دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده شیمی

گزارش نهایی طرح پژوهشی

عنوان:

پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک

کد طرح: ۲۲۰۳۰

مجری: زهرا کلانتر

عضو هیئت علمی دانشکده شیمی

۱۳۸۷

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده شیمی

گزارش نهایی طرح پژوهشی با عنوان:

پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک

کد طرح: ۲۲۰۳۰

مجری: زهرا کلانتر

عضو هیئت علمی دانشکده شیمی

این پژوهش با استفاده از اعتبارات پژوهشی دانشگاه صنعتی شاهرود انجام گردیده است و تاریخ‌های شروع و خاتمه‌ی آن به ترتیب ۸۶/۸/۱۳ و ۸۷/۲/۲۲ می‌باشد.

پیش‌بینی دانسیته‌ی الکلها با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک

چکیده: الکل‌ها گروهی از ترکیبات آلی هستند که از طریق جایگزینی یک یا چند هیدروژن در هیدروکربن‌ها با یک یا چند گروه هیدروکسیل به وجود می‌آیند. پیوند هیدروژنی بین گروه هیدروکسیل موجود در الکل‌ها باعث می‌شود این مواد جزء سیالات تجمع‌کننده طبقه‌بندی شوند. عمومی‌ترین اثرات شیمیایی موجود در ترمودینامیک سیالات تجمعی پیوند هیدروژنی و انتقال بار می‌باشد که باعث می‌شود مولکول‌ها به صورت دیمر، تریمر و یا سایر گونه‌های تجمعی به هم متصل شوند. به همین دلیل، به دست آوردن یک معادله‌ی حالت دقیق برای چنین سیالاتی یک چالش در حوزه‌ی تحقیقات ترمودینامیکی است. یکی از معایب معادله‌های حالت موجود، وجود پارامترهای وابسته به نوع سیال در معادله است که برای پیش‌بینی خواص ماده باید در دسترس باشد. همچنین اکثر این معادلات برای یک یا چند سیال مشخص در محدوده‌ی خاصی از دما و فشار کارایی دارد. در نتیجه، چنین معادلاتی برای کاربردهای مهندسی، سخت و پیچیده بوده و چندان مناسب نیستند. از این رو روش‌های پیش‌بینی ساده، کارامد و معتبر برای پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی این سیالات در کاربردهای مهندسی و طراحی صنعتی ضروری است. امروزه، شبکه‌ی عصبی مصنوعی و همچنین تلفیق موجک با شبکه‌ها، ابزار پردازش اطلاعات قدرتمندی را در اختیار محققین قرار داده است تا بتوانند بر عدم موفقیت روش‌های پیش‌بینی قدیمی فائق آیند. به همین دلیل در این طرح پژوهشی طراحی و بهینه‌سازی یک شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی انواع الکل‌ها مورد بررسی و مطالعه قرار گرفته است. برای این منظور، ابتدا، داده‌های تجربی دانسیته برای الکلها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار جمع‌آوری گردید. سپس با استفاده از روش سهم گروه‌ها، توصیف‌کننده‌های مناسبی برای ارتباط دانسیته و ساختار انتخاب شدند. پس از تعیین توصیف‌کننده‌های مناسب، الگوریتم شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از این توصیف‌کننده‌ها طراحی گردید و برنامه‌ای رایانه‌ای در محیط برنامه نویسی MATLAB جهت به کارگیری شبکه عصبی موجک نوشته شد. پس از کنترل صحت برنامه‌ی نوشته شده از لحاظ محاسبات ریاضی و عملی، اطلاعات ورودی نمونه‌ها به شبکه منتقل گردید و شبکه طبق برنامه‌ی نوشته شده آموزش دید. پس از پایان آموزش شبکه و بهینه شدن پارامترهای شبکه، عملکرد شبکه‌ی موجک بهینه شده در پیش‌بینی دانسیته‌ی الکلها در دما و فشارهای جدید مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج به دست آمده نشان داد که شبکه‌ی بهینه شده می‌تواند دانسیته را با متوسط خطای نسبی کمتر از ٪ ۰/۳۳ و ماکزیمم خطای نسبی ٪ ۰/۵۴ پیش‌بینی کند که این نشانگر کارآیی مطلوب مدل بهینه شده است. همچنین مربع ضریب همبستگی نزدیک به یک در نمودار برگشت نیز دلیل بر صحت مقادیر پیش‌بینی شده توسط این شبکه است.

