

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده شیمی

گروه شیمی فیزیک

مدل سازی شبکه عصبی موجک با استفاده از روش سهم گروه‌ها برای
پیش بینی دانسیته‌ی آلکان‌ها و سیکلوآلکان‌ها در محدوده‌ی وسیعی از
دما و فشار

سمیرا شعبانی

استاد راهنما

دکتر زهرا کلانتر کهدمی

استاد مشاور

دکتر حسین نیکوفرد

پایان نامه ارشد جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد

آذر ۸۸

**به پاس محبت های بی دریغشان که هرگز فروکش
نمی کند**

**این مجموعه را به پدر، مادر و همسر عزیزم
تقدیم می کنم**

سپاس خدائی را که در قالب جهان آفرینش دفتر حُسن و زیبایی بنمود
و برگهای گوناگون آن را در برابر ادراک و احساس آدمیان بگشود تا
پاک بینان از هر ورق آن فصول، اسرار خوانند و از دریافت هر سری مزه
عشق برچسند.

اکنون بر خود لازم می‌دانم از زحمات پدر و مادر گرامی‌ام، همسر عزیزم و کلیه کسانی که
در دوران تحصیل همواره مشوق و پشتیبان اینجانب بوده‌اند کمال تشکر را بنمایم.
همچنین از زحمات اساتید محترم و دانشجویان صمیمی و مهربان دانشکده شیمی و به
خصوص استاد ارجمند سرکار خانم دکتر زهرا کلانتر که با راهنمایی‌های خود راهگشای
اینجانب بوده‌اند کمال تشکر و سپاسگزاری را دارم.

دانشجو تایید می نماید که مطالب مندرج در این پایان نامه نتیجه تحقیقات خودش می باشد و در صورت استفاده از نتایج دیگران مرجع آن را ذکر نموده است.

کلیه حقوق مادی مترتب از نتایج مطالعات، آزمایشات و نوآوری ناشی از تحقیق موضوع این پایان نامه متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد.

آذر ۸۸

چکیده

در این پایان نامه، از مدل شبکه عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته آلکان‌ها از ۲ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار استفاده شده است. دو شبکه عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته مدل‌سازی شد: یکی برای گازهای طبیعی (آلکان‌های ۲ تا ۴ کربنه) و دیگری برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها.

در ابتدا، مدل شبکه عصبی موجک برای گازهای طبیعی با دو متغیر دما و فشار و توصیف‌کننده بر مبنای روش سهم گروه شامل متیل و متیلن طراحی گردید. سپس جهت به کارگیری شبکه عصبی موجک، برنامه‌ی رایانه‌ی در محیط MATLAB نوشته شد و پس از آموزش شبکه، پارامترهای شبکه شامل ممنتم، سرعت آموزش، تعداد نرون لایه‌ی مخفی و تعداد دور آموزش بهینه‌سازی گردید. کارایی شبکه‌ی بهینه شده با رسم نمودار مقادیر تجربی دانسیته بر حسب مقادیر پیش‌بینی شده برای دو سری پیش‌بینی و تایید مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج حاصل با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۰/۹٪ کارایی مطلوب شبکه را تایید می‌کند.

در مرحله‌ی بعد، مدل شبکه‌ی عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های خطی از ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها با ۵ توصیف‌کننده شامل دما و فشار و تعداد گروه‌های متیل، متیلن و متین طراحی و بهینه‌سازی گردید. رفتار کاملاً خطی با ضریب همبستگی $R^2 \geq 0/9486$ مشاهده گردید. این روش دانسیته‌ی این ترکیبات را با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۱/۱٪ پیش‌بینی می‌کند.

کلید واژه: شبکه عصبی موجک - دانسیته - روش سهم گروه - آلکان - سیکلوآلکان

فهرست:

فصل اول: روش سهم گروه و کاربردهای آن

۲ مقدمه
۳ ۱-۱ پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی استاندارد
۳ ۲-۱ پیش‌بینی پارامترهای بحرانی
۴ ۱-۲-۱ روش لیدرسن
۵ ۲-۲-۱ روش گانی
۷ ۳-۱ پیش‌بینی دانسیته
۷ ۱-۳-۱ روش گیرولامی
۸ ۲-۳-۱ پیش‌بینی دانسیته‌ی هیدر و کربن‌های مایع اشباع
۹ ۳-۳-۱ روش حجم سهم گروه و روش‌های توسعه یافته‌ی آن
۱۰ ۴-۱ پیش‌بینی نقطه جوش نرمال
۱۰ ۱-۴-۱ روش جوپاک
۱۱ ۲-۴-۱ پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال ترکیبات با وزن ملکولی بالا
۱۳ ۳-۴-۱ روش یالکووسکی
۱۴ ۵-۱ پیش‌بینی ویسکوزیته
۱۴ ۱-۵-۱ پیش‌بینی ویسکوزیته‌ی ترکیبات آلی
۱۵ ۲-۵-۱ پیش‌بینی ویسکوزیته‌ی مایعات یونی
۱۵ ۶-۱ استفاده از روش سهم گروه در شبکه عصبی مصنوعی
۱۵ ۱-۶-۱ پیش‌بینی دمای نقطه اشتعال ترکیبات خالص
۱۶ ۲-۶-۱ پیش‌بینی دمای خود اشتعالی ترکیبات خالص
۱۶ ۳-۶-۱ پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی

فصل دوم: شبکه‌های عصبی مصنوعی

۱۹ مقدمه
۲۰ ۱-۲ سابقه تاریخی
۲۱ ۲-۲ شبکه عصبی بیولوژیکی
۲۳ ۱-۲-۲ چگونگی ایجاد و انتقال پیام عصبی
۲۴ ۲-۲-۲ از سلول‌های عصبی انسانی تا سلول‌های عصبی مصنوعی
۲۵ ۳-۲ شبکه‌های عصبی در مقابل کامپیوترهای معمولی
۲۶ ۴-۲ ساختار شبکه عصبی مصنوعی
۲۹ ۵-۲ تقسیم بندی لایه‌ای شبکه‌های عصبی مصنوعی

۶-۲	نحوه‌ی پردازش اطلاعات در شبکه‌های عصبی مصنوعی	31
۷-۲	آموزش شبکه عصبی	۳۲
۸-۲	معرفی روش‌های مختلف بهینه‌سازی عملکرد شبکه عصبی	۳۳
۱-۸-۲	روش نزول گرادیانی	۳۴
۲-۸-۲	الگوریتم پس انتشار خطا	۳۷
3-8-۲	روش‌های نوین آموزش شبکه
۹-۲	شبکه عصبی موجک	۳۷
۱-۹-۲	موجک و تبدیل موجک	۳۸
۲-۹-۲	الگوریتم شبکه عصبی موجک	۳۸
		۳۹

فصل سوم: مدل‌سازی و محاسبات

	مقدمه	۴۴
۱-۳	قاعده‌ی هم‌دمای خطی (LIR)	۴۴
۲-۳	تعمیم معادله حالت LIR به آلکان‌های خطی با استفاده از روش سهم گروه‌ها	۴۵
۳-۳	استفاده از شبکه عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌ها و سیکلوآلکان‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار	۴۸
۱-۳-۳	ارائه شبکه عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های خطی و سیکلوآلکان‌ها	۴۹
۱-۱-۳-۳	انتخاب سری داده‌ها	۴۹
۲-۱-۳-۳	انتخاب توصیف‌کننده‌ها	۵۱
۳-۱-۳-۳	ساخت مدل با استفاده از شبکه عصبی موجک	۵۲
۴-۱-۳-۳	الگوریتم برنامه‌ی نوشته شده	۵۳
۲-۳-۳	شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های خطی ۲ کربنه تا ۴ کربنه	۵۶
۱-۲-۳-۳	انتخاب توصیف‌کننده‌ها	۵۶
۲-۲-۳-۳	بهینه‌سازی پارامترهای ممتم، سرعت آموزش و تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی	۵۷
۳-۲-۳-۳	بهینه‌سازی تعداد دور شبکه‌های عصبی موجک	۵۸
۴-۲-۳-۳	ارزیابی شبکه بهینه شده	۵۹
۵-۲-۳-۳	معماری شبکه	۷۲
۳-۳-۳	شبکه عصبی موجک جامع برای آلکان‌ها از ۵ تا ۱۹ کربنه	۷۳

۳-۳-۴ شبکه عصبی موجک برای سیکلوآلکانها ۸۳

۳-۳-۵ شبکه عصبی موجک واحد برای آلکانها از ۵ کربنه تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکانها ۹۱

۳-۳-۵-۱ ارزیابی شبکه بهینه ۹۳

۳-۳-۵-۲ معماری شبکه ۱۰۵

فصل چهارم: بحث و نتیجه‌گیری ۱۰۷

منابع و ماخذ ۱۱۲

شکل (۱-۲): ساختمان یک نرون زیستی	۲۱
شکل (۲-۲): نمایی از سیناپس	۲۲
شکل (۳-۲): ساختمان یک نرون محاسباتی	۲۶
شکل (۴-۲): تابع محرک آستانه‌ای حدی و اثر آن روی ورودی نرون	۲۸
شکل (۵-۲): تابع محرک سیگموئید و اثر آن روی ورودی نرون	۲۸
شکل (۶-۲): ساختار یک شبکه‌ی تک لایه پیشرو	۲۹
شکل (۷-۲): ساختار یک شبکه سه لایه	۳۱
شکل (۸-۲): موجک‌های معروف کلاه مکزیکی، مورلت و میر	۳۹
شکل (۹-۲): ساختار عمومی شبکه عصبی موجک	۴۰
شکل (۱-۳): نمودارهای الف) تعداد نرون لایه مخفی ب) مقادیر ممنتم ج) سرعت آموزش د) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری پیش‌بینی که مینیمم مقدار آن را نشان می‌دهد بر حسب بردار مرجع برای آلکان‌ها از ۲ تا ۴ کربنه	۵۸
شکل (۲-۳): نمودار MSE بر حسب تعداد دور آموزش برای سری‌های آموزش و پیش‌بینی شبکه‌ی آلکان‌های ۲ تا ۴ کربنه	۵۹
شکل (۳-۳): نمودار برگشت برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۴ توصیف‌کننده بر حسب مقادیر تجربی برای دو سری الف) پیش‌بینی ب) تایید آلکان‌های خطی از ۲ تا ۴ کربنه در محدوده‌ی دما و فشار موجود در جدول (۱-۳)	۶۰
شکل (۴-۳): ساختار هندسی شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه	۷۲
شکل (۵-۳): نمودارهای الف) تعداد نرون لایه مخفی ب) مقادیر ممنتم ج) سرعت آموزش د) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری پیش‌بینی که مینیمم مقدار آن را نشان می‌دهد بر حسب بردار مرجع برای آلکان‌ها از ۵ تا ۱۹ کربنه	۷۴
شکل (۶-۳): نمودار MSE بر حسب تعداد دور آموزش برای سری‌های آموزش و پیش‌بینی برای آلکان‌ها از ۵ تا ۱۹ کربنه	۷۵
شکل (۷-۳): نمودار برگشت برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۴ توصیف‌کننده بر حسب مقادیر تجربی برای دو سری الف) پیش‌بینی ب) تایید آلکان‌های خطی از ۵ تا ۱۹ کربنه در محدوده‌ی دما و فشار موجود در جدول (۱-۳)	۸۳
شکل (۸-۳): نمودارهای الف) تعداد نرون لایه مخفی ب) مقادیر ممنتم ج) سرعت آموزش د) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری پیش‌بینی که مینیمم مقدار آن را نشان می‌دهد بر حسب بردار مرجع برای سیکلوآلکان‌ها	۸۵

شکل (۳-۹): نمودار MSE بر حسب تعداد دور آموزش برای سری‌های آموزش و پیش‌بینی برای سیکلوآلکان‌ها ۸۵

شکل (۳-۱۰): نمودار برگشت برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده بر حسب مقادیر تجربی برای دو سری الف) پیش‌بینی ب) تایید سیکلوآلکان‌ها در محدوده‌ی دما و فشار موجود در جدول (۳-۱۷) ۸۶

شکل (۳-۱۱): نمودارهای الف) تعداد نرون لایه مخفی ب) مقادیر ممنتم ج) سرعت آموزش د) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری پیش‌بینی که مینیمم مقدار آن را نشان می‌دهد بر حسب بردار مرجع برای آلکان‌ها از ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها ۹۲

شکل (۳-۱۲): نمودار MSE بر حسب تعداد دور آموزش برای سری‌های آموزش و پیش‌بینی برای آلکان‌ها از ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها ۹۲

شکل (۳-۱۳): نمودار برگشت برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده بر حسب مقادیر تجربی برای دو سری الف) پیش‌بینی ب) تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها در محدوده‌ی دما و فشار موجود در جدول (۳-۱) ۱۰۴

شکل (۳-۱۴): ساختار هندسی شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها ۱۰۶

فهرست جداول

- جدول (۱-۱): مقادیر پارامترهای تنظیم پذیر در معادله‌های (۱-۵) تا (۱-۷) ۶
- جدول (۲-۱): مقدار حجم‌های نسبی برای اتم‌های مختلف در روش گیرولامی ۸
- جدول (۳-۱): مقادیر A_i بدست آمده توسط دو روش تاجا و تسونوپلوس ۱۲
- جدول (۱-۳): محدوده‌ی دما و فشار برای ترکیبات موجود در بخش (۳-۱-۱) برای پیش‌بینی دانسیته به همراه مرجع مورد استفاده برای هریک از آنها ۵۰
- جدول (۲-۳): تعداد الگوها برای سری‌های آموزش، پیش‌بینی و تایید برای هریک از شبکه‌های بهینه شده ۵۰
- جدول (۳-۳): تعداد ورودی‌ها و نوع توصیف‌کننده‌ها بر مبنای سهم گروه‌ها برای ترکیبات موجود در جدول (۱-۳) ۵۱
- جدول (۴-۳): توصیف‌کننده‌های مورد استفاده برای ترکیبات ۲ تا ۴ کربنه ۵۷
- جدول (۵-۳): مقدار پارامترهای شبکه‌ی موجک بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های ۲ تا ۴ کربنه ۵۷
- جدول (۶-۳): متوسط درصد خطای نسبی و MSE برای سری پیش‌بینی و تایید برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه ۵۹
- جدول (۷-۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه ۶۰
- جدول (۸-۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه ۶۶
- جدول (۹-۳): مقادیر R^2 برای سری پیش‌بینی و تایید بعد از چندین تست Y -تصادفی برای شبکه‌ی آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه ۷۲
- جدول (۱۰-۳): توصیف‌کننده‌های مورد استفاده برای ترکیبات ۵ تا ۱۹ کربنه ۷۳
- جدول (۱۱-۳): مقدار پارامترهای شبکه‌ی موجک بهینه شده برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه ۷۴
- جدول (۱۲-۳): متوسط درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی و تایید برای آلکان‌های ۵ کربنه تا ۱۹ کربنه همراه با محدوده‌ی دما و فشار ۷۵
- جدول (۱۳-۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه ۷۶

جدول (۳-۱۴): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه..... ۷۹

جدول (۳-۱۵): توصیف‌کننده‌های مورد استفاده برای سیکلوآلکان‌ها..... ۸۴

جدول (۳-۱۶): مقدار پارامترهای شبکه‌ی موجک بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی سیکلوآلکان‌ها..... ۸۴

جدول (۳-۱۷): متوسط درصد خطای نسبی دو سری پیش‌بینی و تایید برای سیکلوآلکان‌ها همراه با محدوده‌ی دما و فشار..... ۸۶

جدول (۳-۱۸): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای سیکلوآلکان‌ها..... ۸۷

جدول (۳-۱۹): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای سیکلوآلکان‌ها..... ۸۹

جدول (۳-۲۰): مقدار پارامترهای شبکه‌ی موجک بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها..... ۹۱

جدول (۳-۲۱): متوسط درصد خطای نسبی و MSE برای سری پیش‌بینی و تایید برای آلکان‌های ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها..... ۹۳

جدول (۳-۲۲): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها..... ۹۴

جدول (۳-۲۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها..... ۹۹

جدول (۳-۲۴): مقادیر R^2 برای سری پیش‌بینی و تایید بعد از چندین تست Y -تصادفی برای شبکه‌ی آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها..... ۱۰۵

فصل اول

روش سهم گروه و کاربردهای آن

مقدمه

برای هر طراحی و شبیه سازی در سیستم‌های شیمیایی، دانستن خواص فیزیکی و شیمیایی مواد خالص و مخلوط‌های آنها ضروری است. اما همیشه یافتن مقادیر تجربی برای این خواص از منابع علمی امکان پذیر نیست. به علاوه اندازه‌گیری این خواص به صرف هزینه و وقت زیادی نیاز دارد و در بعضی موارد این کار بسیار مشکل و حتی غیرممکن است. تحت این شرایط روش‌های ساده و کار آمد و معتبر برای پیش‌بینی و تخمین خواص مواد از روی ساختار ملکولی آنها ضروری است. این ایده سبب پیدایش روشی به نام روش سهم گروه‌ها¹ شده است که امروزه بطور گسترده‌ای در پیش‌بینی خواص فیزیکی و ترمودینامیکی بکار می‌رود. مبنای روش سهم گروه این است که با وجودی که هزاران ترکیب شیمیایی در دنیای علم و تکنولوژی موجود است اما تعداد گروه‌های ساختاری و عاملی سازنده‌ی آنها نسبت به تعداد این ترکیبات بسیار اندک است [1].

به این ترتیب مبنای ایجاد و توسعه‌ی هر روش سهم گروه شامل دو مرحله است:

۱- خواص شناخته شده به ساختار شیمیایی ترکیبات مرتبط می‌شود تا گروه‌های اصلی شناسایی شده و مقادیر جمع پذیر مولی آنها مشخص شود.

۲- سهم یک گروه مشخص در یک ملکول با ملکول دیگر یکسان در نظر گرفته می‌شود. از این رو می‌توان خواص یک ماده جدید را از افزایش مستقیم مقادیر جمع پذیری مولی گروه‌های شیمیایی تشکیل‌دهنده ترکیب، پیش‌بینی نمود [2].

البته باید گفته شود که انتخاب و تعریف گروه‌های تشکیل‌دهنده‌ی ماده، مقوله‌ای اختیاری است و با انتخاب صحیح می‌توان به روش سودمندی دست یافت که با تعداد گروه‌های کم، صحت خواص پیش‌بینی شده قابل قبول باشد. بدیهی است هرچه تمایز بین گروه‌ها بیشتر شود، صحت روش افزایش می‌یابد [1].

۱-۱ پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی استاندارد

در سال ۱۹۵۸، بنسون^۱ و باس^۲ مبانی نظری روش سهم گروه‌ها و چگونگی دسته‌بندی گروه‌های مختلف را جهت تعیین خواص ترمودینامیکی استاندارد شامل $C_p^\circ(T)$ ، $\Delta H_f^\circ(T)$ و $S^\circ(T)$ ارائه کردند [3]. ۱۰ سال بعد بنسون و همکارانش سهم گروه را برای مواد زیر در فشار یک اتمسفر و دمای ۲۹۸K گزارش نمودند [4].

- ۱- هیدروکربن‌ها شامل آلکان‌ها، آلکن‌ها، آلکین‌ها، ترکیبات آروماتیک، سیلکوالکان و سیکلوالکن‌ها
- ۲- ترکیبات حاوی اکسیژن
- ۳- ترکیبات حاوی نیتروژن شامل آمین‌ها، ایمین‌ها، سیانیدها، ترکیبات نیترو، نیتريت‌ها و نیترات‌ها، هیدرازین‌ها، تترازین‌ها و ترکیبات آزو، آمیدها و ایمیدها، ترکیبات حلقوی نیتروژن‌دار
- ۴- ترکیبات هالوژن‌دار
- ۵- ترکیبات آلی - فلزی
- ۶- ترکیبات آلی فسفر، بور و گوگرد
- ۷- ترکیبات متفرقه و ترکیبات حاوی گروه‌های منحصر به فرد.

۲-۱ پیش‌بینی پارامترهای بحرانی

دانستن خواص بحرانی (v_c, p_c, T_c) برای مهندسين شیمی از اهمیت خاصی برخوردار است. مقادیر دماها و فشارها بحرانی در محاسبه‌ی معادله‌ی حالت ترمودینامیکی و خواص انتقالی مورد نیاز می‌باشد. به طور مثال از داده‌های بحرانی برای مطالعات استخراج توسط سیال فوق بحرانی استفاده می‌گردد [5]. علیرغم کاربرد گسترده‌ی خواص بحرانی اکثراً از روش‌های تخمینی برای بدست آوردن این مقادیر استفاده می‌شود.

۱-Benson
۲-Buss

یکی از معروفترین آنها، روش سهم گروه لیدرسن^۱ است [6]. پس از آن در سال ۱۹۶۸، زولینسکی^۲ و همکارانش خواص بحرانی مواد آلی را با استفاده از روش سهم گروه محاسبه کردند [7]. در سال ۱۹۹۴، گانی^۳ روش سهم گروه جدیدی را ارائه نمود که می‌توانست مقادیر بحرانی ترکیبات آلی خالص با اندازه‌ی متوسط، ترکیبات سیکلوآلیفاتیک یک حلقه‌ای با چند استخلاف و ترکیبات آروماتیک را پیش‌بینی کند [8]. در سال ۲۰۰۳، این گروه با تعمیم کار قبلی‌شان توانستند نقاط بحرانی ترکیبات پیچیده‌ی هتروسیکل و ترکیبات غیر حلقوی چند عاملی بزرگ (از ۷ تا ۶۰ اتم کربن) را با استفاده از روش سهم گروه پیش‌بینی کنند [9].

۱-۲-۱ روش لیدرسن

روش لیدرسن، یک روش سهم گروه برای پیش‌بینی کمیت‌های بحرانی، p_c و v_c و T_c است. این روش لیدرسن طرح اولیه و مبنای بسیاری از روش‌های جدید مانند روش جوپاک^۴ و زولینسکی می‌باشد. روابط ارائه شده توسط لیدرسن به صورت زیر می‌باشد:

$$T_c = \frac{T_b}{0.567 + \sum G_i - (\sum G_i)^2} \quad (1-1)$$

$$v_c = 40 + \sum G_i \quad (2-1)$$

$$p_c = \frac{M}{(0.34 + \sum G_i)^2} \quad (3-1)$$

که در آن، M جرم مولی و G_i سهم گروه‌ها برای گروه‌های بینادی موجود در ملکول در خاصیت مورد نظر است که در جدول لیدرسن موجود می‌باشد. واحد دما، فشار و حجم به ترتیب کلوین، اتمسفر و سانتی متر مکعب بر گرم است. مقدار خطای محاسبه‌ی T_c با استفاده از این روش ۵-۲٪ و برای p_c و v_c ۱۰-۴٪ می‌باشد [6].

1-Lydersen
2-Zwolinski
3-Gani
4-Joback

۱-۲-۲ روش گانی

مشکل روش لیدرسن این است که برای محاسبه مقادیر دمای بحرانی باید نقطه جوش نرمال را داشته باشیم که این کمیت برای همه‌ی مواد در دسترس نیست. در نتیجه محققان روش‌های سهم گروه دیگری را ارائه کردند که از جمله این موارد می‌توان به روشی که در سال ۱۹۸۲ توسط فدورس^۱ ارائه گردید اشاره نمود که در آن فقط از ساختار ملکول استفاده می‌شد [10]. روش‌های دیگری هم ارائه شدند که برخی به خاطر پیچیدگی روابط و برخی به خاطر محدودیت دامنه‌ی کاربرد چندان مورد توجه قرار نگرفتند. در نهایت گانی روشی ساده و سریع و در عین حال کاملی را ارائه نمود که در آن می‌توان با استفاده از ساختار ملکولی، برخی خواص مواد مثل نقطه جوش نرمال، فشار بحرانی، دما و حجم بحرانی، آنتالپی تبخیر استاندارد و... را پیش‌بینی نمود [9 و 8].

گانی سه نوع گروه عاملی^۲ را معرفی کرد. گروه عاملی مرتبه‌ی اول^۳ که همان گروه‌های مشخصه در ملکول‌ها هستند به طوری که می‌توان هر ملکول را مخلوطی از گروه‌های عاملی مرتبه‌ی اول در نظر گرفت مثل گروه‌های متیل، متیلن و... . گروه‌های عاملی مرتبه‌ی دوم^۴ گروه‌هایی هستند که دارای دو یا چند گروه عاملی نوع اول بوده و با هم به صورت یک واحد ساختمانی در نظر گرفته می‌شوند مثل گروه ایزوبوتیل یا ترشیوبوتیل. این دو نوع گروه عاملی را گانی برای توصیف ترکیبات آلی با اندازه متوسط (۳ تا ۶ کربنی)، ترکیبات آروماتیک و سیلکواالیفاتیک با یک حلقه و چند استخلاف به کار برد [8]. سپس او در سال ۲۰۰۳ با معرفی گروه‌های عاملی مرتبه‌ی سوم^۵ این کار را به ترکیبات پیچیده‌ی هتروسیکل و ترکیبات غیر حلقوی چند عاملی بزرگ (از ۷ تا ۶۰ کربن) تعمیم داد که این گروه‌ها شامل قطعات ملکولی موجود در این ترکیبات بودند [9].

۱-Fedors

۲-Functional group

۳-First functional group

۴-Second functional group

۵-Third functional group

آنها با استفاده از این سه نوع گروه عاملی معادله (۴-۱) را برای پیش‌بینی هر خاصیت x معرفی

کردند:

$$F(x) = \sum_i N_i C_{1i} + w \sum_j M_j D_{2j} + z \sum_k O_k E_{3k} \quad (۴-۱)$$

که در آن E_{3k}, D_{2j}, C_{1i} به ترتیب سهم گروه مرتبه‌ی اول i با تعداد N_i ، سهم گروه مرتبه‌ی دوم نوع j با تعداد M_j و سهم گروه مرتبه‌ی سوم k با تعداد O_k می‌باشد. ثابت‌های w و z هم در تخمین مرتبه‌ی اول مقدار صفر دارند و در تخمین مرتبه‌ی دوم به ترتیب برابر یک و صفر هستند و در تخمین مرتبه‌ی سوم هر دو مقدار یک را خواهند داشت. تابع $F(x)$ هم باید به صورت زیر انتخاب شود:

۱- تابع باید جمع‌پذیری سهم‌های C_{1i}, D_{2j} و E_{3k} را نشان دهد.

۲- تابع باید بهترین تطابق ممکن را با داده‌های تجربی داشته باشد.

۳- تابع باید خاصیت برون‌یابی داشته باشد تا بتواند در دامنه‌ی وسیعی به کار رود.

گانی با توجه به شرایط فوق عبارت‌های زیر را برای کمیت‌های بحرانی ارائه داد:

$$\exp\left(\frac{T_c}{T_{c0}}\right) = \sum_i N_i C_{1i} + w \sum_j M_j D_{2j} + z \sum_k O_k E_{3k} \quad (۵-۱)$$

$$(P_c - P_{ci})^{-0.5} - p_{c2} = \sum_i N_i C_{1i} + w \sum_j M_j D_{2j} + z \sum_k O_k E_{3k} \quad (۶-۱)$$

$$v_c - v_{c0} = \sum_i N_i C_{1i} + w \sum_j M_j D_{2j} + z \sum_k O_k E_{3k} \quad (۷-۱)$$

در این عبارتها $T_{c0}, p_{c1}, p_{c2}, v_{c0}$ پارامترهای تنظیم‌پذیر هستند و مقادیر آن در جدول (۱-۱)

آمده است.

جدول (۱-۱): مقادیر پارامترهای تنظیم‌پذیر در معادله‌های (۵-۱) تا (۷-۱)

T_{c0} / K	p_{c2} / bar	$p_{c1} / \text{bar}^{-0.5}$	$v_{c0} / (\text{kmol}) \text{m}^3$
۱۸۱/۱۲۸	۱/۳۷۰۵	۰/۱۰۰۲۲۰	-۰/۰۰۴۳۵۰

۳-۱ پیش‌بینی دانسیته

دانسیته‌ی مایعات پارامتر بسیار مهمی در طراحی فرایندهای شیمیایی است. با وجودیکه مقادیر تجربی دقیق هستند اما بدست آوردن مقادیر تجربی برای همه مواد امکان پذیر نیست به همین دلیل روش‌های مختلف برای پیش‌بینی دانسیته ارائه شده است. یکی از روش‌های مورد استفاده روش سهم گروه می‌باشد که روشی ساده و آسان برای پیش‌بینی دانسیته از روی ساختار ملکولی ماده می‌باشد. در ادامه به چند روش محاسبه‌ی دانسیته‌ی مایعات برمبنای روش سهم گروه اشاره می‌کنیم.

۱-۳-۱ روش گیرولامی^۱

در سال ۱۹۹۴ گیرولامی و همکارانش معادله (۸-۱) را برای محاسبه‌ی دانسیته برحسب دما

ارائه دادند [11]:

$$d = \frac{M}{5 \cdot v_s} \quad (8-1)$$

که در این معادله M جرم ملکولی و d دانسیته برحسب $\frac{g}{cm^3}$ است و v_s طبق معادله (۹-۱) محاسبه می‌گردد:

$$v_s = \sum_i v_i \quad (9-1)$$

که در آن v_i حجم نسبی است و مقادیر آن در جدول (۲-۱) برای اتم‌های مختلف آمده است.

طبق این روش برای برخی ترکیبات باید ضرایبی به این صورت به دانسیته افزوده شود: برای

الکل، گروه کربوکسی، گروه آمین نوع اول یا دوم، آمید و سولفوکسید باید ۱۰٪ به ازاء هر گروه به

دانسیته‌ی محاسبه شده بالا افزوده شود. برای سولفون ۲۰٪ و برای حلقه‌های فشرده به ازاء هر حلقه

۷/۵٪ به دانسیته افزوده شود. خطای این روش 0.049 g/cm^3 می‌باشد.

۱-Girolami

جدول (۲-۱): مقدار حجم‌های نسبی برای اتم‌های مختلف در روش گیرولامی

عنصر	حجم نسبی V_i
هیدر وژن	۱
لیتیم تا فلور	۲
سدیم تا کلر	۴
پتاسیم تا برم	۵
رویدیم تا ید	۷/۵
سزیم تا بیسموت	۹

۲-۳-۱ پیش‌بینی دانسیته‌ی هیدروکربن‌های مایع اشباع

راکت^۱ در سال ۱۹۷۰، رابطه (۱۰-۱) را برای محاسبه‌ی دانسیته مایعات اشباع ارائه داد [12].

$$\log v_r = \log(Z_{RA})(1 - T_r)^{2/7} \quad (10-1)$$

که در آن T_r و v_r به ترتیب دما و حجم کاهش یافته می‌باشد، Z_{RA} فاکتور تراکم‌پذیری بحرانی است. بعدها مشخص شد که Z_{RA} با Z_c برابر نیست و Z_{RA} یک پارامتر تنظیم‌پذیر در این معادله می‌باشد [13].

در سال ۱۹۹۰، معادله‌ی (۱۱-۱) براساس معادله‌ی راکت برای پیش‌بینی دانسیته‌ی

هیدروکربن‌های مایع اشباع بر حسب دما ارائه شد [14]:

$$v_s = v^* Z_{RA} (1 - T_r)^{2/7} \quad (11-1)$$

که در این رابطه Z_{RA} و v^* برای آلکان‌ها چنین تعریف می‌شوند:

^۱-Rackett

$$Z_{RA} = 0.3096 - 0.00630v^{*1/3} \quad (12-1)$$

$$v^* = 19.05 - 0.00564T_b^{1.75} + \sum_{j=1}^4 v_j G_j - 5.85v_{st} \quad (13-1)$$

در روابط فوق T_b نقطه جوش نرمال، G_j تعداد گروه نوع j و v_j سهم گروه j در v^* و v_{st} جمله ساختاری^۱ است. مقادیر v_{st} برای انواع ساختارهای ملکولی تعیین و در یک جدول ارائه شده است. همچنین سهم چهار گروه کربنی موجود در آلکان‌ها در v^* تعیین و گزارش گردید. متوسط خطای نسبی این روش در پیش‌بینی دانسیته ۲۰۷ هیدروکربن بر حسب دما ۰/۴٪ می‌باشد.

۱-۳-۳ روش حجم سهم گروه^۲ و روش‌های توسعه یافته‌ی آن

البرو^۳ و همکارانش در سال ۱۹۹۱ معادله ساده‌ی زیر را برای محاسبه‌ی دانسیته‌ی مایعات ارائه نمودند [15]:

$$\rho = \frac{MW}{v} = \frac{MW}{\sum n_i \Delta v_i} \quad (14-1)$$

که در آن MW وزن ملکولی و v حجم ملکولی است که به وسیله جمع زدن روی حجم جزئی گروه‌ها محاسبه می‌شود و n_i تعداد گروه i موجود در ترکیب می‌باشد. سپس آنها معادله (۱۵-۱) را برای وابستگی دمایی حجم جزئی گروه‌ها، Δv_i به دما ارائه نمودند:

$$\Delta v_i = A_i + B_i T + C_i T^2 \quad (15-1)$$

که در آن واحد دما، کلوین و واحد Δv_i ، $cm^3 \times mol^{-1}$ می‌باشد.

