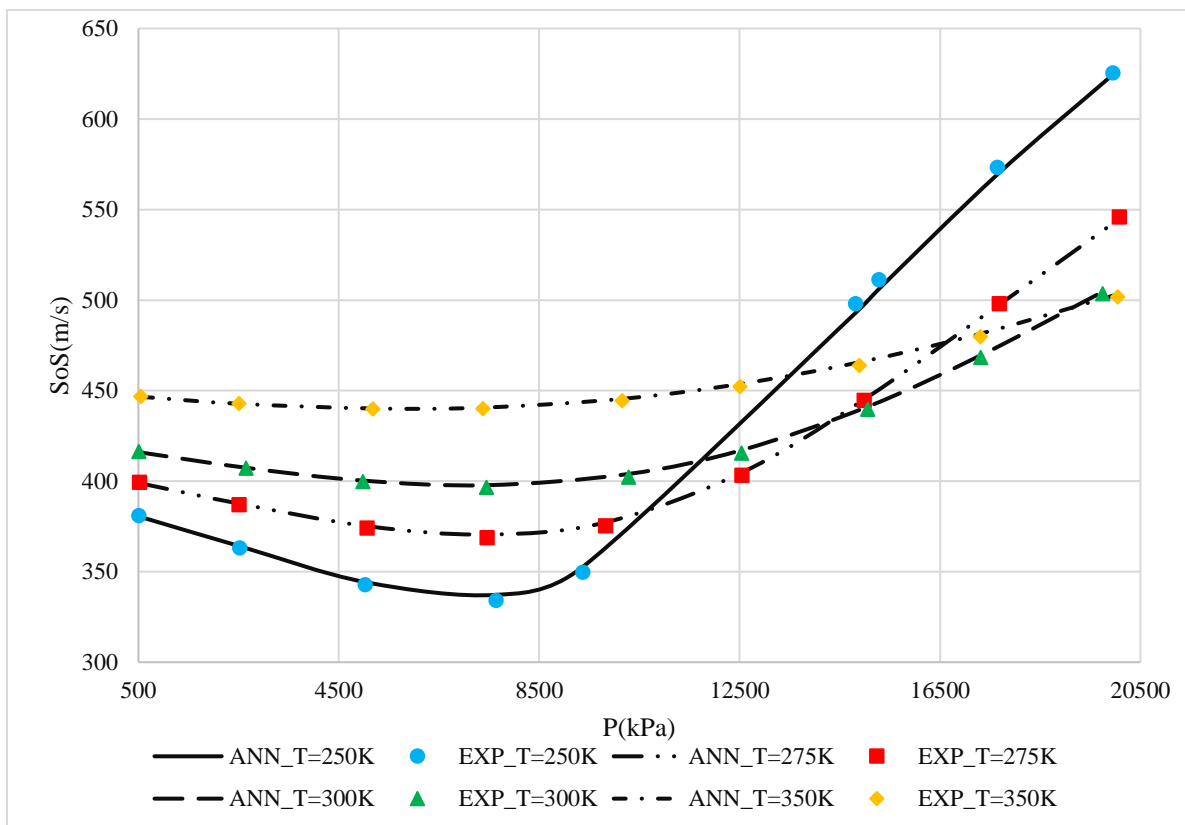
برای مخلوط گاز طبیعی NG_1 که شامل ۷ عنصر مطابق با جدول ۴-۸ می‌باشد، سرعت صوت برای حالت‌های دما ثابت ۳۱/۳۲۳، ۴۸/۳۴۶، ۴۱/۳۶۹، ۳۴/۳۹۲ و ۴۵/۴۱۴ کلوین با محدوده فشاری ۱۳۰۱ تا ۵۸۳۷۴ کیلوپاسکال محاسبه شده است. نمودار شکل ۴-۹ سرعت صوت را برای این مخلوط

گاز طبیعی در حالت‌های دما ثابت و محدوده فشاری ذکر شده به دست آمده از آزمایش و شبکه عصبی نشان می‌دهد. با توجه به جدول ۴-۸، با مقایسه نتایج حاصل از شبکه عصبی و مقادیر آزمایشگاهی گزارش شده برای این ترکیب، مقدار خطای AAPRE برابر ۰/۱۸۳۸٪ می‌باشد.



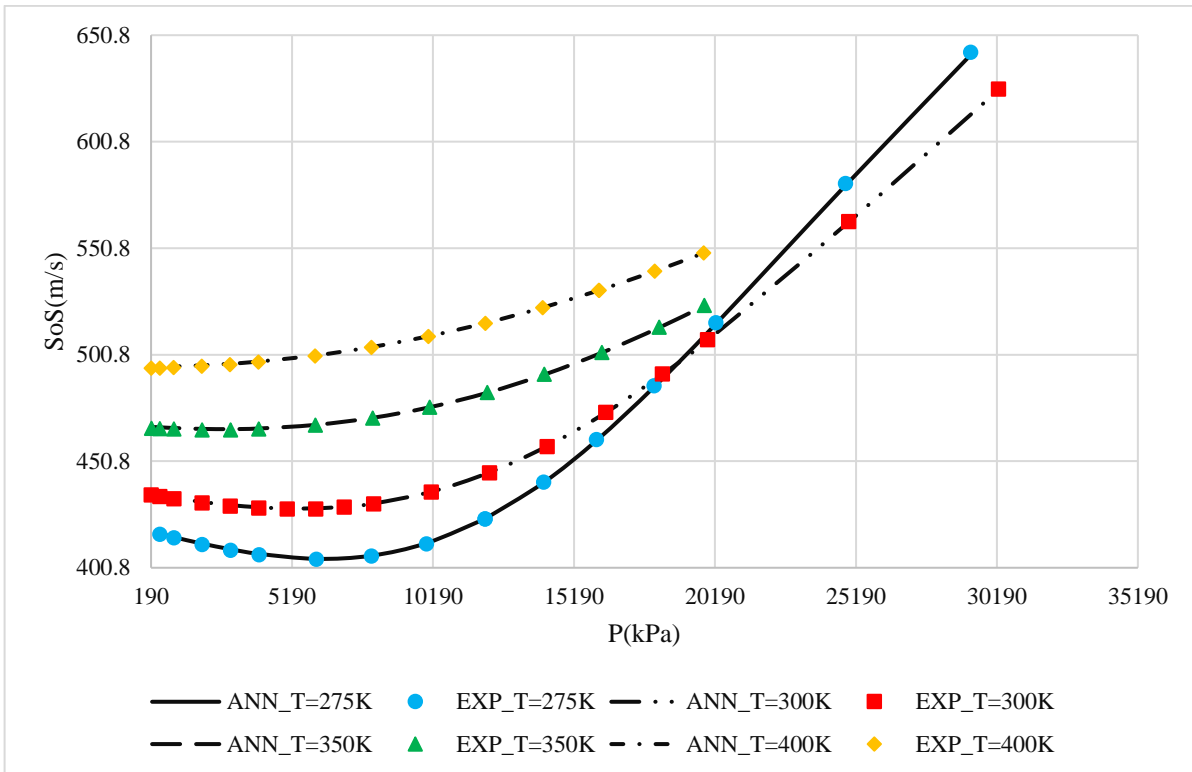
شکل ۹-۴ سرعت صوت برای NG_1 بر حسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۵])

در این قسمت سرعت صوت برای مخلوط دوتایی متان و اتان NG_7 با درصد مشخص مولی مطابق جدول ۴-۸ برای چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۵۰ کلوین تا ۲۰۰۰۰ کیلوپاسکال توسط شبکه عصبی محاسبه شده است. نمودار شکل ۴-۱۰ سرعت صوت را براساس نتایج آزمایشگاهی و شبکه عصبی مطابق با محدوده‌های ذکر شده دمایی و فشاری نشان می‌دهد. با توجه به جدول ۴-۸، با مقایسه نتایج حاصل از شبکه عصبی و مقادیر آزمایشگاهی گزارش شده برای این ترکیب، مقدار خطای AAPRE برابر ۰/۳۳۲۳٪ می‌باشد.

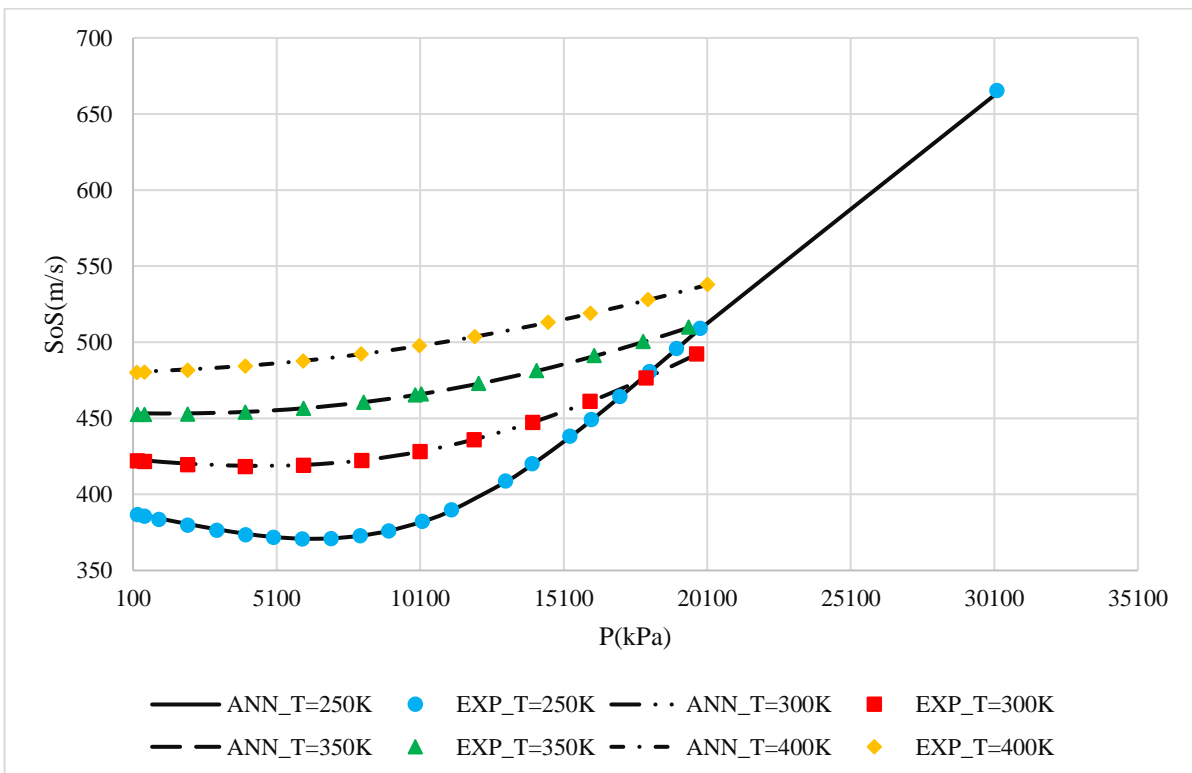


شکل ۴-۱۰ سرعت صوت برای NG_7 برحسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۸]).

نمودارهای شکل ۴-۱۱ و شکل ۴-۱۲ مقادیر سرعت صوت را برای مخلوط‌های دوتایی به ترتیب متان-اتان (NG_8) و متان-نیتروژن (NG_9) برای حالات دما ثابت و محدوده فشاری مشخص در نمودارها با توجه به نتایج شبکه عصبی و مقادیر آزمایشگاهی نشان می‌دهد. با توجه به جدول ۴-۸، با مقایسه نتایج حاصل از شبکه عصبی و مقادیر آزمایشگاهی گزارش شده برای این ترکیبات، مقدار خطای AAPRE برای (NG_8) ۰/۲۶۹۵٪ و برای (NG_9) برابر ۰/۲۱۷۹٪ می‌باشد.

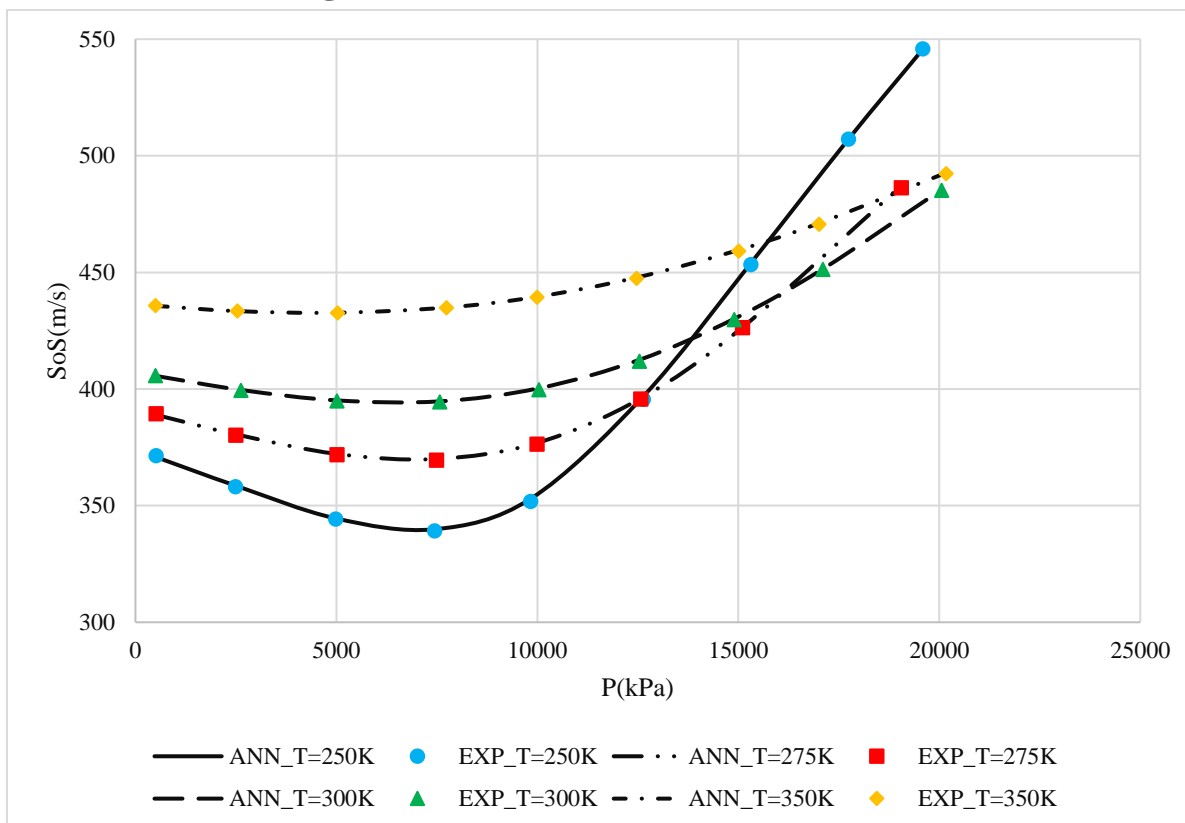


شکل ۴-۱۱ سرعت صوت برای NG_8 برحسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده های آزمایشگاهی [۶۸])



شکل ۴-۱۲ سرعت صوت برای NG_9 برحسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده های آزمایشگاهی [۶۹])

برای مخلوط گاز طبیعی NG_10 که ترکیبی از ۵ عنصر مختلف با توجه به درصد‌های مشخص شده در جدول ۴-۸ می‌باشد، سرعت صوت برای چهار حالت دما ثابت شامل ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۵۰ کلوین تا فشار ۲۰۰۰۰ کیلوپاسکال توسط شبکه عصبی محاسبه شده است که نمودار شکل ۴-۱۳ مقدار سرعت صوت محاسبه‌شده توسط شبکه عصبی و مقادیر تجربی با توجه به چهار حالت دما ثابت را نشان می‌دهد. با توجه به جدول ۴-۸، با مقایسه نتایج حاصل از شبکه عصبی و مقادیر آزمایشگاهی گزارش شده، مقدار خطای AAPRE برای این ترکیب گاز برابر ۰/۰۹۸۲٪ می‌باشد.



شکل ۴-۱۳ سرعت صوت برای NG_10 برحسب فشار برای حالات دما ثابت محاسبه‌شده توسط شبکه عصبی و به صورت آزمایشگاهی (داده‌های آزمایشگاهی [۶۸])

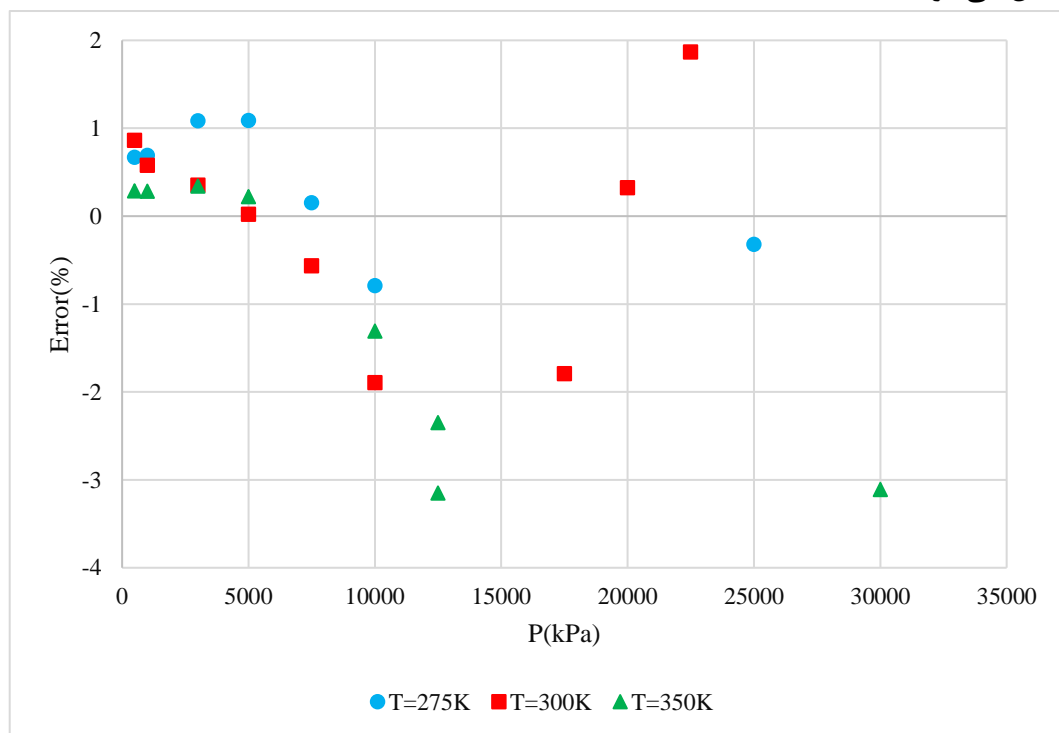
۴-۳-۱_۵ ضریب ژول تامسون

در این قسمت ضریب ژول تامسون برای یک مخلوط دوتایی متان-تان و متان خالص توسط شبکه عصبی محاسبه و در ادامه با استفاده از مقادیر تجربی و استاندارد معتبر NIST، به بررسی نحوه عملکرد شبکه عصبی در مورد خاصیت ضریب ژول تامسون پرداخته می‌شود. با استفاده از نمودارهای شکل ۴-۱۴ و شکل ۴-۱۵ که بیان‌گر خطا نسبی هر داده نسبت به مقدار تجربی می‌باشد بحث خواهیم نمود. ترکیب مولی هر یک از گازهای موجود برای محاسبه ضریب ژول تامسون به صورت جدول ۴-۹ است:

جدول ۴-۹. درصد ترکیبات مولی مورد استفاده در ضریب ژول تامسون

Composition	NG_11[٪]	Pure methane[٪]
Methane	85	100
Ethane	15	-

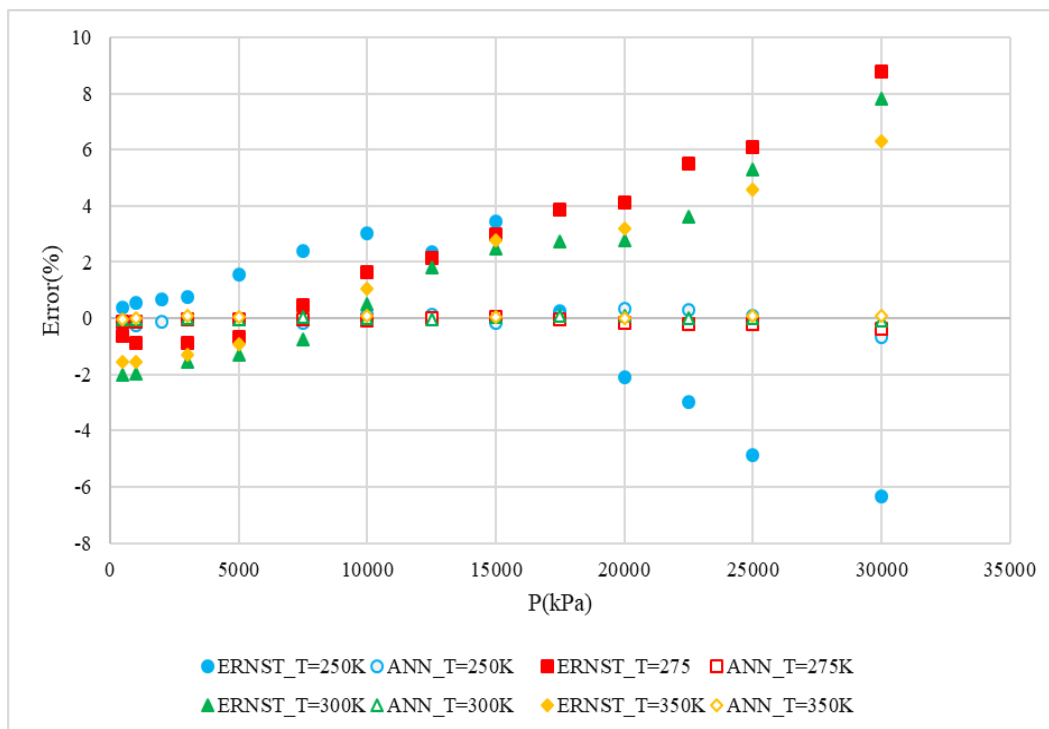
ضریب ژول تامسون برای مخلوط دوتایی متان-اتان با درصد مولی مشخص در جدول ۴-۹، در سه حالت دما ثابت ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۵۰ کلوین تا فشار ۳۰۰۰۰ کیلوپاسکال محاسبه شده است. مطابق با نمودار شکل ۴-۱۴ که نشان‌دهنده اختلاف نسبی بین داده‌های آزمایشگاهی و شبکه عصبی است، حداکثر مقدار خطا برای دمای ۲۷۵ کلوین برابر ۱/۰۸٪، برای دمای ۳۰۰ کلوین برابر ۱/۸۶٪ و برای دمای ۳۵۰ کلوین برابر با ۳/۱۵٪ می‌باشد. شایان ذکر است که مقادیر AAPRE(%) شبکه عصبی نسبت به داده‌های آزمایشگاهی در حالات دما ثابت ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۵۰ کلوین به ترتیب برابر است با ۰/۶۸۶٪، ۰/۹۱۷٪ و ۱/۳۸۱٪ در حالی که با محاسبه ضریب ژول تامسون توسط معادله حالت AGA8 و مقایسه آن با مقادیر تجربی، خطاهای AAPRE(%) به ترتیب ۰/۷۱۳٪، ۱/۰۷۷٪ و ۱/۶۴۷٪ حاصل می‌شود.