فهرست مطالب

فصل اول: شبکه‌های عصبی مصنوعی

مقدمه ۱

۱-۱- از مغز انسان تا سلول‌های عصبی مصنوعی ۲

۱-۱-۱- جستجوی شباهت‌هایی بین مغز انسان و سلول‌های عصبی مصنوعی ۲

۱-۱-۲- مغز انسان چگونه کار می‌کند؟ ۳

۱-۱-۳- مغز ما چگونه می‌آموزد؟ ۵

۱-۱-۴- از سلول‌های عصبی انسانی تا شبکه‌های عصبی مصنوعی ۵

۱-۲- تاریخچه‌ی شبکه‌های عصبی مصنوعی ۵

۱-۳- ساختار شبکه‌های عصبی مصنوعی ۷

۱-۴- دسته‌بندی لایه‌ای شبکه‌های عصبی مصنوعی ۸

۱-۵- معماری شبکه‌های عصبی مصنوعی ۹

۱-۶- فرآیند یادگیری در شبکه‌های عصبی به عنوان سیستم‌های آموزش پذیر ۱۰

۱-۷- معرفی روش‌های مختلف بهینه‌سازی عملکرد شبکه‌های عصبی ۱۱

۱-۷-۱- روش نزول گرادیانی ۱۲

۱-۷-۲- الگوریتم پس انتشار خطا ۱۴

۱-۸- شبکه‌ی عصبی موجک ۱۴

۱-۸-۱- موجک و تبدیل موجک ۱۵

۱-۸-۲- موجک مادر ۱۷

۱-۸-۳ آلگوریتم شبکه‌ی عصبی موجک ۱۷

فصل دوم: طراحی و بهینه‌سازی شبکه‌ی عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱- آلکانول‌ها

مقدمه ۲۰

۲-۱- پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱- آلکانول‌ها با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک در محدوده‌ی وسیعی از ۲۱

۲-۱-۱- انتخاب سری داده‌ها ۲۱

۲-۱-۲- انتخاب توصیف‌کننده‌ها ۲۲

۲-۱-۳- ساخت مدل با استفاده از شبکه عصبی موجک ۲۲

۲-۱-۴- آلگوریتم برنامه‌ی نوشته شده ۲۴

۲-۱-۵- استفاده از شبکه عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱-آلکانول‌ها ۲۶

فصل سوم: طراحی و بهینه‌سازی شبکه‌ی عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها

مقدمه ۳۳

فهرست مطالب

۳-۱- پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار ۳۴

۳-۱-۱- انتخاب سری داده‌ها ۳۴

۳-۱-۲- انتخاب توصیف‌کننده‌ها ۳۴

۳-۱-۳- ساخت مدل با استفاده از شبکه عصبی موجک ۳۶

۳-۱-۴- استفاده از شبکه عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱-آلکانول‌ها ۳۷

۳-۱-۵- بحث و نتیجه‌گیری ۴۳

فهرست جداول

جدول (۲-۱): تعداد کربن، محدوده‌ی دما و فشار و مرجع داده‌های تجربی دانسیته‌ی ۱-آلکانول‌ها ۲۱

جدول (۲-۲): متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱-آلکانول‌ها در محدوده‌ی دما (ΔT) و فشار داده شده (Δp) با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده برای سری تایید. ۲۹

جدول (۲-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه عصبی موجک بهینه شده با مقادیر تجربی دانسیته برای ۱-آلکانول‌ها ۳۰

جدول (۳-۱): تعداد کربن، محدوده‌ی دما و فشار و مرجع داده‌های تجربی دانسیته‌ی الکل‌ها ۳۵

جدول (۳-۲): متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها در محدوده‌ی دما (ΔT) و فشار داده شده (Δp) با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده برای سری تایید. ۳۸

جدول (۳-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه عصبی موجک بهینه شده با مقادیر تجربی دانسیته برای الکل‌ها ۴۰

فهرست اشکال

شکل (۱-۱): ساختمان یک سلول عصبی زیستی ۴

شکل (۱-۲): نمایی از یک سیناپس [۴]. ۴

شکل(۱-۳): ساختمان یک نرون محاسباتی. ۸

شکل (۱-۴): ساختار یک شبکه تک لایه پیشرو. ۸

شکل (۱-۵): ساختار یک شبکه‌ی سه لایه. ۹

شکل (۱-۶): مقایسه‌ی یک موج سینوسی (سمت چپ) با یک موجک (سمت راست). ۱۵

شکل (۱-۷): ساختار عمومی شبکه‌ی عصبی موجک. ۱۷

شکل (۲-۱): نمودارهای (الف) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ب)مقادیر ممنتم، (ج) سرعت آموزش، (د) MSE سری پیش‌بینی و (ط) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری پیش‌بینی که مینیمم مقدار آن را بهتر نشان می‌دهد برحسب بردار مرجع. ۲۸

شکل (۲-۲): نمودار MSE برحسب تعداد دور آموزش برای دو سری آموزش و پیش‌بینی برای ۱-آلکانول‌ها. ۲۹