در این کار پارامترهای A_i و B_i و C_i برای ۳۶ گروه متفاوت از ترکیباتی مثل هیدروکربن‌های غیر حلقوی، آلکان‌ها، ترکیبات آروماتیک، آلکن‌ها، الکل‌ها، کتون‌ها، آلدئیدها، اترها، استرها، کلریدها،

۱-Structural term

۲-Group contribution volume (GCVOL)

۳-Elbro

سیلوکسان‌ها تعیین و در جدولی گزارش گردید.

در سال ۱۹۹۴ با تعریف ۶ گروه جدید روش GCVOI به الکل‌های نوع سوم، آلکین‌ها، کربوکسیلیک اسیدها، آلن، سیکلوهگزان و سیکلوپنتان تعمیم یافت و مقدار پارامترهای A_i و B_i و C_i برای آنها بدست آمد [16].

در سال ۲۰۰۳، کریستین^۱ و جرجن^۲ این روش را بازنگری کرده و توسعه دادند [17]. آنها ترکیبات جدیدی شامل برمیدها، فلوریدها، یدیدها، سیکلوبوتان و سیکلوپروپان، تیول‌ها و سولفید، سولفات‌ها، آمین‌ها، ترکیبات نیترو و نیتریل را نیز به مواد قبلی اضافه نموده و پارامترهای A_i و B_i و C_i را برای آنها بدست آوردند. در این کار ۱۰۴۰ ترکیب برای بدست آوردن پارامترهای ۶۰ گروه جدید به کار برده شد و متوسط خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته برحسب دما برای این مواد ۱/۵٪ گزارش گردید.

۴-۱ پیش‌بینی نقطه جوش نرمال

نقطه‌ی جوش نرمال یکی از خواص فیزیکی است که اندازه‌گیری آن به صورت تجربی کار آسانی است و مقادیر تجربی عموماً برای ترکیبات خالص وجود دارند. اما اگر ماده‌ی جدیدی سنتز شود یا ماده‌ای حساس به گرما بوده و در نقطه جوش تجزیه شود اندازه‌گیری با مشکل مواجه می‌شود. در این شرایط مدل‌های ریاضی می‌توانند برای پیش‌بینی نقطه جوش استفاده شوند. یکی از روش‌های ساده و کارآمد روش سهم گروه می‌باشد که در زیر به چند نمونه از این روش اشاره می‌شود.

۱-۴-۱ روش جوپاک

روش جوپاک یک روش توسعه‌یافته از روش لیدرسن می‌باشد [6]. او از همان گروه‌های مورد

۱-Christian

۲-Jrgen

استفاده لیدرسن برای پیش‌بینی مقادیر بحرانی به علاوه چند گروه عاملی دیگر استفاده نمود و سهم گروه‌ها را در نقطه جوش تعیین و گزارش کرد. معادله‌ی ارائه شده توسط جوباک به صورت زیر است:

$$T_{bj} = 198.0 + \sum_i \delta_i \quad (16-1)$$

که در آن T_{bj} ، نقطه جوش نرمال برحسب کلین است و δ_i سهم گروه‌های مختلف در نقطه‌ی جوش نرمال می‌باشد. متوسط در صد خطای نسبی این روش در پیش‌بینی نقطه جوش نرمال ۳/۶٪ است [18].

در سال ۱۹۹۲ یک گروه از محققین این کار را توسعه دادند و سهم گروه‌های جدیدی برای هالوژن‌ها تعریف کردند که نتیجه‌ی رضایت بخشی برای T_b این ترکیبات بدست آمد [19].

۱-۴-۲ پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال ترکیبات با وزن ملکولی بالا

در روش سهم گروه جوباک و روش اصلاح شده‌ی آن (۱۹۹۲) برای بدست آوردن نقطه جوش نرمال، دماهای نقطه جوش نرمال نسبت به وزن ملکولی خطی هستند در حالی که دماهای نقطه جوش نرمال محاسباتی به طور خطی با وزن مولکولی افزایش نمی‌یافتند و ترکیبات با MW بالا انحراف نشان می‌دادند [19 و ۱۸].

آیونیس^۱ و همکارانش در سال ۱۹۹۵ روشی را برای پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال ترکیبات با وزن ملکولی متوسط و بالا ارائه نمودند [20]. اطلاعات مورد نیاز در این روش دانسیته در دمای 20°C و وزن ملکولی می‌باشد. معادله‌ی ارائه شده توسط آنها به صورت زیر می‌باشد:

$$i = 1, 2, 3 \quad T_b = T_b^{ref} + \sum a_i (Q - Q_{(1\sqrt{-1})}^{ref})^i$$

که در آن T_b نقطه جوش نرمال یک ترکیب با وزن ملکولی MW و Q دانسیته‌ی ترکیب در دمای 20°C می‌باشد.

T_b^{ref} و Q^{ref} مقادیر مشابه از یک سیستم مرجع می‌باشند. سیستم مرجع را یک آلکان خطی با

وزن ملکولی مشابه در نظر می‌گیرند و T_b^{ref} و Q_b^{ref} را به این شکل محاسبه می‌کنند:

با توجه به اینکه نقطه جوش نرمال آلکان‌ها با تعداد کربن آنها n_c ارتباط دارد، آنها از رابطه

(۱۸-۱) برای محاسبه‌ی n_c ترکیب مرجع استفاده کردند:

$$n_c = \frac{(MW - 2.0158)}{14.0268} \quad (18-1)$$

T_b^{ref} با استفاده از رابطه‌ی (۱۹-۱) برای ترکیب مرجع محاسبه می‌گردد:

$$\ln(A_1 - T_b^{ref}) = A_2 - A_3 n_c^{A_4} \quad (19-1)$$

که مقادیر A_i ($i=1, 2, 3, 4$) بدست آمده توسط دو روش تجا^۱ و تسونوپلوس^۲ در جدول (۳-۱) گزارش شده است.

Q^{ref} هم از روش GCVOI برای آلکان‌ها به صورت زیر بدست می‌آید:

$$Q^{ref} = \frac{MW}{29.6729 + 1.1630MW} \quad (20-1)$$

خطای این روش در پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال کمتر از ۲٪ می‌باشد.

جدول (۳-۱): مقادیر A_i بدست آمده توسط دو روش تجا و تسونوپلوس

پارامتر	تسونوپلاس	تجا
A_1	۱۰۷۱/۲۸	۱۰۱۳/۴۰
A_2	۶/۹۷۵۹۶	۶/۹۰۵۹۹
A_3	۰/۱۱۶۳۰۷	۰/۱۱۲۸۰۱
A_4	۲/۳	۰/۷۰۱۵۳۵

۱-Teja

۲-Tsonopoulos

۱-۴-۳ روش یالکووسکی^۱

یالکووسکی و سانقوی^۲ طی مقاله ای در سال ۲۰۰۶ یک روش سهم گروه برای تخمین T_b ارائه

کردند که در آن نقطه جوش نرمال از نسبت ΔH_b به ΔS_b بدست آمده است [21].

آنها رابطه‌ی (۲۱-۱) را برای محاسبه‌ی ΔS_b ارائه کردند:

$$\Delta S_b = 87 + 0.35(\tau) + 15(HBP) \quad (21-1)$$

که در آن τ پارامتر انعطاف پذیری بوده و طبق رابطه‌ی زیر بدست می‌آید:

$$\tau = (sp^3 + 0.5sp^2 + 0.5ring - 1) \quad (22-1)$$

که در این رابطه sp^3 و sp^2 به ترتیب تعداد کربن با هیبرید sp^3 و sp^2 است چون کربن با هیبرید

sp انعطاف پذیر نیست در نظر گرفته نمی‌شود و $ring$ هم تعداد حلقه است. به علاوه ترکیبات با τ

منفی صفر فرض می‌شوند. HBP هم به صورت رابطه (۲۳-۱) تعریف می‌شود که تاثیر پیوند با

هیدروژن‌های متفاوت را نشان می‌دهد:

$$HBP = \sqrt{((\neq OH) + (\neq COOH) + 0.0625(\neq NH))} \quad (23-1)$$

در رابطه (۲۳-۱) علامت \neq تعداد گروه آلیفاتیک و آروماتیک است.

همچنین در این کار، آنتالپی جوش براساس روش سهم گروه‌ها به صورت زیر بیان گردیده است:

$$\Delta H_b = \sum n_i b_i \quad (24-1)$$

که در آن n_i تعداد گروه i موجود در ترکیب و b_i سهم آنتالپی جوش گروه i است. ۱۳۲۲ ترکیب برای

تعیین b_i برای ۱۳۲ گروه مختلف بکار برده شدند و میانگین خطای مطلق در این روش برای

پیش‌بینی T_b برابر با ۲/۳٪ گزارش شده است.

^۱-Yalkowsky

^۲-Sanghvi

۱-۵ پیش‌بینی ویسکوزیته

دانستن خواص انتقالی سیالات، از اهمیت خاصی در طراحی صنعتی برخوردار است. دانستن ویسکوزیته برای طراحی بهینه‌ی دستگاه‌هایی مثل مبدل‌های حرارتی و در هر جایی که سیال در حال حرکت است مهم است. روش‌های مختلفی برای پیش‌بینی ویسکوزیته‌ی ترکیبات وجود دارد که یکی از ساده‌ترین روش‌ها، روش سهم گروه است که در ادامه به شرح چند نمونه از آنها می‌پردازیم.

۱-۵-۱ پیش‌بینی ویسکوزیته‌ی ترکیبات آلی

در این کار، ساستری^۱ و رائو^۲ با توجه به کارهای قبلی خود رابطه زیر را برای ویسکوزیته‌ی مایعات ارائه کردند [22].

$$\eta = \eta_b p^{-N} \quad (1-25)$$

که در آن، p فشار بخار و η_b ویسکوزیته‌ی مایع در نقطه جوش نرمال می‌باشد. سپس آنها با بررسی بیشتر اعضای یک سری همولوگ با طبیعت مشابه در فاز مایع، مشخص کردند که تغییرات N و η_b در عبارت فوق بسیار کم است و از این موضوع برای ارتباط بین ساختار و ویسکوزیته استفاده کردند. آنها ابتدا برای تعداد زیادی از ترکیبات، مقادیر η_b و N را بدست آوردند و سپس با استفاده از این مقادیر سهم گروه‌های عاملی را براساس معادلات زیر بدست آورده و جدول بندی نمودند.

$$\eta_b = \sum \Delta \eta_b + \sum \Delta \eta_b^{cor} \quad (1-26)$$

$$N = 0.2 + \sum \Delta N + \sum \Delta N^{cor} \quad (1-27)$$

سپس مقادیر η_b و N را محاسبه کرده و با استفاده از مقادیر تجربی فشار بخار توانستند ویسکوزیته‌ی هیدروکربن‌های مختلف شامل n-آلکان، آلکان شاخه‌ای، سیلوآلکان، ترکیبات آروماتیک

۱-Sastri

۲-Rao

و آلیفاتیک اشباع نشده محاسبه کنند. خطای نسبی برای آلکان‌های خطی ۷/۵٪، آلکان شاخه‌ای ۸/۸٪، سیلوآلکان ۹٪، ترکیبات آروماتیک ۶/۶٪ و آلیفاتیک اشباع نشده ۵/۷٪ می‌باشد [23].

۲-۵-۱ پیش‌بینی ویسکوزیته‌ی مایعات یونی

یکی از خواص فیزیکی مهم مایعات یونی که به عنوان حلال در واکنش‌ها استفاده می‌شوند، ویسکوزیته می‌باشد. روشی که در سال ۲۰۰۸ ارائه شد از معادله زیر برای پیش‌بینی ویسکوزیته مایعات یونی استفاده می‌کند:

$$\ln \frac{\eta}{\rho M} = A + \frac{B}{T} \quad (28-1)$$

که در آن واحد ρ و η به ترتیب $\frac{g}{cm^3}$ و سانتی‌پوز است و M وزن ملکولی ترکیب می‌باشد. سپس سهم ۱۳ گروه مختلف در پارامترهای A و B تعیین و در جدولی گزارش شده است. متوسط خطای نسبی این روش در پیش‌بینی ویسکوزیته ۷/۷۸٪ گزارش شده است [24].

۱-۶ استفاده از روش سهم گروه در شبکه عصبی مصنوعی

۱-۶-۱ پیش‌بینی دمای نقطه اشتعال^۱ ترکیبات خالص

در این کار که مقاله‌ی آن در سال ۲۰۰۸ به چاپ رسید، قراقیزی^۲ و همکارانش داده‌های تجربی نقطه اشتعال را برای ۱۳۷۸ ترکیب خالص برای طراحی شبکه عصبی مصنوعی انتخاب کردند که از این تعداد ۹۰٪ (۱۲۴۱ ترکیب) برای سری آموزش و ۱۰٪ باقی‌مانده (۱۳۷ ترکیب) برای سری پیش‌بینی به کار بردند [25]. توصیف‌کننده‌های این ترکیبات بر اساس روش سهم گروه انتخاب گردید به این صورت که آنها ۷۹ گروه عاملی در این ترکیبات شناسایی شدند که به صورت ۷۹ توصیف‌کننده

1-Flash Point
2-Gharagheizi

برای طراحی شبکه به کار گرفتند. سپس از شبکه‌ی بهینه شده در پیش‌بینی دمای نقطه اشتعال سری پیش‌بینی استفاده کردند. میانگین انحراف مطلق برای سری پیش‌بینی برابر با $8/10\%$ گزارش شده است. چون پارامترها در این مدل به راحتی محاسبه می‌شوند این مدل بسیار ساده و قابل استفاده می‌باشد.

۱-۶-۲ پیش‌بینی دمای خود اشتعالی^۱ ترکیبات خالص

البحری^۲ و جورج^۳ یک شبکه عصبی مصنوعی برای پیش‌بینی دمای خود اشتعالی ترکیبات خالص ارائه کردند که توصیف‌کننده‌های آن از روش سهم گروه بدست آمده بود [26]. در این مدل، ۵۸ گروه بنیادی برای ترکیبات مختلف شامل هیدروکربن‌ها، ترکیبات هالوژنه، اترها و الکل‌ها، فنول‌ها، آلدهیدها و کتون‌ها، آمین‌ها و انیدریدها تعریف کردند. آنها از داده‌های جمع‌آوری شده برای ۴۹۰ ترکیب، داده‌های ۴۷۰ ترکیب را برای سری آموزش و ۲۰ ترکیب را برای سری پیش‌بینی استفاده کردند. پس از بهینه‌سازی شبکه عصبی از آن در پیش‌بینی دمای خود اشتعالی سری پیش‌بینی استفاده کردند. میانگین انحراف در پیش‌بینی دمای خود اشتعالی برای انواع ترکیبات خالص در این سری در دامنه‌ی 303 K تا 1283 K برابر $2/8\%$ بدست آمده است.

۱-۶-۳ پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی

در این کار که اخیراً توسط والدراما^۴ و همکارانش انجام شده است، دانسیته‌ی مایعات یونی با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی و توصیف‌کننده‌هایی بر مبنای سهم گروه پیش‌بینی می‌گردد [27]. او از ۳۹۹ داده برای آموزش شبکه و ۸۲ داده برای سری پیش‌بینی استفاده نمود. برای انتخاب

1-Auto Ignition Temperature
2-Albahri
3-George
4-Valderrama

توصیف‌کننده‌های شبکه، از روش سهم گروه توسعه یافته جوباک استفاده کردند، که طبق آن ترکیبات مورد نظر به ۸ گروه بنیادی تقسیم شدند. آنها با استفاده از توصیف‌کننده‌ها بر مبنای روش سهم گروه، دما و جرم ملکولی ترکیبات، شبکه را آموزش دادند. سپس از شبکه‌ی بهینه شده در پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی بر حسب دما برای سری پیش‌بینی استفاده کردند. میانگین خطای مطلق برای سری پیش‌بینی برابر ۰/۲۶٪ بدست آمده است.

فصل دوم

شبکه‌های عصبی مصنوعی

مقدمه

شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)^۱ به عنوان یکی از سیستم‌های هوشمندی که ایده‌ی اصلی خود را از سیستم عصبی انسان گرفته، در طی چند دهه‌ی اخیر کاربرد فراوانی را در زمینه‌های مختلف فنی و مهندسی، علوم پایه و... یافته است. شبکه‌های عصبی مصنوعی جزء دسته‌ای از سیستم‌های دینامیکی هستند که با پردازش روی مجموعه‌ای از ورودی‌ها و خروجی‌های صحیح، دانش یا قانون نهفته در ورای داده‌ها را پیدا می‌کنند [۲۸]. به همین خاطر به این سیستم‌ها هوشمند گفته می‌شود، زیرا براساس محاسبات روی داده‌های عددی یا مثال‌ها، قوانین کلی را فرا می‌گیرند و براساس آن متغیرهای خود را به گونه‌ای تنظیم می‌کنند که در صورت گرفتن ورودی‌های جدید، بتوانند پاسخ‌های درستی ایجاد کنند.

البته هرچه بیشتر دانشمندان در مورد مغز بشر تحقیق می‌کنند و می‌آموزند، بیشتر درمی‌یابند که مغز بشر دست‌نیافتنی است. در حقیقت باید گفته شود شبکه‌های عصبی با الهام از ساختار مغز یک مدل ساده و ابتدایی از آن ارائه می‌کنند که فقط می‌تواند بخشی از عملکرد مغز را شبیه‌سازی کند [۲۹]. با وجودی که این سامانه‌های هوشمند تنها درصد کمی از کارایی مغز را دارند، اما توانایی فوق‌العاده‌ای در زمینه‌ی پردازش سیگنال^۲ (شکل، گفتار، تصویر و اطلاعات)، کنترل (ربات‌ها و وسایل نقلیه هوشمند) و بسیاری زمینه‌های دیگر دارند و همین موضوع باعث شده است که شبکه‌های عصبی مصنوعی مورد توجه قرار گیرند [۳۰].

از شبکه‌های عصبی در زمینه‌های مختلف علمی استفاده شده است به عنوان مثال از شبکه‌های عصبی در زمینه‌ی شیمی در پیش‌بینی خصوصیات آشکارساز یونیزاسیون شعله [۳۱]، پیش‌بینی گرانیوی گازها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار [۳۲] و ... می‌توان اشاره کرد.

1-Artificial neural networks(ANN)
2-Signal processing

۲-۱ سابقه تاریخی

از قرن نوزدهم به طور همزمان اما جداگانه نروفیزولوژیست‌ها سعی کردند سیستم یادگیری و تجزیه و تحلیل مغز را کشف کنند و از سویی دیگر ریاضیدانان تلاش کردند تا مدل ریاضی بسازند که قابلیت فراگیری و تجزیه و تحلیل عمومی مسائل را دارا باشد. اولین کوشش‌ها در شبیه‌سازی در سال ۱۹۴۳ با استفاده از یک مدل منطقی توسط مک کلوت^۱ و والتر پیترز^۲ انجام شد که امروزه بلوک اصلی سازنده‌ی اکثر شبکه‌های عصبی مصنوعی است. این مدل فرضیه‌هایی در مورد عملکرد نرون‌ها ارائه می‌کرد اما محدودیت‌های تکنولوژی در آن زمان اجازه کار بیشتر به آنها را نداد. نه تنها نروفیزولوژیست‌ها، بلکه روانشناسان و مهندسان نیز در پیشرفت شبیه‌سازی شبکه‌های عصبی تاثیر داشتند.

در سال ۱۹۵۸ شبکه پرسپترون^۳ توسط روزنبلات^۴ معرفی گردید. پرسپترون دارای سه لایه می‌باشد که لایه میانی به عنوان لایه پیوند شناخته می‌شود. سیستم دیگر مدل آدالاین می‌باشد که در سال ۱۹۶۰ توسط ویدرو^۵ و هاف^۶ به وجود آمد که اولین شبکه‌های عصبی به کار گرفته شده در مسائل واقعی بوده‌اند [۳۳].

در سال ۱۹۶۹ مینسکی^۷ و پاپرت^۸ کتابی نوشتند که در آن محدودیت‌های سیستم تک لایه و چند لایه پرسپترون را تشریح می‌کردند. نتیجه‌ی این کتاب، پیش‌داوری و قطع سرمایه‌گذاری برای تحقیقات در زمینه شبیه‌سازی شبکه‌های عصبی بود. آنها با طرح این که پرسپترون قادر به حل هیچ مسئله‌ی جالبی نمی‌باشد تحقیقات در این زمینه را برای مدت چندین سال متوقف کردند [۳۴].

با وجودی که اشتیاق عمومی و سرمایه‌گذاری موجود به حداقل رسیده بود، برخی محققان تحقیقات خود را برای ساخت ماشین‌هایی که توانایی حل مسائلی از قبیل تشخیص الگو را داشته باشند ادامه دادند. پیشرفت‌های شبکه عصبی تا دهه‌ی هشتاد قرن بیستم ادامه یافت. با رشد

1-Waren Mc Culloch
4-Frank Rosenblat
7-Minsky

2-Walter Pitts
5-Bernurd Widrow
8-Papert

3-perceptron
6-Ted Hoff

تکنولوژی میکروپرسورها در دهه‌ی هشتاد، ایده‌ی به کارگیری شبکه‌ها در زمینه‌های جدیدی مطرح شد.

در سال ۱۹۸۲ هاپفیلد^۱ با معرفی شبکه‌های چند لایه و الگوریتم یادگیری دارای بازخورد^۲، راه‌حلی را برای حل مسائل غیرخطی ارائه کرد و سپس الگوریتم پس انتشار خطا در سال ۱۹۸۶ توسط دیوید راملهارت^۳ و جیمز مک‌کلند^۴ مطرح گردید. از آن زمان تاکنون، این زمینه‌ی علمی روند رشد و پیشرفت را ادامه داده است، که البته بیشتر این پیشرفت‌ها به ساختارهای نوین و روش‌های یادگیری جدید مربوط می‌شود [۳۳].

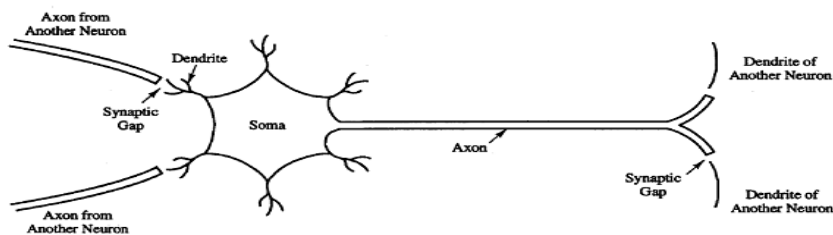
۲-۲ شبکه عصبی بیولوژیکی

نرون^۵ عنصر اصلی سیستم عصبی انسان است و به تنهایی مانند یک واحد پردازش منطقی عمل می‌کند. نحوه‌ی عملیات نرون بسیار پیچیده است و هنوز در سطح میکروسکوپی چندان شناخته شده نیست. اکثر نرون‌ها از سه قسمت اصلی تشکیل شده اند:

۱- بدنه سلول^۶

۲- دندریت^۷

۳- آکسون^۸



شکل (۲-۱): ساختمان یک نرون زیستی

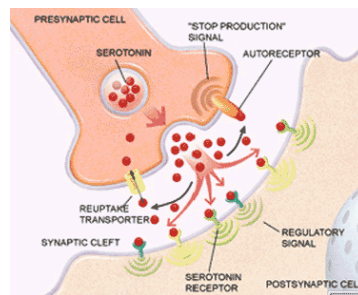
1-John Hopfield
4-James Mcland
7-Dendrite

2-Feedback
5-Neuron
8-Axon

3- David Rummelhart
6-Soma

دندریته‌ها شبکه‌هایی تشکیل یافته از فیبر سلولی هستند که دارای سطح نامنظم و شاخه‌های انشعابی بی‌شماری می‌باشند و به عنوان مناطق دریافت سیگنال الکتریکی عمل می‌کنند. دندریته‌ها سیگنال الکتریکی را به بدنه‌ی سلول منتقل می‌کنند. بدنه‌ی سلول انرژی لازم برای فعالیت نرون را فراهم می‌کند و هم بر روی سیگنال‌های دریافتی عمل می‌کند.

آکسون بر خلاف دندریته‌ها از سطحی هموارتر و تعداد شاخه‌های کمتری برخوردار می‌باشد. آکسون طول بیشتری دارد و سیگنال‌های دریافتی از هسته سلول را گرفته و به نرون‌های دیگر منتقل می‌کند. محل اتصال یک آکسون به دندریته‌های سلول دیگر را سیناپس^۱ و به فضای ما بین آکسون و دندریته‌ها، فضای سیناپسی می‌گویند. بنابراین پیام‌های عصبی یک طرفه حرکت می‌کنند. از دندریته‌ها به بدنه‌ی سلول و از آنجا به آکسون [۲۹].



شکل (۲-۲): نمایی از سیناپس

محافظت از نرون‌ها نیز توسط سلول‌هایی به نام گلیا^۲ انجام می‌گیرد. سلول‌های گلیا با احاطه کردن نرون‌ها باعث ثابت ماندن آنها در جای خودشان می‌شوند. همچنین وظیفه‌ی رساندن مواد غذایی به نرون و دور کردن مواد زائد حاصل از فعالیت نرون‌ها از آنها به عهده‌ی این سلول‌ها می‌باشد [۳۰].

1-Synapse
2-Glia

۲-۱-۲ چگونگی ایجاد و انتقال پیام عصبی

غشا سلول عصبی، انجام تبادلات یونی بمنظور ایجاد پیام عصبی را کنترل می‌کنند. غشا نرون در حالت سکون^۱ نسبت به ورود یون‌های سدیم (Na^+) تقریباً نفوذناپذیر است، به همین دلیل تراکم بارهای سدیم در خارج غشا نسبت به داخل بسیار بیشتر است، برعکس غشا سلول در چنین حالتی نسبت به خروج یون‌های پتاسیم و کلرید نفوذناپذیر است و تراکم پتاسیم در داخل بیشتر از خارج غشا می‌باشد. با توجه به این که از قبل بین یون‌های پتاسیم در داخل سلول و یون‌های سدیم در خارج آن تعادل برقرار است، این جابجایی‌ها موجب قطبی شدن سلول می‌شود (در مجموع تعداد بارهای مثبت در خارج غشا از داخل آن بیشتر است). این عدم توازن الکتریکی در اطراف غشای سلولی به پتانسیل سکون موسوم است. حال اگر یک عامل محرک سلول را تحریک کند، غشا نرون در محل تحریک نسبت به یون سدیم نفوذپذیر می‌شود. با ورود یون‌های سدیم به داخل غشا، پتانسیل غشا معکوس می‌شود یعنی داخل نسبت به بیرون مثبت می‌گردد. در این حالت یک موج عصبی ایجاد می‌شود که آن را پتانسیل تحریک^۲ می‌نامند. بعد از عبور موج پتانسیل تحریک، غشا در مدتی حدود چند هزارم ثانیه به حالت اولیه خود (پتانسیل سکون) باز می‌گردد، این عمل که به غیر قطبی شدن موسوم است. با توقف ورود یون‌های سدیم و خروج یون‌های پتاسیم صورت می‌گیرد. پتانسیل تحریک به صورت یک موج الکتریکی از محل تحریک به قسمت‌های دیگر غشا هدایت می‌شود.

کمترین شدت محرکی که باعث پتانسیل تحریک در غشا می‌شود را آستانه‌ی^۳ تحریک می‌گویند، در این حالت پتانسیل غشا یعنی ولتاژ پتانسیل تحریک حداکثر است و با اضافه کردن شدت محرک به مقدار آن اضافه نخواهد شد. این پدیده را قانون همه یا هیچ می‌گویند. یعنی غشا یا به محرک پاسخ می‌دهد یا نمی‌دهد و اگر پاسخ دهد این پاسخ حداکثر خواهد بود.

1-Resting
2-Action potential
3-Thershold

با توجه به این که هدایت پیام عصبی به دلیل وجود سیناپس‌ها و نحوه‌ی انتقال سیناپسی یک طرفه است، از پایانه‌های آکسون موادی به نام انتقال‌دهنده‌ی شیمیایی به درون فضای سیناپسی ریخته می‌شود. این انتقال دهنده‌ها ساختارهای ملکولی متفاوت دارند و پیام‌های مختلفی را مخابره می‌کنند، به طور مثال برخی از این مواد باعث باز شدن کانال‌های سدیم در نرون پس‌سیناپسی و هدایت پیام عصبی می‌شوند، که به آن سیناپس تشدید^۱ می‌گویند، اما در برخی دیگر انتقال‌دهنده‌ی شیمیایی که از انتهای عصبی نرون ترشح می‌شود سبب غیر فعال شدن نرون پس‌سیناپسی شده که به آنها سیناپس بازدارنده^۲ می‌گویند.

اکنون با اطلاعات مختصری که راجع به ساختار مغز داریم، بینیم مغز چگونه می‌آموزد؟ یادگیری مغز بصورت تطبیقی است یعنی یادگیری هنگامی صورت می‌گیرد که شدت اتصال یک سلول عصبی به سلول دیگر در محل سیناپس‌ها، تغییر می‌کند. البته بخشی از ساختار عصبی مغز هنگام تولد ایجاد می‌شود ولی بقیه در خلال یادگیری شکل می‌گیرد یعنی بعضی از ارتباطات از بین رفته و به جای آنها اتصالات جدیدی به وجود می‌آیند. اگرچه این تغییر و تحول‌ها در مراحل ابتدایی زندگی محسوس‌تر است اما در سرتاسر زندگی ادامه دارد و مرتباً در اثر یادگیری تغییراتی در سیناپس‌ها رخ می‌دهد. بنابراین، افزودن محفوظات جدید به مغز با اصلاح قدرت سیناپس‌های فعلی صورت می‌گیرد. مثلاً اگر بخواهید چهره‌ی یک دوست جدید را به خاطر بسپارید، باید یک فرایند یادگیری با تغییراتی در سیناپس‌های مختلف صورت گیرد [۳۰].

۲-۲-۲ از سلول‌های عصبی انسانی تا سلول‌های عصبی مصنوعی

شبکه‌های عصبی مصنوعی در حقیقت الگوهای ریاضی هستند که از ساختار مغز انسان و چگونگی عملکرد آن الهام گرفته‌اند. هر شبکه‌ی عصبی از مجموعه‌ای از سلول‌های عصبی (نرون)

1-Excitatory
2-Inhibitory

ساخته شده است که از طریق ارتباطاتی به هم وصل شده‌اند (سیناپس‌ها). این سلول‌های عصبی که واحدهای پردازش شبکه هستند بصورت موازی به یکدیگر متصل شده‌اند و با هم برای حل یک مسئله خاص کار می‌کنند [۳۵]. در این شبکه‌ها نیز مثل مغز، یادگیری از طریق مثال انجام می‌گیرد. مثال‌ها باید به دقت انتخاب شوند در غیر این صورت زمان مفید تلف شده و یا حتی بدتر از این، شبکه درست کار نمی‌کند. مهمترین امتیاز شبکه این است که خودش کشف می‌کند که چگونه مسئله را حل کند و دیگر مثل کامپیوترهای قدیمی از یک مسیر الگوریتمی شناخته شده برای حل مسئله استفاده نمی‌کند.

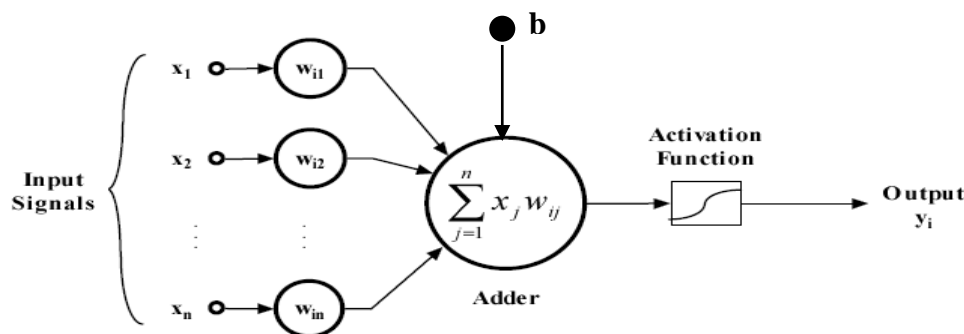
۳-۲ شبکه‌های عصبی در مقابل کامپیوترهای معمولی

شبکه‌های عصبی نسبت به کامپیوترهای معمولی مسیره‌های متفاوتی را برای حل مسئله طی می‌کنند. کامپیوترهای معمولی یک مسیر الگوریتمی را استفاده می‌کنند به این معنی که کامپیوتر یک مجموعه از دستور العمل‌ها را به قصد حل مسئله پی می‌گیرد و بدون شناختن قدم‌های مخصوص برای طی کردن مسیر، کامپیوتر قادر به حل مسئله نیست. این حقیقت قابلیت حل مسئله‌ی کامپیوترهای معمولی را به مسائلی محدود می‌کند که ما قادر به درک آنها هستیم و می‌دانیم چگونه حل می‌شوند. اما اگر کامپیوترها می‌توانستند کارهایی را انجام دهند که ما دقیقاً نمی‌دانیم چگونه آنها را حل کنیم، خیلی پر فایده‌تر بود. شبکه‌های عصبی برای پاسخ به این نیاز به وجود آمدند.