شکل ۴-۱۴ درصد خطای نسبی برای محاسبه ضریب ژول تامسون مخلوط NG_11 (داده‌های تجربی آزمایشگاهی [۷۰])

نمودار شکل ۴-۱۵ نشان‌دهنده مقدار خطای نسبی برای متان خالص با توجه به نتایج مرجع [۷۰] و استاندارد NIST می‌باشد. با توجه به نمودار شکل ۴-۱۵، شکل‌های توپر نشان‌دهنده اختلاف نسبی بین نتایج مرجع [۷۰] با استاندارد NIST و شکل‌های توخالی نشان‌دهنده اختلاف نسبی بین نتایج شبکه عصبی با استاندارد NIST است. با توجه به این نمودار خطا، اختلافات نسبی شبکه عصبی با استاندارد NIST در کل حالات بین ۰/۶۷٪ تا ۰/۳۴٪ می‌باشد در حالی که بیشترین اختلافات نسبی

بین نتایج مرجع [۷۰] و استاندارد NIST در دماهای ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۵۰ کلوین به ترتیب برابر ۶/۳۲٪، ۸/۷۸٪، ۷/۷۹٪ و ۶/۳۱٪ است.



شکل ۴-۱۵ درصد خطای نسبی برای محاسبه ضریب ژول تامسون برای متان خالص (داده‌های تجربی آزمایشگاهی [۷۰] و استاندارد NIST)

۴_۳_۱_۶ معتبرسازی توان آیزنتروپیک، آنتروپی، آنتالپی و انرژی داخلی

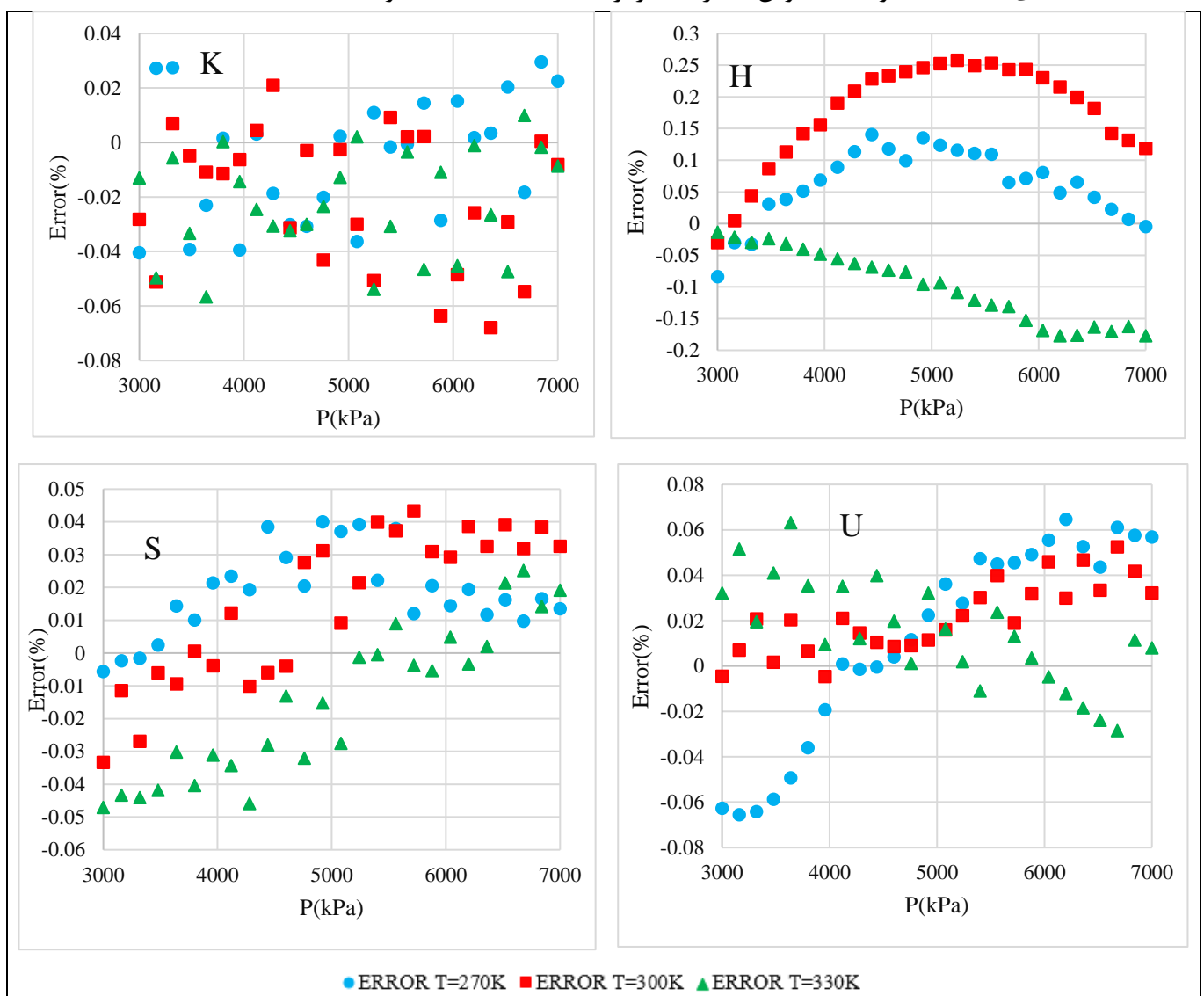
به علت کمبود داده‌های آزمایشگاهی موجود در بررسی توان آیزنتروپیک، آنتالپی، آنتروپی و انرژی داخلی مخلوط گاز طبیعی، معتبرسازی این خواص ذکر شده را با استفاده از استاندارد معتبر NIST که مرجعی در زمینه تعیین خواص ترمودینامیکی مواد می‌باشد، برای متان خالص در سه دمای ثابت ۲۷۰، ۳۰۰ و ۳۳۰ کلوین و محدوده فشاری ۳۰۰۰ تا ۷۰۰۰ کیلوپاسکال انجام شده است.

همان‌طور که در مجموعه نمودار شکل ۴-۱۶ دیده می‌شود، برای توان آیزنتروپیک، خطای نسبی پس از محاسبه این خاصیت توسط شبکه عصبی و مقایسه آن با اطلاعات NIST، بین بازه ۰/۰۸٪ تا ۰/۰۴٪ قرار دارد و مقدار AAPRE(%) برای کل سه حالت ثابت ذکر شده برابر است با ۰/۱۲۵٪. که این نشان از دقت بالای شبکه عصبی دارد.

آنتالپی گاز متان در سه دمای ۲۷۰، ۳۰۰ و ۳۳۰ کلوین در بازه فشاری ۷۰۰۰ تا ۷۰۰۰ کیلوپاسکال توسط شبکه عصبی محاسبه شده و درصد خطای نسبی این نتایج با مقایسه با اطلاعات NIST در نمودار شکل ۴-۱۶ نشان شده است و همان‌طور که در این شکل دیده می‌شود حداکثر خطای نسبی برای دماهای ۲۷۰، ۳۰۰ و ۳۳۰ کلوین به ترتیب برابر با ۰/۱۵٪، ۰/۲۶٪ و ۰/۱۷٪ می‌باشد.

در محاسبه آنتروپی گاز متان در سه حالت دما ثابت و محدوده فشاری مشخص در نمودار شکل ۴-۱۶ توسط شبکه عصبی و مقایسه نتایج این شبکه برای این خاصیت با نتایج NIST، می‌توان از نمودار شکل ۴-۱۶ که بیانگر درصد خطای نسبی است متوجه شد که خطاها در محدوده 0.06% تا 0.05% می‌باشد.

با محاسبه انرژی داخلی گاز طبیعی متان در سه حالت دما ثابت ۲۷۰، ۳۰۰ و ۳۳۰ کلوین و محدوده فشاری ۳۰۰۰ تا ۷۰۰۰ کیلوپاسکال توسط شبکه عصبی و مقایسه نتایج حاصل با داده‌های NIST می‌توان با توجه به نمودار شکل ۴-۱۶ که بیانگر خطای نسبی محاسبه انرژی داخلی می‌باشد مشاهده نمود که خطاها در بازه 0.08% تا 0.08% می‌باشند و همچنین مقدار خطای $AAPRE(\%)$ برای سه دمای ۲۷۰، ۳۰۰ و ۳۳۰ کلوین به ترتیب برابر با 0.04% ، 0.24% و 0.219% است.



شکل ۴-۱۶ درصد خطای نسبی برای محاسبه توان آیزنتروپیک، آنتالپی، آنتروپی و انرژی داخلی متان خالص (استاندارد NIST)

۲_۳_۴ معتبرسازی خروجی‌های شبکه‌های عصبی XPS ، XPH

برای اعتبارسنجی خروجی‌های دو شبکه XPH و XPS، به دلیل کمبود داده آزمایشگاهی به‌نحوی که دارای ورودی‌های کسر مولی-آنتالپی-فشار و کسر مولی-آنتروپی-فشار باشند، محاسبات را برای ترکیب گاز خانگیان موجود در جدول ۴-۱۱ و متان خالص انجام داده به‌نحوی که برای گاز خانگیان با استفاده از معادله AGA8 و برای متان خالص از داده‌های آزمایشگاهی NIST استفاده و اعتبارسنجی شده است.

اعتبارسنجی بدین‌صورت می‌باشد که ابتدا در سه حالت دما ثابت ۲۵۰، ۳۰۰ و ۳۵۰ کلوین و در بازه فشاری ۱۰۰۰ تا ۱۵۰۰۰ کیلوپاسکال، تمام نه خاصیت موردنظر شامل ضریب تراکم‌پذیری، ظرفیت گرمایی ویژه در حجم و فشار ثابت، سرعت صوت، ضریب ژول تامسون، انرژی داخلی، آنتالپی، آنتروپی و توان آیزنتروپیک را برای گاز خانگیان توسط معادله AGA8 و برای متان خالص توسط داده‌های NIST به دست آورده و سپس برای شبکه عصبی XPH به‌جای دما، آنتالپی را به‌عنوان ورودی قرار داده و نه خاصیت شامل دما، ضریب تراکم‌پذیری، ظرفیت گرمایی ویژه در حجم و فشار ثابت، سرعت صوت، ضریب ژول تامسون، انرژی داخلی، آنتروپی و توان آیزنتروپیک را با سه ورودی کسر مولی-فشار-آنتالپی توسط شبکه عصبی XPH محاسبه و با داده‌های قبلی تعیین‌شده مقایسه کرده و به همین ترتیب برای شبکه عصبی XPS با استفاده از سه ورودی کسر مولی-فشار-آنتروپی، نه خاصیت شامل دما، ضریب تراکم‌پذیری، ظرفیت گرمایی ویژه در حجم و فشار ثابت، سرعت صوت، ضریب ژول تامسون، انرژی داخلی، آنتالپی و توان آیزنتروپیک را محاسبه و اعتبارسنجی همانند شبکه XPH با استفاده از داده‌های AGA8 و NIST انجام شده است.

جدول ۴-۱۰ شامل خطای AAPRE(%) برای سه حالت دما ثابت ۲۵۰، ۳۰۰ و ۳۵۰ کلوین و فشارهای تا ۱۵۰۰۰ کیلوپاسکال برای دو شبکه عصبی به ترتیب XPH و XPS می‌باشد. همان‌طور که از اعداد این جدول قابل مشاهده می‌باشد، تمام خطاها بین بازه ۱- تا ۱ درصد است که این مقدار بیان‌گر قدرت و توانایی شبکه عصبی در مدل‌سازی و تخمین خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی می‌باشد.

جدول ۴-۱۰۰. AAPRE(%) خروجی‌های شبکه XPH و XPS

Output	Temperature	XPS		XPH	
		Khangiran	Methane	Khangiran	Methane
C _v	T ₁ = 250K	0.2222	0.2496	0.1837	0.116
	T ₂ = 300K	0.0328	0.0939	0.0512	0.1117
	T ₃ = 350K	0.0813	0.0801	0.034	0.0988
C _p	T ₁ = 250K	0.4134	0.4132	0.3404	0.3199
	T ₂ = 300K	0.0311	0.0957	0.0955	0.1504
	T ₃ = 350K	0.026	0.0821	0.0605	0.1244
SoS	T ₁ = 250K	0.0227	0.0581	0.0887	0.0535
	T ₂ = 300K	0.0192	0.0218	0.0634	0.0567
	T ₃ = 350K	0.0126	0.0382	0.0522	0.0557
JT	T ₁ = 250K	0.0557	0.0687	0.0803	0.0873
	T ₂ = 300K	0.0277	0.0285	0.0282	0.0264
	T ₃ = 350K	0.0108	0.056	0.0389	0.0493
U	T ₁ = 250K	0.0368	0.0481	0.0152	0.0136
	T ₂ = 300K	0.0225	0.0329	0.0171	0.0258
	T ₃ = 350K	0.079	0.0711	0.021	0.0273
K	T ₁ = 250K	0.0587	0.0744	0.0501	0.064
	T ₂ = 300K	0.0094	0.0391	0.0135	0.0302
	T ₃ = 350K	0.0152	0.0319	0.0094	0.0235
Z	T ₁ = 250K	0.0307	0.04	0.0252	0.0299
	T ₂ = 300K	0.0079	0.0114	0.0038	0.0115
	T ₃ = 350K	0.0051	0.0137	0.0039	0.0045
T	T ₁ = 250K	0.1709	0.2276	0.0694	0.0753
	T ₂ = 300K	0.0361	0.0442	0.029	0.038
	T ₃ = 350K	0.0202	0.0608	0.0201	0.0408
H	T ₁ = 250K	0.0376	0.0507	-	-
	T ₂ = 300K	0.0586	0.1528	-	-
	T ₃ = 350K	0.2739	0.1997	-	-
S	T ₁ = 250K	-	-	0.2657	0.0449
	T ₂ = 300K	-	-	0.3863	0.0187
	T ₃ = 350K	-	-	0.5012	0.0216

۴_۴ محاسبه خواص ترمودینامیکی گازهای طبیعی ایران

در این قسمت خواص ترمودینامیکی شامل آنتالپی، انرژی داخلی، سرعت صوت، آنتروپی و ضریب ژول تامسون چهار ترکیب گاز طبیعی ایران شامل سرجه، خانگیران، پارس و سرخون با درصدهای مولی مشخص مطابق جدول ۴-۱۱ در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال محاسبه شده است.

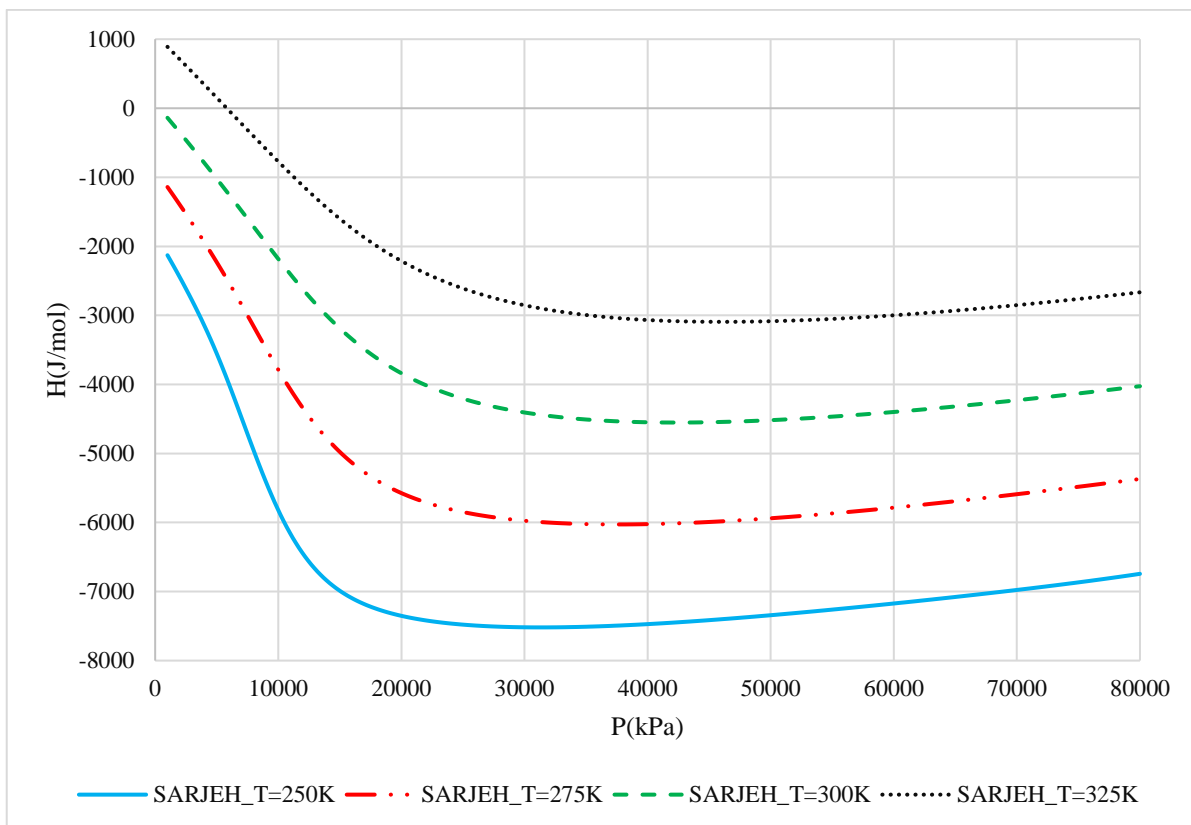
جدول ۴-۱۱. درصد ترکیبات مولی گازهای طبیعی ایران

Compositions	Sarjeh	Khangiran	Pars	Sarkhon
Methane	86.8	98.548	87	88.09
Nitrogen	2.05	0.5	3.1	5.75
Carbon dioxide	0.11	0	1.71	0.53
Ethane	5.82	0.647	5.4	3.42
Propane	3.03	0.069	1.7	1.27
Iso-butane	0.45	0.018	0.3	0.29
n-Butane	0.96	0.039	0.45	0.37
Iso-pentane	0.25	0.018	0.13	0.12
n-Pentane	0.27	0.021	0.11	0.07
n-Hexane	0.26	0.14	0.07	0.09
n-Heptane	-	-	0.03	-
T _c [K]	206.9916	191.83	202.48	195.9994
P _c [kPa]	4560.2	4591.4	4606.9	4539.9
M _w $[\frac{Kg}{Kmol}]$ ^۱	19.05241	16.35648	18.65073	18.16245