شکل (۲-۳): نمودار برگشت برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با شبکه‌عصبی موجک بهینه شده برای ۱- آلکانول‌ها بر حسب مقادیر تجربی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار در سری تایید. ۳۲

شکل (۳-۱): نمودارهای (الف) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ب)مقادیر ممنتم، (ج) سرعت آموزش، (د) MSE سری پیش‌بینی برحسب بردار مرجع. ۳۹

شکل (۳-۲): نمودار برگشت برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با شبکه‌عصبی موجک بهینه شده برای الکل‌ها بر حسب مقادیر تجربی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار در سری تایید. ۴۲

فصل اول: شبکه‌های عصبی مصنوعی

مقدمه

انسان تنها موجودی است که دارای قدرت تفکّر ارادی و تصمیم‌گیری منطقی است. توانایی‌های ذهنی انسان، تأثیر بسزایی در پیشبرد زندگی روزانه‌ی او و اطرافیانش دارد و پیچیدگی این توانایی‌ها، یکی از علل جذابیت بررسی مسأله‌ی هوش مصنوعی است. اما پیاده‌سازی ویژگی‌های شگفت‌انگیز مغز در یک سیستم مصنوعی و به وجود آوردن هوش مصنوعی از جذابیت بیشتری برخوردار است [۱]. همین انگیزه باعث شده است تا دانشمندان با الهام از ساختار مغز پستانداران، ایده‌ی شبکه‌های عصبی مصنوعی[۱] (ANN) را به صورت یک مدل بسیار ساده و ابتدایی از مغز ارائه کنند که فقط می‌تواند بخشی از عملکرد مغز را شبیه‌سازی کند[۲]. عنصر کلیدی این ایده، ساختار جدید سیستم پردازش اطلاعات است. این سیستم از تعداد زیادی واحد محاسباتی ساده تشکیل شده که می‌توانند هماهنگ با هم عمل کرده و محاسبات طولانی و بزرگ را به سرعت انجام دهند [۱]. اگر چه تمام پژوهشگرانی که در این زمینه کار می‌کنند، باور دارند که مغز انسان دست نیافتنی است اما عالی بودن هدف و کافی نبودن دانش موجود، آن‌ها را به پژوهش بیشتر در این زمینه سوق می‌دهد چرا که اگر یک سامانه بتواند تنها درصد کمی از کارآیی مغز را داشته باشد آن وقت توانایی فوق‌العاده‌ای در زمینه‌های پردازش سیگنال (مثل پردازش شکل، گفتار، تصویر و اطلاعات)، کنترل (مثل کنترل ربات‌ها، وسایل نقلیه‌ی هوشمند، سامانه‌های قدرت و سامانه‌های ارتباطات) و بسیاری از زمینه‌های دیگر خواهد داشت. این موارد باعث شده است که سامانه‌های هوشمند از جمله شبکه‌های عصبی مصنوعی مورد توجه قرار گیرند [۳].

شبکه‌های عصبی مصنوعی نظیر انسان‌ها با مثال یاد می‌گیرند به این معنی که مجموعه‌ای از ورودی‌ها و خروجی‌های صحیح به شبکه‌ی عصبی داده می‌شود. شبکه با پردازش این داده‌ها دانش نهفته در ورای آن‌ها را کشف کرده و براساس آن متغیرهای خود را به گونه‌ای تنظیم می‌کند تا درصورت دریافت ورودی‌های جدید بتواند پاسخ‌های درستی را ایجاد کند [۴]. به همین خاطر به این سامانه‌ها، هوشمند می‌گویند زیرا آن‌ها بر اساس محاسبات روی داده‌های عددی یا مثال‌ها، قوانین کلی را یاد می‌گیرند [۳]. اما هدفی که محققین هوش محاسباتی[۲] (CI) به دنبال آن هستند دستیابی به رایانه‌های هوشمندی است که توانایی انسان

۱- artificial neural networks (ANN)

۲- computational intelligence

را داشته باشند [۸]. به قول بلمن[۱]، هوش محاسباتی، سامانه‌ای خودکار با توانایی‌هایی همچون تصمیم‌گیری، قدرت تحلیل مسائل، نوآوری، ابتکار، یادگیری و کسب تجربه همانند انسان می‌باشد[۱].