شبکه‌های عصبی و کامپیوترهای معمولی با هم در حال رقابت نیستند بلکه کامل‌کننده‌ی یکدیگرند. وظایفی وجود دارد که بیشتر مناسب روش‌های الگوریتمی هستند مثل محاسبات ریاضی و وظایفی وجود دارند که بیشتر مناسب شبکه‌های عصبی هستند. حتی فراتر از این مسائلی وجود دارد که نیازمند به سیستمی است که از ترکیب هر دو روش به دست می‌آید (به طور معمول کامپیوترهای معمولی برای نظارت بر شبکه عصبی به کار گرفته می‌شوند) به این قصد که بیشترین کارایی را به دست آورند. شبکه‌های عصبی معجزه نمی‌کنند اما اگر خردمندان به کار گرفته شوند نتایج شگفت‌آوری را خلق می‌کنند [۳۴].

۲-۴ ساختار شبکه عصبی مصنوعی

مهم‌ترین جزء تشکیل دهنده‌ی هر شبکه عصبی، نرون می‌باشد. نرون که یک واحد محاسباتی - پردازشی است در حقیقت مدل ساده شده‌ای از نرون طبیعی است. هر کدام از نرون‌ها عملکرد ساده‌ای دارند، این عملکرد ساده عبارت است از دریافت ورودی‌ها، وزن‌دهی به آن‌ها و سپس محاسبه‌ی مجموع آن‌ها به عنوان سیگنال تحریک در مرحله‌ی اول و سپس اعمال تابعی به عنوان تابع تبدیل^۱ بر روی آن و در نهایت ساختن یک خروجی در مرحله‌ی دوم [۲۸]. در متون فنی برای نمایش مدل ساده‌ای از نرون محاسباتی از شکلی مشابه شکل (۲-۳) استفاده می‌کنند. بیان رابطه‌ی ورودی‌ها و خروجی‌های شبکه در یک مدل ریاضی مطابق فرمولاسیون شکل (۲-۳) پرسپترون^۲ نامیده می‌شود.



شکل (۲-۳): ساختمان یک نرون محاسباتی

در این شکل از علامت x برای نشان دادن سیگنال ورودی استفاده شده است. هر یک از سیگنال‌های ورودی x_j پس از وزن‌دهی به اندازه‌ی وزن آماری w_{ij} ، به صورت یک سیگنال الکتریکی با اندازه $x_j w_{ij}$ وارد نرون می‌شود. اگر به شکل دقت کنید در هسته سلول عصبی، سیگنال ورودی با سیگنال دیگری به اندازه b جمع شده است که این سیگنال b ، خود به معنای سیگنالی به اندازه واحد است که در پیش‌قدر^۳ ضرب شده است. این پیش‌قدر شبیه یک وزن بوده با این تفاوت که روی ورودی ثابت یک

1-Transfer function
2-Perceptron
3-Bais

عمل می‌کند و مزیت آن افزودن یک متغیر اضافی به شبکه است. از این رو شبکه‌ای که پیش‌قدر دارد قوی‌تر از شبکه‌ی فاقد پیش‌قدر می‌باشد. به علاوه، یک نرون بدون پیش‌قدر در اثر ورودی صفر، خروجی را صفر می‌دهد که این حالت مطلوب نیست و با اعمال پیش‌قدر برطرف می‌شود.

اگر هر ورودی را به عنوان یک عضو از بردار ورودی X و وزن مربوط به هر یک از آنها را به عنوان یک عضو از ماتریس وزن‌ها W در نظر بگیریم می‌بینیم مجموع حاصل، یعنی سیگنال $XW+b$ سیگنال ورودی نرون را به وجود می‌آورد.

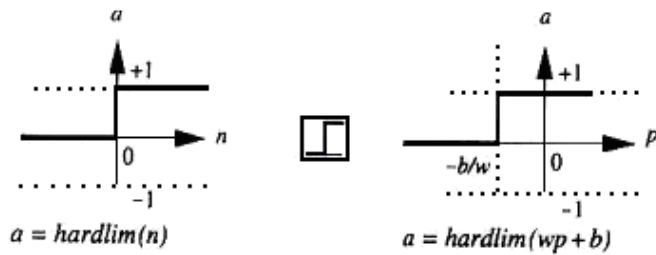
$$n = WX+b = w_{i,1}x_1 + w_{i,2}x_2 + \dots + w_{i,n}x_n + b \quad (1-2)$$

سپس این سیگنال قبل از خارج شدن از سلول تحت تابع انتقال قرار می‌گیرد و خروجی نرون، y ، ایجاد می‌شود [۳۰].

$$y = f(n) = f(WX+b) \quad (2-2)$$

توابع انتقال مورد استفاده در شبکه‌های عصبی می‌توانند بر حسب کاربردهای توابع متفاوتی باشند. در برخی از کاربردها، پاسخ مسائل از نوع دودویی است یعنی مسئله به گونه‌ای است که خروجی شبکه باید چیزی مانند آری یا نه باشد. در این حالت باید ورودی‌های دنیای واقعی به مقادیر گسسته تبدیل شوند. در چنین کاربردهایی، روش حل مسئله نمی‌تواند صرفاً بر جمع جبری سیگنال‌های ورودی تکیه نماید. در این کاربردها، ویژگی خواسته شده‌ی فوق، در تابع انتقال گنجانیده می‌شود. مثلاً اگر قرار باشد خروجی تابع فقط یکی از مقادیر صفر یا یک را شامل شود، از تابع آستانه‌ای حدی^۱ استفاده می‌شود. در این حالت اگر ورودی تابع کوچکتر از صفر باشد، خروجی این تابع صفر و اگر ورودی مساوی یا بزرگتر از صفر باشد، خروجی این تابع یک خواهد بود. شکل (۲-۴) اثر تابع آستانه‌ای حدی را بر روی یک نرون نشان می‌دهد [۳۰].

در گروه دیگری از مسائلی که حل آنها به شبکه عصبی واگذار می‌شود خروجی شبکه‌ی عصبی الزاماً بین مقادیر معلوم و شناخته شده واقع نمی‌شود. مسائلی از نوع شناسایی الگوهای تصویری، از چنین مواردی محسوب می‌شوند. شبکه‌های عصبی در این موارد، باید به گونه‌ای باشند که

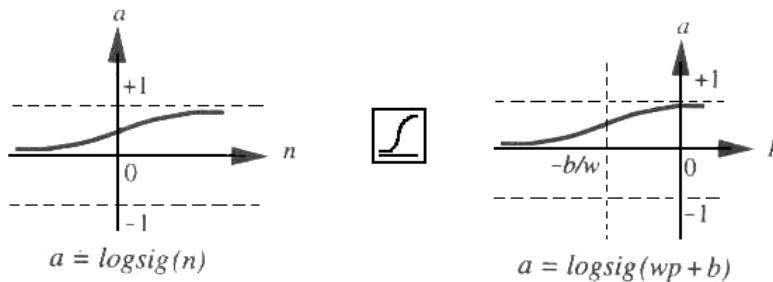


شکل (۲-۴): تابع محرک آستانه‌ای حدی و اثر آن روی ورودی نرون

قابلیت تولید مجموعه‌ای نامتناهی از پاسخ‌ها را داشته باشند. رفتار حرکتی ربات‌ها، نمونه‌ای از هوشی است که چنین شبکه‌های عصبی می‌توانند فراهم آورند. اما در این شبکه‌ها نیز لازم است که خروجی بین مقادیر مشخص محدود شده باشد [۳۶]. یک نمونه از توابعی که در این حالت به کار برده می‌شود، تابع محرک سیگموئید^۱ است:

$$F(u) = \frac{1}{1 + e^{-cu}} \quad c > 0 \quad (۳-۲)$$

در شکل (۲-۵) اثر این تابع بر روی نرون نشان داده شده است.

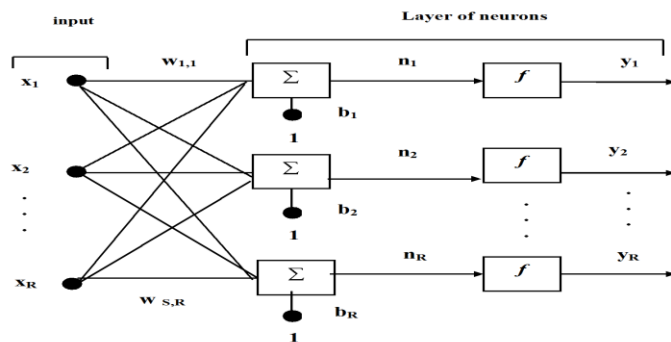


شکل (۲-۵): تابع محرک سیگموئید و اثر آن روی ورودی نرون

تابع سیگموئید ورودی‌های متعددی از $-\infty$ تا $+\infty$ را می‌تواند دریافت کند ولی مقدار خروجی‌ها دیگر تنها صفر و یک نیست، بلکه بین صفر و یک تغییر می‌کند. در این تابع با کوچک کردن c ، ناحیه خطی کوچک‌تر و شیب خط افزایش می‌یابد. تابع سیگموئید به علت مشتق پذیر بودن در شبکه‌های چند لایه‌ای که از الگوریتم پس انتشار خطا استفاده می‌کنند کاربرد فراوانی دارد [۳۰].

۵-۲ تقسیم بندی لایه‌ای شبکه‌های عصبی مصنوعی

در این تقسیم‌بندی شبکه‌های عصبی مصنوعی، به دو صورت تک لایه و چند لایه تفکیک می‌شوند. در شبکه‌های تک لایه، نرون‌های ورودی و خروجی یکی هستند بنابراین به تعداد خروجی، نرون در شبکه وجود دارد که همگی در یک لایه و به موازات هم کار می‌کنند. شکل (۲-۶) ساختار یک شبکه‌ی تک لایه را نشان می‌دهد.



شکل (۲-۶): ساختار یک شبکه‌ی تک لایه پیشرو

در این نوع شبکه‌ها یک عضو از بردار ورودی \mathbf{X} به تمام نرون‌ها متصل است و یک ستون از ماتریس وزن‌ها را می‌سازد. همچنین هر نرون دارای مقدار پیش قدر b_i خواهد بود. بنابراین ماتریس وزن‌ها چنین است:

$$W = \begin{bmatrix} W_{11} & W_{12} & \cdot & \cdot & \cdot & W_{1R} \\ W_{21} & W_{22} & \cdot & \cdot & \cdot & W_{2R} \\ \cdot & \cdot & & & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & & & \cdot \\ W_{S1} & W_{S2} & \cdot & \cdot & \cdot & W_{SR} \end{bmatrix}_{S \times R} \quad (۲-۴)$$

و بردار پیش قدر عبارت است از:

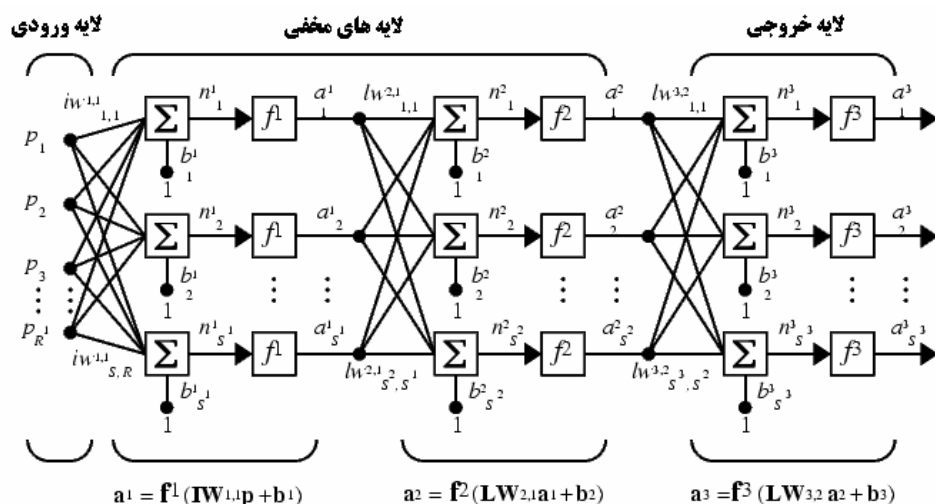
$$b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ b_s \end{bmatrix}_{S \times 1} \quad (5-2)$$

البته هر نرون یک ورودی خالص n و یک خروجی y مخصوص به خود دارد که مقادیر آنها برای هر نرون طبق روابط (۱-۲) و (۲-۲) تغییر می‌کنند. در مسائل مختلف، ماتریس‌های W و b تغییر می‌کنند تا مقادیر بهینه‌ی شبکه به دست آید [۳۰].

گاهی دینامیک و قوانین شبکه‌های عصبی آنقدر پیچیده است که به پارامترهای قابل تنظیم بیشتر نیاز است، در این موارد از شبکه‌های چند لایه استفاده می‌شود. شبکه‌های چند لایه شامل لایه ورودی^۱، لایه خروجی^۲ و یک یا چند لایه پنهان^۳ یا لایه میانی می‌باشند. در این توپولوژی، نرون‌ها علاوه بر این که در لایه خود به شکل محدودی به یکدیگر اتصال داده شده‌اند، از طریق اتصال بین لایه‌ها نیز با یکدیگر ارتباط دارند. در این حالت گروهی از نرون‌ها از طریق ورودی‌های خود با جهان واقعی ارتباط دارند، گروهی دیگر از نرون‌ها نیز از طریق خروجی‌های خود، جهان خارج را می‌سازند که لایه‌ی خروجی نام دارند و بقیه‌ی نرون‌ها که از دید پنهان هستند لایه‌های پنهان را تشکیل می‌دهند [۳۷]. در یک شبکه‌ی چند لایه هر لایه، ماتریس وزن، بردار پیش قدر، بردار ورودی خالص و بردار خروجی مخصوص به خود را دارد، که برای مشخص کردن لایه‌های مختلف از بالانویس^۴ استفاده می‌شود. در شکل (۷-۲) یک شبکه سه لایه‌ای نشان داده شده است. [۳۰].

همانطور که قبلاً توضیح داده شد، در شبکه‌های تک لایه باید مقادیر W و b بهینه شوند، اما در

1-Input layer
2-Output layer
3-Hidden layer
4-Superscript



شکل (۷-۲): ساختار یک شبکه سه لایه.

شبکه‌های چند لایه علاوه بر آنها باید تعداد لایه‌های مخفی و تعداد نرون‌ها در لایه مخفی نیز توسط کاربر بهینه شوند. که همین امر باعث افزایش حجم محاسبات و در نتیجه افزایش مدت زمان آموزش خواهد شد.

شبکه‌های چند لایه قدرتمندتر از شبکه‌های تک لایه هستند. به عنوان مثال شبکه‌های عصبی دو لایه که در لایه اول تابع سیگموئید و در لایه دوم، تابع خطی داشته باشند، قادرند هر تابعی را با دقت دلخواه تقریب بزنند در صورتی که شبکه‌های عصبی تک لایه قادر به چنین کاری نیستند [۳۰]. نکته‌ای را که باید در مورد تعداد نرون‌های لایه مخفی باید در نظر داشته باشیم این است که اگر تعداد نرون‌ها بسیار کم انتخاب شوند، چون تعداد پارامترهای شبکه اندک است، قدرت تجزیه و تحلیل شبکه و در نتیجه دقت پیش‌گویی شبکه کاهش می‌یابد و اگر تعداد نرون‌های لایه مخفی زیاد انتخاب شود، باعث می‌شود که شبکه بهترین تطبیق با سری داده‌های آموزش را به دست آورد، در حالی که باعث عدم توانایی شبکه در تطبیق مناسب با داده‌های سری پیش‌بینی می‌شود [۳۸].

۶-۲ نحوه پردازش اطلاعات در شبکه‌های عصبی مصنوعی

نحوه پردازش اطلاعات در شبکه‌های عصبی مصنوعی به دو صورت است:

۱- شبکه‌های پیش‌خور^۱

۲- شبکه‌های پس‌خور^۲

در شبکه‌های پیش‌خور، اتصالات بین نرونی به گونه‌ای است که هر نرون لایه میانی، می‌تواند ورودی خود را از هر یک از نرون‌های لایه‌های قبلی خود دریافت کند اما هیچ سیگنالی از نرون به خودش یا به نرون لایه‌ی قبل برنمی‌گردد. بدین ترتیب در یک شبکه عصبی، سیگنال‌ها به تدریج از یک لایه نرونی به لایه‌های بالاتر حرکت می‌کنند و در نهایت به لایه آخر یا خروجی شبکه می‌رسند. نوع دیگری از ارتباط بین نرونی در شبکه‌های عصبی ارتباط بازخوردی است که در شبکه‌های پس‌خور وجود دارد. در این نوع از ارتباطات، خروجی یک نرون به همان نرون یا نرون‌های همان لایه یا به نرون‌های لایه‌ی قبلی اتصال داده می‌شود. ارتباطات بین نرونی در شبکه‌های عصبی از اهمیت بسیار زیادی برخوردار هستند و به نوعی قدرت یک شبکه عصبی را تعیین می‌کنند [۳۷].

۲-۷ آموزش شبکه عصبی

شبکه‌های عصبی می‌توانند بر اساس طراحی خود، سیگنال‌های ورودی را پردازش کنند و به سیگنال‌های خروجی مورد نظر تبدیل نمایند. به طور معمول پس از آنکه شبکه‌های عصبی طراحی و پیاده‌سازی شدند، باید پارامترهای W و b به ازای مجموعه‌هایی از سیگنال‌های ورودی، به گونه‌ای تنظیم شوند که سیگنال‌های خروجی شبکه خروجی مطلوب را تشکیل دهند. چنین فرایندی را آموزش شبکه عصبی می‌نامند.

به طور کلی برای آموزش شبکه دو روش وجود دارد:

۲- یادگیری بدون ناظر^۴

۱- یادگیری با ناظر^۳

-
- 1-Feed forward
 - 2-Feed back
 - 3-Supervised learning
 - 4- Unsupervised learning

روش یادگیری با ناظر، شامل مراحل است که در آن سیستم از طریق در دست داشتن جواب واقعی آموزش می‌بیند. اما در روش بدون ناظر، شبکه عصبی باید خود سامان ده باشد و بدون در دست داشتن جواب واقعی، بتواند کار آموزش را انجام دهد. در این نوع یادگیری، شبکه می‌آموزد که الگوهای ورودی را به تعداد متناهی از گروه‌ها تقسیم‌بندی کند و عبارتی عمل خوشه‌بندی را انجام می‌دهد. باید توجه داشت در این حالت فرد طراح است که مقصد و هدف نهایی یعنی چیزی را که باید به آن رسید مشخص می‌کند.

رفتار سیستم‌های یادگیر توسط الگوریتم‌های بازگشتی بیان می‌شود که به آنها قوانین یادگیری می‌گویند. انواع مختلفی از قوانین یادگیری وجود دارد که یادگیری عملکردی^۱ یکی از آنهاست. قانون یادگیری در اینجا روندی است که توسط آن ماتریس وزن‌ها و بردارهای پیش قدر شبکه عصبی به نحوی تنظیم می‌شوند که عملکرد شبکه بهینه شود. منظور از بهینه شدن عملکرد شبکه، حداقل شدن خطایی است که بین مقادیر تجربی و پاسخ شبکه وجود دارد. برای بهینه‌سازی عملکرد، شبکه باید پارامترهایش را به گونه‌ای تنظیم کند که شاخص عملکرد^۲ کمترین مقدار را داشته باشد. شاخص عملکرد، معیاری است که به طور کمی، عملکرد شبکه را بیان می‌کند و رابطه معکوسی با نحوه عملکرد شبکه دارد، یعنی هر چه مقدار این شاخص کوچکتر باشد، عملکرد شبکه بهتر خواهد بود و بالعکس. به شاخص عملکرد اصطلاحاً تابع هدف یا تابع خطا می‌گویند و در بیشتر الگوریتم‌ها، متوسط مربعات خطا^۳ (MSE) می‌باشد [۳۰].

۲-۸ معرفی روش‌های مختلف بهینه‌سازی عملکرد شبکه عصبی

در تمام الگوریتم‌های بهینه‌سازی یک مقدار اولیه برای تابع حدس زده می‌شود و بعد این مقدار اولیه طی مراحل که از قاعده‌ی زیر پیروی می‌کند بهینه می‌شود.

1-Performance learning
2-Performance
3-Mean square error

$$X_{K+1} = X_K + \alpha P_K \quad (6-2)$$

که در آن X_K تخمین نقطه مینیمم تابع در مرحله K ام است و X_{K+1} حدس مرحله‌ی بعدی نقطه مینیمم تابع می‌باشد. P_K نیز بردار جستجو می‌باشد بدین معنی که از روی آن، تخمین مرحله‌ی بعد به دست می‌آید. α یک مقدار اسکالر بین صفر و یک بوده و سرعت یادگیری^۱ نامیده می‌شود. سرعت یادگیری، طول قدم در هر تکرار را در هر مسیر P_K تعیین می‌کند. انتخاب P_K و α روش‌های مختلف مینیمم سازی را از هم متمایز می‌کند که به بعضی از آنها در ادامه اشاره خواهیم نمود.

۱-۸-۲ روش نزول گرادینانی^۲

الگوریتم نزول گرادینانی یا سریع‌ترین نزول^۳ یکی از ابتدایی‌ترین تکنیک‌ها و در عین حال کاملاً

مؤثر در آموزش شبکه می‌باشد.

تابع n متغیره $F(x)$ را در نظر بگیرید:

$$F(x) = F(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (7-2)$$

بردار گرادینان برای این تابع به صورت زیر تعریف خواهد شد:

$$\nabla F(x) = \left[\frac{\partial}{\partial x_1} F(x) \quad \frac{\partial}{\partial x_2} F(x) \quad \dots \quad \frac{\partial}{\partial x_n} F(x) \right]_{n \times 1}^T \quad (8-2)$$

بالانویس T ، ترانسپوز^۴ ماتریس می‌گویند و باعث جابجایی سطرها و ستون‌های ماتریس می‌شود.

گرادینان تابع خاصیت جالبی دارد که کاربرد منحصر به فردی برای آن به وجود آورده است. برای

استفاده از این خاصیت یک تابع عملکرد یا تابع خطای E انتخاب می‌شود که این تابع بیانگر اختلاف

1-Learning rate

2-Steepest descent algorithm

3- Gradient descent algorithm

4-Transpose

بین مقادیر واقعی و پاسخ شبکه است. اگر E تابع عملکرد یا همان تابع خطا شبکه باشد گرادیان آن به صورت محاسبه خواهد شد:

$$g_k^T = \nabla E(W)^T \Big|_{W=W_k} = \left[\frac{\partial}{\partial w_1} E(W) \quad \frac{\partial}{\partial w_2} E(W) \quad \dots \quad \frac{\partial}{\partial w_n} E(W) \right]^T \Big|_{W=W_k} \quad (9-2)$$

که برداری است که مولفه‌هایش پارامترهای شبکه هستند. در این حالت باید این نکته در نظر گرفته شود که تابع خطا به گونه‌ای انتخاب شود که نسبت به تک تک پارامترهای شبکه مشتق پذیر باشد. از طرف دیگر، زمانی که حدس اولیه از نقطه مینیمم را با استفاده از رابطه بازگشتی (۶-۲) بهبود می‌یابد، باید تابع خطا در هر تکرار کاهش یابد یعنی:

$$E(W_{k+1}) < E(W_k) \quad (10-2)$$

بسط تیلور مرتبه‌ی اول تابع $E(W)$ حول نقطه‌ی قبلی یعنی W_k برابر است با:

$$E(W_{k+1}) = E(W_k) + \nabla E(W)^T \Big|_{W=W_k} \Delta W_k \quad (11-2)$$

برای اینکه رابطه (۱۰-۲) برقرار باشد، بایستی داشته باشیم:

$$\nabla E(W)^T \Big|_{W=W_k} \Delta W_k = g_k^T \Delta W_k < 0 \quad (12-2)$$

اگر رابطه (۶-۲) را به صورت زیر بازنویسی کنیم:

$$W_{k+1} = W_k + \alpha p_k \implies \Delta W_k = \alpha p_k \quad (13-2)$$

با قرار دادن رابطه (۱۳-۲) در (۱۲-۲) به دست می‌آید:

$$\alpha \Delta E(W)_k = \alpha g_k^T p_k < 0 \quad (14-2)$$

و چون ضریب یادگیری، α یک مقدار مثبت است، در نتیجه باید داشته باشیم:

$$g_k^T p_k < 0 \quad (15-2)$$

نامساوی فوق جهت نزول تابع $E(W)$ را تعریف می‌کند. مقدار تابع E اگر به اندازه کافی در مسیر P_k حرکت کنیم بایستی کاهش یابد. اینجا این سوال مطرح می‌شود که مسیری که منجر به بیشترین کاهش می‌شود کدام است؟ به عبارتی کدامین P_k منجر به بیشترین کاهش تابع E می‌شود؟ در

حقیقت این زمانی رخ می‌دهد که $g_k^T P_k$ بیشترین مقدار منفی را داشته باشد چون عبارت (۲-۱۵) را می‌توان به این صورت نوشت:

$$g_k^T p_k = \|g_k\| \|p_k\| \cos \theta_k \quad (۲-۱۶)$$

اگر بردارهای جستجو و گرادیان ثابت باشند و فقط θ_k تغییر کند، تابع بیشترین تنزل را در $\theta_k = \pi$ خواهد داشت یعنی باید بردار جستجو در خلاف جهت بردار گرادیان انتخاب شود:

$$P_k = -g_k \quad (۲-۱۷)$$

خاصیت جالب گرادیان تابع که قبلاً به آن اشاره شد همین است. طبق رابطه (۲-۱۷) اگر در خلاف جهت گرادیان تابع حرکت کنیم تابع با بیشترین سرعت کاهش می‌یابد. بنابراین با استفاده از رابطه (۲-۱۷) تغییر وزن‌های شبکه به گونه‌ای صورت می‌گیرد که باعث مینیمم شدن تابع عملکرد خطا می‌شود. با قرار دادن رابطه (۲-۱۷) در (۲-۱۳) می‌توان الگوریتم سریع‌ترین نزول را چنین نوشت [۳۸]:

$$W_{k+1} = W_k - \alpha g_k = W_k - \alpha \nabla E(W) \Big|_{W=W_k} \quad (۲-۱۸)$$

یکی از معایب روش سریع‌ترین نزول این است که ممکن است تابع خطا در یک کمینه‌ی محلی گرفتار شود. در این حالت شبکه در یک جواب پایدار متوقف شده و خروجی درست را نمی‌دهد [۳۰]. یکی دیگر از معایب این روش این است که اگر α را کوچک انتخاب کنیم باعث افزایش زمان آموزش شبکه می‌شود و اگر سرعت یادگیری بزرگ انتخاب شود باعث نوسانات دائم و پرش متوالی حول نقطه‌ی مینیمم می‌شود زیرا سرعت یادگیری بالا باعث تغییرات شدید در پارامترهای شبکه شده و تابع عملکرد را دچار نوسان می‌کند [۳۸]. یک راه حل مناسب برای آنکه α بزرگ انتخاب شود و ناپایداری هم رخ ندهد استفاده از ترم ممنتوم است به این معنی که ضریبی از وزن‌های مرحله قبل به مرحله فعلی افزوده می‌شود:

$$\Delta W_k^{new} = -\alpha \nabla E(W) \Big|_{W=W_k} + \eta \Delta W_k^{old} \quad (۲-۱۹)$$

که η ممتنم است. طبق این رابطه در دور $(k+1)$ ام به جای $-\alpha \nabla E(W)|_{W=W_k}$ در رابطه‌ی (۲-۱۸) از ΔW_k^{new} به عنوان تغییر وزن‌ها استفاده می‌شود در این حالت با وجود انتخاب مقادیر بزرگ α ، شبکه پایدار خواهد بود و از دام کمینه‌های محلی رها خواهد شد [۳۰].

۲-۸-۲ الگوریتم پس انتشار خطا^۱

این الگوریتم در اصل یک الگوریتم سریع‌ترین نزول با شاخص عملکرد MSE می‌باشد که برای آموزش شبکه‌های چند لایه با تابع محرک غیرخطی، به کار می‌رود. در این روش ابتدا وزن‌های شبکه به صورت تصادفی انتخاب می‌شوند، ورودی‌ها با این وزن‌های تصادفی به شبکه اعمال شده و خروجی شبکه محاسبه می‌گردد. سپس مقدار تابع خطا محاسبه می‌گردد. برای مینیمم کردن تابع خطا، خطای خروجی شبکه به عقب و از یک لایه به لایه پیشین آن انتشار می‌یابد و به همین دلیل اصطلاح پس انتشار برای این الگوریتم به کار می‌رود. ضرایب وزنی هر واحد جداگانه تنظیم شده و بدین صورت میزان خطا کاهش می‌یابد. با این روش می‌توان با انتشار خطا به عقب ضرایب وزنی تمام لایه‌ها را به درستی تنظیم نمود و شبکه را به خوبی آموزش داد [۳۹].

۳-۸-۲ روش‌های نوین آموزش شبکه

اساس کار در روش‌های نوین آموزش، به کارگیری بسط تیلور مرتبه‌ی دوم تابع عملکرد به جای گرادیان تابع است. از معروف‌ترین روش‌ها می‌توان به روش نیوتن اشاره کرد که این اساس کار روش‌های دیگری مثل روش لوبنبرگ-مارکوارت^۲ می‌باشد.

1-Error back propagation algorithm
2- Levenberg-Marquardt

از خصوصیات روش لونبرگ - مارکوارت سرعت همگرایی فوق‌العاده آن است که تا به امروز جزء سریع‌ترین الگوریتم‌های آموزشی شناخته شده است [۴۰].

۹-۲ شبکه عصبی موجک^۱

شبکه عصبی موجک (WNN) از تلفیق موجک^۲ با شبکه‌های عصبی به وجود آمده است. در این نوع از شبکه‌های عصبی مشکلات آموزشی که در پرسپترون چند لایه‌ای گفته شد وجود ندارد و به همین علت مورد توجه قرار می‌گیرند.

۱-۹-۲ موجک و تبدیل موجک

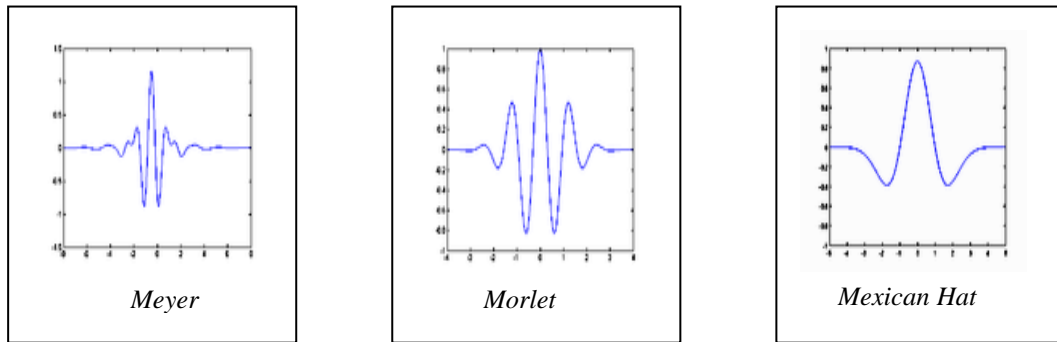
ایده‌ی نمایش یک تابع بر حسب مجموعه‌ی کاملی از توابع اولین بار توسط فوریه^۳، برای نمایش توابع به کار گرفته شد. فوریه نشان داد که یک تابع $f(t)$ را می‌توان به وسیله ترکیب خطی از توابع سینوسی و کسینوسی نمایش داد.

$$f(w) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t)e^{-j\omega t} dt \quad (2-28)$$

که در آن جمع روی حاصلضرب سیگنال اصلی $f(t)$ در تابع نمایی در همه‌ی زمان‌ها می‌باشد. در آنالیز موجک هم مانند تبدیل فوریه با بسط توابع سروکار داریم، ولی این بسط بر حسب موجک‌ها انجام می‌گیرد. موجک یک موج کوچک با انرژی معین است و به خاطر تمرکز انرژی در زمان و مکان دارای خصوصیت محلی سازی بسیار خوبی است. به طور مثال تبدیل فوریه یک پیک تیز دارای تعداد زیادی ضریب است، چرا که توابع پایه تبدیل فوریه، توابع سینوسی، کسینوسی هستند که دامنه‌ی آنها در کل بازه ثابت است. در حالی که توابع موجک تابعی هستند که بیشتر انرژی آنها در بازه کوچکی متمرکز شده و میانگین آن در این بازه صفر می‌شود و به سرعت میرا می‌گردد. این توابع را می‌توان در

1-Wavelet neural network
2-wavelet
3-Fourier

اثر دو عمل تغییر موقعیت^۱ و تغییر پهنا^۲ از موجک‌های مادر^۳ به وجود آورد. مشتقات مختلف تابع گوسین به عنوان تابع موجک مادر مورد استفاده قرار می‌گیرند. سه تابع موجک مادر معروف عبارتند از موجک کلاه مکزیکی^۴، مورلت^۵ و میر^۶ که در شکل (۸-۲) نشان داده شده‌اند [۴۳]:



شکل (۸-۲): موجک‌های معروف کلاه مکزیکی، مورلت و میر

مشابه تبدیل فوریه، هر تابع می‌تواند به طور منحصر به فردی روی توابع پایه‌ی موجک تصویر شده و به صورت یک ترکیب خطی از این توابع بیان شود. مجموعه ضرایب بسط که وزن توابع پایه‌ی موجک را نشان می‌دهد، تبدیل موجک تابع مورد نظر است. موجک مادری که در این پایان‌نامه در طراحی الگوریتم شبکه عصبی موجک مورد استفاده قرار گرفته است موجک مادر مورلت است که به صورت زیر بیان می‌شود [۴۴]:

$$h(t) = \cos(1.75t) \exp\left(\frac{-t^2}{2}\right) \quad (۲۹-۲)$$

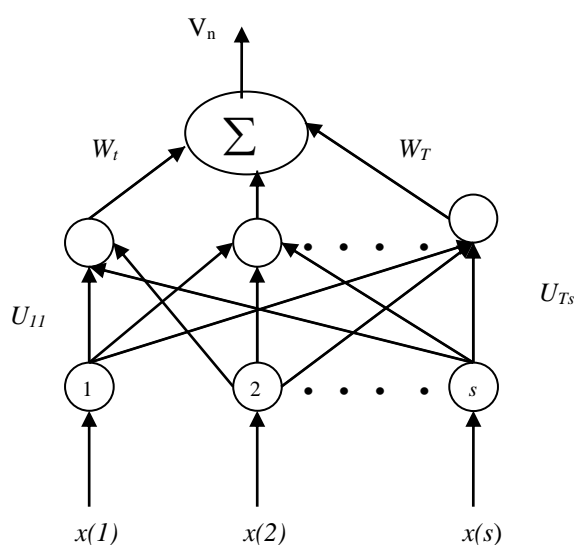
۲-۹-۲ الگوریتم شبکه عصبی موجک

ساختار شبکه عصبی موجک در شکل (۹-۲) نمایش داده شده است: همان‌طور که در این شکل

1-Translation
4-Mexican Hat

2-dilation
5-Morlet

3-Mother wavelet
6-Meyer



شکل (۲-۹): ساختار عمومی شبکه عصبی موجک

مشاهده می‌شود، این ساختار شبیه یک شبکه‌ی پرسپترون چند لایه‌ی است با این تفاوت که مقادیر پیش‌قدر مربوط به لایه‌های مخفی و خروجی حذف شده‌اند. به علاوه از تابع محرک موجک به جای تابع محرک سیگموئید استفاده شده است.