۴_۴_۱ آنتالپی

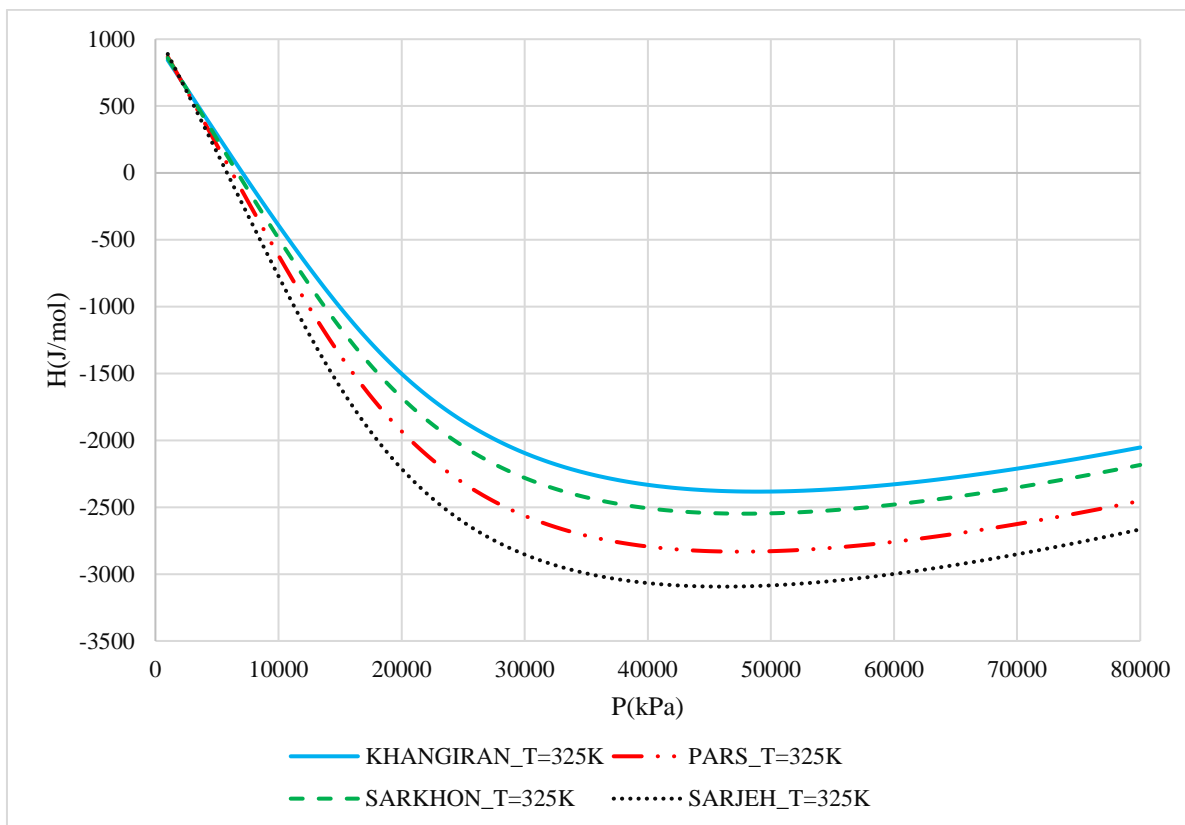
نمودار شکل ۴-۱۷ مقدار آنتالپی مولار منطقه گازی سرجه را تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین نشان می‌دهد. با توجه نمودار شکل ۴-۱۷ مقدار آنتالپی در هر دمایی با افزایش فشار ابتدا کاهش و بعد از آن افزایش می‌یابد. به‌عنوان مثال در دمای ۲۵۰ کلوین، تا فشار ۳۰۰۰۰ کیلوپاسکال، مقدار آنتالپی با نرخ شدیدی کاهش و بعد از ۳۰۰۰۰ کیلوپاسکال با یک شیب ملایم، مقدار آنتالپی افزایش می‌یابد و فشارهایی که در آن مقدار شیب آنتالپی نسبت به فشار تغییر می‌کند با توجه به دمای موردنظر متفاوت است به‌عنوان مثال در دمای ۲۵۰ کلوین در فشار ۳۰۰۰۰ کیلوپاسکال شیب تغییر آنتالپی عوض می‌شود درحالی‌که برای دما ۳۲۵ کلوین این اتفاق در فشارهایی حدود ۵۰۰۰۰ کیلوپاسکال اتفاق می‌افتد.

^۱ Molecular weight



شکل ۴-۱۷ آنتالپی مولار ترکیب گاز سرجه در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال

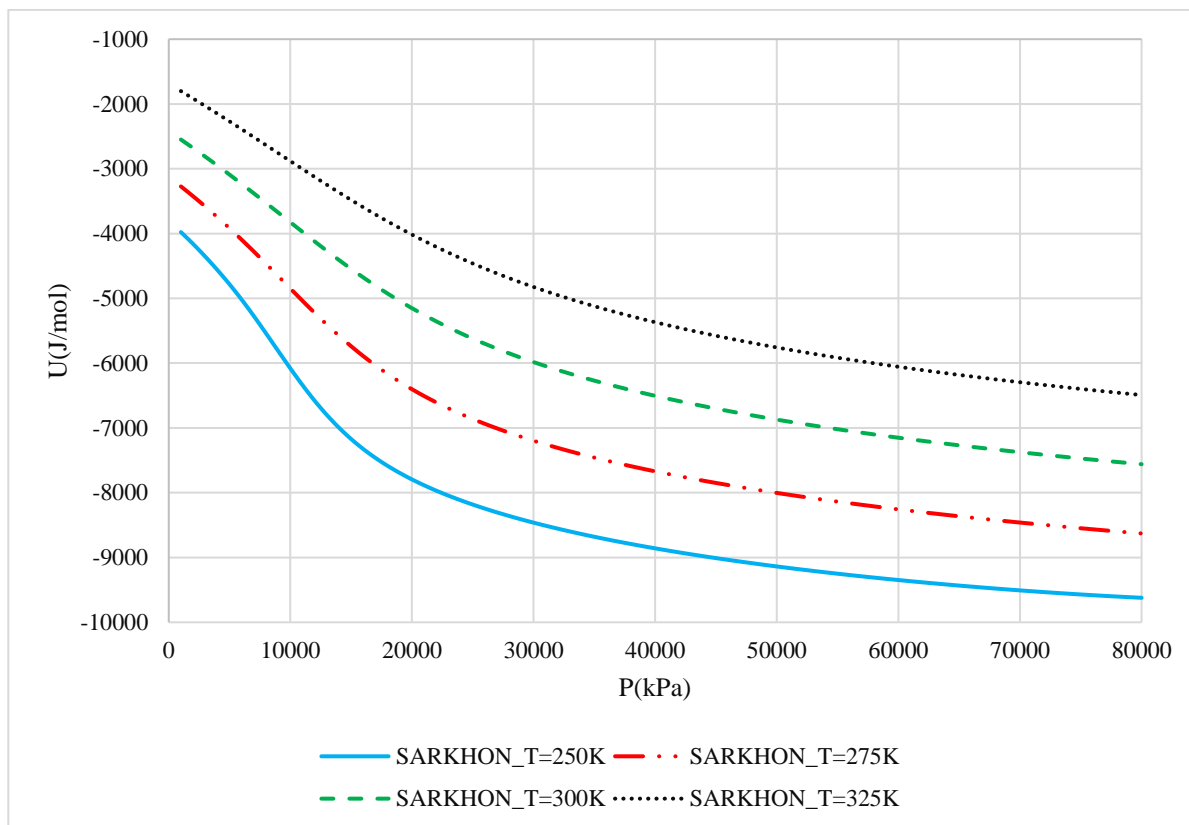
نمودار شکل ۴-۱۸ مقدار آنتالپی مولار را برای چهار منطقه گازی ذکر شده در جدول ۴-۱۱، در دمای ثابت ۳۲۵ کلوین نشان می‌دهد. با توجه به نمودار شکل ۴-۱۸، گازها در فشارهای بسیار پایین مقدار آنتالپی تقریباً برابری دارند اما با افزایش فشار، مقدار آنتالپی دچار تغییر شده به نحوی که تا فشار ۵۰۰۰۰ کیلوپاسکال مقدار آنتالپی به شدت کاهش یافته و بعد از ۵۰۰۰۰ کیلوپاسکال مقدار آنتالپی با افزایش فشار، افزایش می‌یابد. در حالت کلی برای فشارهای بالاتر از ۵۰۰۰۰ کیلوپاسکال و در دماهای ثابت، مقدار آنتالپی با افزایش درصد متان در ترکیب گاز، افزایش می‌یابد.



شکل ۴-۱۸ آنتالپی مولار برای چهار ترکیب گاز خانگیران، پارس، سرخون و سرجه در حالت دما ثابت ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال

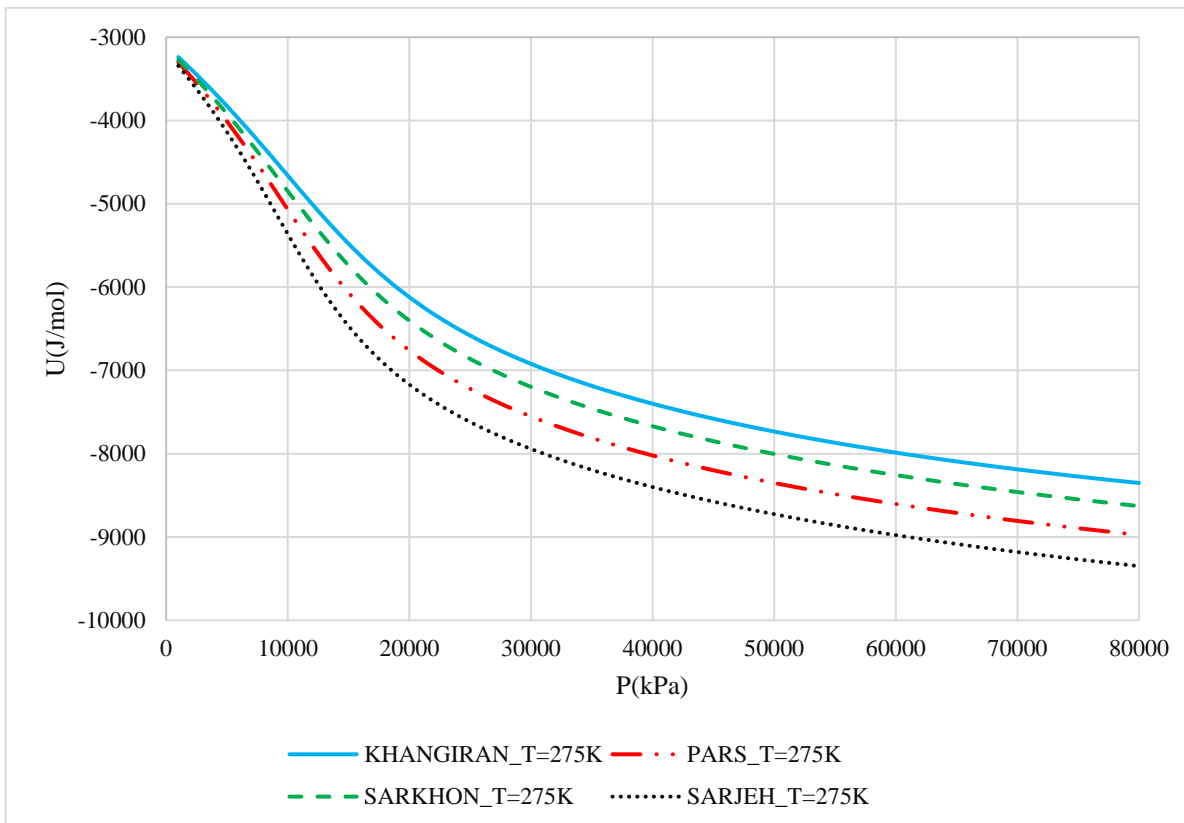
۲_۴_۴ انرژی داخلی

نمودار شکل ۴-۱۹ انرژی داخلی منطقه گازی سرخون را در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال نشان می‌دهد. با توجه به نمودار شکل ۴-۱۹، به طور کلی انرژی داخلی گاز در یک دما ثابت با افزایش فشار، همواره کاهش می‌یابد که آهنگ کاهش مقدار انرژی داخلی گاز در هر دمایی تا فشار ۳۰۰۰۰ کیلوپاسکال با نرخ بیشتری نسبت به فشارهای بالای ۳۰۰۰۰ کیلوپاسکال همراه است و به طور کلی در شرایط یکسان فشاری و ترکیب گاز ثابت، با افزایش دما مقدار انرژی داخلی افزایش می‌یابد.



شکل ۴-۱۹ انرژی داخلی ترکیب گاز سرخون در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال

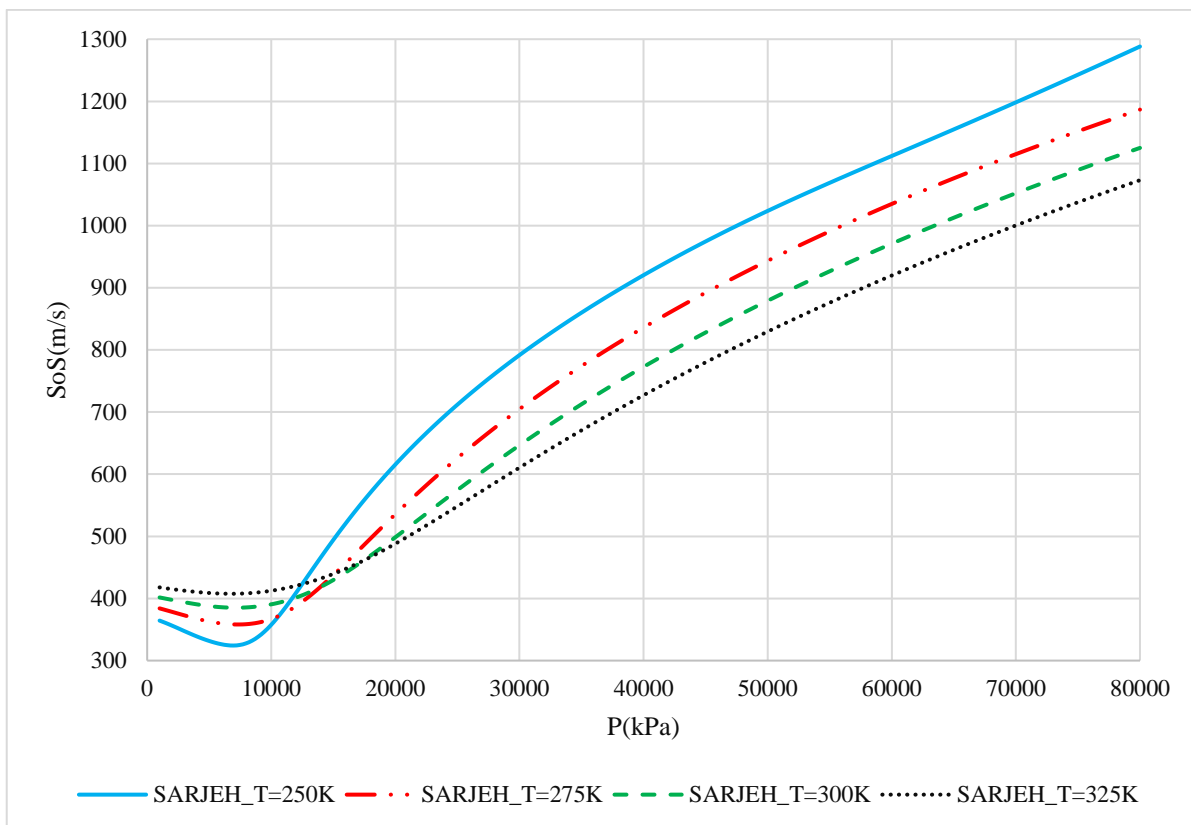
نمودار شکل ۴-۲۰ مقدار انرژی داخلی محاسبه شده را برای چهار منطقه گازی ذکر شده مطابق جدول ۴-۱۱ در دمای ثابت ۲۷۵ کلوین و تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال نشان می‌دهد. با توجه به نمودار شکل ۴-۲۰، در فشارهای کمتر از ۵۰۰۰ کیلوپاسکال، گازها دارای انرژی داخلی یکسانی می‌باشند و تفاوت زیادی در مقدار انرژی داخلی آنها موجود نمی‌باشد، اما با افزایش فشار مقدار انرژی داخلی گازها با توجه به جرم مولکولی آنها کاهش می‌یابد به طوری که هر چه ترکیب گاز سنگین تر شود مقدار انرژی داخلی کاهش بیشتری خواهد یافت و در فشارهای بیشتر از ۳۰۰۰۰ کیلوپاسکال، مقدار انرژی داخلی با افزایش فشار در هر ترکیب گازی با یک نرخ تقریباً ثابتی کاهش می‌یابد.



شکل ۴-۲۰ انرژی داخلی برای چهار ترکیب گاز خانگیران، پارس، سرخون و سرجه در حالت دما ثابت ۲۷۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال

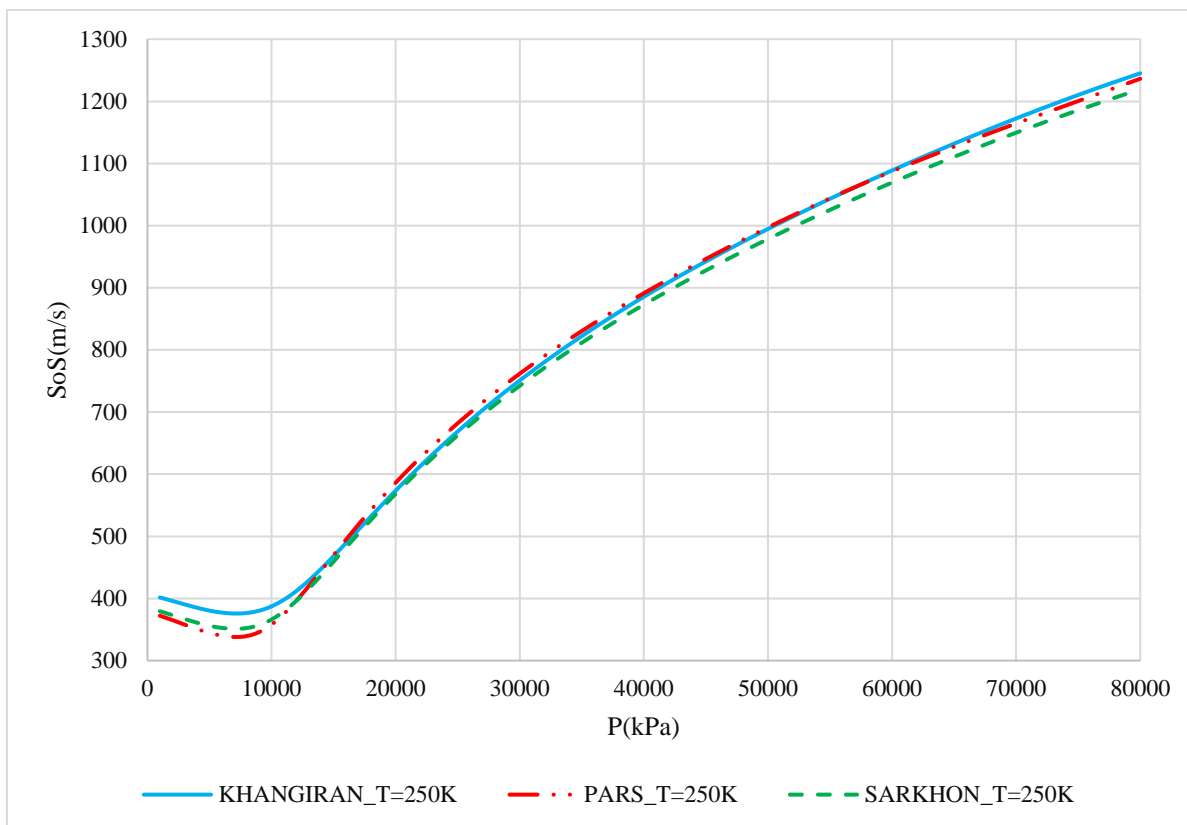
۳_۴_۴ سرعت صوت

نمودار شکل ۴-۲۱ سرعت صوت را برای منطقه گاز سرجه تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین نشان می‌دهد. با توجه به محاسبات انجام شده برای فشارهای کمتر از ۱۰۰۰۰ کیلوپاسکال سرعت صوت با افزایش فشار در هر دمای ثابتی، کاهش می‌یابد اما در فشارهای بیشتر از ۱۰۰۰۰ کیلوپاسکال با افزایش فشار، سرعت صوت افزایش یافته و همچنین در بازه فشاری بیشتر از ۱۰۰۰۰ کیلوپاسکال، با کاهش دما در هر فشار ثابتی در محدوده ذکر شده، مقدار سرعت صوت افزایش می‌یابد به‌عنوان مثال در فشار ۷۰۰۰۰ کیلوپاسکال، با کاهش دما از ۳۲۵ به ۲۵۰ کلوین مقدار سرعت صوت ۱۹/۸٪ افزایش می‌یابد.