۱-۱- از مغز انسان تا سلول‌های عصبی مصنوعی

۱-۱-۱- جستجوی شباهت‌هایی بین مغز انسان و سلول‌های عصبی مصنوعی

مغز انسان از حدود یکصد میلیارد واحد محاسباتی ساده به نام نرون[۲] تشکیل شده که هرکدام به هزاران نرون دیگر متصل شده‌اند. این نرون‌ها مثل صد میلیاردCPU هستندکه هرکدام‌شان به چند هزارCPU مجاور مثل شبکه متصل شده‌اند. البته اگر بخواهیم هرکدام از این نرون‌ها را با CPU یک رایانه‌ی پنتیوم مقایسه کنیم می‌بینیم CPU رایانه، هم خیلی سریعتر است و هم حجم حافظه‌ی بیشتری دارد به طوری که سرعت عملیات درآن‌ها به میلیون‌ها محاسبه در ثانیه می‌رسددر حالی که، تک تک نرون‌های مغز ما بسیار ضعیف‌تر از CPU رایانه‌ی پنتیوم بوده و سرعت عملیات در آن‌ها به بیش از ده بار در ثانیه نمی‌رسد. اما با این وجود، عملکرد بالای مغز ناشی از ساختار کاملاً موازی نرون‌ها در مغز است به این معنی که همه‌ی نرون‌ها معمولاً به طور هم زمان کار می‌کنند و پاسخ می‌دهند. در نتیجه اگر نرونی راه خطا در پیش گیرد یا از بین برود کارایی مغز تحت تاثیر قرار نمی‌گیرد زیرا، تعداد نرون‌های درگیر در یک فعالیت زیاد بوده و سهم هر یک ازآن‌ها به تنهایی حائز اهمیت نیست. اما رایانه‌ها، به جای چندین هزار واحد پردازش کننده متصل به یکدیگر، یک یا چند واحد پردازش بسیار سریع دارند که می‌توانند میلیون‌ها محاسبه را به صورت متوالی و با سرعت زیاد انجام دهند. درست به همین دلیل است که انجام عملیات ریاضی روی اعداد، توسط رایانه‌ها بسیار راحت و سریع است چون این کارها، اعمال ساده و پی‌درپی می‌باشند. اما درعوض رایانه‌ها از انجام کارهایی مثل دیدن و شنیدن که نیاز به پردازش انواع داده‌ها به صورت موازی دارد، عاجز هستند. همچنین اگر در رایانه‌ای واحد پردازش از کار بیفتد، رایانه در انجام مسئولیتی که برعهده‌ی آن گذاشته شده، ناتوان مانده و می‌تواند پیامدهای جبران‌ناپذیری را به بار آورد، مثلاً هواپیمایی سقوط کند و یا شهری در تاریکی فرو برود[۸]. علت این موضوع در این نکته نهفته است که رایانه‌های معمولی یک مسیر الگوریتمی را برای حل مسئله طی می‌کنند یعنی؛ راه حلی که مسئله از آن طریق حل می‌شود باید از قبل شناخته شده باشد و به صورت دستورات کوتاه و غیر مبهم شرح داده شود. این دستورات سپس به زبان‌های برنامه‌نویسی سطح بالا برگردانده شده و درنهایت به کدهایی که کامپیوتر قادر به درک آن‌ها می‌باشد تبدیل می‌شود. بنابراین

۱- Belman

۲- neuron

درحقیقت رایانه‌های معمولی، ماشین‌های قابل پیش‌بینی هستند و اگر چیزی به خطا انجام شود به یک اشتباه سخت‌افزاری یا نرم‌افزاری برمی‌گردد [۲].

همین مسائل، موجب بروز تمایل به ایجاد رایانه‌هایی شده است که از عناصر ساده ولی با اتصالات زیاد بین آن‌ها درست شده باشد به طوری که این عناصر، وظایف محوّله را به صورت مشترک انجام دهند و در واقع بیشتر به مغز شبیه باشند تا به رایانه‌های فعلی. برای نیل به این مقصود، استفاده ازشبکه‌های عصبی مصنوعی، مناسب است زیرا دو شباهت کلیدی بین شبکه‌های عصبی زیستی و مصنوعی وجود دارد. اول این که واحدهای ساختاری هر دو شبکه، عناصر محاسباتی ساده می‌باشد که با اتصالات زیاد به یکدیگر وصل شده‌اند، هرچند نرون‌های مصنوعی ساده‌تر از نرون‌های زیستی هستند. دوم این که در هر دو نوع شبکه، اتصالات بین نرون‌ها نقش تعیین‌کننده‌ای در عملکرد شبکه دارد [۹].

۱-۱-۲- مغز انسان چگونه کار می‌کند؟

مغز به عنوان یک سیستم پردازش اطلاعات با ساختار موازی ازحدود یکصد میلیارد نرون مرتبط به هم تشکیل شده که هر نرون به ده هزار نرون دیگر مرتبط می‌باشد. اگر چه همه نرون‌ها کارکرد یکسانی دارند، اما اندازه و شکل آن‌ها بستگی به محل استقرارشان در سیستم عصبی دارد. با وجود این تنوع، اکثر نرون‌ها از سه قسمت اساسی تشکیل شده‌اند:

۱- دندریت‌ها[۱]، که گیرنده‌های نرون هستند و سیگنال‌های الکتریکی را به بدنه‌ی سلول منتقل می‌کنند.