طراحی مدل به صورت زیر خلاصه می‌شود:

۱- در ابتدا، پارامتر پهنای (a_t) ، پارامتر موقعیت (b_t) و همچنین وزن‌های شبکه (u_{ii}) و W_t به صورت تصادفی از اعداد بین صفر و یک انتخاب می‌شوند.

۲- داده‌های $x_n(i)$ و مقدار خروجی‌های مربوط به آن V_n^T (بالاوند T برای نشان دادن خروجی واقعی بکار می‌رود) به شبکه وارد شوند. i می‌تواند از یک تا s تغییر کند که نشان دهنده‌ی تعداد نرون‌های ورودی است و n نشان‌دهنده‌ی m امین نمونه از داده‌های ورودی است

۳- خروجی m امین نمونه از سری آموزش به صورت زیر محاسبه می‌شود [۴۴]:

$$v_n = \sum_{t=1}^T w_t h \left(\frac{\sum_{i=1}^s u_{ii} x_n(i) - b_t}{a_t} \right) \quad (۳۰-۲)$$

که h تابع موجک مادر مورلت است که در معادله (۲۹-۲) معرفی شده است:

۴- تابع خطای شبکه به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N (V_n^T - V_n)^2 \quad (۳۱-۲)$$

۵- برای کاهش خطای شبکه از الگوریتم نزول گرادیانی همراه با ترم ممنتم استفاده می‌شود. برای این منظور مقدار عددی مشتق تابع خطا نسبت به پارامترهای شبکه W_t ، u_{ii} ، b_t و a_t طبق معادلات

(۳۲-۲) تا (۳۵-۲) بدست می‌آید:

$$\delta_{wt} = \frac{\partial E}{\partial w_t} = - \sum_{n=1}^N (v_n^T - v_n) h \left(\frac{\sum_{i=1}^s u_{ii} x_n(i) - b_t}{a_t} \right) \quad (۳۲-۲)$$

$$\delta_{at} = \frac{\partial E}{\partial a_t} = - \sum_{n=1}^N (v_n^T - v_n) w_t \frac{\partial h}{\partial a_t} \quad (۳۳-۲)$$

$$\delta_{bt} = \frac{\partial E}{\partial b_t} = - \sum_{n=1}^N (v_n^T - v_n) w_t \frac{\partial h}{\partial b_t} \quad (۳۴-۲)$$

$$\delta_{u_{ii}} = \frac{\partial E}{\partial u_{ii}} = - \sum_{n=1}^N (v_n^T - v_n) w_t \frac{\partial h}{\partial x'_n} x_n(i) \quad (۳۵-۲)$$

که در آن x'_n ، t'_n ، $\frac{\partial h}{\partial x'_n}$ ، $\frac{\partial h}{\partial a_t}$ و $\frac{\partial h}{\partial b_t}$ با استفاده از معادلات (۲-۳۶) تا (۲-۴۰) به دست می‌آیند:

$$x'_n = \sum_{i=1}^s u_{ii} x_n(i) \quad (۳۶-۲)$$

$$t'_n = \frac{(x'_n - b_t)}{a_t} \quad (۳۷-۲)$$

$$\frac{\partial h}{\partial x'_n} = -\cos(1.75t'_n) \exp\left(-\frac{t_n'^2}{2}\right) \frac{t'_n}{a_t} - 1.75 \sin(1.75t'_n) \exp\left(-\frac{t_n'^2}{2}\right) \frac{1}{a_t} \quad (۳۸-۲)$$

$$\frac{\partial h}{\partial a_t} = \cos(1.75t'_n) \exp\left(-\frac{t_n'^2}{2}\right) \frac{t'_n}{a_t} + 1.75 \sin(1.75t'_n) \exp\left(-\frac{t_n'^2}{2}\right) \frac{t'_n}{a_t} \quad (۳۹-۲)$$

$$\frac{\partial h}{\partial b_t} = \cos(1.75t'_n) \exp\left(-\frac{t_n'^2}{2}\right) \frac{t'_n}{a_t} + 1.75 \sin(1.75t'_n) \exp\left(-\frac{t_n'^2}{2}\right) \frac{1}{a_t} \quad (40-2)$$

۶- با استفاده از روابط (۴۱-۲) تا (۴۴-۲) مقادیر هر یک از پارامترها طبق الگوریتم نزول گرادیانی با ممتنم به صورت زیر تغییر داده می‌شوند تا در هر دور آموزش تابع خطا کاهش یابد:

$$\Delta w_t^{new} = -\eta \frac{\partial E}{\partial w_t^{old}} + \alpha \Delta w_t^{old} \quad (41-2)$$

$$\Delta a_t^{new} = -\eta \frac{\partial E}{\partial a_t^{old}} + \alpha \Delta a_t^{old} \quad (42-2)$$

$$\Delta u_{ii}^{new} = -\eta \frac{\partial E}{\partial u_{ii}^{old}} + \alpha \Delta u_{ii}^{old} \quad (43-2)$$

$$\Delta b_t^{new} = -\eta \frac{\partial E}{\partial b_t^{old}} + \alpha \Delta b_t^{old} \quad (44-2)$$

که در معادلات فوق η سرعت آموزش و α ممتنم است.

۷- مقادیر جدید پارامترهای شبکه را می‌توان با استفاده از روابط (۴۵-۲) تا (۴۸-۲) بدست آورد:

$$w_t^{new} = w_t^{old} + \Delta w_t^{new} \quad (45-2)$$

$$a_t^{new} = a_t^{old} + \Delta a_t^{new} \quad (46-2)$$

$$u_{ii}^{new} = u_{ii}^{old} + \Delta u_{ii}^{new} \quad (47-2)$$

$$b_t^{new} = b_t^{old} + \Delta b_t^{new} \quad (48-2)$$

۸- بازگشت به مرحله ۳ و تکرار دور جدید آموزش با استفاده از مقادیر جدید پارامترهای شبکه. این فرایند ادامه پیدا می‌کند تا جایی که خطای شبکه به حداقل کاهش یابد.

۹- برای اثبات کارایی مدل، مقادیر خروجی برای داده‌های سری تایید توسط شبکه بهینه شده، محاسبه می‌شود و با بررسی مقادیر خطا، کارایی مدل، مورد بررسی قرار می‌گیرد [۴۴].

فصل سوم

مدل سازی و محاسبات

مقدمه:

همان‌طور که در فصل اول اشاره شد دانستن خواص فیزیکی و شیمیایی مواد خالص و مخلوط‌ها برای طراحی صنعتی ضروری می‌باشد. از طرفی دیگر، اندازه‌گیری این خواص نیاز به صرف وقت و هزینه‌ی زیادی دارد و در بعضی موارد این کار بسیار مشکل و حتی غیرممکن است. بر این اساس استفاده از روش سهم گروه که روشی ساده برای پیش‌بینی این خواص از روی ساختار ملکولی مواد می‌باشد به عنوان یک روش کارآمد گسترش پیدا کرد.

در فصل دوم شبکه‌های عصبی مصنوعی که یکی از روش‌های نوین پردازش اطلاعات می‌باشد مورد بحث و بررسی قرار گرفت. همان‌طور که در آن‌جا ذکر شد شبکه‌های عصبی دارای قدرت یادگیری و محاسباتی بالایی می‌باشند و در علوم مختلف استفاده می‌شوند. به همین دلیل از شبکه‌های عصبی مصنوعی استفاده نموده و در این پایان‌نامه، به چگونگی طراحی و بهینه کردن شبکه‌ی عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌ها و سیکلوآلکان‌ها اشاره می‌گردد.

۳-۱- قاعده‌ی همدمای خطی (LIR):

قاعده‌ی همدمای خطی LIR قاعده‌ی است که در سال ۱۹۹۳ برای سیالات چگال زیر بحرانی و فوق بحرانی ارائه گردید [۴۶].

این قاعده که با استفاده از معادله ترمودینامیکی دقیق استخراج می‌شود به صورت زیر بیان می‌شود:

$$(Z-1)v^2 = A + B\rho^2 \quad (1-3)$$

که طبق آن کمیت $(Z-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای هر همدمای سیال چگالی خطی است. سپس با استفاده از مدلی که برای استخراج معادله به کار رفت، وابستگی دمایی پارامترهای A و B نیز به صورت زیر تعیین گردید:

$$A = A_2 - \frac{A_1}{RT} \quad (2-3)$$

$$B = B_2 + \frac{B_1}{RT} \quad (3-3)$$

این معادله در محدوده‌ی $\rho > \rho_B$ و $T < 2 T_B$ کارایی دارد که T_B, ρ_B به ترتیب دانسیته و دمای بویل سیال می‌باشد. قاعده‌ی هم‌دمای خطی برای انواع سیالات چگال قطبی و غیرقطبی کارایی دارد. این معادله در سال ۱۹۹۴ با استفاده از تقریب تک سیال وان‌دروالس به مخلوط سیالات چگال نیز تعمیم داده شد. بر اساس این تقریب هر معادله حالتی که برای سیال خالص قابل استفاده باشد عیناً برای مخلوط سیالات نیز کارایی دارد با این تفاوت که در حالت مخلوط پارامترهای معادله حالت علاوه بر دما به ترکیب سیستم نیز وابستگی دارد. با استفاده از مدلی که برای استخراج خود معادله به کار رفته بود وابستگی پارامترهای LIR به ترکیب سیستم به صورت زیر بدست آمد:

$$B_{\text{mix}} = \sum_i \sum_j x_i x_j B_{ij} \quad (4-3)$$

$$\left(\frac{A}{B}\right)_{\text{mix}} = \sum_i \sum_j x_i x_j \left(\frac{A}{B}\right)_{ij} \quad (5-3)$$

که در آن x_i کسر مولی گونه‌ی i در مخلوط بوده و B_{ij} و $\left(\frac{A}{B}\right)_{ij}$ مقدار پارامترها برای مخلوطی است که تمام بر هم‌کنش‌های آن از نوع ij باشد [۴۵].

۲-۳ تعمیم معادله حالت LIR به آلکان‌های خطی با استفاده از روش

سهم گروه‌ها

قاعده‌ی هم‌دمای خطی بر مبنای مفهوم پتانسیل جفت مؤثر استخراج شده است. شکل ریاضی تابع پتانسیل جفت مؤثر مانند جفت منزوی به صورت لنارد-جونز (۶ و ۱۲) در نظر گرفته شده است. اما پارامترهای این تابع در منطقه چگال بر خلاف پارامترهای تابع پتانسیل منزوی به حالت ترمودینامیکی سیستم وابسته است. چون این تابع پتانسیل به طور کیفی برای ذرات متقارن کروی مناسب بود برای ذرات نامتقارن مثل ترکیبات آلی با زنجیر طولانی انحراف از حالت خطی معادله LIR مشاهده می‌شود.

پارسافر و کلانتر با استفاده از داده‌های تجربی برای آلکان‌های خطی نشان دادند که نمودار $(Z-1)v^2$ برحسب ρ^2 برای این ترکیبات خطی نیست. به دلیل آنکه این معادله برای سیالات چگال فرم بسیار ساده و تفسیر فیزیکی خوبی داشت، آنها تصمیم گرفتند با استفاده از روش سهم گروه‌ها این معادله را به آلکان‌های خطی تعمیم دهند. برای این منظور آنها هر سیال آلکان خطی را به صورت مخلوط فرضی از گروه‌های سازنده‌شان یعنی متیل و متیلن در نظر گرفتند و سپس طبق تقریب تک سیال واندروالس معادله حالت LIR را عیناً برای این مخلوط فرضی به کار بردند با این تفاوت که در این حالت پارامترهای معادله‌ی حالت به طول زنجیر هم بستگی پیدا می‌کرد. در این صورت، با استفاده از دانسیته‌ی سیال (ρ) دانسیته‌ی کل گروه‌ها در مخلوط فرضی در دمای T و فشار p را برابر $n\rho$ می‌شود و معادله LIR به شکل زیر در می‌آید:

$$\left(\frac{p}{n\rho RT} - 1\right)/n^2 p^2 = A_m + B_m n^2 \rho^2 \rightarrow \left(\frac{Z}{n} - 1\right)v^2 = A_m n^2 + B_m n^4 \rho^2 \quad (5-3)$$

که در آن A_m و B_m پارامترهای معادله حالت LIR به ازای یک گروه کربنی اعم از متیل یا متیلن می‌باشد. سپس با تعریف دو پارامتر $A' = A_m n^2$ و $B' = B_m n^2$ معادله فوق را به شکل زیر ارائه نمودند.

$$\left(\frac{Z}{n} - 1\right)v^2 = A' + B'\rho^2 \quad (6-3)$$

این معادله، قاعده همدمای خطی اصلاح شده^۱ (MLIR) نامیده شد. در مرحله‌ی بعد با استفاده

از داده‌های تجربی برای آلکان‌های خطی نشان دادند که رفتار خطی نمودار $\left(\frac{Z}{n} - 1\right)v^2$

برحسب ρ^2 برای هر هم‌دمای آلکان خطی با افزایش طول زنجیر نیز حفظ می‌شود. همچنین آنها

وابستگی دمایی پارامترهای A_m و B_m را به صورت زیر بدست آوردند و مقادیر $\frac{a_1}{R}$ ، a_2 ، $\frac{b_1}{R}$ و b_2 را

برای ترکیبات مختلف در جدولی گزارش نمودند.

$$A_m = \frac{a_1}{RT} + a_2 \quad (7-3)$$

$$B_m = \frac{b_1}{RT} + b_2 \quad (8-3)$$

اما هنوز مهمترین شکل معادله حالت MLIR مثل سایر معادلات وابستگی پارامترهای معادله‌ی حالت به نوع سیال بود چرا که اگر برای ترکیبی مقادیر $\frac{a_1}{R}$ ، a_2 ، $\frac{b_1}{R}$ و b_2 وجود نمی‌داشت، معادله حالت کارایی لازم را نداشت. آنها در قدم بعدی برای رفع این مشکل از روش سهم گروه در پیش‌بینی پارامترهای معادله حالت MLIR استفاده نمودند. آنها برای تعیین سهم سه نوع گروه کربنی متیل (-CH₃)، متیلن انتهایی (-CH₂) و متیلن میانی (-CH₂-) در پارامترهای A_m و B_m از سه ترکیب پایه پروپان، n-بوتان و سیکلوهگزان استفاده کردند.

با توجه به اینکه وابستگی پارامترهای معادله‌ی حالت به ترکیب سیستم در مخلوط‌ها قبلاً بدست آمده بود لذا آنها با استفاده از مقادیر پارامترهای A_m و B_m برای دو ترکیب پایه پروپان و n-بوتان با استفاده از حل دو معادله، دو مجهول سهم گروه‌های متیل و متیلن انتهایی در پارامترهای A_m و B_m در دمای مورد نظر را بدست آوردند.

$$\begin{cases} (B_m)_{\text{Propane}} = \left(\frac{2}{3} \sqrt{B_{11}} + \frac{1}{3} \sqrt{B_{22}} \right)^2 \\ (B_m)_{\text{n-Butane}} = \left(\frac{2}{4} \sqrt{B_{11}} + \frac{2}{4} \sqrt{B_{22}} \right)^2 \end{cases} \quad (9-3)$$

$$\begin{cases} \left(\frac{A_m}{B_m} \right)_{\text{Propane}} = \left(\frac{2}{3} \sqrt{\frac{A_{11}}{B_{11}}} + \frac{1}{3} \sqrt{\frac{A_{22}}{B_{22}}} \right)^2 \\ \left(\frac{A_m}{B_m} \right)_{\text{n-Butane}} = \left(\frac{2}{4} \sqrt{\frac{A_{11}}{B_{11}}} + \frac{2}{4} \sqrt{\frac{A_{22}}{B_{22}}} \right)^2 \end{cases} \quad (10-3)$$

که در آن A₁₁ و B₁₁ به ترتیب سهم گروه متیل را در A_m و B_m است و A₂₂ و B₂₂ به ترتیب سهم گروه متیلن انتهایی در A_m و B_m است. سهم گروه متیلن میانی در پارامترهای A_m و B_m در دمای مورد نظر را با مقادیر پارامترهای A_m و B_m سیکلوهگزان در آن دما برابر در نظر گرفتند زیرا این ترکیب فقط از گروه‌های متیلن میانی ساخته شده بود. سپس آنها با استفاده از سهم سه نوع گروه

مختلف در پارامترهای A_m و B_m و تقریب متوسط هندسی پارامترهای A_m و B_m را با استفاده از روابط زیر محاسبه نمودند:

$$(B_m)_{\text{Alkane}} = (x_1 \sqrt{B_{11}} + x_2 \sqrt{B_{22}} + x_3 \sqrt{B_{33}})^2 \quad (11-3)$$

$$\left(\frac{A_m}{B_m}\right)_{\text{Alkane}} = \left(x_1 \sqrt{\frac{A_{11}}{B_{11}}} + x_2 \sqrt{\frac{A_{22}}{B_{22}}} + x_3 \sqrt{\frac{A_{33}}{B_{33}}}\right)^2 \quad (12-3)$$

که در آن

$$x_1 = \frac{2}{n} \quad x_2 = \frac{2}{n} \quad \text{و} \quad x_3 = \frac{n-4}{n} \quad (n \geq 4) \quad (13-3)$$

بعد با استفاده از مقادیر A_m و B_m محاسبه شده و معادله (3-6) دانسیته‌ی هر یک از آلکان‌های خطی را در همان دما برحسب فشار پیش‌بینی نمودند. برای محاسبات در هر دما باید این محاسبات برای هر ترکیب به طور جداگانه انجام شود [47].

۳-۳ استفاده از شبکه عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان

ها و سیکلوآلکان‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار

در قسمت قبل معادله حالت MLIR معرفی شد و گفته شد که با استفاده از آن می‌توان دانسیته‌ی آلکان‌های خطی چگال را با دقت خوبی پیش‌بینی نمود. اما همانطور که ملاحظه نمودید پیش‌بینی دانسیته توسط این معادله نیاز به محاسبات طولانی دارد به این صورت که برای هر ترکیب در دمای معین ابتدا باید سهم گروه‌ها در پارامترهای A_m و B_m با استفاده از ترکیبات پایه محاسبه شود. سپس با استفاده از روابط ارائه شده A_m و B_m برای ترکیب مورد نظر در آن دمای خاص بدست آید. بعد با استفاده از A_m و B_m محاسبه شده و معادله MLIR، مقدار دانسیته برحسب فشار در همان دمای معین برای ترکیب مورد نظر بدست آید. برای محاسبه دانسیته‌ی همین ترکیب در دمای دیگر و یا تغییر ترکیب مورد نظر باید روش از ابتدا برای محاسبه‌ی سهم جدید گروه‌ها در پارامترهای A_m و B_m و سپس محاسبه‌ی دانسیته تکرار شود. در صورت تغییر ترکیب نیز باید سهم گروه‌های جدید محاسبه شده و روش تکرار شود.

به این ترتیب اگرچه روش سهم گروه توانست پارامترهای معادله‌ی حالت را فقط با استفاده از اطلاعات مربوط به سه ترکیب پایه برای سایر آلکان‌ها محاسبه کنند اما حجم محاسبات ریاضی را به شدت افزایش داد. به همین دلیل در این پایان‌نامه از شبکه عصبی موجک به عنوان ابزار قدرتمند پردازش اطلاعات به جای معادله حالت برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌ها و سیکلوآلکان‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار استفاده گردید. آنچه در ادامه می‌آید چگونگی فرایند رسیدن به یک شبکه عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی این ترکیبات براساس مفهوم سهم گروه‌ها می‌باشد. اما از آنجا که ۳ آلکان ابتدایی در دماها و فشارهای معمولی به صورت گاز می‌باشند. لذا در دامنه‌ی دانسیته‌ی متفاوتی نسبت به سایر آلکان‌ها دارای خاصیت سیال چگال هستند به همین دلیل دو شبکه عصبی موجک طراحی می‌گردد. اولین شبکه عصبی مربوط به آلکان‌های دو تا چهار کربنه می‌باشد و شبکه‌ی عصبی جداگانه‌ای برای آلکان‌های ۵ کربنه تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها طراحی و بهینه‌سازی می‌گردد.

۳-۳-۱ ارائه شبکه عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های

خطی و سیکلو آلکان‌ها

۳-۳-۱-۱ انتخاب سری داده‌ها

در ابتدا برای طراحی یک مدل، لازم است یک سری ملکولی که خاصیت مورد نظر برای آنها به صورت تجربی وجود دارد انتخاب و جمع‌آوری شود. در این کار چون هدف پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های خطی و سیکلوآلکان‌ها می‌باشد لذا دانسیته برای آلکان‌ها از ۲ کربنی تا ۱۹ کربنی و همچنین ترکیبات سیکلوهگزان، سیکلوپنتان، متیل‌سیکلوهگزان و متیل‌سیکلوپنتان در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار جمع‌آوری گردید. نام ترکیبات، محدوده‌ی دما و فشار برای هر ترکیب در جدول (۳-۱) آمده است. این داده‌ها برای هر ترکیب به صورت اتفاقی به سه سری آموزش، پیش‌بینی و تایید تقسیم شده‌اند. تعداد الگوها برای سری‌های آموزش، پیش‌بینی و تایید برای هر کدام از شبکه‌های بهینه شده در جدول (۳-۲) آمده است.

جدول (۱-۳): محدوده‌ی دما و فشار برای ترکیبات موجود در بخش (۳-۱-۱) برای پیش‌بینی دانسیته به همراه

مرجع مورد استفاده برای هریک از آنها

نام ترکیب	$\Delta T (K)$	$\Delta p (MPa)$	مرجع
اتان	۹۵-۳	۵-۷۰	[48]
پروپان	۹۰-۳۶۵	۵-۱	[48]
نرمال بوتان	3 ۱۴۰-	5-65	[48]
پنتان	303-323	۵-۱۷۶	[49]
هگزان	۲۹۸/۱۵-348/۱۵	۰/۱-250	[۴۹] و [۵۰]
هپتان	۲۹۸/۱۵-۳۲۸/۱۵	۲/۱-۳۸/۶	[۵۱]
اکتان	۳۰۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۲۴۷/۴۱	[۴۹]
نونان	۳۰۳-۴۲۳	۲۰-۲۶۰	[۵۲]
دکان	۳۰۳-۳۴۸	۰/۱-۲۵۴/۳۷	[۴۹]
دودکان	۲۹۳-۴۳۳	۰/۱-۱۴۰	[۵۳]
پنتادکان	۲۹۳-۳۸۳	۲۰-۱۴۹/۵۵	[۵۴]
هپتادکان	۳۲۳-۳۸۳	۲۰-۱۴۹/۵۵	[۵۴]
اکتادکان	۳۱۳-۳۸۳	۲۰-۱۴۹/۵۵	[۵۵]
نونادکان	۳۱۳-۳۸۳	۲۰-۱۴۹/۵۵	[۵۵]
سیکلوپنتان	283/15-333/15	0/1 -19/57	[۵۶]
سیکلو هگزان	283/15-313/15	0/1 -19/52	[۵۶]
متیل سیکلوپنتان	283/15-333/15	0/1 -19/34	[۵۶]
متیل سیکلو هگزان	283/15-333/15	0/1 -19/33	[۵۶]

جدول (۲-۳): تعداد الگوها برای سری‌های آموزش، پیش‌بینی و تایید برای هریک از شبکه‌های بهینه شده

تعداد الگوهای تایید	تعداد الگوهای پیش‌بینی	تعداد الگوهای آموزش	نام شبکه WNN
۱۹۳	۲۱۹	۳۱۳	شبکه آلکان‌های ۲ تا ۴ کربنه
۱۲۰	۱۱۴	۳۱۶	شبکه آلکان‌های ۵ تا ۱۹ کربنه
۶۹	۷۲	۱۲۶	شبکه سیکلوآلکان‌ها
۱۸۹	۱۸۶	۴۴۲	شبکه آلکان‌های ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها

۳-۱-۳-۲ انتخاب توصیف‌کننده‌ها

انتخاب توصیف‌کننده‌های مناسب برای برقراری ارتباط بین ساختار ملکول و دانسیته، در ایجاد ساخت مدل اهمیت بسیاری دارد. از آنجا که دانسیته‌ی هر ترکیب به دما و فشار سیستم وابسته است لذا این دو ویژگی به عنوان اولین توصیف‌کننده‌ها به کار می‌روند و ستون‌های اول و دوم ماتریس ورودی را تشکیل می‌دهند. برای انتخاب سایر توصیف‌کننده‌ها در این پایان‌نامه از روش سهم گروه استفاده گردید. بر اساس این روش ترکیبات مورد بررسی در این پایان‌نامه دارای سه گروه عاملی متیل، متیلن و متین هستند که تعداد گروه‌های عاملی تشکیل‌دهنده‌ی هر کدام از ترکیبات موجود در جدول (۳-۱)، ستون‌های بعدی ماتریس ورودی را تشکیل می‌دهند. در جدول (۳-۳) نام ترکیبات، تعداد ورودی‌ها و نوع توصیف‌کننده‌های انتخابی بر مبنای روش سهم گروه برای همه‌ی ترکیبات مورد بررسی در این پایان‌نامه آمده است. لازم به تذکر است که برای همه‌ی ترکیبات تعداد ورودی‌ها برابر با دو توصیف‌کننده دما و فشار

جدول (۳-۳): تعداد و نوع توصیف‌کننده‌ها بر مبنای سهم گروه‌ها برای ترکیبات موجود در جدول (۳-۱)

نام ترکیبات	نوع توصیف‌کننده‌ها بر مبنای سهم گروه	تعداد توصیف‌کننده‌ها بر مبنای سهم گروه
اتان	گروه متیل	۱
از پروپان تا نونادکان	گروه‌های متیل و متیلن	۲
سیکلوپنتان و سیکلوهگزان	گروه متیلن	۱
متیل‌سیکلوپنتان و متیل‌سیکلوپنتان	گروه‌های متیل، متیلن و متین	۳

به علاوه‌ی توصیف‌کننده‌های موجود در ستون سوم جدول (۳-۳) برای هر ترکیب است. به این ترتیب، اگر Q را به عنوان تعداد سطرهای ماتریس ورودی که همان تعداد نقاط تجربی می‌باشد در نظر بگیریم، ماتریس ورودی شبکه یک ماتریس $Q \times N$ خواهد بود که N تعداد ستون‌های ماتریس ورودی است که برابر تعداد توصیف‌کننده‌های ترکیبات مورد بررسی می‌باشد.

۳-۱-۳-۳ ساخت مدل با استفاده از شبکه عصبی موجک

مدل‌های شبکه عصبی موجک با استفاده از توصیف‌کننده‌های مربوط به ترکیبات موجود در جدول (۳-۳) مطابق ساختار ارائه شده در بخش (۲-۹-۲) برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آن‌ها طراحی شدند. شبکه‌های طراحی شده به ازاء هر توصیف‌کننده یک نرون ورودی دارند. به ازاء نرون‌های ورودی که به طور همزمان در شبکه پردازش می‌شوند یک خروجی در اختیار است تا شبکه با آن سنجیده شود. در نتیجه لایه خروجی شامل یک نرون می‌باشد که دانسیته‌ی متناظر با ورودی‌ها را نشان می‌دهد. تعداد نرون‌های لایه مخفی و پارامترهای دیگر شبکه شامل ممنتم، سرعت آموزش و تعداد دورها نیز پارامترهایی هستند که باید توسط شبکه بهینه شوند. در این کار، از روش هم‌زمانی برای تغییر پارامترها استفاده می‌شود زیرا روش معمول که شامل تغییر یکی یکی پارامترهاست نمی‌تواند تعداد زیادی از پارامترهایی را که در ابتدا بهینه کرده است، در نظر بگیرد. در اینجا برنامه به گونه‌ای نوشته می‌شود که در ابتدا مقادیر سرعت آموزش، ممنتم و همچنین تعداد نرون‌های لایه مخفی بطور هم‌زمان تغییر می‌کنند و از آنجا که در دوره‌های مختلف روند طی شده یکسان است تعداد دورها ثابت و برابر ۱۰۰۰ در نظر گرفته می‌شود. با توجه به تعداد نرون‌های لایه ورودی مقادیر ۳ تا ۱۸ برای تعداد نرون‌های لایه مخفی، مقادیر ۰/۱ تا ۰/۹ با فواصل ۰/۱ برای ممنتم و مقادیر ۰/۱ تا ۰/۰۹ با فواصل ۰/۰۱ برای سرعت آموزش در نظر گرفته می‌شود. برای مشخص کردن مقادیر بهینه‌ی این پارامترها برنامه به گونه‌ای نوشته می‌شود که مقدار تابع خطا (MSE) مربوط به دو سری آموزش و پیش‌بینی به ازاء کلیه تغییرات این سه پارامتر در یک ماتریس ثبت می‌شود و در ضمن تغییرات پارامترهای مختلف همراه با مقادیر MSE دو سری آموزش و پیش‌بینی به طور جداگانه برحسب یک بردار مرجع رسم می‌شود. بردار مرجع نشان‌دهنده‌ی کلیه تغییرات سه پارامتر سرعت آموزش، ممنتم و همچنین تعداد نرون‌های لایه مخفی می‌باشد. مقدار پارامترها با کمترین خطای سری پیش‌بینی به عنوان مقادیر بهینه انتخاب می‌شوند. پس از بهینه شدن این پارامترها تعداد دور آموزش نیز باید بهینه شود برای انجام این کار، مقادیر ۱۰۰۰ تا ۱۵۰۰۰ با فاصله ۱۰۰۰ در نظر گرفته می‌شود.

اگر نمودار MSE برحسب تعداد دور آموزش برای دو سری آموزش و پیش‌بینی رسم شود. در تعداد دورهای کم یک روند کاهشی خطا مشاهده می‌شود، اما با افزایش تعداد دور، نمودار سری

آموزش به قسمت مسطح خود می‌رسد و با افزایش تعداد دور آموزش، تغییر قابل توجهی در خطای MSE سری آموزش مشاهده نمی‌شود.

در این شرایط مدل اصطلاحاً به همگرایی رسیده است. به کمک نمودار رسم شده می‌توان مقدار بهینه دور را جهت آموزش شبکه انتخاب کرد به این ترتیب که شروع قسمت مسطح نمودار به عنوان تعداد دور بهینه انتخاب می‌شود. باید توجه داشت با وجودی که MSE سری آموزش، با افزایش تعداد دور پس از مقدار بهینه چندان تغییر نمی‌کند، اما MSE سری پیش‌بینی به آرامی افزایش می‌یابد که به این پدیده فراتطبیق می‌گویند در نتیجه برای انتخاب تعداد دور بهینه باید نکات زیر توجه شود:

- ۱- تغییرات شدید و ناگهانی در نمودار MSE نسبت به تعداد دور در دو سری آموزش و پیش‌بینی مشاهده نشود.

۲- خطای MSE سری پیش‌بینی حداقل شود.

۳- افزایش تدریجی در MSE سری پیش‌بینی نسبت به تعداد دور ایجاد نشود.

پس از تعیین تعداد دور بهینه، شبکه آموزش دیده و کار آموزش متوقف می‌شود. در این مرحله خروجی شبکه طبق پارامترهای بهینه شده شبکه اعلام می‌شود و پارامترهای وزن ورودی و خروجی شبکه، موقعیت موجک و پهنای موجک نیز تنظیم می‌شوند.