شکل ۴-۲۱ سرعت صوت ترکیب گاز سرخون در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال

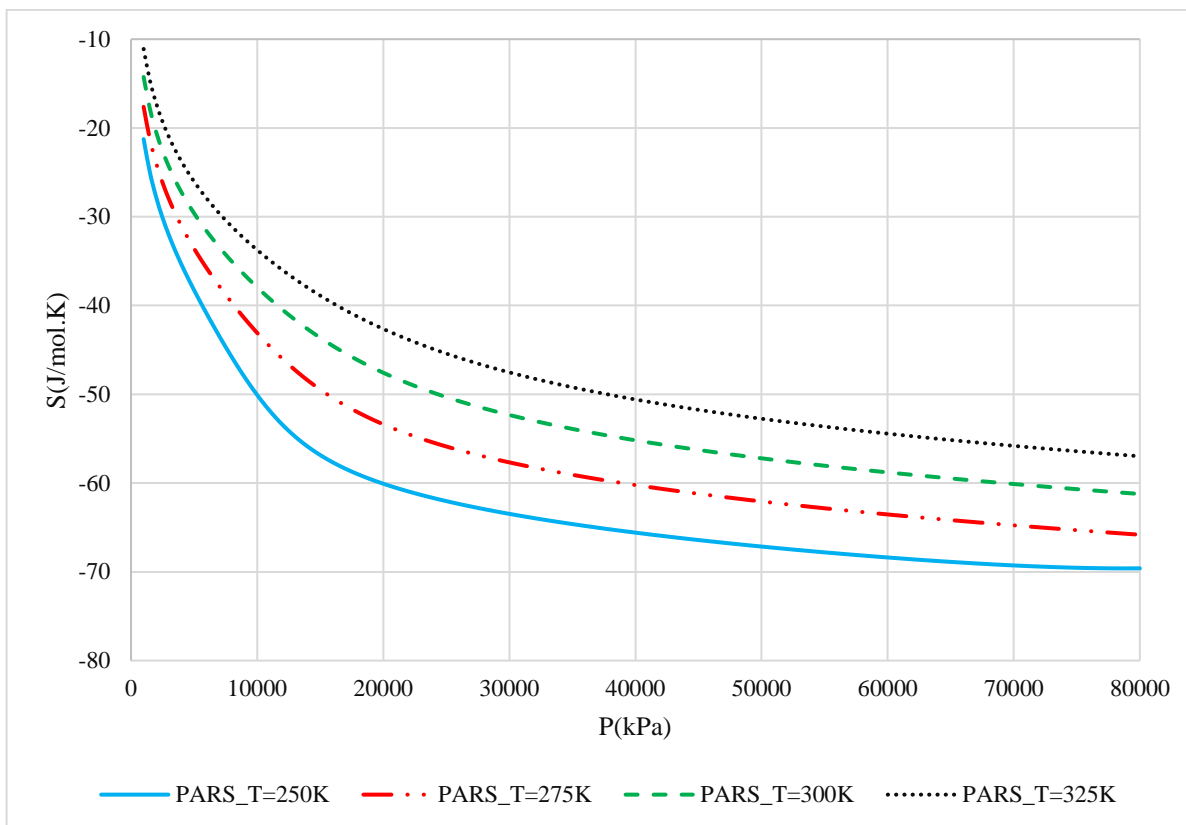
نمودار شکل ۴-۲۲ سرعت صوت را برای سه منطقه گازی خانگیان، پارس و سرخون در دمای ثابت ۲۵۰ کلوین نشان می‌دهد. با توجه به نمودار شکل ۴-۲۲ تا فشارهای ۱۰۰۰۰ کیلوپاسکال با افزایش جرم مولکولی ترکیب گاز، مقدار سرعت صوت در یک دمای ثابت کاهش می‌یابد و از فشارهای بیشتر از ۱۰۰۰۰ کیلوپاسکال، ترکیب گاز تاثیر چندانی بر روی سرعت صوت نداشته و به‌طور کلی در این محدوده با افزایش فشار مقدار سرعت صوت افزایش می‌یابد.



شکل ۴-۲۲ سرعت صوت برای سه ترکیب گاز خانگیران، پارس، سرخون در حالت دما ثابت ۲۵۰ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال

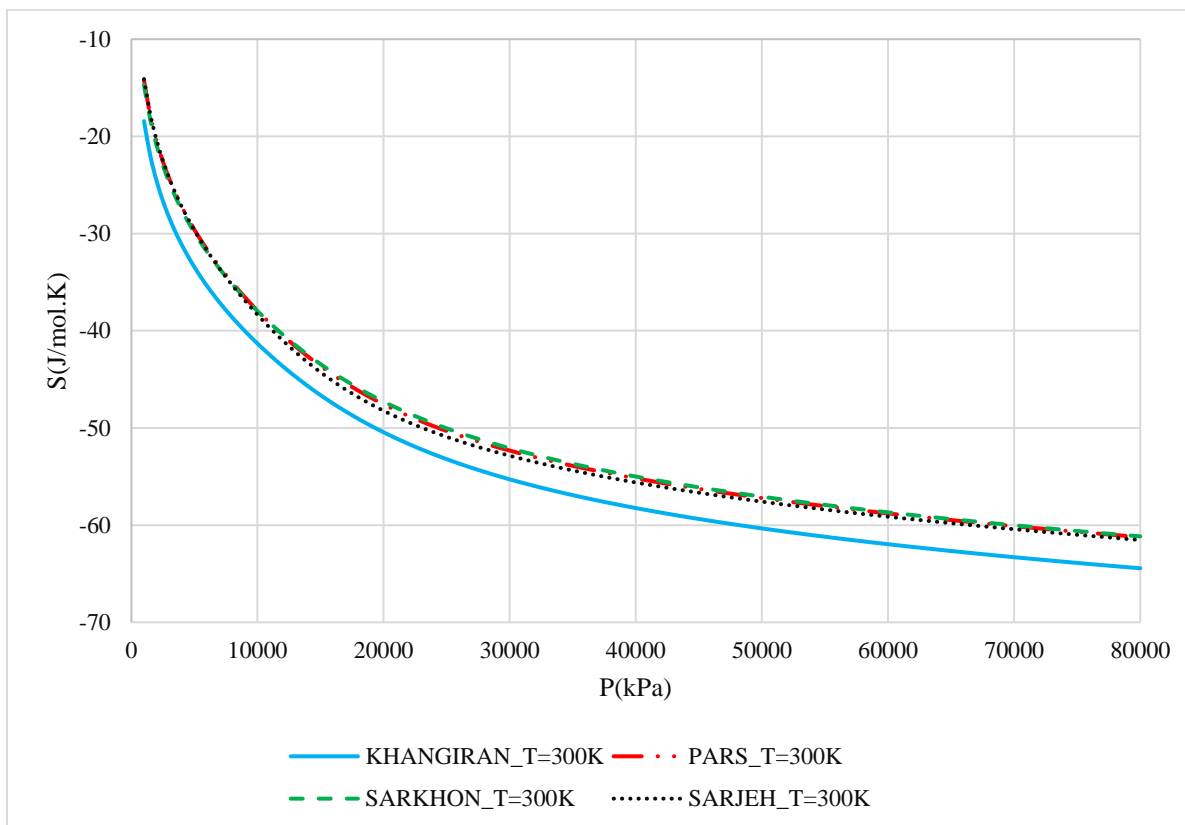
۴_۴_۴ آنترپی

نمودار شکل ۴-۲۳ آنترپی برحسب واحد مول را برای گاز منطقه پارس در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین نشان می‌دهد. با توجه به نمودار شکل ۴-۲۳، در هر دمای ثابتی با افزایش فشار، مقدار آنترپی کاهش می‌یابد و این کاهش آنترپی تا فشارهای ۳۵۰۰۰ کیلوپاسکال با نرخ بیشتر نسبت به فشارهای بالای ۳۵۰۰۰ کیلوپاسکال می‌باشد. به‌عنوان مثال در دمای ثابت ۲۵۰ کلوین، مقدار آنترپی از فشار ۱۰۰۰ کیلوپاسکال نسبت به فشار ۳۰۰۰۰ کیلوپاسکال به میزان ۶۶/۴٪ کاهش یافته درحالی‌که این میزان کاهش آنترپی در فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال نسبت به ۳۰۰۰۰ کیلوپاسکال ۹/۷٪ درصد است.



شکل ۴-۲۳ آنتروپی ترکیب گاز پارس در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال

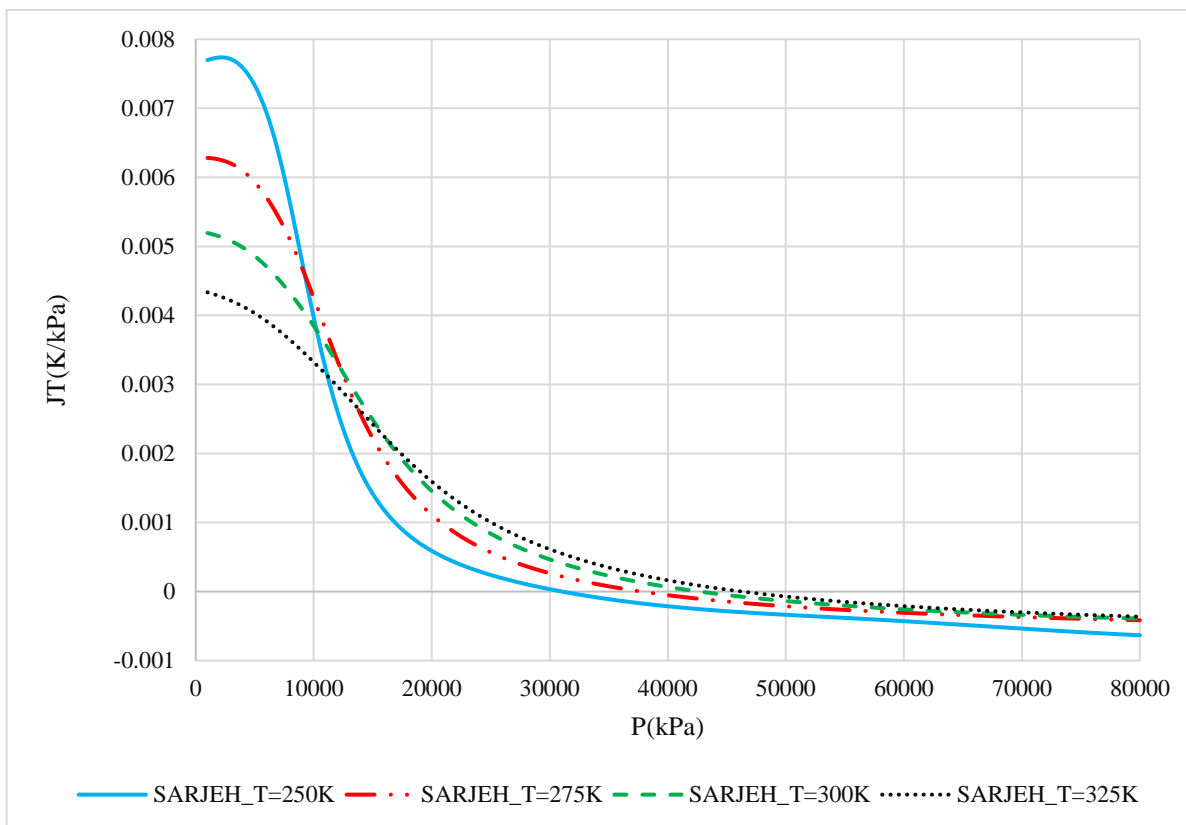
نمودار شکل ۴-۲۴ آنتروپی چهار منطقه گاز اشاره شده مطابق جدول ۴-۱۱ در دما ثابت ۳۰۰ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال نشان می‌دهد. مطابق با نمودار شکل ۴-۲۴، با افزایش مقدار متان در ترکیب گاز، مقدار آنتروپی در هر شرایط یکسانی از فشار و دما، کاهش می‌یابد و با افزایش فشار، مقدار کاهش آنتروپی با توجه به افزایش درصد متان محسوس‌تر خواهد شد.



شکل ۴-۲۴ آنتروپی برای چهار ترکیب گاز خانگیران، پارس، سرخون و سرجه در حالت دما ثابت ۳۰۰ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال

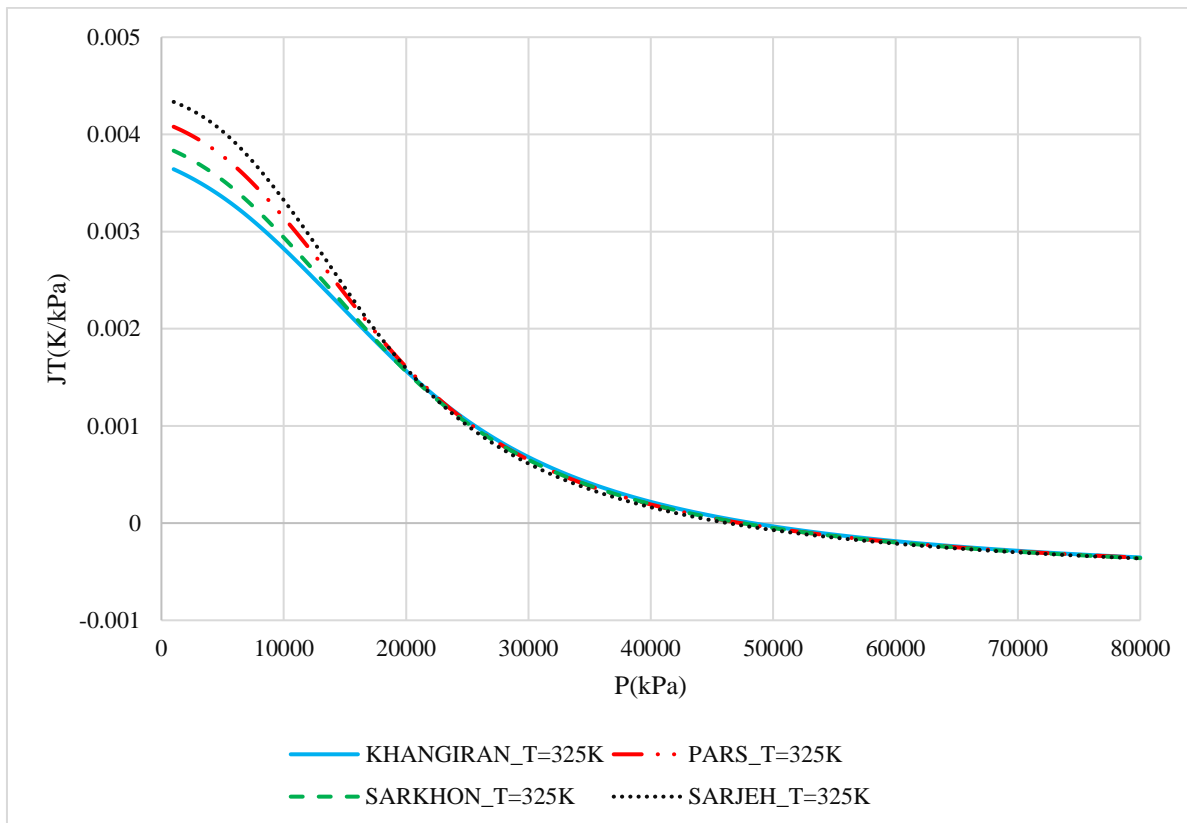
۴_۴_۵ ضریب ژول تامسون

نمودار شکل ۴-۲۵ مقدار ضریب ژول تامسون را برای منطقه گازی سرجه تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین نشان می‌دهد. با توجه به نمودار شکل ۴-۲۵ از فشار ۱۰۰۰ کیلوپاسکال به فشارهای بالاتر، مقدار ضریب ژول تامسون کاهش می‌یابد و به طور کلی در ضرایب ژول تامسون منفی، همیشه با افزایش دما در یک فشار ثابت مقدار ضریب ژول تامسون افزایش می‌یابد. فشاری که در آن ضریب ژول تامسون منفی می‌گردد همانند نمودار شکل ۴-۲۵ وابسته به دما می‌باشد به نحوی که در دماهای پایین‌تر با افزایش فشار سریع‌تر به ضریب ژول تامسون منفی خواهیم رسید.



شکل ۴-۲۵ ضریب ژول تامسون ترکیب گاز سرجه در چهار حالت دما ثابت ۲۵۰، ۲۷۵، ۳۰۰ و ۳۲۵ کلوین تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال

نمودار شکل ۴-۲۶ تغییرات ضریب ژول تامسون را برای چهار منطقه گازی ذکر شده در جدول ۴-۱۱ در دمای ثابت ۳۲۵ کلوین نشان می‌دهد. با توجه به نمودار شکل ۴-۲۶ در فشارهای کمتر از ۲۰۰۰۰ کیلوپاسکال، هر چقدر گاز سبک‌تر باشد ضریب ژول تامسون کمتری دارد اما برای فشارهای بیشتر از ۲۰۰۰۰ کیلوپاسکال وابستگی تغییرات ضریب ژول تامسون نسبت به وزن مولکولی گاز کاهش یافته و برای گازهای متفاوت در یک دمای ثابت، ضریب ژول تامسون در یک بازه فشاری یکسانی مانند شکل زیر در فشار ۴۵۰۰۰ کیلوپاسکال منفی خواهد شد.



شکل ۴-۲۶ ضریب ژول تامسون برای چهار ترکیب گاز خانگیران، پارس، سرخون و سرجه در حالت دما ثابت ۳۰۰ کلون تا فشار ۸۰۰۰۰ کیلوپاسکال

۴_۵ کاربردهای شبکه‌های عصبی ایجاد شده

در این قسمت برخی از کاربردهای مهم شبکه‌های عصبی ایجاد شده را بررسی خواهیم کرد. دبی‌سنجی جریان عبوری گاز و افت دما در ایستگاه‌های تقلیل فشار از مهم‌ترین مسائل موجود در صنعت گاز می‌باشد که می‌توان به راحتی این مسائل را توسط شبکه‌های عصبی آموزش دیده شده تجزیه و تحلیل کرد.

۴_۵_۱ دبی‌سنجی در جریان‌سنج‌ها^۱

یکی از کاربردهای مهم اندازه‌گیری سرعت صوت، محاسبه نرخ دبی جرمی در نازل‌های صوتی^۲ می‌باشد. که نازل‌های صوتی برای کالیبره کردن جریان‌سنج‌ها در صنعت انتقال گاز طبیعی به وفور استفاده می‌شوند [۷۱]. اما یکی از مشکلات اساسی جریان‌سنج‌ها کالیبراسیون دوره‌ای آنها توسط نازل‌های صوتی می‌باشد که این مستلزم صرف هزینه و زمان قابل توجهی است، اما با استفاده از شبکه

^۱ Flowmeters

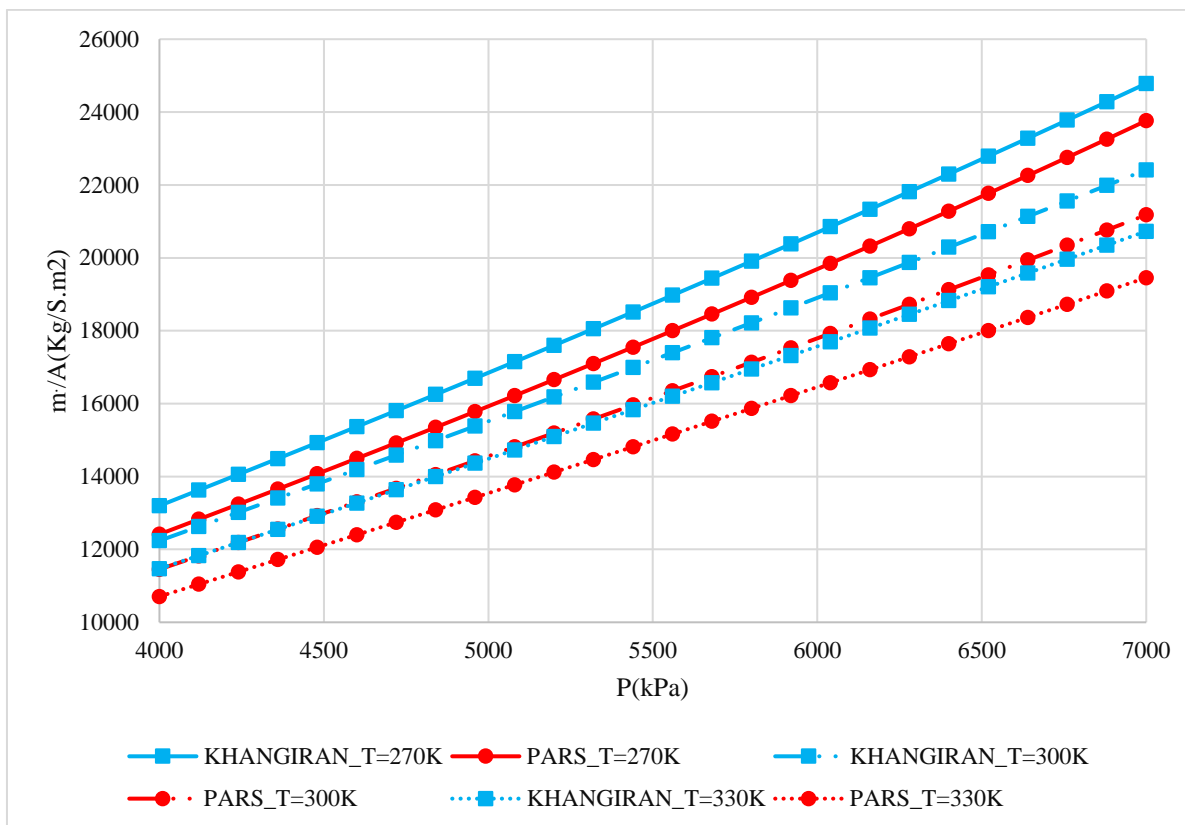
^۲ Sonic nozzles

عصبی آموزش داده شده که با دقت بسیار بالایی سرعت صوت و ضریب تراکم‌پذیری مخلوط گاز طبیعی را محاسبه می‌کند، می‌توان در محاسبه دبی جریان از آن استفاده شود.