۲- بدنه‌ی سلول که به آن سوما[۲] نیز می‌گویند، شامل هسته و قسمت‌های حفاظتی دیگر می‌باشد و انجام عملیات لازم روی اطلاعات ورودی را برعهده دارد. این کار را به طور ساده می‌توان شبیه جمع زدن اطلاعات ورودی و مقایسه‌ی آن با یک سطح آستانه دانست.

۳- اکسون[۳]، رشته‌ای طولانی که اطلاعات خروجی را از سوما گرفته و به خارج نرون می‌فرستد. محل اتصال یک اکسون از یک سلول به دندریت‌های سلول دیگر را سیناپس[۴] می‌گویند. شکل (۱-۱) ساختمان یک سلول عصبی زیستی را نشان می‌دهد. پیام‌های عصبی تنها به صورت یک طرفه از دندریت‌ها به بدنه‌ی سلول و از آن جا به اکسون حرکت می‌کنند. وقتی پیام به انتهای اکسون می‌رسد، فیبرهای ماهیچه‌ای، سلول‌های غددی و یا نرون‌های دیگر که به آن متصل هستند تحریک می‌شوند.

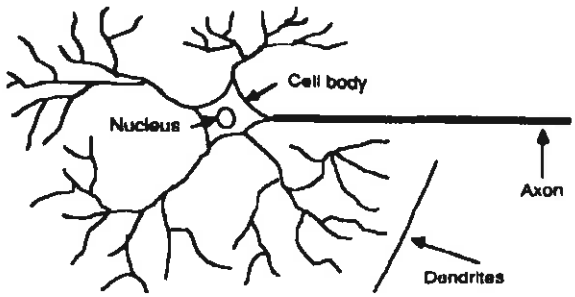
---

۱ - dendrite

۲- soma

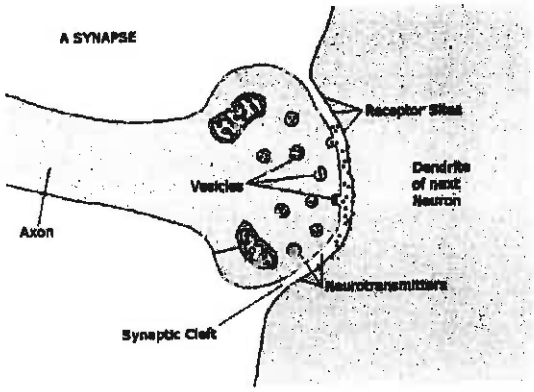
۳- axon

۴- synapse



شکل (۱-۱): ساختمان یک سلول عصبی زیستی

امروزه پس از سال‌ها تحقیق مشخص شده است که پیام‌های عصبی که توسط نرون‌ها از یک قسمت بدن به قسمت دیگری منتقل می‌شوند از نوع تکان‌های[۱] الکتروشیمیایی می‌باشند. اگر یک عامل محرک سلول را تحریک کند، قطب‌های سلول در نقطه‌ی تحریک تغییر کرده و اکسون یک ضربه[۲]، ولتاژی را به مدت تقریبی یک هزارم ثانیه تولید می‌کند که همان پتانسیل تحریک است.این پتانسیل در طول اکسون هدایت می‌شود و زمانی که به انتهای اکسون می‌رسد، موجب آزاد شدن یک ماده‌ی شیمیایی به نام انتقال دهنده‌ی نرونی[۳] از انتهای اکسون می‌شود. سپس این ماده وارد سیناپس شده و گیرنده‌های سلول مجاور را فعال می‌کند و به این ترتیب پیام‌های عصبی به سایر نرون‌ها منتقل می‌گردد [۳]. به شکل (۱-۲) دقت کنید. انتقال دهنده‌های نرونی ساختارهای مولکولی متفاوتی داشته و پیام‌های مختلفی را مخابره می‌کنند. بنابراین قدرت سیناپس به نوع و مقدار ماده‌ی انتقال دهنده‌ی نرونی موجود در درون سیناپس بستگی دارد [۱۰].



شکل (۱-۲): نمایی از یک سیناپس [۴].

۱- impulse

۲- pulse

۳- neuron transmitter

۱-۱-۳- مغز ما چگونه می‌آموزد؟

یادگیری مغز به صورت تطبیقی است یعنی یادگیری هنگامی صورت می‌گیرد که شدت اتصال یک سلول عصبی به سلول دیگر در محل سیناپس‌ها، تغییر می‌کند یعنی در خلال یادگیری بعضی از ارتباطات از بین رفته و به جای آن‌ها اتصالات جدیدی بوجود می‌آیند. اگر چه این تغییر و تحولات 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 دوست جدیدی را به خاطر بسپارید، باید یک فرایند یادگیری با تغییراتی در سیناپس‌های مختلف صورت گیرد [۳].