۳-۳-۱-۴ الگوریتم برنامه‌ی نوشته شده

برنامه‌ی رایانه‌ای در محیط برنامه‌نویسی MATLAB جهت به کارگیری شبکه عصبی موجک

نوشته شد که الگوریتم آن به صورت زیر می‌باشد:

۱- ابتدا ماتریس‌های ورودی و ماتریس‌های هدف متناظر با آنها برای دو سری آموزش و

پیش‌بینی به شبکه وارد می‌شوند. ماتریس هدف به این دلیل به شبکه داده می‌شود که شبکه بتواند

خروجی‌های محاسبه شده‌ی خودش را با آن مقایسه کرده و تابع خطا را بدست آورد. سپس

بزرگ‌ترین عدد موجود در هر ستون از ماتریس‌های ورودی و خروجی دو سری تعیین می‌شود و تمام

اعداد در هر ستون بر بزرگ‌ترین عدد موجود در آن ستون تقسیم می‌گردد.

- ۲- تعداد نرون ورودی و خروجی به عنوان پارامترهای ثابت به شبکه داده می‌شود.
- ۳- برای تغییر هم‌زمان سه پارامتر سرعت آموزش، تعداد نرون لایه مخفی و ممنتم، سه حلقه‌ی^۱ داخل هم تعریف می‌شود همان‌طور که قبلاً گفته شد تعداد دور آموزش در این مرحله ثابت می‌باشد.
- ۴- در شروع برنامه پارامترهای شبکه شامل پهنای و موقعیت موجک، وزن‌های ورودی و خروجی به صورت تصادفی از اعداد بین صفر و یک انتخاب می‌شوند.
- ۵- اکنون با وارد شدن داده‌های ورودی هر نمونه به شبکه، خروجی مربوط به آن نمونه بدست آمده و شبکه MSE متناظر با آن را محاسبه می‌کند و یک سطر از ماتریس MSE را می‌سازد. این عمل برای تمام نمونه‌های ورودی تکرار می‌شود تا خطای سری آموزش محاسبه شود.
- ۶- با استفاده از خطای محاسبه شده پارامترهای شبکه طبق روابط (۲-۳۰) تا (۲-۴۸) به گونه‌ای تغییر می‌کنند تا در هر دور آموزش، تابع خطا کاهش یابد.
- ۷- دور بعدی آموزش از مرحله ۵ با مقادیر جدید پارامترهای شبکه آغاز می‌شود و این کار تا زمانی که تعداد دور به ۱۰۰۰ دور برسد ادامه می‌یابد.
- ۸- بعد از پایان مرحله آموزش، پارامترهای نهایی شبکه به ازای سه پارامتر ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون‌های لایه مخفی معین، جهت بدست آوردن خروجی‌های سری پیش‌بینی استفاده می‌شود و از مقایسه خروجی شبکه با خروجی‌های واقعی تابع خطای MSE سری پیش‌بینی به ازای این سه پارامتر بدست می‌آید.
- ۹- تمام مراحل فوق به ازای کلیه تغییرات پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون لایه مخفی به صورت جداگانه انجام می‌گیرد و نتایج MSE مربوط به دو سری آموزش و پیش‌بینی برای همه‌ی آنها ثبت می‌شود. سپس از روی حداقل مقدار MSE سری پیش‌بینی، مقادیر بهینه این سه پارامتر انتخاب می‌شود.

1-loop

۱۰- پس از بهینه شدن این سه پارامتر، تعداد دور آموزش بهینه می‌شود و برای انجام این کار، مقادیر 1000 تا ۱۵۰۰۰ با فواصل ۱۰۰۰ انتخاب می‌شوند و نمودار MSE برحسب تعداد دور برای هر دو سری آموزش و پیش‌بینی رسم می‌شود. تعداد دور با کمترین MSE سری پیش‌بینی تعداد دور بهینه می‌باشد. در این مرحله آموزش شبکه به پایان رسیده است و مدلی که همه‌ی پارامترهایش بهینه شده است آماده‌ی استفاده می‌باشد.

۱۱- سپس داده‌های سری تأیید به مدل بهینه شده داده می‌شود و خروجی مربوط به شبکه با خروجی واقعی این سری مقایسه می‌گردد تا کارایی مدل مورد ارزیابی قرار گیرد. داده‌های این سری، داده‌هایی هستند که شبکه آنها را ندیده است و تقریباً کل محدوده‌ی داده‌ها در سری آموزش و پیش‌بینی را شامل می‌شود.

برای بررسی صحت برنامه نوشته شده به دو صورت زیر عمل می‌شود:

۱- اجرای خط به خط برنامه جهت کنترل جوابی که هر خط می‌دهد که این جواب نشانگر صحت نتایج برنامه از لحاظ ریاضی می‌باشد.

۲- سپس برنامه برای داده‌های مرجع [57] به کار گرفته شد و نتایج آن با نتایج موجود در این مرجع مقایسه شد. در این تحقیق زمان ماند نفتال‌ها در کروماتوگرافی گازی با درصد خطای نسبی ۱٪ پیش‌بینی شده بود برای انجام این تحقیق ۹۴ نمونه تجربی به صورت تصادفی به دو دسته تقسیم شده بودند. مطابقت نتایج بدست آمده از اجرای برنامه با نتایج بدست آمده از این مرجع صحت برنامه نوشته شده را نشان می‌دهد.

همچنین کارایی شبکه بهینه شده با رسم نمودار برگشت یعنی نمودار مقادیر پیش‌بینی شده برحسب مقادیر تجربی برای سری پیش‌بینی و سری تأیید مورد ارزیابی قرار می‌گیرد و به کمک مربع مقدار ضریب همبستگی (R^2)، پراکندگی نقاط در اطراف خط برگشت تعیین می‌شود.

محدوده‌ی $0 \leq R^2 \leq 1$ می‌باشد. اگر $R^2=1$ یعنی همبستگی کاملی بین داده‌های تجربی و محاسبه شده وجود دارد و اگر $R^2=0$ باشد یعنی هیچ‌گونه همبستگی وجود ندارد. پس هر چه مقدار R^2 بدست آمده به یک نزدیک‌تر باشد می‌توان گفت نتایج پیش‌بینی شده به واقعیت نزدیک‌تر هستند.

۳-۳-۲ شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی

آلکان‌های خطی ۲ کربنه تا ۴ کربنه

۳-۳-۱ انتخاب توصیف‌کننده‌ها

برای پیش‌بینی دانسیته دو ویژگی دما و فشار به عنوان اولین توصیف‌کننده‌ها به کار گرفته شدند و سایر توصیف‌کننده‌ها مطابق با روش سهم گروه تعریف می‌شود.

براساس مفهوم سهم گروه‌ها این ترکیبات دارای دو گروه عاملی متیل و متیلن می‌باشند. به این ترتیب دو توصیف‌کننده دیگر بر مبنای روش سهم گروه علاوه بر دما و فشار در ماتریس ورودی وارد می‌شوند و یک کد دو رقمی را در ستون‌های سوم و چهارم این ماتریس به خود اختصاص می‌دهند که برای هر ملکول منحصر به فرد است و هیچ دو مولکولی دارای کد یکسان نیستند. برای مثال کدگذاری برای ترکیب اتان به صورت زیر می‌باشد:

ملکول اتان فقط شامل دو گروه متیل است و سایر گروه‌های عاملی را ندارد. در نتیجه بعد از دما و فشار در ماتریس ورودی کد روش سهم گروه (۲۰) وارد می‌شود. کد بدست آمده از روش سهم گروه برای ۳ ترکیب فوق در جدول (۳-۴) آمده است.

جدول (۳-۴): توصیف‌کننده‌های مورد استفاده برای ترکیبات ۲ تا ۴ کربنه

نام ترکیب	توصیف‌کننده‌ها در ماتریس ورودی			
	ستون اول	ستون دوم	ستون سوم	ستون چهارم
اتان	T	p	۲	۰
پروپان	T	p	۲	۱
نرمال بوتان	T	p	۲	۲

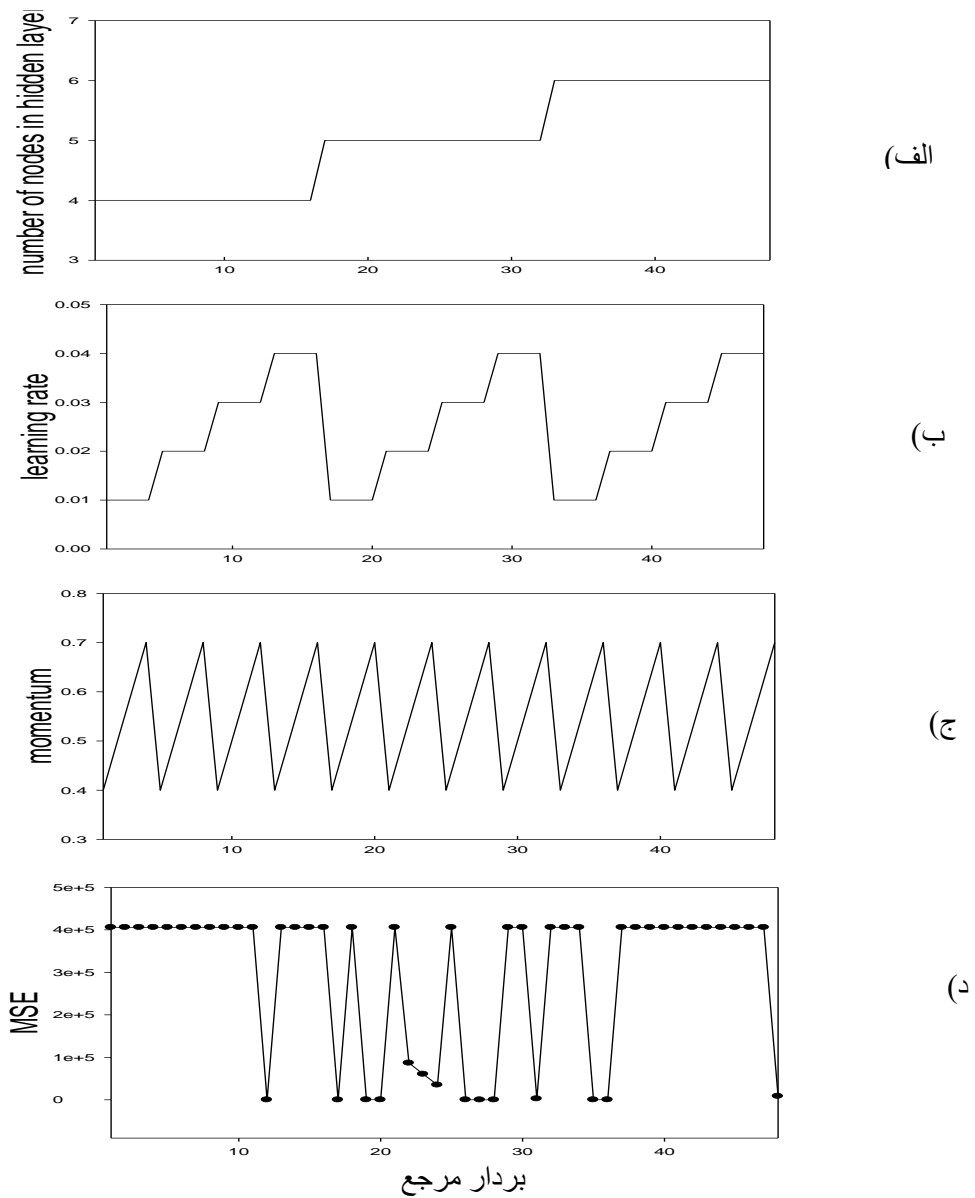
۳-۳-۲-۲ بهینه‌سازی پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش و تعداد

نرون‌های لایه مخفی

بر این اساس مدل شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از ۴ توصیف‌کننده و یک خروجی برای ترکیبات ۲ تا ۴ کربنه طراحی گردید. این توصیف‌کننده‌ها ستون‌های ماتریس ورودی در مدل را به وجود می‌آورند. از آموزش شبکه، طبق دستورعمل بخش (۳-۳-۱-۴) پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون‌های لایه مخفی به طور هم‌زمان بهینه شدند که مقادیر بهینه این پارامترها در جدول (۳-۵) آمده است. برای مشخص شدن چگونگی کار بخشی از محاسبات برای این شبکه در شکل (۳-۱) نشان داده شده است.

جدول (۳-۵): مقدار پارامترهای شبکه‌ی موجک بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های ۲ تا ۴ کربنه

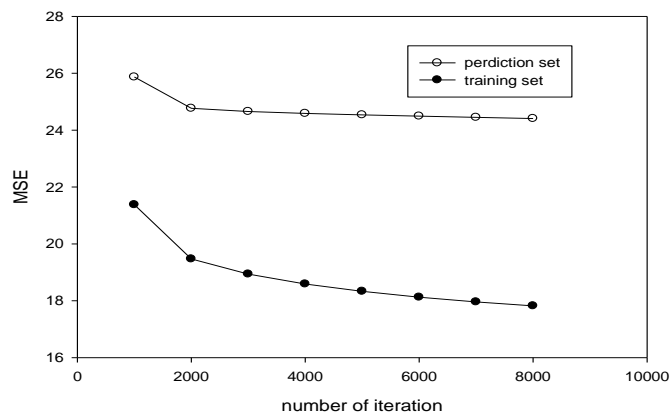
تعداد دوره‌های مرحله آموزش	ممنتم	سرعت آموزش	تعداد نرون لایه مخفی
۲۰۰۰	۰/۶	۰/۰۳	۵



شکل (۳-۱): نمودارهای الف) تعداد نرون لایه مخفی ب) مقادیر منتمم ج) سرعت آموزش د) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری پیش‌بینی که مینیمم مقدار آن را نشان می‌دهد بر حسب بردار مرجع برای آلکان‌ها از ۲ تا ۴ کربنه

۳-۲-۳-۳ بهینه‌سازی تعداد دور شبکه‌های عصبی موجک

برای تعیین تعداد دور بهینه، نمودار MSE بر حسب تعداد دور برای دو سری آموزش و پیش‌بینی برای هر یک از ترکیبات رسم گردید این نمودار در شکل (۳-۲) برای این شبکه نشان داده شده است. تعداد دوری که در آن MSE سری پیش‌بینی کمترین مقدار است به عنوان تعداد دور بهینه برای شبکه انتخاب گردید.



شکل (۳-۲): نمودار MSE بر حسب تعداد دور آموزش برای سری‌های آموزش و پیش‌بینی شبکه‌ی آلکان‌های ۲ تا ۴ کربنه

۳-۲-۴ ارزیابی شبکه‌ی بهینه شده

سپس، شبکه بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته دو سری پیش‌بینی و تأیید ترکیبات فوق استفاده شد. متوسط درصد خطای نسبی* و مقادیر MSE در پیش‌بینی دانسیته برای دو سری پیش‌بینی و تأیید در جدول (۳-۶) آورده شده است. نتایج این جدول نشان می‌دهد که متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته برای سری پیش‌بینی و تأیید کمتر از ۱٪ می‌باشد که نشان دهنده‌ی کارایی بالای شبکه عصبی موجد بهینه شده می‌باشد.

جدول (۳-۶): متوسط درصد خطای نسبی و MSE برای سری پیش‌بینی و تأیید برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

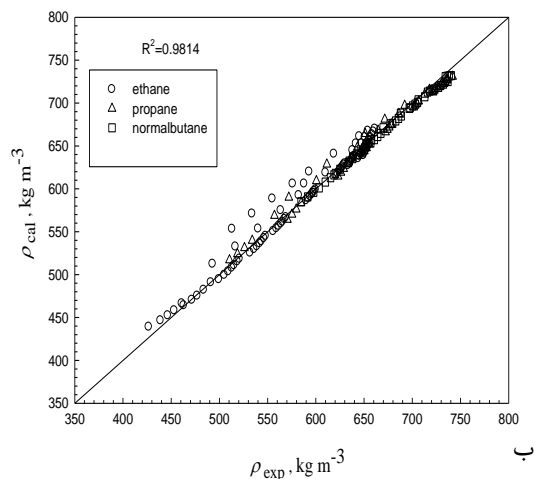
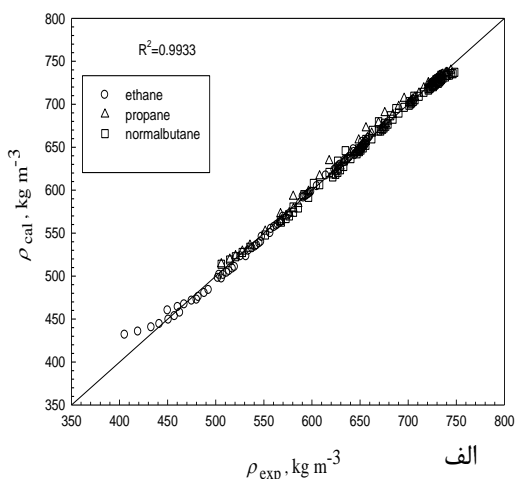
نام ترکیب	MSE		$100 \times (\Delta\rho /\rho)$	
	برای سری پیش‌بینی	برای سری تأیید	برای سری پیش‌بینی	برای سری تأیید
اتان	۲۹/۹۹	۱۰۷/۶۲	۰/۷۵ (۶/۳۱)	۱/۲۲ (۷/۸۸)
پروپان	۲۵/۵۹	۶۱/۱۳۸	۰/۶۵ (۲/۶۲)	۱/۰۶ (۳/۱۵)
نرمال بوتان	۱۳/۲۸	۱۶/۹۳	۰/۶۵ (۱/۷۷)	۰/۴۹ (۱/۶۰)

نمودار برگشت برای این شبکه در شکل (۳-۳) رسم شده است و مقدار R^2 نزدیک به یک نشان‌دهنده‌ی کارایی بسیار خوب شبکه‌ی ارائه شده در پیش‌بینی دانسیته می‌باشد.

* در تمام این فصول منظور از متوسط خطای نسبی در پیش‌بینی، \bar{x} ، متوسط درصد خطای نسبی کل نقاط است که چنین محاسبه می‌شود: $\bar{x} = \frac{\sum_i n_i |\bar{x}_i|}{\sum_i n_i}$ که در آن $\bar{x}_i = 100(x_{i,exp} - x_{i,cal})/x_{i,exp}$

مقادیر دانسیته‌ی تجربی و پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه برای دو سری پیش‌بینی و

تایید این ترکیبات در جداول (۷-۳) و (۸-۳) آورده شده است.



شکل (۳-۳): نمودار برگشت برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۴ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای دو سری الف) پیش‌بینی ب) تایید آلکان‌های خطی از ۲ تا ۴ کربنه در محدوده‌ی دما و فشار موجود در جدول (۱-۳)

جدول (۷-۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
95	9	649/84	644/17	0/87
95	13	651/24	646/26	0/76
95	16	652/27	647/80	0/69
95	18	652/95	648/81	0/63
95	21	653/95	650/30	0/56
95	23	654/62	651/28	0/51
95	26	655/60	652/73	0/44
95	28	656/25	653/68	0/39
100	9	644/64	640/54	0/64
100	13	646/11	642/53	0/55
100	16	647/19	643/99	0/49
100	18	647/90	644/96	0/45
100	21	648/95	646/40	0/39
100	23	649/64	647/35	0/35
100	26	650/67	648/75	0/29
100	28	651/35	649/69	0/26

ادامه‌ی جدول (۷-۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
------	--------	------------------------	-------------------------------	----------------

100	32	652/68	651/53	0/18
100	37	654/32	653/82	0/08
100	42	655/93	656/08	-0/02
100	47	657/5 0	658/33	-0/13
1 00	52	659/03	660/56	-0/23
100	57	660/54	662/80	-0/34
110	9	634/09	632/42	0/26
110	13	635/7 0	634/25	0/23
110	16	636/88	635/62	0/20
110	18	637/66	636/53	0/18
110	21	638/81	637/89	0/14
110	23	639/57	638/80	0/12
110	35	643/96	644/26	-0/05
110	60	652/36	655/97	-0/55
120	9	623/45	623/30	0/02
120	13	625/22	625/03	0/03
120	16	626/51	626/34	0/03
120	18	627/36	627/22	0/02
120	21	628/62	628/55	0/01
120	23	629/45	629/45	3/54e-4
120	35	634/23	634/97	-0/12
120	60	643/31	647/43	-0/64
150	9	591/1 0	591/23	-0/02
150	13	593/47	593/03	0/08
150	16	595/19	594/40	0/13
150	18	596/31	595/36	0/16
150	21	597/97	596/84	0/19
150	23	599/05	597/86	0/20
150	35	605/22	604/41	0/13
150	55	614/49	616/96	-0/40
180	9	557/49	554/76	0/49
180	13	560/72	557/01	0/66
180	16	563/03	558/78	0/75
180	18	564/54	560/01	0/80
180	21	566/73	561/92	0/85
180	23	568/16	563/23	0/87
180	35	576/14	571/75	0/76
180	60	590/42	592/48	-0/35

ادامه‌ی جدول (۳-۷): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
200	9	533/87	529/41	0/84
200	13	537/9 0	532/14	1/07
200	16	540/76	534/29	1/20
200	18	542/61	535/78	1/26
200	21	545/28	538/03	1/32
200	23	547/13	539/65	1/34
200	35	556/52	549/81	1/21
200	55	570/03	568/92	0/19
225	9	502/28	497/73	0/91
225	13	507/77	501/19	1/30

225	16	511/58	503/89	1/50
225	18	514/14	505/74	1/61
225	21	517/46	508/58	1/72
225	23	519/68	510/53	1/76
225	35	531/6 0	522/89	1/64
۲۲۵	55	547/87	545/53	0/43
250	2	449/98	459/95	-2/22
250	6	460/58	463/88	-0/72
250	9	467/3 0	466/95	0/08
250	13	475/13	471/18	0/83
250	17	482/03	475/58	1/34
250	21	488/23	480/13	1/66
250	24	492/51	483/63	1/80
250	35	506/17	497/03	1/81
250	55	525/73	522/98	0/52
275	4	405/38	431/63	-6/48
275	7	419/3 0	435/23	-3/80
275	11	433/09	440/18	-1/64
275	14	441/45	443/99	-0/58
275	18	450/94	449/19	0/39
275	21	457/18	453/17	0/88
275	24	462/84	457/21	1/22
275	35	480/17	472/48	1/60
275	55	503/66	501/33	0/46
275	7	731/12	724/31	0/93
90	11	732/37	726/05	0/86
90	14	733/3 0	727/25	0/82
90	18	734/52	728/73	0/79

ادامه‌ی جدول (۳-۷): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با

دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
90	23	736/02	730/40	0/76
90	35	739/52	733/63	0/80
95	7	726/02	720/49	0/76
95	11	727/32	722/19	0/70
95	14	728/28	723/38	0/67
95	18	729/55	724/84	0/65
95	23	731/1 0	726/51	0/63
95	35	734/71	729/82	0/67
95	55	740/4 0	733/70	0/90
95	70	744/43	735/68	1/18
95	85	748/28	737/15	1/49
100	7	720/95	716/49	0/62
100	11	722/3 0	718/16	0/57
100	14	723/29	719/33	0/55
100	18	724/6 0	720/80	0/52
100	23	726/2 0	722/47	0/51
100	35	729/93	725/90	0/55
100	50	734/36	729/22	0/70
100	65	738/58	731/79	0/92
100	80	742/59	733/84	1/18

100	95	746/43	735/54	1/46
120	7	700/90	698/82	0/30
120	11	702/46	700/52	0/28
120	14	703/61	701/73	0/27
120	18	705/11	703/30	0/26
120	23	706/96	705/16	0/25
120	35	711/21	709/29	0/27
120	50	716/23	713/90	0/33
120	65	720/95	718/08	0/40
120	80	725/42	721/94	0/48
120	95	729/67	725/55	0/56
150	7	671/31	668/90	0/36
150	11	673/28	670/92	0/35
150	14	674/73	672/41	0/34
150	18	676/61	674/39	0/33
150	23	678/90	676/84	0/30
150	35	684/12	682/61	0/22
150	50	690/18	689/63	0/08

ادامه‌ی جدول (۳-۷): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
150	65	695/81	696/47	-0/09
150	80	701/07	703/07	-0/29
150	95	706/01	709/42	-0/48
175	7	646/67	642/33	0/67
175	11	649/09	644/80	0/66
175	14	650/85	646/66	0/64
175	18	653/13	649/14	0/61
175	23	655/88	652/24	0/55
175	35	662/10	659/67	0/37
175	50	669/20	668/88	0/05
175	65	675/71	677/92	-0/33
175	80	681/72	686/67	-0/73
175	95	687/31	695/01	-1/12
200	7	621/57	615/37	1/00
200	11	624/57	618/39	0/99
200	14	626/73	620/67	0/97
200	18	629/52	623/71	0/92
200	23	632/86	627/53	0/84
200	35	640/28	636/68	0/56
200	50	648/62	648/02	0/09
200	65	656/13	659/08	-0/45
200	80	662/98	669/68	-1/01
200	95	669/29	679/70	-1/55
250	7	568/05	562/79	0/93
250	11	572/93	566/94	1/05
250	14	576/36	570/05	1/10
250	18	580/67	574/19	1/12
250	23	585/69	579/35	1/08
250	35	596/44	591/58	0/81
250	50	607/94	606/43	0/25

250	65	617/92	620/56	-0/43
250	80	626/76	633/82	-1/13
250	95	634/72	646/06	-1/79
300	7	505/81	513/77	-1/57
300	11	514/68	518/78	-0/80
300	14	520/57	522/52	-0/37
300	18	527/66	527/46	0/04
300	23	535/55	533/56	0/37

ادامه‌ی جدول (۷-۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
300	35	551/43	547/82	0/66
300	50	567/33	564/71	0/46
300	65	580/46	580/43	0/01
300	80	591/71	594/85	-0/53
300	95	601/59	607/95	-1/06
140	8	733/86	737/01	-0/43
140	13	735/93	737/32	-0/19
140	18	737/95	737/59	0/05
140	23	739/91	737/84	0/28
160	8	715/38	718/17	-0/39
160	13	717/73	719/06	-0/19
160	18	720/01	719/94	0/01
160	23	722/23	720/79	0/20
160	30	725/23	721/98	0/45
160	50	733/23	725/31	1/08
180	8	697/14	699/14	-0/29
180	13	699/83	700/62	-0/11
180	18	702/43	702/08	0/05
180	23	704/94	703/54	0/20
180	30	708/32	705/55	0/39
180	50	717/25	711/20	0/84
200	8	678/98	680/09	-0/16
200	13	682/08	682/13	-0/01
200	18	685/05	684/16	0/13
200	23	687/90	686/17	0/25
200	30	691/72	688/95	0/40
200	50	701/69	696/66	0/72
225	8	656/14	656/38	-0/04
225	13	659/86	659/06	0/12
225	18	663/39	661/72	0/25
225	23	666/75	664/34	0/36
225	30	671/21	667/96	0/48
225	50	682/67	677/84	0/71
250	8	632/81	632/84	-4/81e-3
250	13	637/33	636/07	0/20
250	18	641/56	639/25	0/36
250	23	645/55	642/37	0/49
250	30	650/79	646/66	0/64

ادامه‌ی جدول (۷-۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
250	50	663/99	658/24	0/87
275	8	608/65	609/44	-0/13
275	13	614/21	613.00	0/18
275	18	619/34	616/67	0/43
275	23	624/11	620/18	0/63
275	30	630/29	624/96	0/85
275	50	645/51	637/77	1/20
300	8	583/26	586/01	-0/48
300	13	590/21	590/01	0/03
300	18	596/49	593/89	0/44
300	23	602/24	597/66	0/76
300	30	609/57	602/78	1/11
300	50	627/15	616/38	1/72

جدول (۳-۸): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
95	7	649/13	639/2	1/53
95	11	650/54	642/19	1/28
95	14	651/58	644/37	1/11
95	17	652/61	646/49	0/94
95	19	653/28	647/88	0/83
95	22	654/29	649/92	0/67
95	24	654/95	651/26	0/56
95	27	655/93	653/25	0/41
100	7	643/9	635/57	1/29
100	11	645/38	638/42	1/08
100	14	646/47	640/51	0/92
100	17	647/54	642/57	0/77
100	19	648/25	643/92	0/67
100	22	649/3	645/93	0/52
100	24	649/99	647/25	0/42
100	27	651/01	649/23	0/27
100	29	651/68	650/53	0/18
100	34	653/34	653/78	-0/07

ادامه‌ی جدول (۳-۸): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
100	39	654/97	657/02	-0/31
100	44	656/56	660/26	-0/56
100	49	658/11	663/5	-0/82
100	54	659/64	666/76	-1/08
100	59	661/14	670/04	-1/35
110	7	633/27	627/47	0/92

110	11	634/9	630/11	0/75
110	14	636/1	632/09	0/63
110	17	637/27	634/06	0/50
110	19	638/04	635/38	0/42
110	22	639/19	637/36	0/29
110	24	639/94	638/68	0/20
110	45	647/43	653/02	-0/86
110	55	650/75	660/21	-1/45
110	65	653/93	667/62	-2/09
120	7	622/55	618/39	0/67
120	11	624/34	620/92	0/55
120	14	625/65	622/84	0/45
120	17	626/94	624/79	0/34
120	19	627/79	626/11	0/27
120	22	629/04	628/12	0/15
120	24	629/86	629/48	0/06
120	45	638	644/82	-1/07
120	55	641/58	652/78	-1/75
120	65	645/01	661/07	-2/49
150	7	589/89	586/61	0/56
150	11	592/3	589/26	0/51
150	14	594/05	591/37	0/45
150	17	595/75	593/6	0/36
150	19	596/87	595/14	0/29
150	22	598/51	597/53	0/16
150	24	599/59	599/19	0/07
150	45	610	618/99	-1/47
150	65	618/73	640/74	-3/56
180	7	555/82	550/6	0/94
180	11	559/12	553/96	0/92
180	14	561/5	556/68	0/86
180	17	563/79	559/55	0/75

ادامه‌ی جدول (۳-۸): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
180	19	565/28	561/55	0/66
180	22	567/45	564/67	0/49
180	24	568/86	566/83	0/36
180	45	582/19	592/49	-1/77
180	55	587/77	606/04	-3/11
180	65	592/98	619/95	-4/55
200	7	531/75	525/61	1/15
200	11	535/92	529/69	1/16
200	14	538/87	532/97	1/09
200	17	541/69	536/42	0/97
200	19	543/51	538/81	0/86
200	22	546/15	542/53	0/66
200	24	547/85	545/08	0/50
200	45	563/59	574/96	-2/02
200	65	575/97	606/02	-5/22
225	7	499/33	494/43	0/98

225	11	505/09	499/57	1/09
225	14	509/07	503/64	1/07
225	17	512/8	507/89	0/96
225	19	515/18	510/82	0/85
225	22	518/58	515/33	0/63
225	24	520/75	518/42	0/45
225	45	540/19	553/51	-2/47
225	65	554/84	588/57	-6/08
250	7	462/92	464/15	-0/27
250	11	471/35	470/42	0/20
250	14	476/94	475/33	0/34
250	18	483/64	482/14	0/31
250	23	491/11	490/98	0/03
250	45	516/61	532/69	-3/11
250	65	533/87	571/02	-6/96
275	9	426/67	439/05	-2/90
275	13	438/8	446/58	-1/77
275	16	446/39	452/4	-1/35
275	19	453/09	458/34	-1/16
275	23	461/01	466/43	-1/18
275	45	492/86	512/49	-3/98
275	65	513/11	553/28	-7/83

ادامه‌ی جدول (۳-۸): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
90	9	731/75	720/59	1/53
90	13	732/99	722/73	1/40
90	17	734/22	724/59	1/31
90	22	735/73	726/57	1/25
90	24	736/32	727/26	1/23
95	9	726/68	716/75	1/37
95	13	727/96	718/87	1/25
95	17	729/23	720/74	1/16
95	22	730/79	722/76	1/10
95	40	736/17	727/82	1/13
95	60	741/76	730/94	1/46
100	9	721/63	712/74	1/23
100	13	722/96	714/86	1/12
100	17	724/27	716/75	1/04
100	22	725/89	718/84	0/97
100	40	731/43	724/38	0/96
100	55	735/79	727/49	1/13
120	9	701/68	695/28	0/91
120	13	703/23	697/55	0/81
120	17	704/74	699/68	0/72
120	22	706/59	702/18	0/62
120	40	712/92	710/06	0/40
120	55	717/83	715/74	0/29
150	9	672/31	666/14	0/92
150	13	674/25	669	0/78
150	17	676/14	671/83	0/64

150	22	678/44	675/31	0/46
150	40	686/19	687/47	-0/19
150	55	692/1	697/12	-0/73
175	9	647/89	640/51	1/14
175	13	650/27	644/1	0/95
175	17	652/57	647/69	0/75
175	22	655/34	652/18	0/48
175	40	664/54	668/14	-0/54
175	55	671/43	680/9	-1/41
200	9	623/08	614/62	1/36
200	13	626/02	619/03	1/12
200	17	628/84	623/46	0/86

ادامه‌ی جدول (۳-۸): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
200	22	632/2	628/99	0/51
200	40	643/16	648/6	-0/85
200	55	651/2	664/11	-1/98
250	9	570/54	564/21	1/11
250	13	575/24	570/21	0/87
250	17	579/62	576/18	0/59
250	22	584/72	583/57	0/20
250	40	600/48	609/15	-1/44
250	55	611/42	628/62	-2/81
300	9	510/41	516/92	-1/28
300	13	518/67	524/08	-1/04
300	17	525/96	531/12	-0/98
300	22	534/05	539/74	-1/07
300	40	557/12	568/73	-2/08
300	55	571/96	590/02	-3/16
140	9	734/28	730/9	0/46
140	14	736/34	731/29	0/69
140	19	738/34	731/63	0/91
140	24	740/3	731/95	1/13
160	9	715/85	712/83	0/42
160	14	718/19	714/08	0/57
160	19	720/46	715/31	0/71
160	24	722/67	716/53	0/85
160	40	729/33	720/38	1/23
160	60	736/96	725/11	1/61
180	9	697/69	694/56	0/45
180	14	700/36	696/68	0/53
180	19	702/94	698/77	0/59
180	24	705/43	700/84	0/65
180	40	712/91	707/31	0/79
180	60	721/36	714/92	0/89
200	9	679/61	676/25	0/49
200	14	682/68	679/18	0/51
200	19	685/63	682/07	0/52
200	24	688/46	684/92	0/51
200	40	696/89	693/7	0/46

200	60	706/23	703/74	0/35
225	9	656/9	653/4	0/53

ادامه‌ی جدول (۳-۸): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
225	14	660/58	657/24	0/51
225	19	664/07	661	0/46
225	24	667/4	664/69	0/41
225	40	677/16	675/87	0/19
225	60	687/82	688/33	-0/07
250	9	633/74	630/62	0/49
250	14	638/19	635/21	0/47
250	19	642/38	639/68	0/42
250	24	646/32	644/03	0/35
250	40	657/68	657/06	0/09
250	60	669/83	671/3	-0/22
275	9	609/8	607/86	0/32
275	14	615/27	613/02	0/37
275	19	620/32	618/02	0/37
275	24	625/02	622/86	0/35
275	40	638/29	637/2	0/17
275	60	652/12	652/66	-0/08
300	9	584/71	585/01	-0/05
300	14	591/52	590/57	0/16
300	19	597/68	595/93	0/29
300	24	603/34	601/1	0/37
300	40	618/88	616/27	0/42
300	60	634/62	632/46	0/34

سپس به منظور اجتناب از همبستگی‌های تصادفی و تضمین قدرت شبکه آزمون Y- تصادفی انجام شد، لذا داده‌های دانسیته (متغییر وابسته) به صورت تصادفی ایجاد شدند. مدل شبکه عصبی موجک بهینه شده با استفاده از ماتریس متغییرهای مستقل اصلی و مقادیر تصادفی دانسیته ترکیبات توسعه یافت. نتایج حاصل از چندین مجموعه تصادفی ایجاد شده در جدول (۳-۹) آورده شده است. ضریب همبستگی پایین نشان‌دهنده‌ی عدم همبستگی تصادفی در مدل شبکه عصبی موجک بهینه شده می‌باشد.