نحوه سنجش جریان جرمی در فرآیند انتقال گاز طبیعی به این صورت است که با داشتن ترکیب گاز، دما و فشار، به ترتیب ضریب تراکم‌پذیری و سرعت صوت محاسبه می‌گردد و با توجه به معادله گاز کامل می‌توان از طریق ضریب تراکم‌پذیری مقدار چگالی بر واحد جرم را محاسبه و با داشتن این مقادیر، دبی جرمی به راحتی قابل محاسبه می‌باشد.

$$\rho = \frac{P}{ZRT}$$
$$\dot{m}/A = \rho U$$

به‌عنوان نمونه برای دو گاز طبیعی ایران شامل گازهای خانگی‌ان و پارس در سه حالت دما ثابت ۲۷۰، ۳۰۰ و ۳۳۰ کلوین و در محدوده فشار کاری بین ۴۰۰۰ تا ۷۰۰۰ کیلوپاسکال، دبی جرمی بر واحد سطح برای این دو گاز مطابق با نمودار زیر می‌باشد. مطابق با نمودار شکل ۴-۲۷، با افزایش دما برای یک ترکیب گاز مشخص در هر فشاری مقدار دبی جرمی کاهش می‌یابد و رابطه افزایش دبی جرمی با فشار یک رابطه صعودی می‌باشد به‌نحوی که با افزایش فشار در هر دمای ثابتی، مقدار دبی جرمی افزایش یافته و شایان ذکر است که به دلیل زیاد بودن جرم مولکولی گاز پارس نسبت به گاز خانگی‌ان، مقدار دبی جرمی گاز پارس در شرایط دمایی و فشاری یکسان نسبت به گاز خانگی‌ان کمتر است.



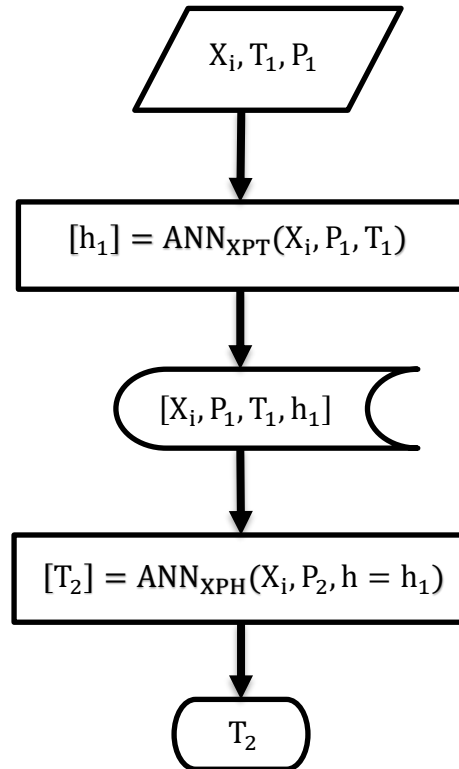
شکل ۴-۲۷ دبی جرمی بر واحد سطح برای گازهای خانگیران و پارس در سه حالت دما ثابت ۲۷۰، ۳۰۰ و ۳۳۰ کلومین و در محدوده فشار کاری بین ۴۰۰۰ تا ۷۰۰۰ کیلوپاسکال

۴_۵_۲ افت دما در شیرهای فشارشکن

اختناق گاز طبیعی یک فرآیند رایجی در صنعت گاز می باشد که در آن، گاز تحت یک فرآیند آنتالپی ثابت به طور ناگهانی منبسط می شود و فشار آن کاهش محسوسی می یابد. این فرآیند در زمینه انتقال گاز طبیعی و در ایستگاه های CGS به وفور توسط شیرهای فشارشکن انجام می گیرد. یکی از پارامترهای مهمی که در هنگام انجام فرآیند اختناق مدنظر می باشد، افت دما در اثر انبساط است که تعیین دقیق دما بعد از فرآیند اختناق تاثیر بسیار مهمی در خصوص عدم تشکیل هیدرات های گاز دارد و افت دما هموار در فرآیندهای انتقال گاز پارامتری مهم است [۷۲]. شایان ذکر است که معادله های حالت از قبیل AGA8، فقط ورودی های دما و فشار و کسر مولی را قبول می کنند و به عنوان مثال برای تعیین افت دما در ژول تامسون و لووها به دلیل این که یک فرآیند آنتالپی ثابت می باشد، نیاز است که با روش های تکراری افت دما محاسبه شود که دقت زیادی نداشته و زمان بر می باشند اما به راحتی و با دقت بسیار زیادی می توان افت دما را در شیرهای اختناقی توسط شبکه های عصبی آموزش دیده شده محاسبه کرد.

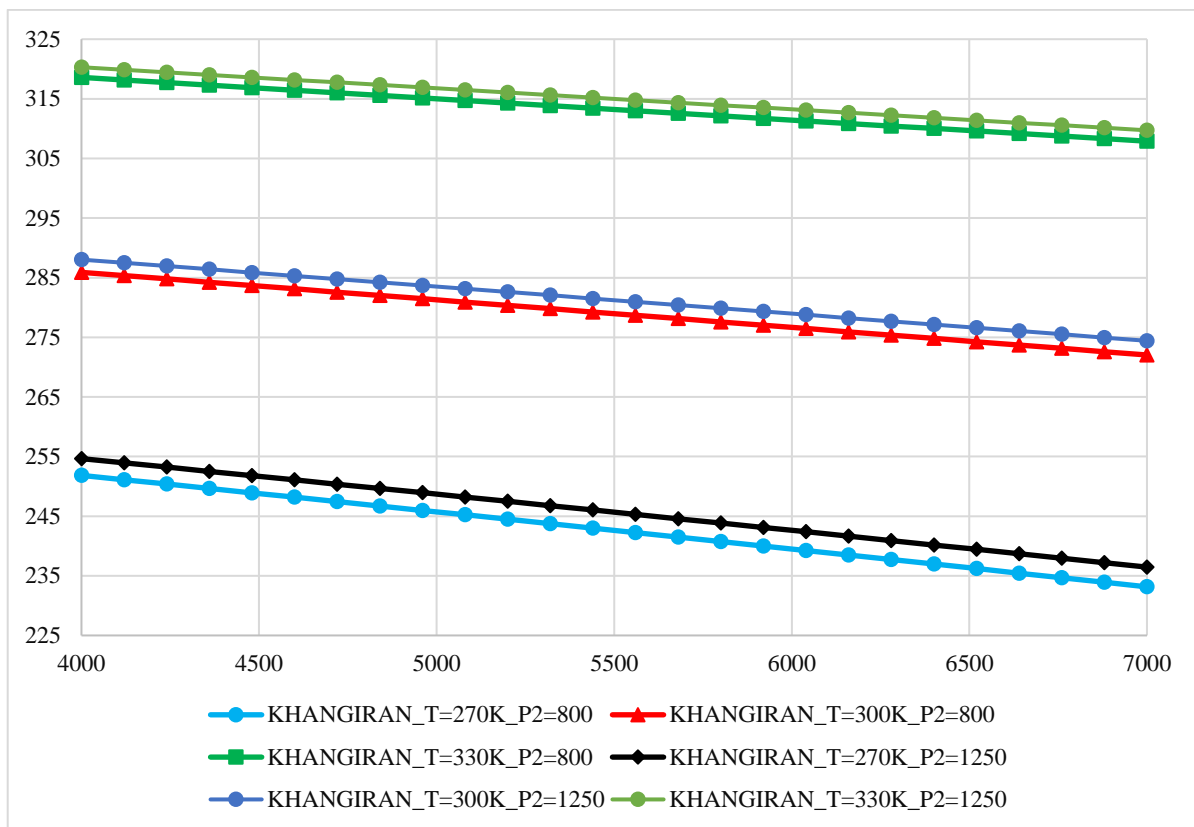
برای محاسبه افت دما در شیرهای اختناق توسط شبکه های عصبی همانند فلوجارت شکل ۴-۲۸، در مرحله اول، آنتالپی ترکیب گاز با استفاده از دما و فشار اولیه محاسبه شده و به دلیل این که فرآیند

اختناق یک فرآیند آنتالپی ثابت است، با استفاده از شبکه عصبی XPH با ورودی‌های کسر مولی ترکیب گاز مورد بررسی و فشاری که می‌خواهیم به صورت هم آنتالپی کاهش یابد (P_2)، مقدار دما بعد از فرآیند اختناق قابل محاسبه می‌باشد.



شکل ۴-۲۸ روند محاسبه افت دما در شیرهای فشارشکن توسط شبکه‌های عصبی

به‌عنوان نمونه با در نظر گرفتن ترکیب گاز خانگی‌ران و دو فشار ثانویه ۸۰۰، ۱۲۵۰ کیلوپاسکال، میزان افت دما در فرآیند اختناق با بازه فشار اولیه ۴۰۰۰ تا ۷۰۰۰ کیلوپاسکال و سه دمای اولیه ۲۷۰، ۳۰۰ و ۳۳۰ کلوین، مقدار دمای ثانویه با شرایط ذکر شده در شیر فشارشکن همانند نمودار شکل ۴-۲۹ می‌باشد. با توجه به نمودار شکل ۴-۲۹، هر چه که فشار اولیه با توجه به فشار ثانویه ثابت، بیشتر باشد، میزان افت دما افزایش می‌یابد و در یک فشار و دمای اولیه ثابت با کاهش فشار اولیه، دما ثانویه نیز افزایش می‌یابد.



شکل ۴-۲۹ افت دما در شیر فشارشکن برای گاز خانگیران در سه دمای اولیه ۲۷۰، ۳۰۰ و ۳۳۰ کلوین و دو فشار ثانویه ۸۰۰ و ۱۲۵۰ کیلوپاسکال

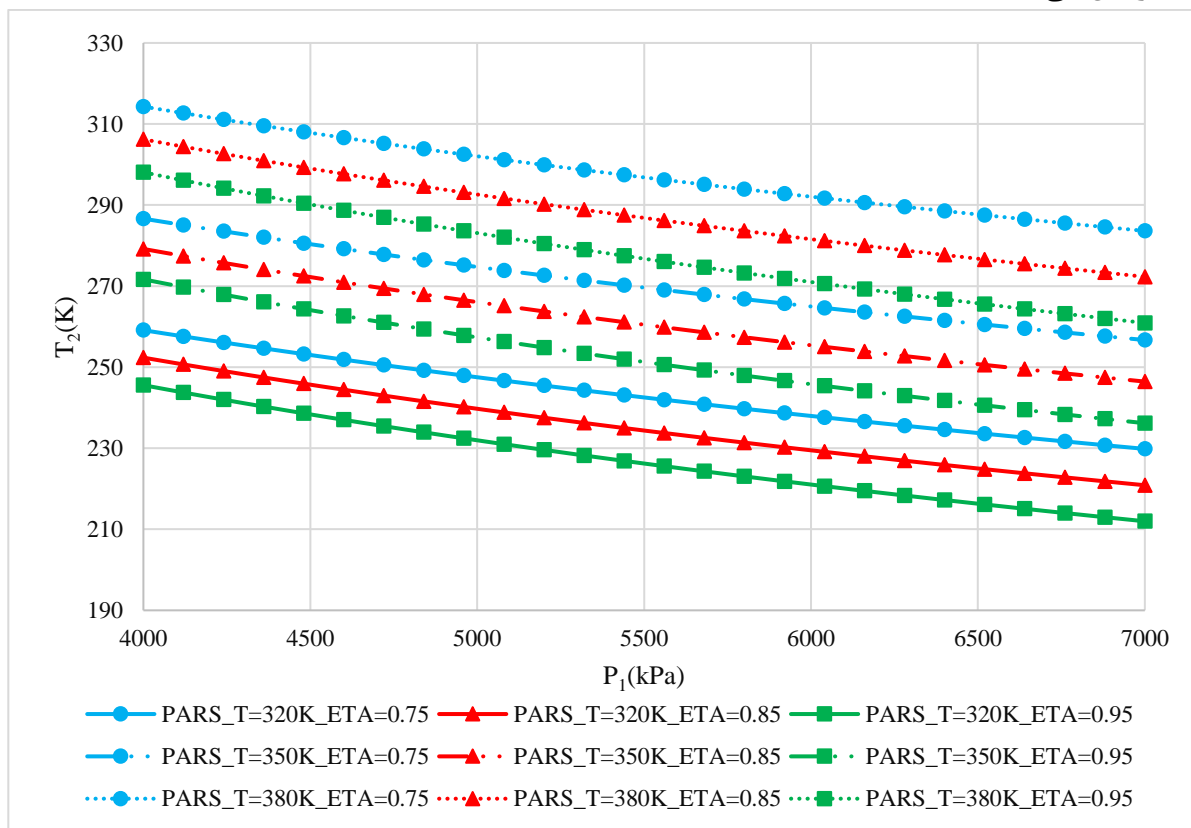
۴_۵_۳ افت دما در توربین‌های انبساطی

توربین‌های انبساطی یا توربو اکسپنדרها دستگاه‌هایی هستند که وظیفه آنها استحصال انرژی در فرآیند کاهش فشار و دما از یک جریان گاز است. از توربو اکسپنדרها در فرآیند جداسازی و خالص‌سازی گازها مانند گاز هلیوم و هیدروژن که با استفاده از چگالش انجام می‌شود بهره‌برداری‌های فراوانی می‌کنند. یکی دیگر از کاربردهای توربو اکسپنדרها می‌تواند به فرآیند کاهش فشار در ایستگاه‌های تقلیل فشار اشاره کرد به نحوی که ابتدا گاز با فشار بالا در حدود ۵۰۰۰ تا ۷۰۰۰ کیلوپاسکال انتقال یافته اما فشار گاز باید قبل از رسیدن به محل‌های مصرف به ۱۰۰۰ تا ۲۰۰۰ کیلوپاسکال کاهش یابد که این کاهش فشار از دو طریق رخ می‌دهد، می‌توان از یک شیر فشارشکن استفاده کرد که وظیفه آنها فقط کاهش فشار می‌باشد اما باید به این نکته توجه کرد که فرآیند اختناق در شیرهای فشارشکن دارای تخریب انرژی می‌باشد و از انرژی گاز با فشار بالا استفاده‌ای نمی‌کنند درحالی‌که می‌توان با استفاده از یک توربو اکسپنדר علاوه بر کاهش فشار، بازیافت انرژی انجام داد و آن را به انرژی الکتریکی یا غیره تبدیل کرد [۷۳].

فرآیند کاهش فشار در توربو اکسپنדרها به گونه‌ای می‌باشد که گاز ابتدا با دما و فشار معینی وارد توربین انبساطی شده و با توجه به بازده توربو اکسپنדרها که معمولاً از ۷۵٪ به بالا است، فرآیند

به صورت آنتروپی ثابت انجام می‌شود. همانند ضعف بیان شده معادلات حالت در تحلیل فرآیندهای از قبیل آنتالپی ثابت مانند بخش ژول تامسون ولووها، می‌توان با استفاده از قابلیت‌های شبکه‌های عصبی آموزش‌دیده شده، میزان افت دما در فرآیند کاهش فشار درون توربین‌های انبساطی را به راحتی محاسبه نمود.

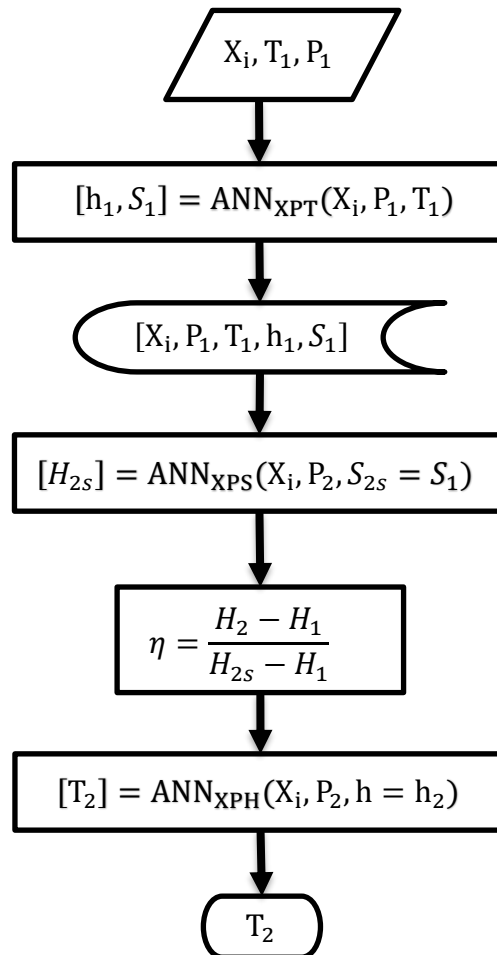
به‌عنوان مثال با در نظر گرفتن گاز حوزه پارس با سه دما اولیه ۳۲۰، ۳۵۰ و ۳۸۰ کلوین در بازه فشاری ابتدایی ۴۰۰۰ تا ۷۰۰۰ کیلوپاسکال پس از افت فشار تا ۱۲۵۰ کیلوپاسکال در توربین‌های انبساطی با بازده‌های ۰/۷۵٪، ۰/۸۵٪ و ۰/۹۵٪، دارای دماهای ثانویه‌ای مطابق با نمودار شکل ۴-۳۰ می‌باشد. مطابق با نمودار شکل ۴-۳۰، با افزایش بازده آیزنتروپیک توربین انبساطی مقدار دمای ثانویه افزایش می‌یابد.



شکل ۴-۳۰ افت دما در توربین‌های انبساطی برای گاز پارس در سه بازده آیزنتروپیک ۰/۷۵، ۰/۸۵ و ۰/۹۵ درصد و سه دمای اولیه ۳۲۰، ۳۵۰ و ۳۸۰ کلوین تا فشار ثانویه ۱۲۵۰ کیلوپاسکال

برای تعیین دما ثانویه در فرآیند افت فشار درون توربین‌های انبساطی با استفاده از شبکه‌های عصبی همانند فلوجارت شکل ۴-۳۱، باید در مرحله اول با توجه به دما و فشار اولیه و ترکیب گاز مقدار آنتالپی و آنتروپی را توسط شبکه عصبی XPT محاسبه نمود و سپس با استفاده از شبکه عصبی XPS آنتالپی آیزنتروپیک را در مرحله دوم با ورودی‌های ترکیب گاز موردنظر، فشاری که می‌خواهیم به آن کاهش یابد و مقدار آنتروپی که این مقدار آنتروپی با توجه به این‌که فرآیند آیزنتروپیک توربو اکسپنדרها، همان مقدار آنتروپی در مرحله اول می‌باشد که توسط شبکه عصبی XPT به دست آمده

است، محاسبه کنیم و در مرحله سوم با توجه به بازده آیزنتروپیک توربین‌های انبساطی مقدار آنتالپی اصلی پس از فرآیند کاهش فشار به دست می‌آید و با استفاده از شبکه عصبی XPH با ورودی‌های فشار ثانویه و ترکیب مولی و آنتالپی ثانویه، مقدار دمای نهایی گاز بعد از کاهش فشار محاسبه می‌شود.



شکل ۴-۳۱ روند محاسبه افت دما در توربین‌های انبساطی توسط شبکه‌های عصبی

فصل ۵ : نتیجه گیری و پیشنهادات

۵_۱ خلاصه مطالب و جمع بندی

توسعه و بهره‌برداری بیشتر از گاز طبیعی مرهون رشد توسعه رایانه‌ها و سیستم‌های الکترونیکی چه در روش‌های آزمایشگاهی و چه در معادلات و روابط تعیین خواص می‌باشد. به همین دلیل در سال‌های اخیر شاهد به‌کارگیری روش‌های متنوع در صنعت گاز طبیعی برای تعیین خواص ترمودینامیکی می‌باشیم.