۱-۱-۴- از سلول‌های عصبی انسانی تا شبکه‌های عصبی مصنوعی

شبکه‌های عصبی مصنوعی که با الهام از سیستم عصبی زیستی ساخته شده‌اند، می‌توانند اطلاعات را به روشی مشابه با کاری که مغز انسان انجام می‌دهد، پردازش کنند. این شبکه‌ها بدون آن که سعی در حفظ پیچیدگی مغز داشته باشند، مشابه مغز از تعداد زیادی سلول عصبی (نرون) تشکیل شده‌اند که از طریق ارتباطاتی به هم متصل شده‌اند (سیناپس‌ها). این سلول‌های عصبی که به عنوان عناصر پردازشی در شبکه‌های عصبی مصنوعی هستند به صورت موازی با هم برای حل یک مسئله‌ی مشخص کار می‌کنند. در این شبکه‌ها نیز مثل مغز، یادگیری از طریق مثال انجام می‌گیرد. البته، مثال‌ها باید با دقت انتخاب شوند. مهم‌ترین امتیاز شبکه‌ی عصبی مصنوعی این است که خودش کشف می‌کند که چگونه مسئله را حل‌کند نه این که مثل کامپیوترهای معمولی از یک مسیر الگوریتمی‌از قبل شناخته شده برای حل مسئله استفاده کند. شبکه‌های عصبی معجزه نمی‌کنند اما اگر خردمندانه به کار بروند، نتایج شگفت‌آوری را خلق می‌کنند [۲].

۱-۲- تاریخچه‌ی شبکه‌های عصبی مصنوعی

اولین سوابق ثبت شده در زمینه‌ی شبکه‌های عصبی به اواخر قرن نوزدهم باز می‌گردد یعنی زمانی که پیشرفت‌هایی در زمینه‌ی فیزیولوژی عصبی[۱]، فیزیولوژی یادگیری و حواس فیزیکی مثل بینایی و شنوایی صورت گرفت اما نتایج مورد بررسی دارای مدل‌های ریاضی نبود. بررسی شبکه‌های عصبی با دیدگاه جدید در دهه‌ی چهل قرن بیستم آغاز شد یعنی زمانی که در سال۱۹۴۳ یک فیزیولوژیست عصبی به نام وارن مک

۱- neurophysiology

کلوث[1] و یک منطق‌دان به نام والتر پیتز[2] اولین سلول عصبی مصنوعی را ساختند و به این ترتیب نشان دادند که شبکه‌های عصبی قادر به محاسبه‌ی توابع حسابی و یا منطقی می‌باشند. سپس دونالد هب[3] مکانیسمی را برای یادگیری نرون‌های زیستی پیشنهاد نمود [۲ و ۳].

نخستین کاربرد عملی شبکه‌های عصبی در سال ۱۹۵۸ توسط فرانک روزنبلات[4] و با معرفی شبکه‌ی پرسپترون[5] مطرح شد. سپس در سال ۱۹۶۰، برنارد ویدرو[6] و تد هوف[7] شبکه‌ی عصبی تطبیقی خطی (آدالاین)[8] را با قانون جدید یادگیری مطرح کردند که از لحاظ قابلیت و ساختار، شبیه شبکه‌ی پرسپترون بود. هر دوی این شبکه‌ها یعنی پرسپترون و آدالاین، توانایی محدودی جهت تخمین توابع داشتند زیرا در ابتدا ویدرو، هوف و روزنبلات فقط قانون یادگیری را برای شبکه‌های عصبی تک لایه‌ای مطرح کرده بودند. از این رو آن‌ها شبکه‌های چند لایه را مطرح کردند اما نتوانستند الگوریتم‌های یادگیری شبکه‌های چند لایه‌ای را بهبود بخشند [۲ و ۳].

پیشرفت شبکه‌های عصبی تا دهه‌ی هفتاد قرن بیستم ادامه یافت. در سال ۱۹۷۲ تئوکوهونن[9] و جیمز اندرسون[10] به طور مستقل و بدون اطلاع از کار هم، شبکه‌های عصبی جدیدی معرفی کردند که قادر به ذخیره‌سازی اطلاعات بودند. استفان گروسبرگ[11] نیز در سال ۱۹۷۶ روی شبکه‌های خودسازمان‌ده کار می‌کرد. با رشد تکنولوژی میکروپروسسورها در دهه‌ی هشتاد، ایده‌ی به کارگیری شبکه‌ها در زمینه‌های جدیدی مطرح شد این ایده‌های نو و تکنولوژی بالا برای تولد دوباره‌ی شبکه‌های عصبی کافی به نظر می‌رسید زیرا در آن دوره، دو نگرش جدید، شبکه‌های عصبی را متحول کرد. این دو ایده عبارت بودند از:

۱- استفاده از مکانیسم تصادفی جهت توضیح عملکرد یک طبقه‌ی وسیع از شبکه‌ها موسوم به برگشتی که توسط جان هاپفیلد[12] فیزیکدان آمریکایی در سال ۱۹۸۲ مطرح شد. از این شبکه‌ها برای ذخیره‌سازی اطلاعات استفاده می‌شود.