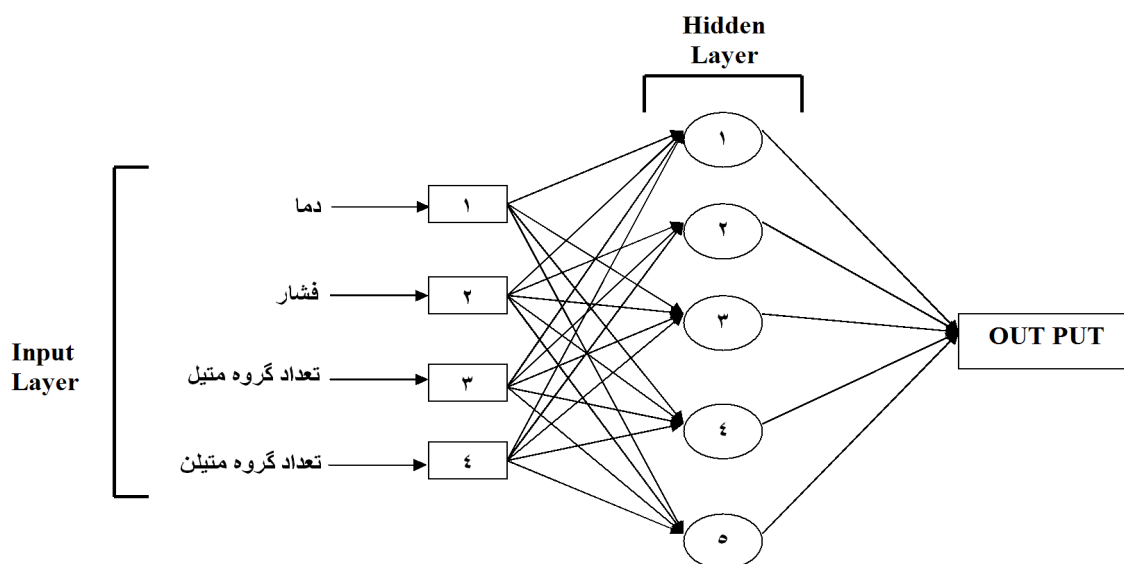
جدول (۳-۹): مقادیر R^2 برای سری پیش‌بینی و تایید بعد از چندین تست Y -تصادفی برای شبکه‌ی آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

تکرار	R^2 سری پیش‌بینی	R^2 سری تایید
1	0/1644	0/1522
2	0/1551	0/1452
3	0/1191	0/1391
4	0/1068	0/1442
5	۰/۰۸۹۹	0/1359
6	0/1129	0/1520
7	0/1166	0/1247
8	0/1230	0/1195
9	0/0950	0/1277
10	0/1104	0/0898

۳-۲-۳-۵ معماری شبکه

ساختار هندسی شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های ۲ تا ۴ کربنه

در شکل (۳-۴) نشان داده شده است.



شکل (۳-۴): ساختار هندسی شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های خطی ۲ تا ۴ کربنه

۳-۳-۳ شبکه عصبی موجک جامع برای آلکان‌ها از ۵ تا ۱۹ کربنه

در این شبکه از سه توصیف کننده دما و فشار و یک توصیف کننده بدست آمده از روش سهم گروه استفاده می شود. ترکیبات فوق شامل دو گروه ساختاری متیل و متیلن می باشند به عبارتی هر ترکیب آلکان خطی شامل دو گروه متیل و $(n-2)$ گروه متیلن می باشد که n تعداد کربن های آلکان مربوطه است. اما از آنجا که تعداد گروه متیل برای تمام ترکیبات یکسان است و به عنوان توصیف کننده در شبکه بکار نمی رود، در نتیجه تعداد گروه متیلن به صورت یک کد یک رقمی در ماتریس ورودی بعد از دما و فشار وارد می شود. کد بدست آمده از روش سهم گروه برای ترکیبات فوق در جدول (۳-۱۰) آورده شده است.

جدول (۳-۱۰): توصیف کننده های مورد استفاده برای ترکیبات ۵ تا ۱۹ کربنه

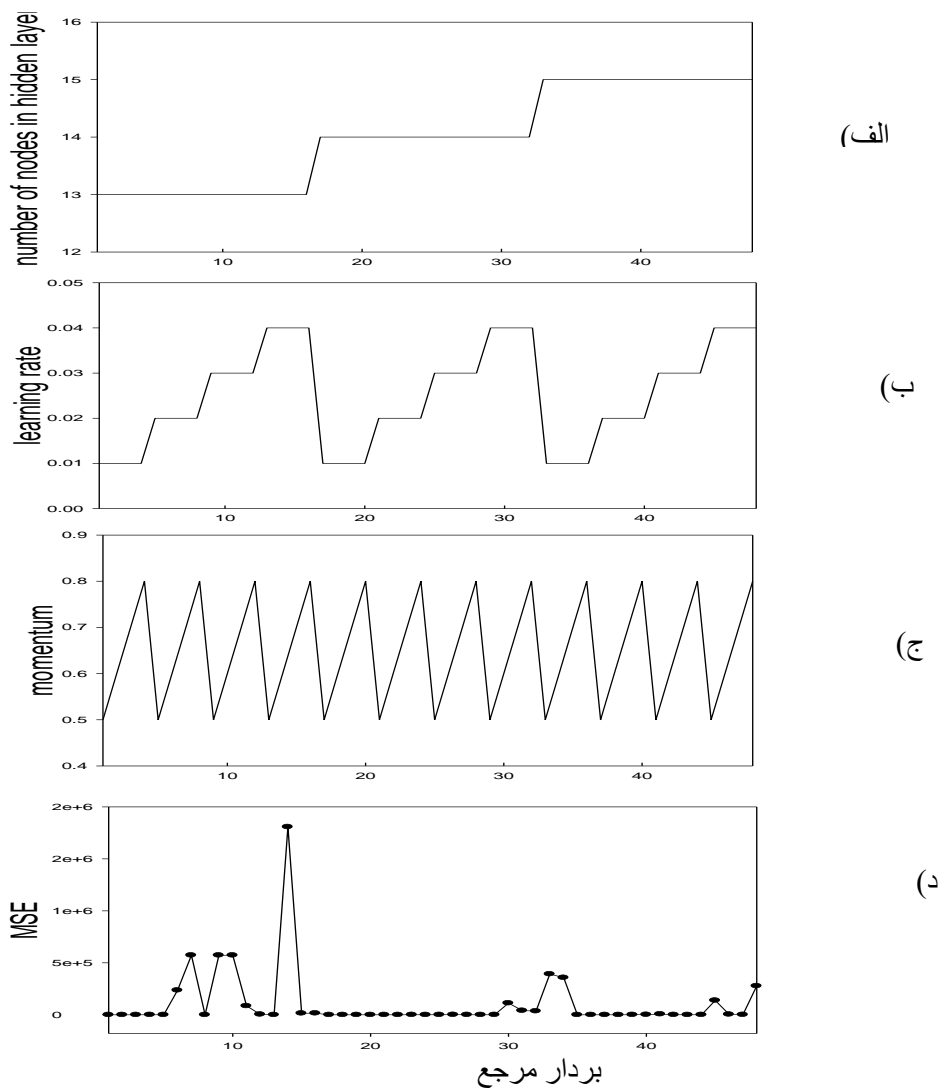
نام ترکیب	توصیف کننده ها در ماتریس ورودی		
	ستون اول	ستون دوم	ستون سوم
پنتان	T	p	۳
هگزان	T	p	۴
هپتان	T	p	۵
اکتان	T	p	۶
نونان	T	p	۷
دکان	T	p	۸
دودکان	T	p	۱۰
پنتادکان	T	p	۱۳
هپتادکان	T	p	۱۵
اکتادکان	T	p	۱۶
نونادکان	T	p	۱۷

بر این اساس مدل شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از سه توصیف کننده و یک خروجی برای ترکیبات فوق طراحی گردید. مشابه شبکه‌ی بهینه شده قبلی، پس از آموزش شبکه طبق دستورالعمل بخش (۳-۳-۱-۴)، پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون لایه‌ی مخفی و سپس تعداد دور آموزش بهینه شد که مقادیر بهینه این پارامترها در جدول (۳-۱۱) آمده است.

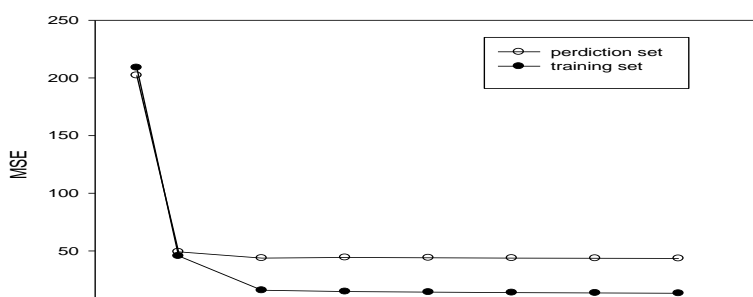
جدول (۳-۱۱): مقدار پارامترهای شبکه‌ی موجک بهینه شده برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه

تعداد دورهای مرحله آموزش	ممنتم	سرعت آموزش	تعداد نرون لایه مخفی
۱۰۰۰	0/7	0/03	۱۵

برای مشخص شدن چگونگی کار بخشی از محاسبات برای این شبکه در شکل (۳-۵) و (۳-۶) نشان داده شده است.



شکل (۳-۵): نمودارهای (الف) تعداد نرون لایه مخفی (ب) مقادیر ممنتم (ج) سرعت آموزش (د) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری پیش‌بینی که مینیمم مقدار آن را نشان می‌دهد بر حسب بردار مرجع برای آلکان‌ها از ۵ تا ۱۹ کربنه



شکل (۳-۶): نمودار MSE بر حسب تعداد دور آموزش برای سری‌های آموزش و پیش‌بینی برای آلکان‌ها از ۵ تا ۱۹ کربنه

شبکه بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته ترکیبات فوق در دماها و فشارهای مربوط به دو سری پیش‌بینی و تأیید استفاده شد. متوسط درصد خطای نسبی و مقادیر MSE مربوط به دو سری پیش‌بینی و تأیید برای این شبکه در جدول (۳-۱۲) آورده شده است.

جدول (۳-۱۲): متوسط درصد خطای نسبی و MSE برای سری پیش‌بینی و تأیید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه

نام ترکیب	MSE		$100 \times (\Delta\rho /\rho)$	
	برای سری پیش‌بینی	برای سری تأیید	برای سری پیش‌بینی	برای سری تأیید
پنتان	348/74	35/63	۲/۳ (4/6)	0/77 (1/4)
هگزان	102/15	110/46	1/2 (2/32)	1/16 (2/15)
هپتان	92/26	96/92	1/38 (1/89)	1/3 (1/64)
اکتان	50/17	49/51	0/93 (1/65)	0/81 (1/76)
نونان	24/134	31/54	0/58 (1/41)	0/67 (1/2)
دکان	17/62	36/26	0/49 (0/98)	0/72 (1/27)
دودکان	5/60	22/12	0/25 (0/66)	0/58 (0/84)
پنتادکان	15/41	12/98	0/40 (1/07)	0/38 (0/84)
هپتادکان	21/60	23/17	0/46 (1/38)	0/49 (1/27)
اکتادکان	32/68	29/61	0/60 (1/41)	0/57 (1/37)
نونادکان	24/29	59/98	0/49 (1/39)	0/83 (1/42)

همانطور که مشاهده می‌شود متوسط خطای نسبی برای سری پیش‌بینی و تأیید به ترتیب

۰/۸۲٪ و ۰/۷۵٪ می‌باشد که توانایی بالای شبکه را در پیش‌بینی دانسیته‌ی این ترکیبات نشان

می‌دهد. همچنین مقادیر دانسیته‌ی تجربی و پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه برای دو سری

پیش‌بینی و تایید برای این ترکیبات در جداول (۳-۱۳) و (۳-۱۴) آورده شده است.

جدول (۳-۱۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
303/15	15/12	633/8	634/12	-0/051
303/15	125/20	706/2	737/16	-/38
323/15	29/73	632/3	643/97	-/845
323/15	151/24	706/8	739/36	-4/607
298/15	50/50	695/9	698/65	-0/395
303/15	10/22	660/6	651/36	1/39
303/15	100/01	719/3	735/17	-2/20
323/15	10/09	644	642/25	0/270
323/15	49/00	678/2	682/7	-0/663
323/15	80/10	697/6	708/4	-1/54
348/15	10/11	622/9	629/67	-1/087
348/15	69/40	674/2	685/07	-1/612
348/15	125/12	707/1	723/55	-2/327
298/15	11/25	689/41	676/33	1/897
308/15	11/25	681/62	671/36	1/505
318/15	11/25	673/95	666/14	1/158
328/15	11/25	666/38	660/75	0/845
303/15	10/52	703/4	691/79	1/651
303/15	31/84	718/8	712/13	0/928
303/15	126/10	765/8	774/33	-1/114
323/15	10/38	688/5	680/28	1/194
323/15	31/26	705/2	699/41	0/820
323/15	126/51	756/1	762/54	-0/851
348/15	10/55	669/7	665/94	0/561
348/15	30/68	688/3	683/93	0/634
348/15	126/31	744	748/87	-0/654
303/00	40/00	738/72	733/23	0/742
303/00	120/00	777/24	781/42	-0/537
303/00	200/00	804/89	809/24	-0/540
333/00	40/00	719/84	714/42	0/752
333/00	120/00	762/43	764/15	-0/225
333/00	200/00	792/08	795/13	-0/385

ادامه‌ی جدول (۳-۱۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه

با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
363/00	40/00	701/16	697/03	0/589
363/00	120/00	748/06	749/3	-0/165
363/00	200/00	779/67	783/46	-0/486
393/00	40/00	682/78	681/62	0/170

393/00	120/00	734/21	736/95	-0/373
393/00	200/00	767/75	774/13	-0/830
423/00	40/00	664/54	668/53	-0/6
423/00	120/00	720/72	727/1	-0/884
423/00	200/00	756/26	766/97	-1/416
303/15	15/60	734/1	726/9	0/981
303/15	101/64	778/8	781/74	-0/377
303/15	175/19	805/6	809/55	-0/490
323/15	15/30	719/7	714/07	0/782
323/15	101/94	768/2	770/1	-0/246
323/15	171/74	794/5	798/63	-0/519
348/15	15/44	702/6	699/08	0/50
348/15	101/39	756/0	756/55	-0/0201
348/15	169/93	782/9	787/11	-0/537
293/15	40/00	773/3	772/14	0/149
293/15	120/00	807/3	809/98	-0/332
313/15	40/00	761/1	759/32	0/233
313/15	120/00	798	799	-0/125
333/15	40/00	749/3	747/4	0/253
333/15	120/00	788/6	789/14	-0/069
353/15	40/00	737/5	736/5	0/135
353/15	120/00	779/4	780/42	-0/130
373/15	40/00	725/7	726/68	-0/135
373/15	120/00	770/3	772/8	-0/324
393/15	40/00	714	717/99	-0/558
393/15	120/00	761/2	766/25	-0/664
313/15	49/95	784/62	785/42	-0/102
313/15	89/80	802/82	802/75	0/8
313/15	129/65	818/09	815/78	0/282
333/15	49/95	773/45	775/08	-0/21
333/15	89/80	792/82	793/55	-0/921
333/15	129/65	808/88	807/65	0/152
353/15	49/95	762/48	765/89	-0/446
353/15	89/80	783/08	785/47	-0/305

ادامه‌ی جدول (۳-۱۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
353/15	129/65	799/96	6۰۰۸	-0/074
373/15	49/95	751/65	757/84	-0/824
373/15	89/80	773/53	778/48	-0/64
373/15	129/65	791/26	794/47	-0/405
383/15	49/95	746/27	754/25	-1/068
383/15	89/80	768/82	775/38	-/853
383/15	129/65	786/98	791/77	-0/609
323/15	49/95	787/81	788/72	-0/115
323/15	89/80	806/13	804/47	0/206
323/15	129/65	821/5	815/81	0/692
343/15	49/95	776/88	780	-/401
343/15	89/80	796/34	796/81	-0/594
343/15	129/65	812/48	809/06	0/420
363/15	49/95	766/11	772/4	-/821

363/15	89/80	786/78	790/2	-/434
363/15	129/65	803/72	803/25	/0583
383/15	49/95	755/47	765/9	-1/38
383/15	89/80	777/4	784/57	-/922
383/15	129/65	795/16	798/31	-0/396
333/15	49/95	786/06	787/34	-0/162
333/15	89/80	804/75	802/54	0/274
333/15	129/65	820/37	813/19	0/875
353/15	49/95	775/29	779/7	-/568
353/15	89/80	795/12	795/86	-/093
353/15	129/65	811/5	807/28	0/519
373/15	49/95	764/7	773/13	-1/102
373/15	89/80	785/74	790/15	-/561
373/15	129/65	802/91	802/23	0/0841
383/15	49/95	759/46	770/23	-1/41
383/15	89/80	780/12	787/64	-0/964
383/15	129/65	798/71	800/01	-0/162
323/15	39/95	789/71	789/4	0/0374
323/15	59/90	799/65	797/35	0/288
333/15	49/95	789/45	789/55	-0/0125
333/15	89/80	807/92	803/65	0/527
353/15	49/95	778/78	782/4	-0/465
353/15	89/80	798/41	797/4	0/126
353/15	129/65	814/65	807/56	0/870

ادامه‌ی جدول (۳-۱۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
373/15	49/95	768/22	776/3	-1/05
373/15	89/80	789/07	792/06	-0/379
373/15	129/65	806/12	802/8	0/411
383/15	49/95	762/97	773/61	-1/39
383/15	89/80	784/44	789/72	-0/673
383/15	129/65	801/91	800/7	0/151

جدول (۳-۱۴): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
303/15	۱۵/۲	633/8	630/81	0/470
303/15	30/39	648/4	649/03	-0/01
323/15	۱۵/۰۹	616/1	623/12	-1/14
323/15	50/06	650/1	659/26	-1/41
298/15	153/1	744	759/33	-2/100
303/15	40/03	685/2	680/05	0/75
303/15	60/12	698/1	697/8	0/04
303/15	148/99	739/9	754/17	-1/92
323/15	39/93	671/5	668/98	0/37

323/15	129/07	721/6	731/44	-1/36
323/15	201/5	748/7	764/03	-2/04
348/15	39/02	653/7	654/01	-0/04
348/15	79/93	683/3	685/78	-0/36
348/15	177/15	728/7	740/96	-1/68
348/15	221/5	742/5	758/47	-2/15
298/15	29/5	703/29	691/69	1/649
308/15	29/5	696/33	686/15	1/462
318/15	29/5	689/54	680/47	1/315
328/15	29/5	682/91	674/71	1/201
303/15	21/11	711/4	698/81	1/769
303/15	75/38	743/5	738/97	0/609
303/15	174/7	783/2	786/29	-0/394
323/15	20/86	697/3	686/85	1/498
323/15	76/38	732/9	726/93	0/814
323/15	174/48	774/7	774/96	-0/034

ادامه‌ی جدول (۳-۱۴): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
348/15	20/67	679/6	671/98	1/12
348/15	76/42	719/4	712/06	1/019
348/15	175/28	763/2	762/75	0/059
303	80	759/99	753/94	0/795
303	160	791/95	790/16	0/226
333	80	743/6	735/38	1/106
333	160	778/27	773/84	0/568
363	80	727/59	718/81	1/206
363	160	764/99	760/01	0/650
393	80	712/1	704/57	1/057
393	160	752/33	748/67	0/486
423	80	696/86	692/81	0/580
423	160	739/97	739/74	0/030
303/15	25/43	740/7	731/23	1/278
303/15	152/44	797/7	795/56	0/268
303/15	199/87	813/9	809/24	0/573
323/15	25/71	727/3	718/79	1/17
323/15	151/39	787/4	784/31	0/392
323/15	200/56	804/1	799/72	0/545
348/15	25/3	710/9	703/46	1/046
348/15	151	776/3	772/1	0/540
293/15	20	761/8	756/38	0/712
293/15	60	782/9	778/65	0/542
293/15	100	799/9	796/48	0/427
313/15	20	748/9	743/39	0/735
313/15	60	771/8	766/09	0/740
313/15	100	790	784/73	0/667
333/15	20	735/9	731/13	0/648
333/15	60	760/9	754/5	0/840
333/15	100	780/3	774/07	0/798
353/15	20	722/8	719/76	0/421
353/15	60	749/9	743/98	0/789

353/15	100	770/5	764/54	0/773
373/15	20	709/8	709/39	0/057
373/15	60	739/1	734/57	0/612
373/15	100	760/9	756/14	0/625
393/15	20	696/7	700/11	-0/490
393/15	60	728/3	726/3	0/274

ادامه‌ی جدول (۳-۱۴): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
393/15	100	751/5	748/86	0/351
313/15	30	773/88	771/87	0/2602
313/15	69/9	794/18	789/93	0/535
313/15	109/7	810/74	804/43	0/778
333/15	30	761/88	760/89	0/129
333/15	69/9	783/66	779/98	0/469
333/15	109/7	801/17	795/51	0/706
353/15	30	750	751/06	-0/141
353/15	69/9	773/38	771/19	0/283
353/15	109/7	791/87	787/69	0/527
373/15	30	738/19	742/38	-0/568
373/15	69/9	763/27	763/53	-0/034
373/15	109/7	782/79	780/94	0/236
383/15	30	732/29	738/48	-0/844
383/15	69/9	758/26	760/11	-0/243
383/15	109/7	778/31	777/95	0/0466
323/15	30	776/99	776/07	0/118
323/15	69/9	797/44	792/7	0/594
323/15	109/7	814/1	805/77	1/023
343/15	30	765/23	766/7	-0/192
343/15	69/9	787/14	784/36	0/353
363/15	109/7	804/73	798/36	0/790
363/15	30	753/57	758/5	-0/653
363/15	69/9	777/05	777/13	-/099
383/15	109/7	795/61	791/96	0/458
383/15	30	741/98	751/42	-1/272
383/15	69/9	767/12	770/95	-0/499
333/15	109/7	786/67	786/52	0/019
333/15	30	774/98	774/96	0/003
333/15	69/9	795/89	791/16	0/595
353/15	109/7	812/86	803/7	1/127
353/15	30	763/37	766/71	-0/437
353/15	69/9	785/76	783/87	0/2408
373/15	109/7	803/64	797/23	0/797
373/15	30	751/88	759/58	-1/024
373/15	69/9	775/85	777/62	-0/228
383/15	109/7	794/69	791/7	0/376
383/15	30	746/15	756/42	-1/377

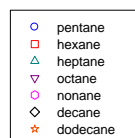
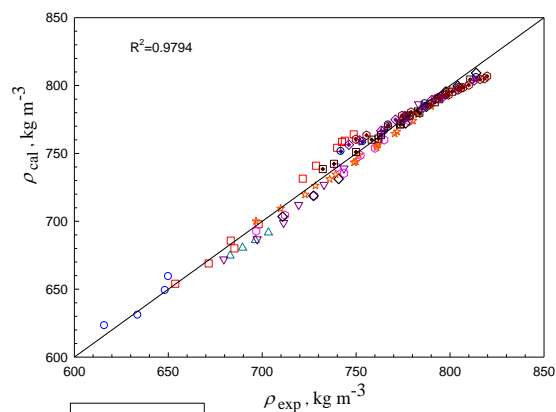
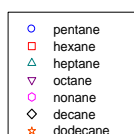
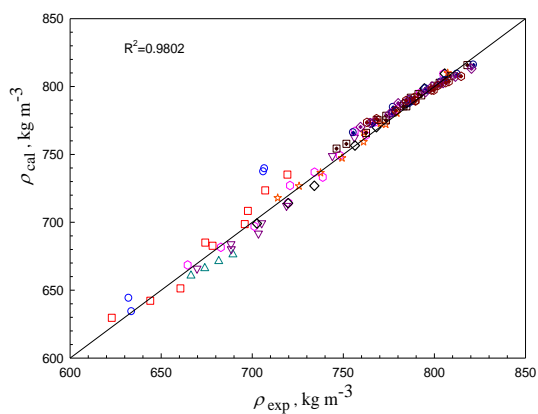
ادامه‌ی جدول (۳-۱۴): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی	درصد خطای نسبی
------	--------	------------------	---------------------------	----------------

		تجربی	شده	
383/15	69/9	770/96	774/87	۷-0/50
323/15	109/7	790/3	789/27	0/13
333/15	69/9	804/24	796/81	0/923
333/15	30	778/51	777/76	0/0964
333/15	69/9	799/16	793/01	0/769
333/15	109/7	815/94	804/54	1/396
353/15	119/7	819/74	806/85	1/572
353/15	30	767	770/04	-0/396
353/15	69/9	789/14	786/19	0/373
353/15	109/7	806/85	798/48	1/037
373/15	139/6	818/33	805/12	1/614
373/15	30	755/55	763/41	-1/04
373/15	69/9	779/25	780/38	-0/144
373/15	109/7	797/95	793/31	0/582
383/15	139/6	809/96	800/32	1/190
383/15	30	749/83	760/49	-1/421
383/15	69/9	774/36	777/82	-0/447
383/15	109/7	755/۵	798/03	0/632

نمودار برگشت برای این شبکه در شکل (۷-۳) رسم شده است که مقدار R^2 نزدیک به یک

نشان‌دهنده‌ی کارایی مطلوب شبکه در پیش‌بینی دانسیته می‌باشد.



ب

الف

شکل (۷-۳): نمودار برگشت برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۴ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای دو سری الف) پیش‌بینی ب) تایید آلکان‌های خطی از ۵ تا ۱۹ کربنه در محدوده‌ی دما و فشار موجود در جدول (۱-۳)

۳-۳-۴ شبکه عصبی موجک برای سیکلوآلکان‌ها

برای طراحی شبکه‌ی عصبی موجک مذکور در این شبکه از ۲ توصیف‌کننده دما و فشار و ۳ توصیف‌کننده برمبنای روش سهم گروه استفاده می‌شود. این سه توصیف‌کننده بر این مبنا انتخاب می‌شوند که در ترکیبات فوق ۳ گروه متیل، متیلن و متین وجود دارد که می‌توانند یک کد سه رقمی را در ماتریس ورودی بعد از دما و فشار تشکیل دهند. به عنوان مثال برای متیل‌سیکلوپنتان، یک گروه متیل، چهار گروه متیلن و یک گروه متین وجود دارد لذا بعد از دما و فشار در ماتریس ورودی کد (۱۴۱) در ستون‌های سوم تا پنجم وارد می‌شود. کد بدست آمده از روش سهم گروه برای ترکیبات فوق در جدول (۱۵-۳) آمده است.

جدول (۱۵-۳): توصیف‌کننده‌های مورد استفاده برای سیکلوآلکان‌ها

نام ترکیب	توصیف‌کننده‌ها در ماتریس ورودی				
	ستون اول	ستون دوم	ستون سوم	ستون چهارم	ستون پنجم

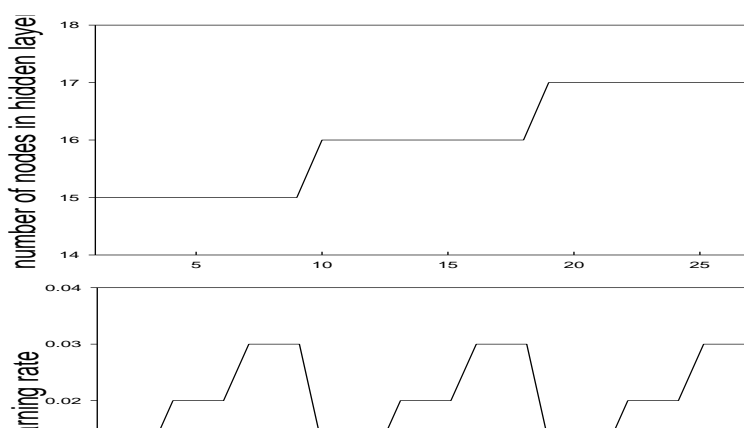
سیکلوپنتان	T	p	۰	۵	۰
سیکلوهگزان	T	p	۰	۶	۰
متیل سیکلوپنتان	T	p	۱	۴	۱
متیل سیکلوهگزان	T	p	۱	۵	۱

سپس مدل شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از ۵ توصیف کننده و یک خروجی برای ترکیبات فوق طراحی گردید. پس از آموزش شبکه طبق دستورالعمل بخش (۳-۳-۱-۴)، پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش، تعداد نرون لایه مخفی و در نهایت تعداد دور آموزش بهینه می‌شود که مقادیر بهینه این پارامترها در جدول (۳-۱۶) آمده است.

جدول (۳-۱۶): مقدار پارامترهای شبکه‌ی موجک بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی سیکلوآلکان‌ها

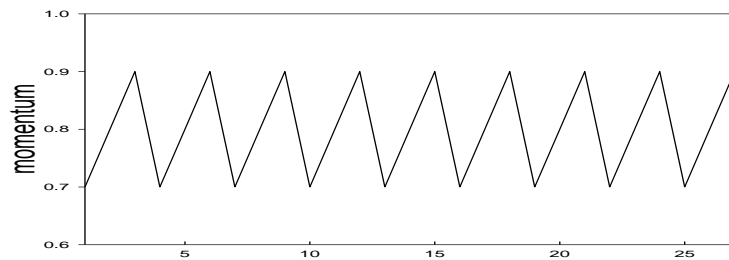
تعداد دورهای مرحله آموزش	ممنتم	سرعت آموزش	تعداد نرون لایه مخفی
۳۰۰۰	۰/۸	۰/۰۱	۱۶

برای مشخص شدن چگونگی کار بخشی از محاسبات برای این شبکه در شکل (۳-۸) و (۳-۹) نشان داده شده است.