در این پایان‌نامه، نه خاصیت مهم ترمودینامیکی گاز طبیعی شامل ضریب تراکم‌پذیری، ظرفیت گرمایی ویژه در فشار و حجم ثابت، سرعت صوت، ضریب ژول تامسون، آنتالپی، آنتروپی، انرژی داخلی و توان آیزنتروپیک، توسط شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه محاسبه شده است. علاوه بر محاسبه خواص براساس ورودی‌های ترکیب گاز، فشار و دما، در این پایان‌نامه دو شبکه عصبی دیگر آموزش دیده شده‌اند که برخلاف حالت عادی شبکه اول به‌جای دما، آنتالپی برای شبکه عصبی دوم و آنتروپی برای شبکه عصبی سوم را به‌عنوان ورودی در کنار ترکیب گاز و فشار دریافت می‌کند. هدف از آموزش این نوع شبکه برای این می‌باشد که در فرآیندهای ترمودینامیکی درون سیکل‌ها، در بعضی از نقاط آنتالپی و یا آنتروپی گاز طبیعی در فشاری مشخص موجود می‌باشد که باید براساس این اطلاعات، دما و سایر خواص ترمودینامیکی گاز طبیعی را محاسبه کنیم اما این کار در حالت عادی معادلات حالت که دارای ورودی‌های ثابت دما، فشار و ترکیب گاز می‌باشند، نیازمند استفاده از محاسبات عددی و حدس و گمان است که دقت این روش‌ها بسیار پایین می‌باشد و علاوه بر این مستلزم صرف زمان طولانی با توجه به پیچیده بودن ترکیب گاز دارد اما با استفاده از این سه مجموعه شبکه عصبی آموزش‌دیده شده، می‌توان این محاسبات را با دقت بسیار بالا و با صرف زمان اندکی انجام داد.

۵_۲ پیشنهادات

با توجه به توانایی‌های شبکه عصبی در مدل‌سازی می‌توان از شبکه‌های عصبی در شبیه‌سازی مسائل موجود در صنعت گاز استفاده‌های فراوان کرد. بنابراین پیشنهادهای تحقیقاتی برای ادامه این پژوهش عبارتند از:

۱. ضرایب ویرال یکی از پارامترهای مهم در زمینه خواص ترمودینامیکی می‌باشد اما با توجه به دشواری‌های موجود در اندازه‌گیری این ضرایب برای مواد موجود در ترکیب گاز طبیعی می‌توان از مسئله یادگیری غیر نظارت‌شده استفاده کرد که دارای توانایی زیادی در پاسخ به مسائلی می‌باشد که جواب دقیقی برای آن موجود نیست و یا استحصال آن جواب نیازمند صرف وقت و هزینه بسیاری می‌باشد.

۲. استفاده از مدل‌های ترکیبی شبکه‌های عصبی از جمله مدل‌های تطبیقی عصبی-فازی در تعیین خواص.

پوست

الف) روابط تجربی جهت محاسبه ضریب تراکم پذیری

- درانچاک-پرویز-رابینسون (رابطه 1)

$$Z = 1 + \left(A_1 + \frac{A_2}{T_r} + \frac{A_3}{T_r^3} \right) \rho_r + \left(A_4 + \frac{A_5}{T_r} \right) \rho_r^2 + \frac{A_5 A_6 \rho_r^5}{T_r} + \frac{A_7 \rho_r^2}{T_r^3} (1 + A_8 \rho_r^2) \exp(-A_8 \rho_r^2)$$

- درانچاک-ابوقاسم (رابطه 2)

$$Z = 1 + \left(A_1 + \frac{A_2}{T_r} + \frac{A_3}{T_r^3} + \frac{A_4}{T_r^4} + \frac{A_5}{T_r^5} \right) \rho_r + \left(A_6 + \frac{A_7}{T_r} + \frac{A_8}{T_r^2} \right) \rho_r^2 - A_9 \left(\frac{A_7}{T_r} + \frac{A_5}{T_r^2} \right) \rho_r^5 + A_{10} (1 + A_{11} \rho_r^2) \frac{\rho_r^3}{T_r^3} \exp(-A_{11} \rho_r^2)$$

- هال-یاربورو (رابطه 3)

$$Z = \frac{1 + \rho_r + \rho_r^2 - \rho_r^3}{(1 - \rho_r)^3} - (A_1 T_r^{-1} - A_2 T_r^2 + A_3 T_r^3) \rho_r + (A_4 T_r^{-1} - A_5 T_r^{-2} + A_6 T_r^{-3}) \rho_r^{(A_7 + A_8 T_r^{-1})}$$

- بگز-بریل (رابطه 4)

$$Z = A_1 (T_r - A_2)^{\frac{1}{2}} - A_3 T_r - A_4 + \frac{1 - A_1 (T_r - A_2)^2 - A_3 T_r - A_4}{\exp \left((A_5 - A_6 T_r) P_r + \left(\frac{A_7}{T_r - A_8} - A_9 \right) P_r^2 + \frac{A_{10} P_r^6}{10 A_{11} (T_r - 1)} \right)} + (A_{12} - A_{13} \log(T_r)) P_r^{10(A_{14} - A_{15} T_r + A_{16} T_r^2)}$$

- شرکت نفتی شل (رابطه 5)

$$Z = -A_1 - A_2 T_r + A_3 (T_r - A_4)^{\frac{1}{2}} + (A_5 + \frac{A_6}{T_r - A_7}) P_r + (1 + A_1 + A_2 T_r - A_3 (T_r - A_4)^{\frac{1}{2}}) \exp(-P_r (A_8 - A_9 T_r + (\frac{A_{10}}{T_r - A_{11}} - A_{12}) P_r) + A_{13} \exp(-A_{14} (T_r - 1))) - (A_{15} \exp(-A_{14} (T_r - 1))) (\frac{P_r}{10})^4$$

• پاپ (رابطه 6)

$$Z = 1 + (A_1 \times T_r^{A_2}) \times \left(\frac{P_r}{T_r^2} - T_r - A_3 + \frac{A_4}{T_r} \right) \times (1 - \exp(A_5 \times \frac{P_r}{T_r^2} + A_6 \times (\frac{P_r}{T_r^2})^2))$$

• محمود (رابطه 7)

$$Z = (A_1 \exp(-A_2 T_r)) P_r^2 - (A_3 \exp(-A_2 T_r)) P_r + (-A_4 T_r^2 - A_5 T_r + A_6)$$

• عزیزى و همکاران (رابطه 8)

$$\begin{aligned} \alpha &= A_1 T_r^2 + A_2 P_r^{1.028} + A_3 P_r^{1.58} T_r^{-2.1} + A_4 \log T_r^{-0.5} \\ \beta &= A_5 + A_6 T_r^{2.4} + A_7 P_r^{1.56} + A_8 P_r^{0.124} T_r^{3.033} \\ \gamma &= A_9 \ln T_r^{-1.28} + A_{10} \ln T_r^{1.37} + A_{11} \ln P_r + A_{12} \ln P_r^2 + A_{13} \ln P_r \ln T_r \\ \delta &= 1 + A_{14} T_r^{5.55} + A_{15} P_r^{0.68} T_r^{0.33} \\ \varepsilon &= A_{16} \ln T_r^{1.18} + A_{17} \ln T_r^{2.1} + A_{18} \ln P_r + A_{19} \ln P_r^2 + A_{20} \ln P_r \ln T_r \\ Z &= \alpha + \frac{\beta + \gamma}{\delta + \varepsilon} \end{aligned}$$

• حیدریان و همکاران (a) (رابطه 9)

$$Z = \ln \left(\frac{A_1 + A_3 \ln P_r + \frac{A_5}{T_r} + A_7 (\ln P_r)^2 + \frac{A_9}{T_r^2} + \frac{A_{11}}{T_r} \ln P_r}{1 + A_2 \ln P_r + \frac{A_4}{T_r} + A_6 (\ln P_r)^2 + \frac{A_8}{T_r^2} + \frac{A_{10}}{T_r} \ln P_r} \right)$$

* : $0.2 \leq P_r^* \leq 3$

** : $3 \leq P_r^{**} \leq 15$

• سنجرى-لاى (رابطه 10)

$$Z = 1 + A_1 P_r + A_2 P_r^2 + \frac{A_3 P_r^{A_4}}{T_r^{A_5}} + \frac{A_6 P_r^{(A_4+1)}}{T_r^{A_7}} + \frac{A_8 P_r^{(A_4+2)}}{T_r^{(A_7+1)}}$$

* : $0.1 \leq P_{pr}^* \leq 3$

** : $3 \leq P_{pr}^{**} \leq 15$

• لطیف (رابطه 11)

$$\begin{aligned}
 t &= \frac{1}{T_r} \\
 \alpha &= A_1 t \exp(A_2(1-t)^2) P_r \\
 \beta &= A_3 t + A_4 t^2 + A_5 t^6 P_r^6 \\
 \gamma &= A_9 + A_8 t P_r + A_7 t^2 P_r^2 + A_6 t^3 P_r^3 \\
 \delta &= A_{10} t \exp(A_{11}(1-t)^2) \\
 \varepsilon &= A_{12} t + A_{13} t^2 + A_{14} t^3 \\
 \zeta &= A_{15} t + A_{16} t^1 + A_{17} t^3 \\
 \eta &= A_{18} + A_{19} t \\
 y &= \frac{\delta P_r}{1 + \alpha^2 - \frac{\alpha^2 \beta}{\gamma - \gamma^3}} \\
 Z &= \frac{\delta P_r (1 + y + y^2 - y^3)}{(\delta P_r + \varepsilon y^2 - \zeta y^\eta)(1 - y)^3}
 \end{aligned}$$

• بهادری و همکاران (رابطه 12)

$$\begin{aligned}
 \alpha &= A_1 + A_2 T_r + A_3 T_r^2 + A_4 T_r^3 \\
 \beta &= A_5 + A_6 T_r + A_7 T_r^2 + A_8 T_r^3 \\
 \gamma &= A_9 + A_{10} T_r + A_{11} T_r^2 + A_{12} T_r^3 \\
 \delta &= A_{13} + A_{14} T_r + A_{15} T_r^2 + A_{16} T_r^3 \\
 Z &= \alpha + \beta P_r + \gamma P_r^2 + \delta P_r^3
 \end{aligned}$$

• حیدریان و همکاران (b) (رابطه 13)

$$Z = \frac{A_1 + A_2 \ln(P_r) + A_3 (\ln(P_r))^2 + A_4 (\ln(P_r))^3 + \frac{A_5}{T_r} + \frac{A_6}{T_r^2}}{1 + A_7 \ln(P_r) + A_8 (\ln(P_r))^2 + \frac{A_9}{T_r} + \frac{A_{10}}{T_r^2}}$$

• عزیزی و بهبهانی (رابطه 14)

$$\begin{aligned}
 \alpha &= 1 + A_1 T_r^{-0.5} + A_2 P_r^{0.5} + A_3 T_r^{-1.3} P_r^{2.4} \\
 \beta &= A_4 \ln(T_r) + A_5 (\ln(T_r))^{0.001} + A_6 (\ln(T_r))^{0.2} + A_7 \ln(P_r) + A_8 (\ln(P_r))^2 \\
 &\quad + A_9 (\ln(P_r))^3 + A_{10} \ln(T_r) \ln(P_r) + A_{11} (\ln(T_r))^{0.2} \ln(P_r) \\
 &\quad + A_{12} (\ln(T_r))^{-1.3} (\ln(P_r))^2 \\
 \gamma &= 1 + A_{13} P_r^{1.957} + A_{14} T_r^{0.6} P_r^{0.68} \\
 \delta &= A_{15} \ln(T_r) + A_{16} (\ln(T_r))^{0.3} + A_{17} \ln(P_r) + A_{18} (\ln(P_r))^2 + A_{19} (\ln(T_r))^{2.3} \ln(P_r) \\
 Z &= 1 + P_r \left(\frac{\alpha + \beta}{\gamma + \delta} \right)
 \end{aligned}$$

روابط هوشمند ژنتیکی جهت محاسبه ضریب تراکم پذیری

• الانازی و القریشی (رابطه 15)

$$\begin{aligned}\alpha &= 2 \left(\frac{A_1}{A_2} \right) P_r + A_3 \\ \beta &= \frac{(3\alpha)^2 - A_4}{T_r} + A_5 \\ \gamma &= \beta - (-2\alpha\beta) \\ \delta &= (-2\alpha\beta)\gamma \\ \varepsilon &= \left[\frac{\left(\frac{\gamma + \delta}{T_r} \right)}{A_6} \right] + A_5 \\ \zeta &= \frac{\delta}{\varepsilon^2} - \varepsilon \\ Z &= \frac{2\varepsilon}{A_7} + \zeta\end{aligned}$$

• کمری و همکاران (رابطه 16)

$$Z = A_1 + \frac{A_2}{T_r} + \frac{A_3}{T_r^2} + \frac{A_4}{T_r^3} + A_5 \ln P_r + A_6 (\ln P_r)^2 + A_7 (\ln P_r)^3 + \frac{A_8 \ln P_r}{T_r} + \frac{A_9 \ln P_r}{T_r^2} + \frac{A_{10} (\ln P_r)^2}{T_r}$$

• شکیر و همکاران (رابطه 17)

$$\begin{aligned}\alpha &= A_1 \left(\frac{2T_r - P_r - 1}{\frac{P_r^2 + T_r^3}{P_r}} \right) \\ \beta &= A_2 \left(\frac{P_r T_r + P_r^2}{T_r P_r + 2T_r^2 + T_r^3} \right) \\ \gamma &= A_3 (T_r^2 P_r - T_r P_r^2 + T_r P_r^3 + 2T_r P_r - 2P_r^2 + 2P_r^3) \\ \delta &= A_4 \left(\frac{T_r - P_r}{P_r^2 + T_r + P_r} \right) \\ \varepsilon &= \frac{A_5}{T_r P_r} + A_6 T_r^2 + A_7 P_r^2 - \frac{A_8 T_r}{P_r} + \frac{A_9 P_r}{T_r} + A_{10} P_r + A_{11} T_r + A_{12} \\ Z &= \alpha + \beta + \gamma + \delta + \varepsilon\end{aligned}$$

ضرایب روابط ذکر شده در محاسبه ضریب تراکم پذیری

ضرایب روابط ذکر شده در محاسبه ضریب تراکم پذیری

رابطه	ضرایب			
رابطه 1	$A_1 = 0.31506237$ $A_2 = -1.0467099$	$A_3 = -0.5783272$ $A_4 = 0.53530771$	$A_5 = -0.61232032$ $A_6 = -0.10488813$	$A_7 = 0.68157001$ $A_8 = 0.68446549$
رابطه 2	$A_1 = 0.3265$ $A_2 = -1.07$ $A_3 = -0.5339$	$A_4 = 0.01569$ $A_5 = -0.05165$ $A_6 = 0.5475$	$A_7 = -0.7361$ $A_8 = 0.1844$ $A_9 = 0.1056$	$A_{10} = 0.6134$ $A_{11} = 0.721$
رابطه 3	$A_1 = 14.76$ $A_2 = 9.76$	$A_3 = 4.58$ $A_4 = 90.7$	$A_5 = -242.2$ $A_6 = 42.4$	$A_7 = 1.18$ $A_8 = 2.82$
رابطه 4	$A_1 = 1.39$ $A_2 = 0.92$ $A_3 = 0.36$ $A_4 = 0.101$	$A_5 = 0.62$ $A_6 = 0.23$ $A_7 = 0.06$ $A_8 = 0.86$	$A_9 = 0.037$ $A_{10} = 0.32$ $A_{11} = 9$ $A_{12} = 0.132$	$A_{13} = 0.32$ $A_{14} = 0.3106$ $A_{15} = 0.49$ $A_{16} = 0.1824$
رابطه 5	$A_1 = 0.101$ $A_2 = 0.36$ $A_3 = 1.3868$ $A_4 = 0.919$	$A_5 = 0.021$ $A_6 = 0.04275$ $A_7 = 0.65$ $A_8 = 0.6222$	$A_9 = 0.224$ $A_{10} = 0.0657$ $A_{11} = 0.85$ $A_{12} = 0.037$	$A_{13} = 0.32$ $A_{14} = 19.53$
رابطه 6	$A_1 = 0.1219$ $A_2 = 0.638$	$A_3 = 7.76$ $A_4 = 14.75$	$A_5 = 0.3$ $A_6 = 0.441$	
رابطه 7	$A_1 = 0.702$ $A_2 = 2.5$	$A_3 = 5.524$ $A_4 = 0.044$	$A_5 = 0.164$ $A_6 = 1.15$	
رابطه 8	$A_1 = 0.0373142485385592$ $A_2 = -0.0140807151485369$ $A_3 = 0.0163263245387186$ $A_4 = -0.0307776478819813$ $A_5 = 13843575480.943800$	$A_6 = -16799138540.763700$ $A_7 = 1624178942.6497600$ $A_8 = 13702270281.086900$ $A_9 = -41645509.896474600$ $A_{10} = 237249967625.01300$	$A_{11} = -24449114791.1531$ $A_{12} = 19357955749.3274$ $A_{13} = -126354717916.607$ $A_{14} = 623705678.385784$ $A_{15} = 17997651104.3330$	$A_{16} = 151211393445.064$ $A_{17} = 139474437997.172$ $A_{18} = -24233012984.0950$ $A_{19} = 18938047327.5205$ $A_{20} = -141401620722.689$
رابطه 9	$A_1^* = 2.827793$ $A_2^* = -0.4688191$ $A_3^* = -1.262288$	$A_4^* = -1.536524$ $A_5^* = -4.535045$ $A_6^* = 0.06895104$	$A_7^* = 0.1903869$ $A_8^* = 0.6200089$ $A_9^* = 1.838479$	$A_{10}^* = 0.4052367$ $A_{11}^* = 1.073574$
رابطه 9	$A_1^{**} = 3.252838$ $A_2^{**} = -0.1306424$ $A_3^{**} = -0.6449194$	$A_4^{**} = -1.518028$ $A_5^{**} = -5.391019$ $A_6^{**} = -0.01379588$	$A_7^{**} = 0.06600633$ $A_8^{**} = 0.6120783$ $A_9^{**} = 2.317431$	$A_{10}^{**} = 0.1632223$ $A_{11}^{**} = 0.5660595$
رابطه 10	$A_1^* = 0.007698$ $A_2^* = 0.003839$	$A_3^* = -0.467212$ $A_4^* = 1.018801$	$A_5^* = 3.805723$ $A_6^* = -0.087361$	$A_7^* = 7.138305$ $A_8^* = 0.083440$
رابطه 10	$A_1^{**} = 0.015642$ $A_2^{**} = 0.000701$	$A_3^{**} = 2.341511$ $A_4^{**} = -0.657903$	$A_5^{**} = 8.902112$ $A_6^{**} = -1.136$	$A_7^{**} = 3.543614$ $A_8^{**} = 0.134041$
رابطه 11	$A_1 = 0.317842$ $A_2 = 0.382216$ $A_3 = -7.76835$ $A_4 = 14.2905$ $A_5 = 2.18363 \times 10^{-6}$	$A_6 = -0.00469257$ $A_7 = 0.0962541$ $A_8 = 0.16672$ $A_9 = 0.96691$ $A_{10} = 0.063069$	$A_{11} = -1.966847$ $A_{12} = 21.0581$ $A_{13} = -27.0246$ $A_{14} = 16.23$ $A_{15} = 207.783$	$A_{16} = -488.161$ $A_{17} = 176.29$ $A_{18} = 1.88453$ $A_{19} = 3.05921$

ضرایب روابط ذکر شده در محاسبه ضریب تراکم پذیری (ادامه)

رابطه 12	$A_1 = 0.969469$ $A_2 = -1.349238$ $A_3 = 1.443959$ $A_4 = -0.3686$	$A_5 = -0.107783$ $A_6 = -0.127013$ $A_7 = 0.100828$ $A_8 = -0.012319$	$A_9 = 0.0184810$ $A_{10} = 0.0523405$ $A_{11} = -0.050688$ $A_{12} = 0.010870$	$A_{13} = -0.000584$ $A_{14} = -0.002146$ $A_{15} = 0.0020961$ $A_{16} = -0.000459$
رابطه 13	$A_1 = 1.11532372699824$ $A_2 = -0.0790395208876$ $A_3 = 0.01588138045027$	$A_4 = 0.00886134496010$ $A_5 = -2.16190792611599$ $A_6 = 1.15753118672070$	$A_7 = -0.05367780720737$ $A_8 = 0.01465569989618$ $A_9 = -1.80997374923296$	$A_{10} = 0.95486038773032$
رابطه 14	$A_1 = 3.54875035417288$ $A_2 = -4.21664513837899$ $A_3 = -0.00410613526239254$ $A_4 = 0.281444443163844$ $A_5 = -1.58050421246329$	$A_6 = 2.39137824393016$ $A_7 = 2.1053368090309$ $A_8 = 0.57558851625008$ $A_9 = 0.108847741499219$ $A_{10} = -0.280971601933716$	$A_{11} = 0.135718801303941$ $A_{12} = 0.00176679767712678$ $A_{13} = -0.206484003384794$ $A_{14} = -0.247284911523729$ $A_{15} = -0.691817295762007$	$A_{16} = -5.33433422937078$ $A_{17} = 0.591526371202178$ $A_{18} = 0.22394631804226$ $A_{19} = -0.560240881093681$
رابطه 15	$A_1 = 0.03275$ $A_2 = -0.9765$	$A_3 = 0.236$ $A_4 = 1.427$	$A_5 = 0.9178$ $A_6 = 1.0474$	$A_7 = 1.0482$
رابطه 16	$A_1 = 0.2625136$ $A_2 = 3.1263651$ $A_3 = -3.8916368$	$A_4 = 1.0551763$ $A_5 = 0.5638878$ $A_6 = -0.3372525$	$A_7 = 0.061688$ $A_8 = -1.3976452$ $A_9 = 0.5217521$	$A_{10} = 0.447935$
رابطه 17	$A_1 = 2.679562$ $A_2 = -7.686825$ $A_3 = -0.000624$	$A_4 = 3.067747$ $A_5 = 0.068059$ $A_6 = 0.139489$	$A_7 = 0.081873$ $A_8 = 0.041098$ $A_9 = 8.152325$	$A_{10} = -1.63028$ $A_{11} = 0.24287$ $A_{12} = -2.64988$