۱- Waren Mc Culloch

۲- Walter Pitts

۳- Donald Hebb

۴- Frank Rosenblat

۵- perceptron

۶- Bernurd Widrow

۷- Ted Hoff

۸- Adaptive Linear Element (ADALINE)

۹- Teo Kohonen

۱۰- James Anderson

۱۱- Estefan Gerossberg

۱۲- John Hopfield

۲- دومین ایده، آلگوریتم پس انتشار خطا[1] بود که توسط دیوید راملهارت[2] و جیمز مکلند[3] در سال ۱۹۸۶ مطرح گردید.

از آن زمان تاکنون، این زمینه‌ی جدید علمی روند رشد و پیشرفت را ادامه داده است و هزاران مقاله درباره‌ی کاربرد شبکه‌های عصبی در زمینه‌های مختلف علوم نوشته شده است. البته بیشتر پیشرفت‌ها در شبکه‌های عصبی به ساختارهای نوین و روش‌های یادگیری جدید مربوط می‌شود. مسلماً در آینده با شناسایی بیشتر نحوه‌ی عملکرد مغز و نرون‌های بیولوژیک، قابلیت‌های بیشتری به شبکه‌های عصبی افزوده شده و پیشرفت‌های مهمی‌در این زمینه صورت خواهد گرفت. قطعاً در آن زمان شبکه‌ها خواهند توانست به عنوان یک ابزار علمی قدرتمند در حل مسائل جدید مطرح شوند [۳].

۱-۳- ساختار شبکه‌های عصبی مصنوعی

با وجود گستردگی شبکه‌های عصبی مصنوعی، واحدهای تشکیل دهنده‌ی همه‌ی آن‌ها مشابه است. مهم‌ترین جزء تشکیل دهنده‌ی یک شبکه‌ی عصبی، نرون می‌باشد. نرون یک واحد محاسباتی- پردازشی است که در حقیقت مدل ساده شده‌ای از نرون طبیعی است. نرون از تعدادی ورودی، یک خروجی، وزن‌های مربوط به ایجاد سیگنال تحریک و تابع تحریک تشکیل شده است. ارتباط بین خروجی و سیگنال تحریک در قسمتی به نام تابع تحریک به وجود می‌آید. بنابراین یک نرون از دو بخش تشکیل شده است: بخش اول وظیفه‌ی دریافت ورودی‌ها، وزن دهی آن‌ها و محاسبه‌ی مجموع آن‌ها به عنوان سیگنال تحریک را به عهده دارد و بخش دوم وظیفه‌ی اعمال تابع تحریک روی سیگنال تحریک و ساختن پیغام خروجی نرون به لایه‌ی بعد و یا خروجی شبکه را به عهده دارد. شکل (۳) ساختمان یک نرون محاسباتی را نشان می‌دهد. بیان رابطه‌ی ورودی‌ها و خروجی‌های شبکه در یک مدل ریاضی مطابق فرمولاسیون شکل (۱-۳)، پرسپترون نامیده می‌شود [۹].

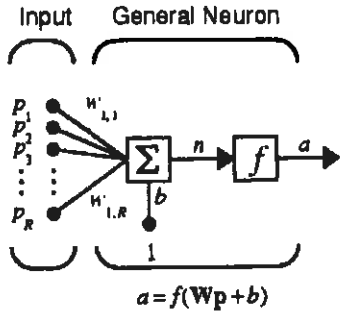
توابع تحریک متفاوتی برای مقاصد مختلف در شبکه‌های عصبی به کار می‌روند. بعضی از این توابع دارای خروجی‌های منطقی (۱ و ۰) و یا (۱- و ۱) هستند، برخی خروجی پله‌ای و بعضی دیگر نیز خروجی پیوسته دارند. در اکثر شبکه‌های مصنوعی به خاطر فرمولاسیون خاص حاکم بر محاسبه‌ی ضرایب اتصال شبکه و آموزش شبکه، بیشتر از توابع تحریک پیوسته استفاده می‌کنیم تا از توابع تحریک گسسته. سه مورد از