(الف)

(ب)

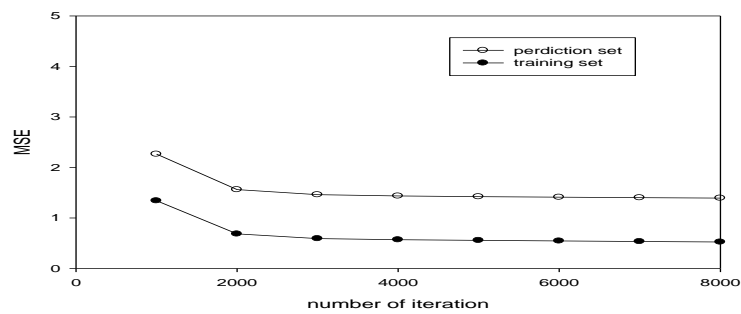


(ج)

(د)

بردار مرجع

شکل (۳-۸): نمودارهای الف) تعداد نرون لایه مخفی ب) مقادیر ممنتوم ج) سرعت آموزش د) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری پیش‌بینی که مینیمم مقدار آن را نشان می‌دهد بر حسب بردار مرجع برای سیکلوآلکان‌ها



شکل (۳-۹): نمودار MSE بر حسب تعداد دور آموزش برای سری‌های آموزش و پیش‌بینی برای سیکلوآلکان‌ها

شبکه بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات در دماها و فشارهای مربوط به دو سری پیش‌بینی و تأیید استفاده گردید. متوسط درصد خطای نسبی برای دو سری پیش‌بینی و تأیید همراه

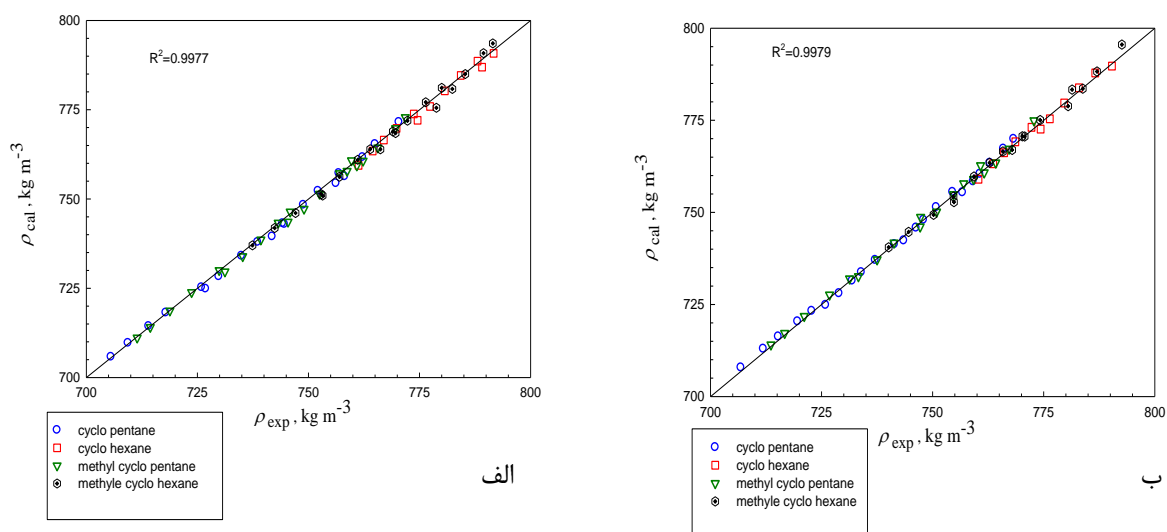
با مقادیر MSE در جدول (۱۷-۳) آورده شده است. داده‌های جدول (۱۷-۳) نشان می‌دهد که متوسط خطای نسبی شبکه در پیش‌بینی دانسیته توسط شبکه‌ی بهینه شده کمتر از ۰/۲٪ می‌باشد.

جدول (۱۷-۳): متوسط درصد خطای نسبی و MSE برای سری پیش‌بینی و تایید برای سیکلوآلکان‌ها

نام ترکیب	MSE		$100 \times (\Delta\rho /\rho)$	
	برای سری پیش‌بینی	برای سری تایید	برای سری پیش‌بینی	برای سری تایید
سیکلوپنتان	1/29	0/747	0/12(0/317)	0/098 (0/221)
سیکلوهگزان	1/60	0/869	0/126 (0/325)	0/10 (0/219)
متیل سیکلوپنتان	1/07	0/886	0/117 (0/213)	0/103 (0/272)
متیل سیکلوهگزان	1/97	1/46	0/136 (0/416)	0/11 (0/372)

مقدار R^2 نزدیک به یک در نمودار برگشت برای این شبکه در شکل (۱۰-۳) نیز نشان‌دهنده‌ی

کارایی بسیار بالای شبکه در پیش‌بینی دانسیته می‌باشد.



شکل (۱۰-۳): نمودار برگشت برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای دو سری الف) پیش‌بینی ب) تایید سیکلوآلکان‌ها در محدوده‌ی دما و فشار موجود در

جدول (۱-۳)

همچنین مقادیر دانسیته‌ی تجربی و پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه برای این ترکیبات برای

دو سری پیش‌بینی و تایید در جداول (۱۸-۳) و (۱۹-۳) آورده شده است.

جدول (۳-۱۸): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای سیکلوآلکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
283/15	0/941	756/2	754/39	0/240
283/15	3/192	758/15	756/32	0/241
283/15	7/906	762/2	761/72	0/063
283/15	11/305	764/99	765/37	-0/050
283/15	17/999	770/36	771/57	-0/158
298/15	1/423	741/84	739/49	0/317
298/15	4/367	744/6	742/98	0/217
298/15	8/981	748/84	748/35	0/066
298/15	12/70	752/16	752/3	-0/019
298/15	18/053	756/83	757/24	-0/054
313/15	1/423	726/85	724/87	0/272
313/15	4/169	729/82	728/32	0/205
313/15	8/990	734/92	734/1	0/112
313/15	12/529	738/55	737/96	0/080
313/15	18/040	744/16	743/2	0/130
333/15	1/256	705/56	705/79	-0/032
333/15	4/209	709/37	709/7	-0/047
333/15	7/951	714/03	714/42	-0/054
333/15	11/174	717/9	718/18	-0/039
333/15	18/193	725/94	725/28	0/091
283/15	1/470	789/08	786/92	0/273
283/15	4/808	791/68	790/78	0/113
298/15	1/008	774/57	772/05	0/325
298/15	4/229	777/38	775/92	0/187
298/15	8/120	780/68	780/28	0/051
298/15	12/476	784/28	784/61	-0/042
298/15	17/192	788/06	788/61	-0/070
313/15	2/061	761/27	759/39	0/247
313/15	5/362	764/44	763/43	0/133
313/15	8/072	766/97	766/51	0/060
313/15	11/196	769/83	769/78	0/6
313/15	15/537	773/71	773/83	-0/015

ادامه‌ی جدول (۳-۱۸): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای سیکلوآلکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
283/15	0/900	758/7	757/83	0/115
283/15	3/429	760/9	759/35	0/204
283/15	5/124	762/3	760/67	0/214
283/15	9/041	765/6	764/37	0/161
283/15	14/039	769/6	769/78	-0/024
283/15	16/792	771/8	772/86	-0/137
298/15	1/506	745/4	743/58	0/245
298/15	5/274	749	747/21	0/239
298/15	9/070	752/5	751/41	0/145
298/15	14/043	757	757/17	-0/023
298/15	17/220	759/7	760/78	-0/142

313/15	1/452	731/2	729/65	0/212
313/15	5/210	735/2	733/92	0/174
313/15	9/110	739/3	738/61	0/094
313/15	13/039	743/2	743/3	-0/013
313/15	15/765	745/9	746/42	-0/070
333/15	0/929	711/45	711/14	0/044
333/15	3/283	714/4	714/11	0/041
333/15	6/901	718/8	718/69	0/016
333/15	11/127	723/7	723/85	-0/021
333/15	16/661	729/9	730/02	-0/017
283/15	1/045	778/8	775/55	0/417
283/15	5/299	782/4	780/82	0/202
283/15	8/738	785/3	784/99	0/039
283/15	13/898	789/4	790/84	-0/182
283/15	16/549	791/5	793/59	-0/263
298/15	1/439	766/2	763/92	0/298
298/15	4/999	769/6	768/46	0/149
298/15	7/840	772/3	771/92	0/049
298/15	12/422	776/4	777/1	-0/090
298/15	16/429	780	781/14	-0/147
313/15	1/121	752/9	751/34	0/207
313/15	4/959	757	756/24	0/101
313/15	8/995	761/1	760/97	0/017
313/15	11/764	763/9	763/95	-0/6
313/15	16/965	769	768/9	0/012
333/15	2/816	737/4	737/01	0/053
333/15	6/979	742/4	741/87	0/072

ادامه‌ی جدول (۳-۱۸): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای سیکلوالکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
333/15	11/065	747/1	746/09	0/136
333/15	16/588	753/2	750/96	0/298

جدول (۳-۱۹): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای سیکلوالکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
283/15	1/535	756/72	755/43	0/170
283/15	4/286	759/13	758/4	0/096
283/15	6/064	760/63	760/43	0/027
283/15	8/774	762/89	763/43	-0/071
283/15	12/462	765/93	767/26	-0/174
283/15	15/284	768/23	769/93	-0/222
298/15	3/192	743/49	742/37	0/150
298/15	6/145	746/27	745/86	0/055
298/15	7/982	747/94	747/96	-0/3

298/15	11/160	750/81	751/42	-0/081
298/15	15/343	754/49	755/53	-0/138
313/15	0/549	725/9	724/85	0/145
313/15	3/318	728/92	728/04	0/120
313/15	6/118	731/9	731/46	0/060
313/15	8/059	733/94	733/74	0/027
313/15	11/052	737/08	737/08	۱0/ 0
313/15	15/275	741/4	741/35	0/ 7
333/15	2/237	706/84	707/88	-0/147
333/15	6/208	711/88	712/98	-0/154
333/15	8/959	715/25	716/3	-0/147
333/15	12/610	719/59	720/4	-0/112
333/15	15/379	722/78	723/24	-0/063
283/15	3/102	790/36	789/7	0/084
298/15	0/700	774/3	772/6	0/219
298/15	3/061	776/37	775/39	0/127
298/15	6/848	779/61	779/7	-0/012
298/15	10/831	782/93	783/81	-0/112
298/15	15/347	786/59	787/86	-0/162

ادامه‌ی جدول (۳-۱۹): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه

با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای سیکلوآلکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
313/15	1/082	760/32	759/01	0/173
313/15	4/513	763/63	763/22	0/053
313/15	7/102	766/07	766/21	-0/018
313/15	9/852	768/61	769/16	-0/071
313/15	13/899	772/26	773/08	-0/107
283/15	1/501	759/2	759	0/026
283/15	4/214	761/6	760/77	0/109
283/15	7/336	764/2	763/46	0/097
283/15	11/058	767/2	767/22	-0/ 2
283/15	18/088	772/8	774/91	-0/273
298/15	3/380	747/2	746/11	0/146
298/15	7/289	750/9	750/15	0/1
298/15	11/450	754/7	754/85	-0/020
298/15	14/043	757	757/82	-0/108
298/15	18/457	760/8	762/74	-0/255
313/15	3/403	733/3	732/61	0/094
313/15	7/337	737/5	737/2	0/041
313/15	11/156	741/3	741/74	-0/059
313/15	17/291	747/3	748/71	-0/189
333/15	2/642	713/6	714/07	-0/066
333/15	5/139	716/7	717/2	-0/070
333/15	8/866	721/1	721/81	-0/098
333/15	13/871	726/8	727/63	-0/114
333/15	18/017	731/3	732	-0/096
283/15	3/016	780/5	778/84	0/213
283/15	6/922	783/8	783/6	0/026
283/15	10/896	787	788/25	-0/158
283/15	17/861	792/6	795/55	-0/372
298/15	3/154	767/9	766/96	0/123

298/15	6/085	770/7	770/59	0/014
298/15	9/898	774/2	775/05	-0/110
298/15	18/047	781/4	783/32	-0/246
313/15	2/749	754/7	754/28	0/055
313/15	7/241	759/3	759/73	-0/057
313/15	10/624	762/8	763/47	-0/088
313/15	13/654	765/8	766/54	-0/097
313/15	18/217	770/2	770/66	-0/059
333/15	5/102	740/1	740/52	-0/057

ادامه‌ی جدول (۳-۱۹): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای سیکلوآلکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
333/15	8/933	744/6	744/68	-0/011
333/15	13/845	750/2	749/35	0/114
333/15	18/086	754/8	752/8	0/265

۳-۳-۵ شبکه عصبی موجک واحد برای آلکان‌ها از ۵ کربنه تا ۱۹

کربنه و سیکلوآلکان‌ها

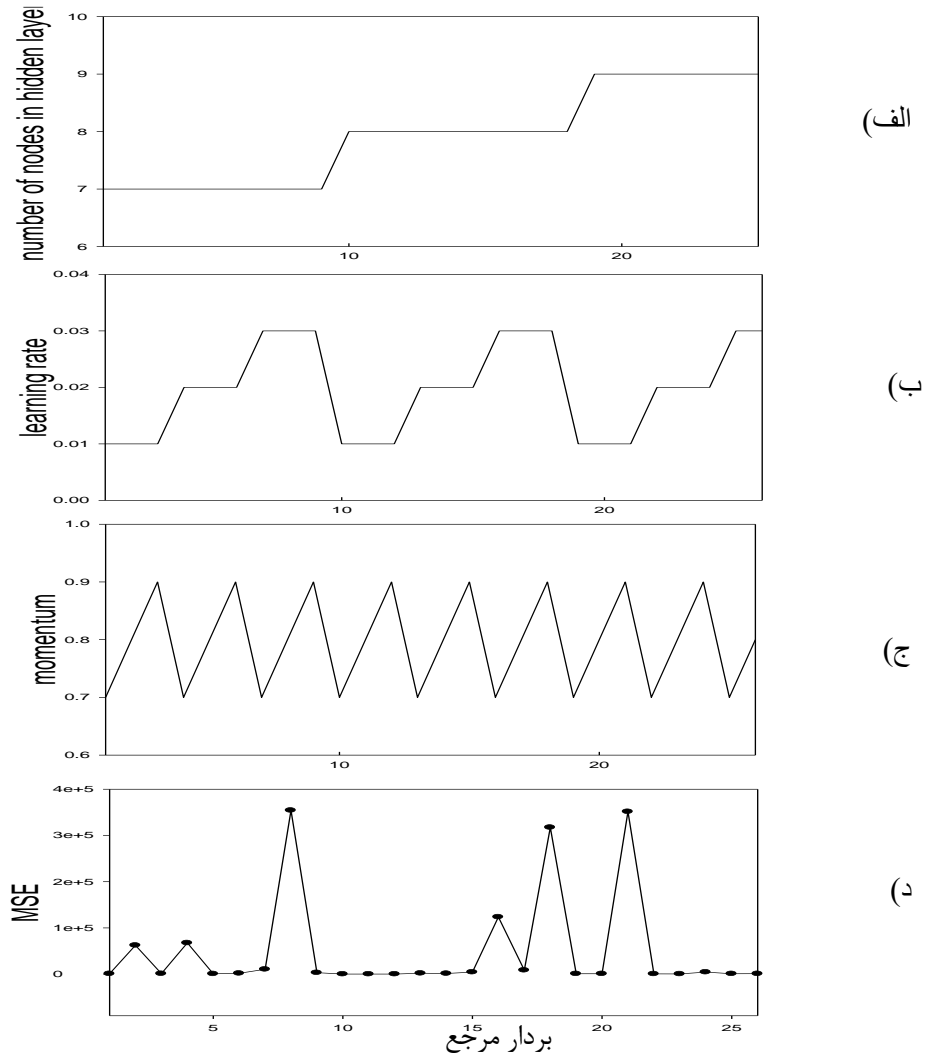
نتایج حاصل شده از بخش‌های (۳-۳-۳) و (۳-۳-۴) حاکی از آن است که شبکه‌های عصبی موجک بهینه شده‌ی برای آلکان‌ها از ۵ کربنه تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها به خوبی توانستند دانسیته‌ی را پیش‌بینی کنند. در نتیجه تصمیم بر این شد که شبکه‌ای واحد طراحی گردد که بتواند دانسیته‌ی تمامی ترکیبات فوق را به صورت هم‌زمان پیش‌بینی نماید. بر این اساس شبکه‌ی واحد با ۵ توصیف‌کننده شامل ۲ توصیف‌کننده‌ی دما و فشار و سه توصیف‌کننده‌ی بدست آمده از روش سهم گروه به عنوان ورودی شبکه و یک خروجی برای پیش‌بینی دانسیته، طراحی و بهینه‌سازی گردید. مقادیر بهینه شده‌ی شبکه در جدول (۳-۲۰) آورده شده است.

جدول (۳-۲۰): مقدار پارامترهای شبکه‌ی موجک بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها

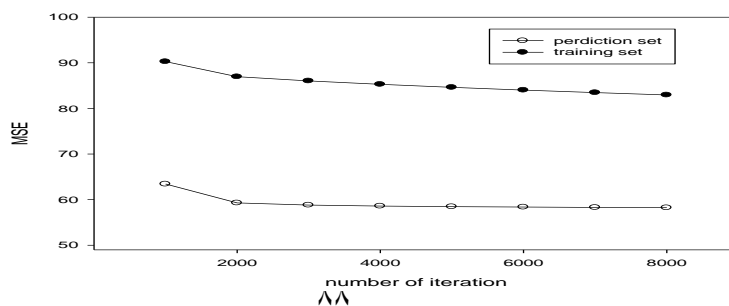
تعداد دوره‌های مرحله آموزش	ممنتم	سرعت آموزش	تعداد نرون لایه مخفی
----------------------------	-------	------------	----------------------

۸	0/0۱	0/8	2۰00
---	------	-----	------

برای مشخص شدن چگونگی کار بخشی از محاسبات برای این شبکه در شکل (۳-۱۱) و (۳-۱۲) نشان داده شده است.



شکل (۳-۱۱): نمودارهای (الف) تعداد نرون لایه مخفی (ب) مقادیر ممنتوم (ج) سرعت آموزش (د) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری پیش‌بینی که مینیمم مقدار آن را نشان می‌دهد بر حسب بردار مرجع برای آکن‌ها از ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآکن‌ها



شکل (۳-۱۲): نمودار MSE بر حسب تعداد دور آموزش برای سری‌های آموزش و پیش‌بینی برای آلکان‌ها از ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها

۳-۳-۵-۱ ارزیابی شبکه‌ی بهینه

شبکه‌ی بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی سری تأیید ترکیبات فوق استفاده شد. متوسط درصد خطای نسبی دو سری پیش‌بینی و تأیید همچنین مقادیر MSE مربوط به این دو سری در جدول (۳-۲۱) آورده شده است. متوسط خطای نسبی شبکه کمتر از ۱/۱٪ برای سری می‌باشد که نشان دهنده‌ی کارایی مطلوب شبکه عصبی موجک بهینه شده می‌باشد.

جدول (۳-۲۱): متوسط درصد خطای نسبی و MSE برای سری پیش‌بینی و تأیید برای آلکان‌های ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها

نام ترکیب	MSE		$100 \times (\Delta\rho /\rho)$	
	برای سری پیش‌بینی	برای سری تأیید	برای سری پیش‌بینی	برای سری تأیید
پنتان	۵۴۷/۱۸	19/16	3/5 (5/25)	1/3 (1/7)
هگزان	۶۶/۰۳	76/592	0/882 (2/39)	1/4 (3/03)
هپتان	۸۱/۶۹۹	123/12	1/33 (1/37)	1/6 (1/89)
اکتان	۸۷/۹۱۳	195/86	1/3 (1/74)	1/3 (2/16)
نونان	۵۱/۴۷۱	37/81	0/769 (1/87)	1/1 (2/04)
دکان	۴۷/۲۰۵	139/19	0/788 (1/4)	0/99 (1/84)
دودکان	۲۰/۲۷۶	31/595	0/527 (0/81)	0/95 (1/58)
پنتادکان	۲۰/۸۶۸	117/57	0/482 (1/19)	0/68 (1/55)
هپتادکان	۴۸/۲۶۷	94/139	0/738 (1/7)	0/88 (2/33)
اکتادکان	۷۳/۱۳۹	78/904	0/924 (1/92)	1/07 (2/61)
نونادکان	۸۸/۳۲۴	62/869	1/09 (2/03)	1/2 (2/83)
سیکلوپنتان	۱۴/۸۵۳	39/464	0/429 (0/97)	0/452 (1/18)
سیکلوهگزان	۸۱/۴۸۱	68/12	1/02 (1/95)	1/2 (2/09)
متیل سیکلوپنتان	۱۸/۶۷۸	99/897	0/51 (0/98)	0/77 (1/17)
متیل سیکلوهگزان	۱۵/۸۶	150/36	0/456 (0/82)	0/66 (1/1)

مقادیر تجربی و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه برای دو سری پیش‌بینی و تایید برای این ترکیبات در جداول (۲۲-۳) و (۲۳-۳) آورده شده است. نمودار برگشت برای این شبکه در شکل (۱۳-۳) رسم شده است و مقدار R^2 نزدیک به یک نشان‌دهنده‌ی کارایی بسیار خوب شبکه در پیش‌بینی دانسیته می‌باشد.

جدول (۲۲-۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
283/15	0/941	756/2	748/8	0/978
283/15	3/192	758/15	751/48	0/880
283/15	7/906	762/2	757/23	0/651
283/15	11/305	764/99	761/52	0/453
283/15	17/999	770/36	770/29	0/9
298/15	1/423	741/84	738/42	0/460
298/15	4/367	744/6	742/17	0/326
298/15	8/981	748/84	748/21	0/085
298/15	12/7	752/16	753/21	-0/140
298/15	18/053	756/83	760/62	-0/501
313/15	1/423	726/85	726/07	0/108
313/15	4/169	729/82	729/76	0/8
313/15	8/99	734/92	736/41	-0/203
313/15	12/529	738/55	741/41	-0/387
313/15	18/04	744/16	749/39	-0/703
333/15	1/256	705/56	707/67	-0/299
333/15	4/209	709/37	711/92	-0/359
333/15	7/951	714/03	717/4	-0/472
333/15	11/174	717/9	722/2	-0/598
333/15	18/193	725/94	732/9	-0/958
303/15	15/12	633/8	645/29	-1/812
303/15	125/2	706/2	742/77	-5/179
323/15	29/73	632/3	644/13	-1/872
323/15	151/24	706/8	743/94	-5/255
283/15	1/47	789/08	773/65	1/956
283/15	4/808	791/68	778/15	1/709
298/15	1/008	774/57	762/41	1/571
298/15	4/229	777/38	766/94	1/342
298/15	8/12	780/68	772/54	1/043
298/15	12/476	784/28	778/94	0/681
298/15	17/192	788/06	786/04	0/257
313/15	2/061	761/27	751/95	1/225
313/15	5/362	764/44	756/83	0/996
313/15	8/072	766/97	760/9	0/792
313/15	11/196	769/83	765/65	0/543
313/15	15/537	773/71	772/36	0/174
298/15	50/5	695/9	550.7	-0/668
303/15	10/22	660/6	658/36	0/339

ادامه‌ی جدول (۳-۲): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
303/15	100/01	719/3	736/49	-2/390
323/15	10/09	644	642/69	0/204
323/15	49	678/2	678/7	-0/073
323/15	80/1 0	697/6	704/59	-1/ 2
348/15	10/11	622/9	626/79	-0/624
348/15	69/4 0	674/2	679/2	-0/742
348/15	125/12	707/1	720/56	-1/903
283/15	0/9 0	758/7	751/22	0/986
283/15	3/429	760/9	755/12	0/759
283/15	5/124	762/3	757/72	0/601
283/15	9/041	765/6	763/67	0/252
283/15	14/039	769/6	771/14	-0/2
283/15	16/792	771/8	775/19	-0/439
298/15	1/506	745/4	738/22	0/964
298/15	5/274	749	743/8	0/694
298/15	9/07	752/5	749/35	0/418
298/15	14/043	757	756/51	0/065
298/15	17/22	759/7	761/01	-0/172
313/15	1/452	731/2	724/54	0/911
313/15	5/21	735/2	729/92	0/719
313/15	9/11	739/3	735/42	0/525
313/15	13/0390	743/2	740/88	0/312
313/15	15/765	745/9	744/62	0/171
333/15	0/929	711/45	706/52	0/693
333/15	3/283	714/4	709/76	0/650
333/15	6/901	718/8	714/67	0/575
333/15	11/127	723/7	720/33	0/466
333/15	16/661	729/9	727/6	0/315
298/15	11/25	689/41	680/64	1/272
308/15	11/25	681/62	672/33	1/362
318/15	11/25	673/95	664/65	1/380
328/15	11/25	666/38	657/6	1/317
283/15	1/045	778/8	776/32	0/318
283/15	5/2990	782/4	782/4	0/ 0
283/15	8/7380	785/3	787/25	-0/248
283/15	13/8980	789/4	794/4	-0/634
283/15	16/5490	791/5	798/03	-0/824
298/15	1/4390	766/	762/09	0/536

ادامه‌ی جدول (۳-۲): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
298/15	4/9990	769/6	766/99	0/339
298/15	7/84	772/3	770/86	0/187
298/15	12/4220	776/4	777	-0/077
298/15	16/4290	780	782/28	-0/293
313/15	1/1210	752/9	747/33	0/739

313/15	4/9590	757	752/43	0/603
313/15	8/9950	761/1	757/71	0/445
313/15	11/7640	763/9	761/29	0/342
313/15	16/9650	769	767/9	0/143
333/15	2/8160	737/4	731/4	0/814
333/15	6/9790	742/4	736/64	0/775
333/15	11/0650	747/1	741/71	0/721
333/15	16/5880	753/2	748/43	0/633
303/15	10/52	703/4	691/7	1/663
303/15	31/84	718/8	709/82	1/249
303/15	126/10	765/8	776/19	-1/356
323/15	10/38	688/5	676/47	1/748
323/15	31/26	705/2	693/99	1/589
323/15	126/51	756/1	760/39	-0/567
348/15	10/55	669/7	661/32	1/251
348/15	30/68	688/3	677/97	1/5
348/15	126/31	744	743/88	0/016
303	40	738/72	729/89	1/195
303	120	777/24	782/04	-0/617
303	2	804/89	820/01	-1/878
333	40	719/84	708/14	1/625
333	120	762/43	759/54	0/379
333	2	792/08	797/09	-0/633
363	40	701/16	692/16	1/283
363	120	748/06	742/72	0/713
363	2	779/67	779/62	0/7
393	40	682/78	681/64	0/167
393	120	734/21	731/13	0/419
393	2	767/75	767/02	0/096
423	40	664/54	676/1	-1/740
423	120	720/72	724/18	-0/480
423	2	756/26	758/64	-0/314

ادامه‌ی جدول (۳-۲۲): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
303/15	15/60	734/1	724/38	1/324
303/15	101/64	778/8	780/6	-0/231
303/15	175/19	805/6	815/58	-1/238
323/15	15/30	719/7	709/56	1/409
323/15	101/94	768/2	765/59	0/339
323/15	171/74	794/5	798/76	-0/537
348/15	15/44	702/6	695/03	1/077
348/15	101/39	756/4	749/92	0/857
348/15	169/93	782/9	782/23	0/086
293/15	40	773/3	772	0/169
293/15	120	807/3	813	-0/706
313/15	40	761/1	756/58	0/594
313/15	120	798	797/23	0/097
333/15	40	749/3	743/73	0/743
333/15	120	788/6	783/96	0/588

353/15	40	737/5	733/35	0/562
353/15	120	779/4	773/05	0/814
373/15	40	725/7	725/31	0/054
373/15	120	770/3	764/34	0/774
393/15	40	714	719/44	-0/762
393/15	120	761/2	757/63	0/469
313/15	49/95	784/62	787/45	-0/360
313/15	89/8 0	802/82	803/19	-0/046
313/15	129/65	818/09	815/76	0/285
333/15	49/95	773/45	775/48	-0/262
333/15	89/8 0	792/82	791	0/229
333/15	129/65	808/88	803/36	0/682
353/15	49/95	762/48	765/79	-0/435
353/15	89/8 0	783/08	781/02	0/263
353/15	129/65	799/96	793/08	0/859
373/15	49/95	751/65	758/22	-0/873
373/15	89/8 0	773/53	773/06	0/061
373/15	129/65	791/26	784/74	0/824
383/15	49/95	746/27	755/16	-1/191
383/15	89/8 0	768/82	769/77	-0/124
383/15	129/65	786/98	781/22	0/732
323/15	49/95	787/81	793/77	-0/756
323/15	89/8 0	806/13	805/97	0/020

ادامه‌ی جدول (۳-۲): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری پیش‌بینی برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوان‌آلکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
323/15	129/65	821/5	815/11	0/778
343/15	49/95	776/88	783/44	-0/845
343/15	89/8 0	796/34	795/36	0/123
343/15	129/65	812/48	804/21	1/018
363/15	49/95	766/11	775/16	-1/181
363/15	89/8 0	786/78	786/7	0/010
363/15	129/65	803/72	795/18	1/063
383/15	49/95	755/47	768/72	-1/754
383/15	89/8 0	777/4	779/79	-0/307
383/15	129/65	795/16	787/79	0/927
333/15	49/95	786/06	793/45	-0/940
333/15	89/8 0	804/75	803/82	0/115
333/15	129/65	820/37	811/19	1/119
353/15	49/95	775/29	784/33	-1/166
353/15	89/8 0	795/12	794/36	0/096
353/15	129/65	811/5	801/38	1/248
373/15	49/95	764/7	777/08	-1/619
373/15	89/8 0	785/74	786/66	-0/117
373/15	129/65	802/91	793/23	1/206
383/15	49/95	759/46	774/08	-1/926
383/15	89/8 0	780/12	783/41	-0/422
383/15	129/65	798/71	789/72	1/126
323/15	39/95	789/71	800/2	-1/328
323/15	59/9 0	799/65	805/39	-0/718
333/15	49/95	789/45	797/68	-1/043

333/15	89/80	807/92	806/38	0/190
353/15	49/95	778/78	788/71	-1/275
353/15	89/80	798/41	797/04	0/171
353/15	129/65	814/65	802/42	1/501
373/15	49/95	768/22	781/51	-1/730
373/15	89/80	789/07	789/38	-0/040
373/15	129/65	806/12	794/3	1/467
383/15	49/95	762/97	778/51	-2/037
383/15	89/80	784/44	786/12	-0/214
383/15	129/65	801/91	790/76	1/391

جدول (۳-۲۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
283/15	1/5350	756/72	747/72	1/189
283/15	4/2860	759/13	750/68	1/113
283/15	6/0640	760/63	752/62	1/053
283/15	8/7740	762/89	755/63	0/951
283/15	12/4620	765/93	759/82	0/797
283/15	15/2840	768/23	763/1	0/667
298/15	3/1920	743/49	738/69	0/646
298/15	6/1450	746/27	742/11	0/558
298/15	7/9820	747/94	744/27	0/491
298/15	11/16	750/81	748/06	0/366
298/15	15/3430	754/49	753/17	0/175
313/15	0/5490	725/9	723/28	0/361
313/15	3/3180	728/92	726/62	0/316
313/15	6/1180	731/9	730/04	0/253
313/15	8/0590	733/94	732/45	0/203
313/15	11/0520	737/08	736/22	0/117
313/15	15/2750	741/4	741/63	-0/030
333/15	2/2370	706/84	707/24	-0/057
333/15	6/2080	711/88	712/42	-0/076
333/15	8/9590	715/25	716/06	-0/114
333/15	12/61	719/59	720/97	-0/191
333/15	15/3790	722/78	724/74	-0/271
303/15	15/2	633/8	642/45	-1/365
303/15	30/39	648/4	656/48	-1/246
323/15	15/09	616/1	626/61	-1/706
323/15	50/06	650/1	657/57	-1/149
283/15	3/1020	790/36	773/77	2/099
298/15	0/7	774/3	760/25	1/815
298/15	3/0610	776/37	763/23	1/692
298/15	6/8480	779/61	768/09	1/478
298/15	10/8310	782/93	773/3	1/230
298/15	15/3470	786/59	779/33	0/923
313/15	1/0820	760/32	748/75	1/521
313/15	4/5130	763/63	753/3	1/353
313/15	7/1020	766/07	756/77	1/213

313/15	9/8520	768/61	760/51	1/054
313/15	13/8990	772/26	766/08	0/800
298/15	153/1	744	766/46	-3/01

ادامه‌ی جدول (۳-۲۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلواآلکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
303/15	40/03	685/2	681/73	0/506
303/15	60/12	698/1	697/94	0/023
303/15	148/99	739/9	759/37	-2/632
323/15	39/93	671/5	665/75	0/857
323/15	129/07	721/6	730/3	-1/205
323/15	201/5	748/7	771/44	-3/038
348/15	39/02	653/7	648/72	0/762
348/15	79/93	683/3	679/97	0/487
348/15	177/15	728/7	741/21	-1/717
348/15	221/5	742/5	763/49	-2/827
283/15	1/5010	759/2	750/31	1/171
283/15	4/2140	761/6	754/08	0/987
283/15	7/3360	764/2	758/38	0/761
283/15	11/0580	767/2	763/45	0/489
283/15	18/0880	772/8	772/86	-0/008
298/15	3/38	747/2	738/93	1/107
298/15	7/2890	750/9	744/12	0/902
298/15	11/45	754/7	749/58	0/678
298/15	14/0430	757	752/94	0/536
298/15	18/4570	760/8	758/6	0/289
313/15	3/4030	733/3	725/31	1/090
313/15	7/3370	737/5	730/35	0/969
313/15	11/1560	741/3	735/19	0/825
313/15	17/2910	747/3	742/82	0/599
333/15	2/6420	713/6	707/01	0/924
333/15	5/1390	716/7	710/08	0/923
333/15	8/8660	721/1	714/62	0/898
333/15	13/8710	726/8	720/63	0/849
333/15	18/0170	731/3	725/53	0/789
298/15	29/5	703/29	693/24	1/429
308/15	29/5	696/33	684/84	1/650
318/15	29/5	689/54	677/07	1/808
328/15	29/5	682/91	669/94	1/899
283/15	3/0160	780/5	777/06	0/440
283/15	6/9220	783/8	782/07	0/221
283/15	10/8960	787	787/1	-0/012
283/15	17/8610	792/6	795/74	-0/397
298/15	3/1540	767/9	762/4	0/716