(ب) ضرایب و پارامترهای استاندارد ISO 20765-1

پارامترهای انرژی هلمولتز گاز ایده آل (a)

i	Component	$(A_{0,1})_i$	$(A_{0,2})_i$	$B_{0,i}$	$C_{0,i}$	$D_{0,i}$
1	nitrogen	23.2653	-2801.72907	3.50031	0.13732	662.738
2	carbon dioxide	26.35604	-4902.17152	3.50002	2.04452	919.306
3	methane	35.53603	-15999.69151	4.00088	0.76315	820.659
4	ethane	42.42766	-23639.65301	4.00263	4.33939	559.314
5	propane	50.40669	-31236.63551	4.02939	6.60569	479.856
6	n-butane	42.22997	-38957.80933	4.33944	9.44893	468.27
7	iso-butane	39.9994	-38525.50276	4.06714	8.97575	438.27
8	n-pentane	48.37597	-45215.83000	4	8.95043	178.67
9	iso-pentane	48.86978	-51198.30946	4	11.7618	292.503
10	n-hexane	52.69477	-52746.83318	4	11.6977	182.326
11	n-heptane	57.77391	-57104.81056	4	13.7266	169.789
12	n-octane	62.95591	-60546.76385	4	15.6865	158.922
13	n-nonane	67.79407	-66600.12837	4	18.0241	156.854
14	n-decane	71.63669	-74131.45483	4	21.0069	164.947
15	hydrogen	18.7728	-5836.94370	2.47906	0.95806	228.734
16	oxygen	22.49931	-2318.32269	3.50146	1.07558	2235.71
17	carbon monoxide	23.15547	-2635.24412	3.50055	1.02865	1550.45
18	water	27.27642	-7766.73308	4.00392	0.01059	268.795
19	hydrogen sulfide	27.28069	-6069.03587	4	3.11942	1833.63
20	helium	15.74399	-745.37500	2.5	0	0
21	argon	15.74399	-745.37500	2.5	0	0

پارامترهای انرژی هلمولتز گاز ایده آل (b)

i	Component	$E_{0,i}$	$F_{0,i}$	$G_{0,i}$	$H_{0,i}$	$I_{0,i}$	$J_{0,i}$
1	nitrogen	-0.14660	680.562	0.90066	1740.06	0	0
2	carbon dioxide	-1.06044	865.07	2.03366	483.553	0.01393	341.109
3	methane	0.0046	178.41	8.74432	1062.82	-4.46921	1090.53
4	ethane	1.23722	223.284	13.1974	1031.38	-6.01989	1071.29
5	propane	3.197	200.893	19.1921	955.312	-8.37267	1027.29
6	n-butane	6.89406	183.636	24.4618	1914.1	14.7824	903.185
7	iso-butane	5.25156	198.018	25.1423	1905.02	16.1388	893.765
8	n-pentane	21.836	840.538	33.4032	1774.25	0	0
9	iso-pentane	20.1101	910.237	33.1688	1919.37	0	0
10	n-hexane	26.8142	859.207	38.6164	1826.59	0	0
11	n-heptane	30.4707	836.195	43.5561	1760.46	0	0
12	n-octane	33.8029	815.064	48.1731	1693.07	0	0
13	n-nonane	38.1235	814.882	53.3415	1693.79	0	0
14	n-decane	43.4931	836.264	58.3657	1750.24	0	0
15	hydrogen	0.45444	326.843	1.56039	1651.71	-1.3756	1671.69
16	oxygen	1.01334	1116.69	0	0	0	0
17	carbon monoxide	0.00493	704.525	0	0	0	0
18	water	0.98763	1141.41	3.06904	2507.37	0	0
19	hydrogen sulfide	1.00243	847.181	0	0	0	0
20	helium	0	0	0	0	0	0
21	argon	0	0	0	0	0	0

ثابت‌های معادله حالت

n	a_n	b_n	c_n	k_n	u_n	g_n	q_n	f_n	s_n	w_n
1	0.153833	1	0	0	0.0	0	0	0	0	0
2	1.341953	1	0	0	0.5	0	0	0	0	0
3	-2.998583000	1	0	0	1.0	0	0	0	0	0
4	-0.048312280	1	0	0	3.5	0	0	0	0	0
5	0.375797	1	0	0	-0.5	1	0	0	0	0
6	-1.589575000	1	0	0	4.5	1	0	0	0	0
7	-0.053588470	1	0	0	0.5	0	1	0	0	0
8	0.886595	1	0	0	7.5	0	0	0	1	0
9	-0.710237040	1	0	0	9.5	0	0	0	1	0
10	-1.471722000	1	0	0	6.0	0	0	0	0	1
11	1.32185	1	0	0	12.0	0	0	0	0	1
12	-0.786659250	1	0	0	12.5	0	0	0	0	1
13	2.291290e-9	1	1	3	-6.0	0	0	1	0	0
14	0.157672	1	1	2	2.0	0	0	0	0	0
15	-0.436386400	1	1	2	3.0	0	0	0	0	0
16	-0.044081590	1	1	2	2.0	0	1	0	0	0
17	-0.003433888	1	1	4	2.0	0	0	0	0	0
18	0.032059	1	1	4	11.0	0	0	0	0	0
19	0.024874	2	0	0	-0.5	0	0	0	0	0
20	0.073323	2	0	0	0.5	0	0	0	0	0
21	-0.001600573	2	1	2	0.0	0	0	0	0	0
22	0.642471	2	1	2	4.0	0	0	0	0	0
23	-0.416260100	2	1	2	6.0	0	0	0	0	0
24	-0.066899570	2	1	4	21.0	0	0	0	0	0
25	0.27918	2	1	4	23.0	1	0	0	0	0
26	-0.696605100	2	1	4	22.0	0	1	0	0	0
27	-0.002860589	2	1	4	-1.0	0	0	1	0	0
28	-0.008098836	3	0	0	-0.5	0	1	0	0	0
29	3.150547	3	1	1	7.0	1	0	0	0	0
30	0.007224	3	1	1	-1.0	0	0	1	0	0
31	-0.705752900	3	1	2	6.0	0	0	0	0	0
32	0.534979	3	1	2	4.0	1	0	0	0	0
33	-0.079314910	3	1	3	1.0	1	0	0	0	0
34	-1.418465000	3	1	3	9.0	1	0	0	0	0
35	-5.99905e-17	3	1	4	-13.0	0	0	1	0	0
36	0.10584	3	1	4	21.0	0	0	0	0	0
37	0.034317	3	1	4	8.0	0	1	0	0	0
38	-0.007022847	4	0	0	-0.5	0	0	0	0	0
39	0.024956	4	0	0	0.0	0	0	0	0	0
40	0.042968	4	1	2	2.0	0	0	0	0	0
41	0.746545	4	1	2	7.0	0	0	0	0	0
42	-0.291961300	4	1	2	9.0	0	1	0	0	0
43	7.294616	4	1	4	22.0	0	0	0	0	0
44	-9.936757000	4	1	4	23.0	0	0	0	0	0
45	-0.005399808	5	0	0	1.0	0	0	0	0	0
46	-0.243256700	5	1	2	9.0	0	0	0	0	0
47	0.04987	5	1	2	3.0	0	1	0	0	0
48	0.003734	5	1	4	8.0	0	0	0	0	0
49	1.874951	5	1	4	23.0	0	1	0	0	0
50	0.002168	6	0	0	1.5	0	0	0	0	0
51	-0.658716400	6	1	2	5.0	1	0	0	0	0
52	0.000206	7	0	0	-0.5	0	1	0	0	0
53	0.009776	7	1	2	4.0	0	0	0	0	0
54	-0.020487080	8	1	1	7.0	1	0	0	0	0

ثابت‌های معادله حالت (ادامه)

n	a_n	b_n	c_n	k_n	u_n	g_n	q_n	f_n	s_n	w_n
55	0.015573	8	1	2	3.0	0	0	0	0	0
56	0.006862	8	1	2	0.0	1	0	0	0	0
57	-0.001226752	9	1	2	1.0	0	0	0	0	0
58	0.002851	9	1	2	0.0	0	1	0	0	0

پارامترهای مواد خالص

i	Component	M_i	E_i	K_i	G_i	Q_i	F_i	S_i	W_i
1	nitrogen	28.0135	99.737780	0.4479153	0.027815	0	0	0	0
2	carbon dioxide	44.010	241.960600	0.4557489	0.189065	0.690000	0	0	0
3	methane	16.043	151.318300	0.4619255	0.0	0	0	0	0
4	ethane	30.070	244.166700	0.5279209	0.079300	0	0	0	0
5	propane	44.097	298.118300	0.5837490	0.141239	0	0	0	0
6	n-butane	58.123	337.638900	0.6341423	0.281835	0	0	0	0
7	iso-butane	58.123	324.068900	0.6406937	0.256692	0	0	0	0
8	n-pentane	72.150	370.682300	0.6798307	0.366911	0	0	0	0
9	iso-pentane	72.150	365.599900	0.6738577	0.332267	0	0	0	0
10	n-hexane	86.177	402.636293	0.7175118	0.289731	0	0	0	0
11	n-heptane	100.204	427.722630	0.7525189	0.337542	0	0	0	0
12	n-octane	114.231	450.325022	0.7849550	0.383381	0	0	0	0
13	n-nonane	128.258	470.840891	0.8152731	0.427354	0	0	0	0
14	n-decane	142.285	489.558373	0.8437826	0.469659	0	0	0	0
15	hydrogen	2.0159	26.957940	0.3514916	0.034369	0	1	0	0
16	oxygen	31.9988	122.766700	0.4186954	0.021000	0	0	0	0
17	carbon monoxide	28.010	105.534800	0.4533894	0.038953	0	0	0	0
18	water	18.0153	514.015600	0.3825868	0.332500	1.067750	0	1.582200	1
19	hydrogen sulfide	34.082	296.355000	0.4618263	0.088500	0.633276	0	0.390000	0
20	helium	4.0026	2.610111	0.3589888	0	0	0	0	0
21	argon	39.948	119.629900	0.4216551	0	0	0	0	0

پارامترهای دودویی

i	j	Component pair		E_{ij}^*	V_{ij}^*	K_{ij}	G_{ij}^*
1	2	nitrogen	carbon dioxide	1.022740	0.835058	0.982361	0.982746
1	3	nitrogen	methane	0.971640	0.886106	1.003630	1.0
1	4	nitrogen	ethane	0.970120	0.816431	1.007960	1.0
1	5	nitrogen	propane	0.945939	0.915502	1.0	1.0
1	6	nitrogen	n-butane	0.973384	0.993556	1.0	1.0
1	7	nitrogen	iso-butane	0.946914	1.0	1.0	1.0
1	8	nitrogen	n-pentane	0.945520	1.0	1.0	1.0
1	9	nitrogen	iso-pentane	0.959340	1.0	1.0	1.0
1	15	nitrogen	hydrogen	1.086320	0.408838	1.032270	1.0
1	16	nitrogen	oxygen	1.021000	1.0	1.0	1.0
1	17	nitrogen	carbon monoxide	1.005710	1.0	1.0	1.0
1	18	nitrogen	water	0.746954	1.0	1.0	1.0
1	19	nitrogen	hydrogen sulfide	0.902271	0.993476	0.942596	1.0
2	3	carbon dioxide	methane	0.960644	0.963827	0.995933	0.807653
2	4	carbon dioxide	ethane	0.925053	0.969870	1.008510	0.370296
2	5	carbon dioxide	propane	0.960237	1.0	1.0	1.0
2	6	carbon dioxide	n-butane	0.897362	1.0	1.0	1.0

پارامترهای دودویی (ادامه)

i	j	Component pair		E_{ij}^*	V_{ij}^*	K_{ij}	G_{ij}^*
2	7	carbon dioxide	iso-butane	0.906849	1.0	1.0	1.0
2	8	carbon dioxide	n-pentane	0.859764	1.0	1.0	1.0
2	9	carbon dioxide	iso-pentane	0.726255	1.0	1.0	1.0
2	10	carbon dioxide	n-hexane	0.855134	1.066638	0.910183	1.0
2	11	carbon dioxide	n-heptane	0.831229	1.077634	0.895362	1.0
2	12	carbon dioxide	n-octane	0.808310	1.088178	0.881152	1.0
2	13	carbon dioxide	n-nonane	0.786323	1.098291	0.867520	1.0
2	14	carbon dioxide	n-decane	0.765171	1.108021	0.854406	1.0
2	15	carbon dioxide	hydrogen	1.281790	1.0	1.0	1.0
2	17	carbon dioxide	carbon monoxide	1.500000	0.900000	1.0	1.0
2	18	carbon dioxide	water	0.849408	1.0	1.0	1.673090
2	19	carbon dioxide	hydrogen sulfide	0.955052	1.045290	1.007790	1.0
3	5	methane	propane	0.994635	0.990877	1.007619	1.0
3	6	methane	n-butane	0.989844	0.992291	0.997596	1.0
3	7	methane	iso-butane	1.019530	1.0	1.0	1.0
3	8	methane	n-pentane	0.999268	1.003670	1.002529	1.0
3	9	methane	iso-pentane	1.002350	1.0	1.0	1.0
3	10	methane	n-hexane	1.107274	1.302576	0.982962	1.0
3	11	methane	n-heptane	0.880880	1.191904	0.983565	1.0
3	13	methane	n-nonane	0.881067	1.219634	0.981849	1.0
3	14	methane	n-decane	0.881161	1.233498	0.980991	1.0
3	15	methane	hydrogen	1.170520	1.156390	1.023260	1.957310
3	17	methane	carbon monoxide	0.990126	1.0	1.0	1.0
3	18	methane	water	0.708218	1.0	1.0	1.0
3	19	methane	hydrogen sulfide	0.931484	0.736833	1.000080	1.0
4	5	ethane	propane	1.022560	1.065173	0.986893	1.0
4	6	ethane	n-butane	1.013060	1.250000	1.0	1.0
4	7	ethane	iso-butane	1.0	1.250000	1.0	1.0
4	8	ethane	n-pentane	1.005320	1.250000	1.0	1.0
4	9	ethane	iso-pentane	1.0	1.250000	1.0	1.0
4	15	ethane	hydrogen	1.164460	1.616660	1.020340	1.0
4	18	ethane	water	0.693168	1.0	1.0	1.0
4	19	ethane	hydrogen sulfide	0.946871	0.971926	0.999969	1.0
5	6	propane	n-butane	1.004900	1.0	1.0	1.0
5	15	propane	hydrogen	1.034787	1.0	1.0	1.0
6	15	n-butane	hydrogen	1.300000	1.0	1.0	1.0
7	15	iso-butane	hydrogen	1.300000	1.0	1.0	1.0
10	19	n-hexane	hydrogen sulfide	1.008692	1.028973	0.968130	1.0
11	19	n-heptane	hydrogen sulfide	1.010126	1.033754	0.962870	1.0
12	19	n-octane	hydrogen sulfide	1.011501	1.038338	0.957828	1.0
13	19	n-nonane	hydrogen sulfide	1.012821	1.042735	0.952441	1.0
14	19	n-decane	hydrogen sulfide	1.014089	1.046966	0.948338	1.0
15	17	hydrogen	carbon monoxide	1.100000	1.0	1.0	1.0

ج) انتخاب بهترین شبکه عصبی

خطاهای RMSE شبکه عصبی XPT با یک و دو لایه پنهان

Net structure	RMSE			Net structure	RMSE		
	Net 1	Net 2	Net 3		Net 1	Net 2	Net3
23_1_3	0.10664	0.174534	0.116089	23_1_1_3	0.105722	0.161316	0.115016
23_2_3	0.066605	0.108915	0.057951	23_2_2_3	0.060933	0.077824	0.053372
23_3_3	0.04057	0.087256	0.038371	23_3_3_3	0.028547	0.037987	0.024386
23_4_3	0.028587	0.06486	0.025505	23_4_4_3	0.011368	0.018537	0.015834
23_5_3	0.020464	0.050048	0.012191	23_5_5_3	0.007717	0.023637	0.004831
23_6_3	0.016259	0.026772	0.008068	23_6_6_3	0.00479	0.037512	0.003672
23_7_3	0.014303	0.019041	0.016504	23_7_7_3	0.003732	0.009068	0.002865
23_8_3	0.01278	0.022774	0.007091	23_8_8_3	0.003109	0.008305	0.00341
23_9_3	0.008654	0.020223	0.007605	23_9_9_3	0.002813	0.005332	0.002186
23_10_3	0.008504	0.022008	0.011676	23_10_10_3	0.001747	0.012221	0.002701
23_11_3	0.00704	0.020904	0.005026	23_11_11_3	0.001394	0.006762	0.001177
23_12_3	0.006726	0.023869	0.004347	23_12_12_3	0.001643	0.00366	0.000965
23_13_3	0.004844	0.016172	0.004277	23_13_13_3	0.001728	0.003207	0.000909
23_14_3	0.007513	0.011791	0.003011	23_14_14_3	0.001842	0.004174	0.000737
23_15_3	0.008468	0.016735	0.005647	23_15_15_3	0.001049	0.004508	0.000899
23_16_3	0.007662	0.011919	0.003197	23_16_16_3	0.000853	0.003364	0.00237
23_17_3	0.006613	0.015679	0.004212	23_17_17_3	0.00147	0.003288	0.000725
23_18_3	0.004194	0.012513	0.00406	23_18_18_3	0.000832	0.003089	0.000589
23_19_3	0.0042	0.024482	0.004358	23_19_19_3	0.000747	0.002548	0.000886
23_20_3	0.006931	0.010604	0.004771	23_20_20_3	0.000727	0.00236	0.000606
23_21_3	0.003986	0.010349	0.004733	23_21_21_3	0.000619	0.002043	0.000539
23_22_3	0.003426	0.011694	0.004715	23_22_22_3	0.000353	0.001586	0.000347

خطاهای RMSE شبکه عصبی XPH با یک و دو لایه پنهان

Net structure	RMSE			Net structure	RMSE		
	Net 1	Net 2	Net 3		Net 1	Net 2	Net 3
23_1_3	0.053912	0.076984	0.149996	23_1_1_3	0.05518	0.075472	0.151322
23_2_3	0.013214	0.03452	0.097524	23_2_2_3	0.049321	0.014567	0.111479
23_3_3	0.009264	0.03051	0.078116	23_3_3_3	0.005479	0.007043	0.033757
23_4_3	0.006653	0.033812	0.024714	23_4_4_3	0.002937	0.004898	0.01172
23_5_3	0.004248	0.010504	0.022731	23_5_5_3	0.001976	0.002487	0.006937
23_6_3	0.003003	0.006859	0.014159	23_6_6_3	0.001098	0.001378	0.003229
23_7_3	0.002505	0.021676	0.008152	23_7_7_3	0.000662	0.001792	0.002567
23_8_3	0.003366	0.005698	0.009543	23_8_8_3	0.000587	0.000782	0.001901
23_9_3	0.002597	0.0046	0.005501	23_9_9_3	0.000588	0.000597	0.002182
23_10_3	0.001481	0.004105	0.004151	23_10_10_3	0.000262	0.000562	0.001222
23_11_3	0.00182	0.003158	0.006888	23_11_11_3	0.000272	0.000531	0.000815
23_12_3	0.00137	0.004493	0.005624	23_12_12_3	0.00029	0.000367	0.000724
23_13_3	0.001193	0.002826	0.003108	23_13_13_3	0.000217	0.000381	0.000617
23_14_3	0.000694	0.0032	0.00352	23_14_14_3	0.000193	0.000422	0.000608
23_15_3	0.000679	0.003109	0.003243	23_15_15_3	0.000197	0.000442	0.000583
23_16_3	0.000934	0.002773	0.003092	23_16_16_3	0.000174	0.00055	0.000546
23_17_3	0.000751	0.003678	0.003254	23_17_17_3	0.000171	0.0004	0.000358
23_18_3	0.001229	0.002767	0.002103	23_18_18_3	0.000131	0.000393	0.000349
23_19_3	0.000932	0.004892	0.006172	23_19_19_3	0.000126	0.00055	0.000295
23_20_3	0.000693	0.001606	0.005545	23_20_20_3	0.000121	0.000352	0.000421
23_21_3	0.000687	0.002357	0.003672	23_21_21_3	9.50E-05	0.000484	0.000341
23_22_3	0.000697	1.81E-03	0.002526	23_22_22_3	9.35E-05	0.000304	0.000267