ادامه‌ی جدول (۳-۲۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلواآلکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
------	--------	---------------------------	----------------------------------	----------------

298/15	6/0850	770/7	766/02	0/607
298/15	9/8980	774/2	770/68	0/454
298/15	18/0470	781/4	780/43	0/124
313/15	2/7490	754/7	747/54	0/948
313/15	7/2410	759/3	752/89	0/844
313/15	10/6240	762/8	756/86	0/778
313/15	13/6540	765/8	760/38	0/708
313/15	18/2170	770/2	765/61	0/596
333/15	5/1020	740/1	732/09	1/082
333/15	8/9330	744/6	736/42	1/099
333/15	13/8450	750/2	741/88	1/109
333/15	18/0860	754/8	746/52	1/097
303/15	21/11	711/4	697/61	1/938
303/15	75/38	743/5	736/3	0/968
303/15	174/7	783/2	792/14	-1/141
323/15	20/86	697/3	682/24	2/160
323/15	76/38	732/9	721/3	1/583
323/15	174/48	774/7	775/91	-0/156
348/15	20/67	679/6	666/73	1/894
348/15	76/42	719/4	705/41	1/945
348/15	175/28	763/2	759/73	0/454
303	80	759/99	751/1	1/170
303	160	791/95	793/38	-0/181
333	80	743/6	729/04	1/958
333	160	778/27	770/78	0/962
363	80	727/59	712/72	2/043
363	160	764/99	753/79	1/464
393	80	712/1	701/78	1/450
393	160	752/33	741/92	1/384
423	80	696/86	695/67	0/170
423	160	739/97	734/55	0/7133
303/15	25/43	740/7	728/33	1/671
303/15	152/44	797/7	797/43	0/034
303/15	199/87	813/9	815/9	-0/246
323/15	25/71	727/3	713/88	1/846
323/15	151/39	787/4	781/7	0/724
323/15	200/56	804/1	800/73	0/419

ادامه‌ی جدول (۳-۲۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
348/15	25/3	710/9	698/93	1/684
348/15	151/0	776/3	765/96	1/331
293/15	20	761/8	756/61	0/682
293/15	60	782/9	778/62	0/547
293/15	100	799/9	797/69	0/277
313/15	20	748/9	741/36	1/006
313/15	60	771/8	763/16	1/120
313/15	100	790	782/05	1/006
333/15	20	735/9	728/69	0/979
333/15	60	760/9	750/25	1/400

333/15	100	780/3	768/95	1/454
353/15	20	722/8	718/51	0/594
353/15	60	749/9	739/79	1/348
353/15	100	770/5	758/25	1/589
373/15	20	709/8	710/68	-0/124
373/15	60	739/1	731/64	1/009
373/15	100	760/9	749/8	1/458
393/15	20	696/7	705/06	-1/199
393/15	60	728/3	725/64	0/366
393/15	100	751/5	743/42	1/075
313/15	30	773/88	775/26	-0/179
313/15	69/9	794/18	791/31	0/362
313/15	109/7	810/74	804/66	0/750
333/15	30	761/88	763/46	-0/207
333/15	69/9	783/66	779/29	0/557
333/15	109/7	801/17	792/45	1/089
353/15	30	750	753/97	-0/529
353/15	69/9	773/38	769/53	0/498
353/15	109/7	791/87	782/42	1/194
373/15	30	738/19	746/63	-1/143
373/15	69/9	763/27	761/84	0/187
373/15	109/7	782/79	774/38	1/074
383/15	30	732/29	743/71	-1/559
383/15	69/9	758/26	758/71	-0/060
383/15	109/7	778/31	771/05	0/932
323/15	30	776/99	783/66	-0/859
323/15	69/9	797/44	796/44	0/126

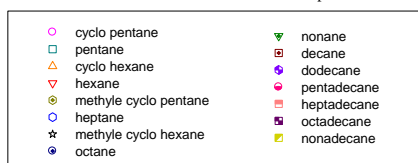
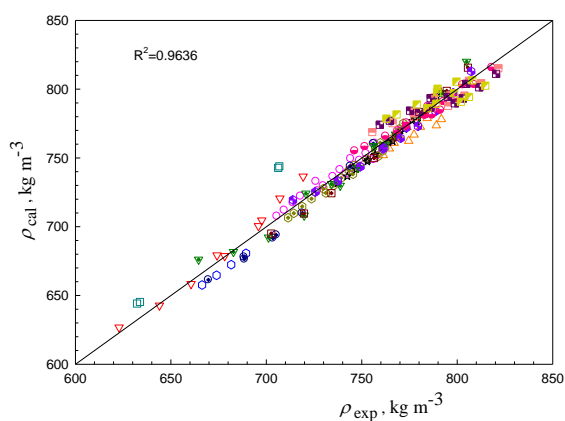
ادامه‌ی جدول (۳-۲۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
323/15	109/7	814/1	806/63	0/918
343/15	30	765/23	773/52	-1/084
343/15	69/9	787/14	786/04	0/140
343/15	109/7	804/73	795/97	1/088
363/15	30	753/57	765/47	-1/580
363/15	69/9	777/05	777/65	-0/077
363/15	109/7	795/61	787/25	1/051
383/15	30	741/98	759/32	-2/337
383/15	69/9	767/12	771/07	-0/515
383/15	109/7	786/67	780/24	0/817
333/15	30	774/98	784/41	-1/217
333/15	69/9	795/89	795/51	0/048
333/15	109/7	812/86	804/07	1/081
353/15	30	763/37	775/52	-1/591
353/15	69/9	785/76	786/3	-0/068
353/15	109/7	803/64	794/55	1/132
373/15	30	751/88	768/53	-2/214
373/15	69/9	775/85	778/91	-0/395
373/15	109/7	794/69	786/76	0/998
383/15	30	746/15	765/69	-2/619

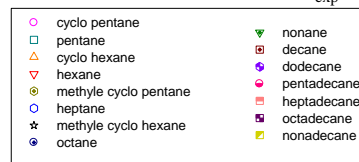
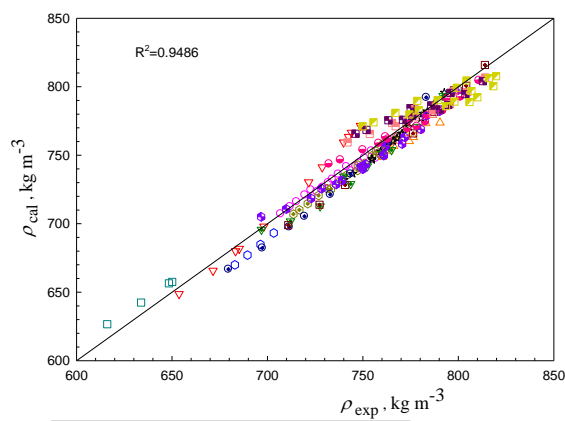
383/15	69/9	770/96	775/84	-0/633
383/15	109/7	790/3	783/46	0/866
323/15	69/9	804/24	804/43	-0/023
333/15	30	778/51	789/62	-1/427
333/15	69/9	799/16	799/17	-0/002
333/15	109/7	815/94	806/25	1/188
333/15	119/7	819/74	807/65	1/475
353/15	30	767	780/87	-1/809
353/15	69/9	789/14	790/1	-0/122
353/15	109/7	806/85	796/84	1/240
353/15	139/6	818/33	800/34	2/19
373/15	30	755/55	773/95	-2/436
373/15	69/9	779/25	782/76	-0/451
373/15	109/7	797/95	789/09	1/111
373/15	139/6	809/96	792/27	2/184
383/15	30	749/83	771/11	-2/838

ادامه‌ی جدول (۳-۲۳): مقادیر تجربی دانسیته و مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با استفاده از مدل بهینه شده همراه با دما و فشار و درصد خطای نسبی برای سری تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها

T(K)	p(MPa)	مقادیر دانسیته‌ی تجربی	مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده	درصد خطای نسبی
383/15	69/9	774/36	779/68	-0/687
383/15	109/7	793/55	785/77	0/981
383/15	139/6	805/83	788/76	2/118



الف



ب

شکل (۳-۱۳): نمودار برگشت برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای دو سری الف) پیش‌بینی ب) تایید برای آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها در محدوده‌ی دما و فشار موجود در جدول (۳-۱)

در انتها به منظور اجتناب از همبستگی‌های تصادفی و تضمین قدرت شبکه آزمون Y -تصادفی انجام شد، لذا داده‌های دانسیته (متغیر وابسته) به صورت تصادفی ایجاد شدند. نتایج حاصل از چندین مجموعه تصادفی ایجاد شده در جدول (۳-۲۴) آورده شده است. ضریب همبستگی پایین نشان‌دهنده ی عدم همبستگی تصادفی در مدل شبکه عصبی موجک بهینه شده می‌باشد.

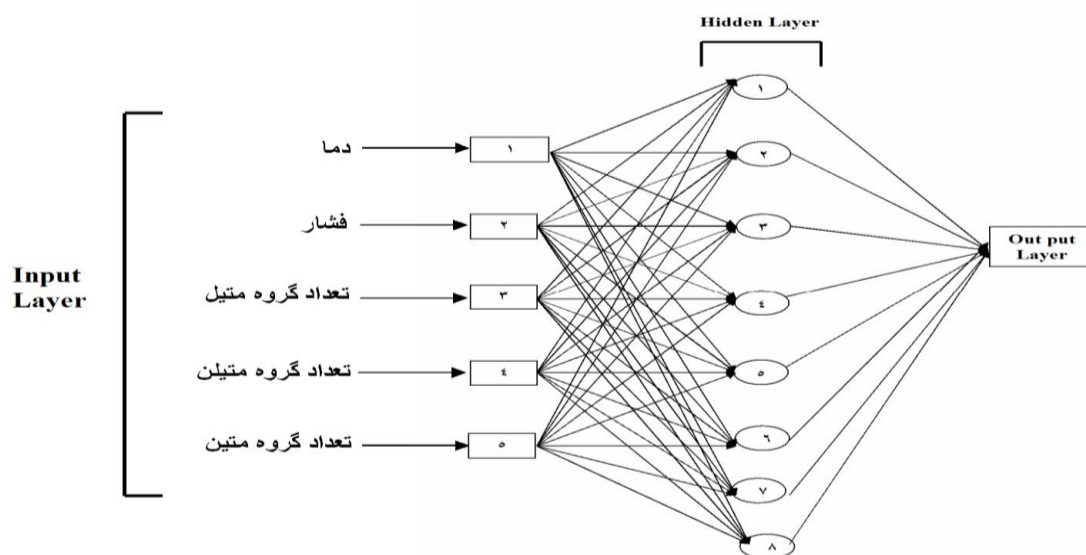
جدول (۳-۲۴): مقادیر R^2 برای سری پیش‌بینی و تایید بعد از چندین تست Y -تصادفی برای شبکه‌ی آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها

تکرار	R^2 سری پیش‌بینی	R^2 سری تایید
1	۰/۳۲۴۰	۰/۳۹۵۰
2	۰/۲۷۲۷	۰/۳۱۶۸
3	۰/۰۹۵۹	۰/۳۱۸۸
4	۰/۰۸۷۲	۰/۳۰۰۳
5	۰/۱۱۸۰	۰/۲۷۷۸
6	۰/۰۳۵۵	۰/۲۸۸۰
7	۰/۰۲۸۶	۰/۳۱۸۴
8	۰/۰۴۱۶	۰/۴۰۰۹
9	۰/۰۶۲۲	۰/۳۱۴۶
10	۰/۰۱۵۱	۰/۲۸۰۰

برای ارزیابی کارایی مدل، داده‌های دانسیته برای ترکیب هگزادکان که برای آموزش شبکه و همچنین بهینه کردن شبکه استفاده نمی‌شد، برای سری تایید شبکه بهینه شده بکار گرفته شدند. متوسط درصد خطای ۱/۲۹٪ برای پیش‌بینی دانسیته‌ی این ترکیب نشان‌دهنده‌ی توانایی بالای شبکه در پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبی است که شبکه تاکنون آن را ندیده است.

۲-۵-۳-۳ معماری شبکه

ساختار هندسی شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآکان‌ها در شکل (۳-۱۴) نشان داده شده است.



شکل (۳-۱۴): ساختار هندسی شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های خطی ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآکان‌ها

فصل چهارم

بحث و نتیجه گیری

مطابق معادله‌ی حالت LIR که برای سیالات چگال و فوق بحرانی کاربرد دارد کمیت $v^2(Z-1)$ برحسب ρ^2 برای هر هم‌دمای سیال چگال خطی است اما چون این معادله بر مبنای مفهوم پتانسیل جفت موثر استخراج شده که شکل ریاضی آن به صورت تابع لنارد-جونز (۱۲ و ۶) می‌باشد لذا فقط برای ملکول‌های کوچک و کروی مناسب است و برای ترکیبات غیرمتمقارن مثل آلکان‌ها انحراف از رفتار خطی معادله‌ی LIR مشاهده می‌شود. در سال ۲۰۰۳ با استفاده از مفهوم سهم گروه‌ها این معادله به آلکان‌های خطی تعمیم داده شد و معادله حاصل، معادله LIR اصلاح شده (MLIR) نام گرفت. با استفاده از معادله‌ی حالت MLIR دانسیته‌ی آلکان‌های خطی با متوسط خطای نسبی کمتر از ۲/۵٪ پیش‌بینی گردید. اما همانطور که در فصل سوم اشاره شد پیش‌بینی دانسیته با استفاده از این معادله‌ی حالت نیاز به محاسبات طولانی دارد، لذا در این پایان‌نامه با استفاده از روش نوین پردازش اطلاعات به نام شبکه عصبی موجک دانسیته‌ی آلکان‌ها و سیکلوآلکان‌ها را بر حسب دما و فشار پیش‌بینی نمودیم. برای این منظور در ابتدا، داده‌های تجربی برای دانسیته‌ی آلکان‌ها از ۲ تا ۱۹ کربنه و همچنین سیکلوآلکان‌ها شامل سیکلوهگزان، سیکلوپنتان، متیل‌سیکلوهگزان و متیل‌سیکلوپنتان را در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار گردآوری کردیم. سپس داده‌های هر ترکیب را به صورت اتفاقی به سه سری آموزش، پیش‌بینی و تایید تقسیم کردیم که نام ترکیبات، محدوده‌ی دما و فشار در جدول (۱-۳) آمده است.

برای انتخاب توصیف‌کننده‌ها، دما و فشار به عنوان دو توصیف‌کننده‌ی اولیه انتخاب شدند زیرا دانسیته‌ی هر ترکیب هم به دما و هم به فشار وابسته است، برای انتخاب سایر توصیف‌کننده‌ها در این پایان‌نامه از روش سهم گروه استفاده کردیم تا ارتباط مناسبی بین ساختار هر ترکیب و دانسیته‌ی آن برقرار کنیم. روش سهم گروه، روش جدیدی است که در سال‌های اخیر برای انتخاب توصیف‌کننده در روش‌های مدل‌سازی استفاده می‌گردد.

بر اساس مفهوم سهم گروه سه گروه عاملی متیل، متیلن و متین را به عنوان گروه‌های عاملی سازنده‌ی ترکیبات موجود در این پایان‌نامه معرفی کردیم که با استفاده از آنها می‌توان تمام ساختارهای ترکیبات مورد بررسی را ایجاد کرد. در جدول (۳-۳)، تعداد و نوع توصیف‌کننده‌ها بر مبنای روش سهم گروه برای هر ترکیب ارائه شده است.

سپس ایده‌ی ارائه‌ی شبکه عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی تمام ترکیبات فوق به طور هم‌زمان را مورد بررسی قرار دادیم. هدف از این کار ارائه‌ی یک شبکه عصبی موجک واحد بود بطوری‌که یک شبکه بتواند برای پیش‌بینی دانسیته‌ی همه‌ی ترکیبات موجود در جدول (۳-۳) به کار رود. اما از آنجا که ۳ آلکان ابتدایی در دما و فشارهای متفاوتی دارای خاصیت سیال چگال هستند شبکه‌ی عصبی موجک جامع جداگانه‌ای برای آنها ارائه کردیم. شبکه عصبی موجک واحدی را برای ۳ آلکان ابتدایی با ۴ ورودی که شامل دما، فشار و یک کد دو رقمی برای تعداد گروه‌های متیل، متیلن موجود در هر ترکیب می‌باشد و یک خروجی طراحی کردیم. پس از آن برنامه‌ی رایانه‌ی در محیط برنامه‌نویسی MATLAB جهت به کارگیری شبکه عصبی موجک نوشتیم که پس از آموزش شبکه طبق دستورالعمل (۳-۳-۱-۴)، از این برنامه جهت بهینه کردن مقادیر پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون لایه مخفی به طور هم‌زمان و همچنین بهینه‌سازی تعداد دور آموزش استفاده کردیم. پارامترهای بهینه شده برای این شبکه در جدول (۳-۵) آمده است. سپس شبکه آموزش داده شده را برای پیش‌بینی دانسیته‌ی دو سری پیش‌بینی و تایید به کار بردیم که نتایج آن در جدول (۳-۳)

6) گزارش شده است. نتایج این جدول نشان می‌دهد که شبکه‌ی بهینه شده می‌تواند دانسیته را با متوسط خطای نسبی کمتر از ۱٪ پیش‌بینی کند که این نشانگر کارایی مطلوب مدل بهینه شده است. همچنین مربع ضریب همبستگی نزدیک به یک در نمودار برگشت شکل (۳-۳) نیز دلیل بر صحت مقادیر پیش‌بینی توسط شبکه می‌باشد.

در مرحله‌ی بعد، ایده‌ی شبکه‌ی عصبی موجک جامع را برای آلکان‌ها از ۵ کربنه تا ۱۹ کربنه را بررسی نمودیم. برای طراحی این شبکه نیز 3 توصیف‌کننده شامل دما، فشار و تعداد گروه‌های متیلن در ماتریس ورودی و یک خروجی که نشان‌دهنده‌ی دانسیته‌ی متناظر با این ورودی‌ها است را در نظر گرفتیم و شبکه را طراحی و مرحله به مرحله داده‌های هر ترکیب را به داده‌های ورودی اضافه کردیم و شبکه را بهینه ساختیم. مقادیر پارامترهای بهینه شده برای شبکه جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آلکان‌های ۵ تا ۱۹ کربنه در جدول (۳-۱۱) گزارش شده است. سپس این شبکه‌ی آموزشی دیده را برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات مختلف در دما و فشارهای مربوط به سری پیش‌بینی و تایید استفاده نمودیم که نتایج آن در جدول (۳-۱۲) آمده است.

در مرحله‌ی بعد، شبکه‌ی عصبی موجک جامعی را برای سیکلوآلکان‌ها با استفاده از ۵ توصیف‌کننده شامل دما، فشار و تعداد گروه‌های متیلن، متیلن و متین طراحی و بهینه‌سازی نمودیم. مقدار پارامترهای بهینه شده برای این شبکه برای پیش‌بینی دانسیته‌ی سیکلوآلکان‌ها در جدول (۳-۱۶) آورده شده است. سپس این شبکه‌ی آموزشی دیده را برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات مختلف در دما و فشارهای مربوط به سری پیش‌بینی و تایید استفاده نمودیم که نتایج آن در جدول (۳-۱۷) آمده است.

در مرحله بعد، پس از بررسی نتایج، ایده‌ی ایجاد شبکه‌ی عصبی موجک واحدی برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی آلکان‌های خطی از ۵ تا ۱۹ کربنه و سیکلوآلکان‌ها بررسی شد. سپس شبکه با استفاده از ۵ توصیف‌کننده شامل دما و فشار و تعداد گروه متیلن، متیلن و متین طراحی و بهینه‌سازی

گردید. مقدار پارامترهای بهینه شده برای این شبکه برای پیش‌بینی دانسیته‌ی سیکلوآلکان‌ها در جدول (۳-۲۰) آورده شده است. سپس این شبکه‌ی آموزش دیده را برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات مختلف در دما و فشارهای مربوط به سری پیش‌بینی و تایید استفاده نمودیم که نتایج آن در جدول (۳-۲۱) آمده است. نتایج این جدول نشان می‌دهد که شبکه‌ی بهینه شده می‌تواند دانسیته را با متوسط خطای نسبی کمتر از ۱/۱٪ پیش‌بینی کند که این نشانگر کارایی مطلوب مدل بهینه شده است. همچنین مربع ضریب همبستگی نزدیک به یک در نمودار برگشت (شکل (۳-۱۳) را ملاحظه کنید) نیز دلیل بر صحت مقادیر پیش‌بینی شده توسط این شبکه است.

آینده‌نگری:

با توجه به این که پیش‌بینی دانسیته‌ی مخلوط‌ها به وسیله معادله MLIR نیاز به محاسبات طولانی دارد، می‌توان از توانایی شبکه عصبی مصنوعی برای پیش‌بینی دانسیته مخلوط‌ها استفاده نمود. همچنین می‌توان از توانایی شبکه برای پیش‌بینی سایر خواص ترمودینامیکی استفاده نمود.

منابع و ماخذ

- [1] - Van Krevelen D. W., Hoftyzer P. J. (1972) "Properties of Polymers. Correlation with Chemical Structure" *Elsevier*, Amsterdam.
- [2] - Tu C. H., Lay Y. Y. (1990) "A group contribution method for the prediction of organic liquid density" *J. Chin. I. Ch. E*, 5, 21, pp.275-281.
- [3] - Benson S. W., Buss J. H. (1958) "Additivity rules for the estimation of molecular properties. Thermodynamic preoperties" *J. Chem. Phys*, Vol. 29, pp. 546.
- [4] - Benson S. W., Cruickshank F. R., Golden D. M., Haugen G. R., O Neal H. E., Rogers A. S., Shaw R. (1969) "Additivity rules for the estimation of thermochemical preoperties" *Chem. Rev*, Vol. 69, pp. 279-324.
- [5] - Turner Brian E., Costello Chandra L., Jurs Peter C. (1998) "Prediction of Critical Temperatures and Pressures of Industrially Important Organic Compounds from Molecular Structure" *J. Chem. Inf. Comput. Sci*, Vol. 38, pp. 639-645.
- [6] - Reid A. C., Prausnitz J. M., Sherwood T. K. (1987) "The Properties of Gases and Liquids" *Mc Graw-Hill, New York*.
- [7] - Kudchadker A. P., Alani G. H., Zowlinski B. J., (1968) "The critical constant of organic substances" *Chem. Rev*, Vol. 68, pp. 659-735.
- [8] - Constantinou L., Gani R., (1994) "New group contribution method for estimating properties of pure compounds" *AIChE J*, 10, 40, pp. 1697-1710.
- [9] - Marrer J., Gani R., (2001) "Group contribution method based estimation of pure compounds properties" *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 183, pp. 183-208.
- [10] - Fedros R. F., (1982) "A relationship between chemical structure and the critical temprature" *Chem. Eng. Commun*, Vol.16, pp. 149-151.
- [11] – Girolami. Gregory. S., (1994) "Method for Estimating the Densities and Molecular Volume of Liquids and Volumes" *J. of Chemical Education*, 71, 11, pp. 962-964
- [12] - Rackett H. G., (1970) "Equation of state for saturated liduid density" *J. Chem. Eng. Data*, Vol. 15, pp. 514-517.
- [13] - Spencer C. F., Danner R. P., (1972) "Improve equation for prediction of saturated liquid densities" *J. Chem. Eng. Data*, Vol. 17, pp. 236-241.
- [14] - Rogalski M., Neau E., (1990) "A group contribution method for prediction of hydrocarbons saturated liquid volumes" *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 56, pp. 59-69.
- [15] – Elbro. Helle S., Fredenslund. Aage., and Rasmussen. Peter., (1991) "Group contribution method for the prediction of liquid densities as a function of temperature for solvents, oligomers, and polymers" *Ind. Eng. Chem. Res*, 30, 12, pp. 2576-2582.

[16] - Tsibanogiannis N. Ioannis., Kalospiros S. Nikolaos., Tassios P. Dimitrios., (1994) "Extension of the GCVOL Method and Application to some Complex Compounds" *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 33, pp. 1641-1643.

[17] - Ihmels E. Christian., Gmehling Jrgen., (2003) "Extension and Revision of the Group Contribution Method GCVOL for the Prediction of Pure Compound Liquid Densities" *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 42, pp. 408-412.

[18] - Joback K. G., Ried R.C., (1987) "Estimation of pure component properties from group contribution method" *Chem. Eng. Commun.*, Vol. 58, pp. 233-243.

[19] - Devotta Sukumar., Pendyala V. Rao., (1992) " Modified Joback group contribution method for normal boiling point of aliphatic halogenated compounds" *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 31, pp. 2042-2046

[20] - Tsibanogiannis Ioannis N., Kalospiros Nikolaos S., Tassios Dimitrios P., (1995) "Prediction of Normal Boiling Point Temperature of Medium/High Molecular Weight Compounds" *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 34, pp. 997-1002.

[21] - Sanghvi Ritesh., Yalkowsky Samuel H., (2006) "Estimation of the Normal Boiling Point of Organic Compounds" *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 45, pp. 2856-2861.

[22] - Sastri S. R. S., Rao M. V. R., (1970), *Chem. Age of India*, Vol. 21, pp. 675.

[23] - Sastri S. R. S., Rao K. K., (1992) "A new group contribution method for predicting viscosity of Organic liquids" *Chem. Ing. J.*, Vol. 50, pp. 9-25.

[24] - Gardas Ramesh L., Coutinho João. A. P., (2008) "A group contribution method for viscosity estimation of ionic liquids" *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 266, pp. 195-201.

[25] - Gharagheizi Farhad., Fareghi Alamdari Reza., Torabi Angaji Mahmood., (2008) "A New Neural Network#Group Contribution Method for Estimation of Flash Point Temperature of Pure Components" *Energy Fuels*, Vol. 22, pp. 1628-1635.

[26] - Albahri Tareq A., George Reena S., (2003) "Artificial Neural Networ Investigation of the Structural Group Contribution Method for Predicting Pure Components Auto Ignition Temperature" *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 42, pp. 5708-5714.

[27] - Valderrama José O., Reátegui Alfonso., Rojas Roberto E., (2009) "Density of Liquids Using Group Contribution and Artificial Neural Networks" *Ind. Eng. Chem. Res.*

[28] - [http:// www.neshatsoft.com](http://www.neshatsoft.com).

[۲۹] - شاه امیری، سید رضا، (۱۳۸۵) "معرفی شبکه‌های عصبی مصنوعی"، نما، دوره ششم، شماره اول.

[۳۰] - منهاج، محمدباقر، (۱۳۷۹) "هوش محاسباتی"، جلد اول، دانشگاه صنعتی امیرکبیر(واحد تفرش)، چاپ اول.

[31] - Jalali – heravi. M., Fatemi. M. H., (1998) "prediction of flame ionization detector response factors using artificial neural network" *J. Chromato A*, No. 825, pp. 161-169.

[۳۲] - حبشی نژاد، م، (۱۳۸۲) "پیش روی گرانروی گازها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی"، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان.

[33] - Marini F., Bucci R., Magri A. L., Magri A. D., (2008) "Artificial neural network in chemometrics: History, examples and perspectives" *MICROCHEMICAL JOURNAL*, Vol. 88, pp. 178-185.

[34] - <http://www.daneshnameh.roshd.ir/mavara>

[۳۵] - آر. بیل، تی. جکسون، (۱۳۸۳) "آشنایی با شبکه‌های عصبی"، ترجمه‌ی دکتر محمود البرزی، دانشگاه صنعتی شریف، چاپ دوم.

[36] - <http://www.AUTO IR.com>.

[۳۷] - سعیدی، مسعود، (۱۳۸۳) " عملیات شبکه‌های عصبی(قسمت دوم)"، ماهنامه شبکه، شماره ۵۲.

[38] - <http://www.dacs.dtic.mit/techs/neural.html>.

[39] - <http://www.rasekhoon.net/article>.

[۴۰] - شیرپور، الهه، (۱۳۸۸) " کاربرد مطالعات رابطه کمی ساختار – فعالیت برای پیش‌بینی و مدل‌سازی فعالیت دارویی برخی از داروهای سنتز شده جدید" پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی شاهرود.

[۴۱] - جعفری‌امزاده‌ئی، م، (۱۳۸۲) "پیش‌بینی هدایت گرمایی سیالات در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی به کمک الگوریتم آموزشی لونیبرگ- مارکوارت"، پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان.

[42] - http://www.siam.org/books/textbooks/fr18_book.pdf.

[43] - <http://fa.wikipedia.org>.

[۴۴] - کلانتر، زهرا، (۱۳۸۵) "پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی و انتقالی سیالات آلی چگال با استفاده از روش سهم گروه‌ها و شبکه‌ی عصبی موجک" رساله‌ی دکترا، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان.

[۴۵] - پارسافر، غلامعباس، (۱۳۸۶) "ترمودینامیک آماری: مبانی و کاربردها" دانشگاه صنعتی اصفهان، ویرایش دوم.

[46] - Parsafar. G. A., Mason. E. A., (1993) "Linear isotherms for dense fluids: A new regularity", *J. Phys. Chem.*, Vol. 97, pp. 9048-9053.

[47] - Parsafar. G. A., Kalantar. Z., (2003) "Extension of Linear isothermal regularity to long chain alkanes" *J. Chem. Eng.*, Vol. 22, pp. 1-8.

[48] - <http://webbook.nist.gov>

[49] - Oliveira. C. M. B. P., Wakeham. W. A., (1992) "The Viscosity of Five Liquid Hydrocarbons at Pressures Up to 250 MPa" *International Journal of Thermophysics*, Vol. 13, 773-790.

[50] - Dymond. J. H., Young. K. J., Isdale. J. D., (1979) "p, ρ , T behaviour for n-hexane + n-hexadecane in the range 298 to 373 K and 0.1 to 500 MPa" *J. Chem. Thermodynamics.*, Vol. 11, pp. 887-895.

[51] - Morávková. L., Linek. J., (2002) "Excess molar volumes of (heptane + 1-chlorobutane) at elevated temperatures and high pressures" *J. Chem. Thermodynamics*, Vol.34, pp. 1397-1405.

[52] - Grindley. T., Lind. John E., (1978) "The residual energy and entropy of hydrocarbon liquids and their relation to the liquid structure" *J. Chem. Phys.*, 68, 11, pp. 5046-5052.

[53] - Khasanshin. T. S., Shchamialiou. A. P., Poddubskij. O. G., (2003) "Thermodynamics properties of heavy n-alkanes in the liquid state: n-Dodecane" *International Journal of Thermophysics*, 24, 5, pp. 1277-1289.

[54] - Daridon. J. L., Carrier. H., Lagourette. B., (2002) "pressure dependence of thermophysical properties of n-pentadecane and n-heptadecane" *International Journal of Thermophysics*, Vol. 23, pp. 697-708.

[55] - Dutour. S., Daridon. J. L., Lagourette. B., (2000) "pressure and temperature dependence of the speed of sound and related properties in normal Octadecane and Nonadecane" *International Journal of Thermophysics*, Vol. 21, pp.173-180.

[56] - Takagi. Toshiharu, Sakura. Taro and Guedes. Henrique J. R., (2002) "Speed of sound in liquid cyclic alkanes at temperatures between (283 and 343) K and pressures up to 20MPa" *J. Chem. Thermodynamics*, Vol. 34, pp. 1943-1957.

[57] - Zhang. X, Qi. J, Zhang. R, Liu. M, Hu. Z, Xue. H, Fan. B, (2001) "Prediction of programmed – temperature retention values of naphthals by wavelet neural networks" *Comput. Chem*, Vol. 25, pp. 125-133.

Abstract

In this work, Wavelet Neural Network (WNN) has been used to predict density of Alkanes and Cycloalkanes with 2-19 carbon atoms over a wide range of temperature and pressure. We modeled two wavelet neural networks for density prediction: one for liquidified and compressed natural gas (LNG and CNG (C2-C4)) and another for alkanes with 5-19 carbon atoms and cycloalkanes.

At first, WNN model has been constructed for LNG and CNG using temperature and pressure variants and 2 descriptors based on group contribution method namely the number of Methyl, Methylene. Then a computer program was written in MATLAB 6.1 (Math works) to use wavelet neural network. After training of network, the WNN parameters consist of the number of neurons in hidden layer, the learning rate, the momentum and the number of iteration have been optimized simultaneously for this. The capability of the optimized model has been evaluated by plotting experimental values of density versus the prediction and validation sets. The obtained result with an average percentage error for density prediction lower than 0.9%. reveals the capability of the WNN model.

In the next step, WNN model has been optimized for density prediction of alkanes (C₅-C₁₉) and cycloalkanes using 5 descriptors consisting of temperature, pressure and the number of methyl, methylene and Methyn groups, in similar manner the linear fit hold quiet well the correlation coefficient, $R^2 \geq 0.9486$. This approach gives density of these compounds with average percentage error less than 1.1%.