خطاهای RMSE شبکه عصبی XPS با یک و دو لایه پنهان

Net structure	RMSE			Net structure	RMSE		
	Net 1	Net 2	Net 3		Net 1	Net 2	Net 3
23_1_3	0.042522	0.065647	0.180577	23_1_1_3	0.04112	0.063788	0.179572
23_2_3	0.029671	0.048031	0.048025	23_2_2_3	0.009337	0.007987	0.03529
23_3_3	0.007247	0.023229	0.032175	23_3_3_3	0.00377	0.005681	0.014914
23_4_3	0.004212	0.019798	0.028896	23_4_4_3	0.002276	0.003559	0.008805
23_5_3	0.003572	0.007727	0.018653	23_5_5_3	0.001893	0.002614	0.007042
23_6_3	0.003061	0.006867	0.013154	23_6_6_3	0.00135	0.001323	0.004081
23_7_3	0.002551	0.004796	0.012513	23_7_7_3	0.000902	0.001143	0.003299
23_8_3	0.002199	0.004475	0.009294	23_8_8_3	0.000752	0.001671	0.002869
23_9_3	0.00216	0.006046	0.006106	23_9_9_3	0.001132	0.001171	0.001921
23_10_3	0.002124	0.004099	0.005869	23_10_10_3	0.000439	0.001014	0.001532
23_11_3	0.001827	0.002742	0.006404	23_11_11_3	0.000467	0.000892	0.001187
23_12_3	0.001575	0.003054	0.004595	23_12_12_3	0.00034	0.000588	0.001324
23_13_3	0.001143	0.003342	0.004415	23_13_13_3	0.000335	0.000465	0.001085
23_14_3	0.001177	0.003052	0.004182	23_14_14_3	0.000229	0.00053	0.001031
23_15_3	0.001261	0.003057	0.003522	23_15_15_3	0.0003	0.000427	0.000998
23_16_3	0.000878	0.002636	0.00343	23_16_16_3	0.00029	0.000358	0.000699
23_17_3	0.000812	0.00359	0.002636	23_17_17_3	0.00026	0.000398	0.000639
23_18_3	0.000781	0.003775	0.00266	23_18_18_3	0.000233	0.000352	0.000491
23_19_3	0.000819	0.002336	0.002723	23_19_19_3	0.000218	0.000285	0.000479
23_20_3	0.000869	0.002014	0.00245	23_20_20_3	0.00025	0.000357	0.000449
23_21_3	0.001345	0.003475	0.002416	23_21_21_3	0.000243	0.000317	0.000425
23_22_3	0.000729	0.001878	0.002382	23_22_22_3	0.00019	0.000256	0.000377

مراجع

- [١] J. G. Speight, F. A. Banks, and R. C. Bansal, "Energy Sources, Part B: Economics, Planning, and Policy," 2008.
- [٢] F.-Y. Liang, M. Ryvak, S. Sayeed, and N. Zhao, "The role of natural gas as a primary fuel in the near future, including comparisons of acquisition, transmission and waste handling costs of as with competitive alternatives," *Chem. Cent. J.*, vol. 6, no. S1, p. S4, 2012.
- [٣] W. V Metcalf, "Van der Waals Equation-A Supplementary Paper," *J. Phys. Chem.*, vol. 20, no. 3, pp. 177–187, 1916.
- [٤] O. Redlich and J. N. S. Kwong, "On the Thermodynamics of Solutions. V. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions.," *Chem. Rev.*, vol. 44, no. 1, pp. 233–244, 1949.
- [٥] G. Soave, "Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 27, no. 6, pp. 1197–1203, 1972.
- [٦] D.-Y. Peng and D. B. Robinson, "A new two-constant equation of state," *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, vol. 15, no. 1, pp. 59–64, 1976.
- [٧] G. Schmidt and H. Wenzel, "A modified van der Waals type equation of state," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 35, no. 7, pp. 1503–1512, 1980.
- [٨] H. K. Onnes, "Expression of the equation of state of gases and liquids by means of series," in *KNAW, Proceedings*, 1901, vol. 4, pp. 1901–1902.
- [٩] M. Benedict, G. B. Webb, and L. C. Rubin, "An empirical equation for thermodynamic properties of light hydrocarbons and their mixtures I. Methane, ethane, propane and n-butane," *J. Chem. Phys.*, vol. 8, no. 4, pp. 334–345, 1940.
- [١٠] M. B. Standing and D. L. Katz, "Density of natural gases," *Trans. AIME*, vol. 146, no. 01, pp. 140–149, 1942.
- [١١] P. M. P. M. Dranchuk, R. A. A. Purvis, and D. B. B. Robinson, "Computer calculation of natural gas compressibility factors using the Standing and Katz correlation," in *Annual Technical Meeting*, 1973, no. 1.
- [١٢] K. R. Hall and L. Yarborough, "A new equation of state for Z-factor calculations," *Oil Gas J*, vol. 71, no. 25, p. 82, 1973.
- [١٣] U. Beggs, D.H., U.; Brill, J.P., D. H. Beggs, and J. P. Brill, "A study of two-phase flow in inclined pipes," *J. Pet. Technol.*, vol. 25, no. 05, pp. 607–617, 1973.
- [١٤] P. M. Dranchuk and J. H. Abou-Kassem, "Calculation of Z Factors for Natural Gases Using Equations of State.," *J. Can. Pet. Technol.*, vol. 14, no. 3, pp. 34–36, 1975.
- [١٥] G. Takacs, "Comparing methods for Calculating Z factor," *Ogj*, pp. 43–46, 1989.
- [١٦] Shell, "No Title," *Fluid Prop. Packag.* 2003., 2003.
- [١٧] A. Bahadori, S. Mokhatab, and B. F. Towler, "Rapidly estimating natural gas compressibility factor," *J. Nat. Gas Chem.*, vol. 16, no. 4, pp. 349–353, 2007.
- [١٨] N. Azizi, R. Behbahani, and M. A. Isazadeh, "An efficient correlation for calculating compressibility factor of natural gases," *J. Nat. Gas Chem.*, vol. 19, no. 6, pp. 642–645, 2010.

- [۱۹] E. Heidaryan, J. Moghadasi, and M. Rahimi, "New correlations to predict natural gas viscosity and compressibility factor," *J. Pet. Sci. Eng.*, vol. 73, no. 1–2, pp. 67–72, 2010.
- [۲۰] E. Heidaryan, A. Salarabadi, and J. Moghadasi, "A novel correlation approach for prediction of natural gas compressibility factor," *J. Nat. Gas Chem.*, vol. 19, no. 2, pp. 189–192, 2010.
- [۲۱] E. Sanjari and E. N. Lay, "An accurate empirical correlation for predicting natural gas compressibility factors," *J. Nat. Gas Chem.*, vol. 21, no. 2, pp. 184–188, 2012.
- [۲۲] J. A. Rushing, K. E. Newsham, K. C. Van Fraassen, S. A. Mehta, and G. R. Moore, "Laboratory measurements of gas-water interfacial tension at HP/HT reservoir conditions," in *CIPC/SPE Gas Technology Symposium 2008 Joint Conference*, 2008.
- [۲۳] M. Mahmoud, "Development of a new correlation of gas compressibility factor (Z-factor) for high pressure gas reservoirs," *J. Energy Resour. Technol.*, vol. 136, no. 1, p. 12903, 2014.
- [۲۴] L. A. Kareem, T. M. Iwalewa, and M. Al-Marhoun, "New explicit correlation for the compressibility factor of natural gas: linearized z-factor isotherms," *J. Pet. Explor. Prod. Technol.*, vol. 6, no. 3, pp. 481–492, 2016.
- [۲۵] N. Azizi and R. M. Behbahani, "Predicting the compressibility factor of natural gas," *Pet. Sci. Technol.*, vol. 35, no. 7, pp. 696–702, 2017.
- [۲۶] A. Normandin, B. P. A. Grandjean, and J. Thibault, "PVT data analysis using neural network models," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 32, no. 5, pp. 970–975, 1993.
- [۲۷] A. R. Moghadassi, F. Parvizian, S. M. Hosseini, and A. R. Fazlali, "A new approach for estimation of PVT properties of pure gases based on artificial neural network model," *Brazilian J. Chem. Eng.*, vol. 26, no. 1, pp. 199–206, 2009.
- [۲۸] J. H. Perry, "Chemical engineers' handbook." ACS Publications, 1950.
- [۲۹] M. Kamyab, J. H. B. Sampaio, F. Qanbari, and A. W. Eustes, "Using artificial neural networks to estimate the z-factor for natural hydrocarbon gases," *J. Pet. Sci. Eng.*, vol. 73, no. 3, pp. 248–257, 2010.
- [۳۰] B. D. Al-Anazi and A. Al-Quraishi, "New correlation for Z-factor using genetic programming technique," in *SPE Oil and Gas India Conference and Exhibition*, 2010.
- [۳۱] A. S. Lawal, "Prediction of Vapor and Liquid Viscosities From the Lawal-Lake-Silberberg Equation of State," *SPE Enhanc. Oil Recover. Symp.*, 1986.
- [۳۲] V. N. Gopal, "Gas z-factor equations developed for computer," *Oil Gas J.*, vol. 75, no. 8, pp. 8–13, 1977.
- [۳۳] E. Sanjari and E. N. Lay, "Estimation of natural gas compressibility factors using artificial neural network approach," *J. Nat. Gas Sci. Eng.*, vol. 9, pp. 220–226, 2012.
- [۳۴] W. G. Chapman, K. E. Gubbins, G. Jackson, and M. Radosz, "SAFT: Equation-of-state solution model for associating fluids," *Fluid Phase Equilib.*, vol. 52, pp. 31–38, 1989.
- [۳۵] E. M. E. M. Shokir, M. N. El-Awad, A. A. Al-Quraishi, and O. A. Al-Mahdy, "Compressibility factor model of sweet, sour, and condensate gases using genetic programming," *Chem. Eng. Res. Des.*, vol. 90, no. 6, pp. 785–792, 2012.
- [۳۶] M. Shateri, S. Ghorbani, A. Hemmati-Sarapardeh, and A. H. Mohammadi, "Application of Wilcoxon generalized radial basis function network for prediction of natural gas compressibility factor," *J. Taiwan Inst. Chem. Eng.*, vol.

- 50, pp. 131–141, 2015.
- [۳۷] A. Chamkalani, S. Zendehboudi, R. Chamkalani, A. Lohi, A. Elkamel, and I. Chatzis, “Utilization of support vector machine to calculate gas compressibility factor,” *Fluid Phase Equilib.*, vol. 358, pp. 189–202, 2013.
- [۳۸] A. Chamkalani, A. Mae’soumi, and A. Sameni, “An intelligent approach for optimal prediction of gas deviation factor using particle swarm optimization and genetic algorithm,” *J. Nat. Gas Sci. Eng.*, vol. 14, pp. 132–143, 2013.
- [۳۹] K. R. Hall and G. A. Iglesias-Silva, “Improved equations for the Standing-Katz tables,” *Hydrocarb. Process.*, vol. 86, no. 4, pp. 107–110, 2007.
- [۴۰] A. Kamari, A. Hemmati-Sarapardeh, S.-M. Mirabbasi, M. Nikookar, and A. H. Mohammadi, “Prediction of sour gas compressibility factor using an intelligent approach,” *Fuel Process. Technol.*, vol. 116, pp. 209–216, 2013.
- [۴۱] B. D. Al-Anazi, G. R. Pazuki, M. Nikookar, and A. F. Al-Anazi, “The prediction of the compressibility factor of sour and natural gas by an artificial neural network system,” *Pet. Sci. Technol.*, vol. 29, no. 4, pp. 325–336, 2011.
- [۴۲] A. Fayazi, M. Arabloo, and A. H. Mohammadi, “Efficient estimation of natural gas compressibility factor using a rigorous method,” *J. Nat. Gas Sci. Eng.*, vol. 16, pp. 8–17, 2014.
- [۴۳] A. Sarrafi, A. E. F. Monfared, E. G. Ravandi, and R. Pouramiri, “Using Fuzzy Logic for the Accurate Determination of the Compressibility Factor of Hydrocarbon Gases,” *Energy Sources, Part A Recover. Util. Environ. Eff.*, vol. 37, no. 20, pp. 2231–2239, 2015.
- [۴۴] M. Mohamadi-Baghmolaei, R. Azin, S. Osfouri, R. Mohamadi-Baghmolaei, and Z. Zarei, “Prediction of gas compressibility factor using intelligent models,” *Nat. Gas Ind. B*, vol. 2, no. 4, pp. 283–294, 2015.
- [۴۵] J. Papay, “A Termelestechnologiai Parameterek Valtozasa a Gazlelepk Muvelese Soran,” *OGIL MUSZ, Tud, Kuzl., Budapest*, pp. 267–273, 1968.
- [۴۶] E. Mohagheghian, H. Zafarian-Rigaki, Y. Motamedi-Ghahfarrokhi, and A. Hemmati-Sarapardeh, “Using an artificial neural network to predict carbon dioxide compressibility factor at high pressure and temperature,” *Korean J. Chem. Eng.*, vol. 32, no. 10, pp. 2087–2096, 2015.
- [۴۷] N. C. Patel and A. S. Teja, “A new cubic equation of state for fluids and fluid mixtures,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 37, no. 3, pp. 463–473, 1982.
- [۴۸] E. Mohagheghian, A. Bahadori, and L. A. James, “Carbon dioxide compressibility factor determination using a robust intelligent method,” *J. Supercrit. Fluids*, vol. 101, pp. 140–149, 2015.
- [۴۹] A. Kamari, F. Gharagheizi, A. H. Mohammadi, and D. Ramjugernath, “A corresponding states-based method for the estimation of natural gas compressibility factors,” *J. Mol. Liq.*, vol. 216, pp. 25–34, 2016.
- [۵۰] N. Azizi, M. Rezakazemi, and M. M. Zarei, “An intelligent approach to predict gas compressibility factor using neural network model,” *Neural Comput. Appl.*, 2017.
- [۵۱] K. E. Starling and J. L. Savidge, “Compressibility factors of natural gas and other related hydrocarbon gases,” 1992.
- [۵۲] ISO 20765-1, “ISO 20765-1:2005 - Natural gas -- Calculation of thermodynamic properties -- Part 1: Gas phase properties for transmission and distribution applications.” [Online]. Available: <https://www.iso.org/standard/40263.html>. [Accessed: 12-Dec-2017].
- [۵۳] S. Haykin and N. Network, “A comprehensive foundation,” *Neural networks*,

- vol. 2, no. 2004, p. 41, 2004.
- [٥٤] K. Madani, "Industrial and real world applications of artificial neural networks illusion or reality?," in *Informatics in Control, Automation and Robotics I*, Springer, 2006, pp. 11–26.
- [٥٥] N. Yadav, A. Yadav, and M. Kumar, "An Introduction to Neural Network Methods for Differential Equations," pp. 13–16, 2015.
- [٥٦] D. J. Amit, "Modeling Brain Function: The World of Attractor Neural Networks," *Trends in Neurosciences*, vol. 13, no. 8, pp. 357–358, 1990.
- [٥٧] K. Çelebi, E. Uludamar, E. Tosun, Ş. Yıldızhan, K. Aydın, and M. Özcanlı, "Experimental and artificial neural network approach of noise and vibration characteristic of an unmodified diesel engine fuelled with conventional diesel, and biodiesel blends with natural gas addition," *Fuel*, vol. 197, no. Supplement C, pp. 159–173, 2017.
- [٥٨] J. Friedman, T. Hastie, and R. Tibshirani, *The elements of statistical learning*, vol. 1, no. 10. Springer series in statistics New York, NY, USA:, 2001.
- [٥٩] H. Demuth, "Neural Network Toolbox," *Networks*, vol. 24, no. 1, pp. 1–8, 2002.
- [٦٠] L. Čapla, P. Buryan, J. Jedelský, M. Rottner, and J. Linek, "Isothermal pVT measurements on gas hydrocarbon mixtures using a vibrating-tube apparatus," *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 34, no. 5, pp. 657–667, 2002.
- [٦١] P. P. Simon, H. Hou, K. R. Hall, J. C. Holste, and K. N. Marsh, "Burnett and pycnometric (p, V_m, T) measurements for natural gas mixtures.," *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 29, no. April 1991, pp. 1455–1472, 1997.
- [٦٢] A. Staby and J. M. Mollerup, "Measurement of the Volumetric Properties of a Nitrogen-Methane-Ethane Mixture at 275, 310, and 345 K at Pressures to 60 MPa," *J. Chem. Eng. Data*, vol. 36, pp. 89–91, 1991.
- [٦٣] D. E. Standard, "National Institute of Standards and Technology," *Fed. Inf. Process. Stand. Publ.*, pp. 41–46, 2002.
- [٦٤] M. J. Assael, N. K. Dalaouti, and V. Vesovic, "Viscosity of natural-gas mixtures: measurements and prediction," *Int. J. Thermophys.*, vol. 22, no. 1, pp. 61–71, 2001.
- [٦٥] P. Ahmadi, A. Chapoy, and B. Tohidi, "Density, speed of sound and derived thermodynamic properties of a synthetic natural gas," *J. Nat. Gas Sci. Eng.*, vol. 40, no. Supplement C, pp. 249–266, 2017.
- [٦٦] A. Jarrahan, H. R. Karami, and E. Heidaryan, "On the isobaric specific heat capacity of natural gas," *Fluid Phase Equilib.*, vol. 384, pp. 16–24, 2014.
- [٦٧] J. E. Mayrath and J. W. Magee, "Measurements of molar heat capacity at constant volume: CV, m {xCH₄+(1-x) C₂H₆, T= 100 to 320 K, p ≤ 35 MPa}," *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 21, no. 5, pp. 499–513, 1989.
- [٦٨] M. F. C. Gomes and J. P. M. Trusler, "The speed of sound in two methane-rich gas mixtures at temperatures between 250 K and 350 K and at pressures up to 20 MPa," *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 30, no. 9, pp. 1121–1129, 1998.
- [٦٩] J. F. Estela-Urbe, J. P. M. Trusler, C. R. Chamorro, J. J. Segovia, M. C. Martín, and M. A. Villamañán, "Speeds of sound in {(1-x)CH₄+xN₂} with x=(0.10001, 0.19999, and 0.5422) at temperatures between 170K and 400K and pressures up to 30MPa," *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 38, no. 7, pp. 929–937, 2006.
- [٧٠] G. Ernst, B. Keil, H. Wirbser, and M. Jaeschke, "Flow-calorimetric results for the massic heat capacity and the Joule–Thomson coefficient of CH₄, of (0.85 CH₄+ 0.15 C₂H₆), and of a mixture similar to natural gas," *J. Chem. Thermodyn.*, vol. 33, no. 6, pp. 601–613, 2001.

- [۷۱] P. H. Wright, “The application of sonic (critical flow) nozzles in the gas industry,” *Flow Meas. Instrum.*, vol. 4, no. 2, pp. 67–71, 1993.
- [۷۲] A. Arabkoohsar, L. Machado, and R. N. N. Koury, “Operation analysis of a photovoltaic plant integrated with a compressed air energy storage system and a city gate station,” *Energy*, vol. 98, pp. 78–91, 2016.
- [۷۳] A. Arabkoohsar, M. Farzaneh-Gord, M. Deymi-Dashtebayaz, L. Machado, and R. N. N. Koury, “A new design for natural gas pressure reduction points by employing a turbo expander and a solar heating set,” *Renew. Energy*, vol. 81, pp. 239–250, 2015.

Abstract

Given that natural gas is a mixture of several elements, we need to know precisely the composition of the elements in the gas to determine its thermodynamic properties. Therefore, in this research, the thermodynamic properties of natural gas are calculated using multi-layer perceptron neural networks method. In order to train neural network, a data set is needed first that in current study, the data required for training the neural networks are obtained from **ISO 20765 – 1** standard which is the updated form of AGA8 equation of state and three sets of neural networks are trained by these data that first set of neural networks with inputs: gas compositions, temperature and pressure are able to accurately calculate nine thermodynamic properties, including compressibility factor, isochoric heat capacity, isobaric heat capacity, speed of sound, isentropic exponent, enthalpy, entropy, internal energy and joule-thomson coefficient. The second neural network set with inputs: molar fractions, pressure and enthalpy and third neural network set with inputs: molar fractions, pressure and entropy are able to calculate all thermodynamic properties of natural gas. Examples of application of trained neural networks include the accurate calculation of flow rate of natural gas and the calibration of natural gas flowmeters and the analysis of thermodynamic processes, such as precise calculation of temperature drop in joule-thomson valves and turbo expanders.

Keywords: Natural gas, Thermodynamic properties, AGA8 equation of state, Thermodynamic relations,



**Shahrood University of
Technology**

Faculty of Mechanical Engineering

M.Sc. Thesis in Energy Conversion

Determining the thermodynamic properties of natural gas by using neural networks

By: Behnam Mohseni-gharyehsafa

Supervisor:

Dr. Mahmoud Farzaneh-gord

Dr. Ali jabbari-moghadam

Advisor:

Amir Ebrahimi-moghadam

September,2018