۱- error back propagation

۲- David Rummelhart

۳- James Mcland

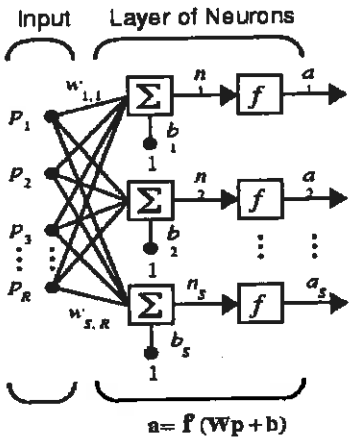
معروفترین توابع محرک عبارتند از: تابع محرک آستانه‌ای حدی[1]، تابع محرک خطی[2] و تابع محرک سیگموئید[3]. تابع تحریک سیگموئید در شبکه‌های عصبی، به خصوص در شبکه‌های چند لایه‌ای که با استفاده از الگوریتم پس انتشار خطا آموزش داده می‌شوند، کاربرد فراوانی دارد. چراکه به علت مشتق‌پذیر بودن این تابع می‌توان روابط مربوط به الگوریتم پس انتشار را برای آن اجرا کرد [۹].



شکل(۱-۳): ساختمان یک نرون محاسباتی.

۱-۴- دسته‌بندی لایه‌ای شبکه‌های عصبی مصنوعی

در یک تقسیم بندی ساختاری، شبکه‌های عصبی را می‌توان به دو دسته‌ی تک لایه و چند لایه تفکیک کرد. در یک شبکه‌ی تک لایه نرون‌های خروجی و ورودی یکی هستند و بنابراین به تعداد سیگنال‌های خروجی، نرون در شبکه وجود دارد که همگی در یک لایه و به موازات هم کار می‌کنند. شکل (۱-۴) ساختار یک شبکه‌ی تک لایه پیشرو با S نرون و R ورودی را نشان می‌دهد.



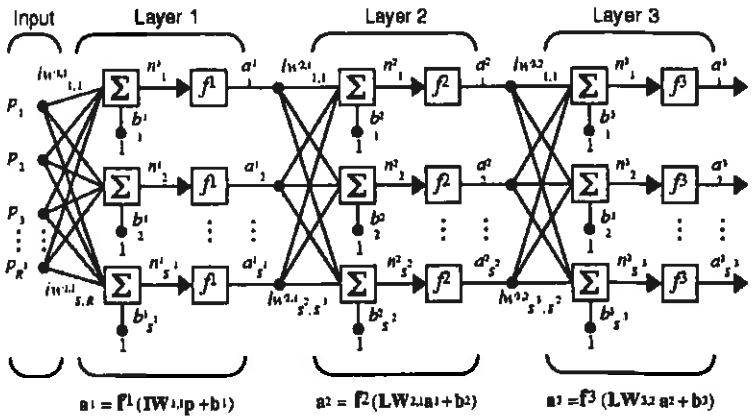
شکل (۱-۴): ساختار یک شبکه تک لایه پیشرو.

۱- hard limit transfer function

۲- linear transfer function

۳- log-sigmoid transfer function

گاهی دینامیک و قوانین حاکم بر مسئله به اندازه‌ای پیچیده است که برای دستیابی به عملکرد مطلوب، به درجات آزادی و پارامترهای قابل تنظیم بیشتری نیازمندیم. در این موارد از شبکه‌های چند لایه استفاده می‌کنیم. در شکل (۱-۵) یک شبکه‌ی سه لایه نشان داده شده است.



شکل (۱-۵): ساختار یک شبکه‌ی سه لایه.

همان طور که در این شکل می‌بینید در یک شبکه‌ی چند لایه، برای مشخص کردن لایه‌های مختلف از بالانویس[۱] استفاده می‌شود. دریک شبکه‌ی چند لایه، لایه‌ای‌که خروجی آن همان خروجی شبکه است، لایه‌ی خروجی[۲] نام دارد و سایر لایه‌ها را لایه‌ی مخفی[۳] می‌گویند [۳]. اگرچه شبکه‌های چند لایه بسیار قدرتمندتر از شبکه‌های تک لایه هستند اما معمولاً در اکثر شبکه‌های کاربردی دو تا سه لایه استفاده می‌شود و افزایش تعداد لایه‌ها بیش از سه لایه، مرسوم نمی‌باشد [۹].

۱-۵- معماری[۴] شبکه‌های عصبی مصنوعی

شبکه‌های عصبی مصنوعی بر اساس شیوه‌ی پردازش اطلاعات در آن‌ها به دو دسته تقسیم می‌شوند:

۱- شبکه‌های پیش‌خور[۵] یا ازقبل تغذیه شده، که در آنها هر نرون در هر لایه به کلیه‌ی نرون‌های لایه‌ی مجاور و بعدی متصل می‌شود اما هیچ سیگنالی از نرون به خودش و یا به نرون‌های لایه‌ی قبلی برنمی‌گردد.

۱- superscript

۲- output layer

۳- hidden layer

۴- topology

۵- feed forward

همچنین پرش اتصالات بین نرون‌ها در طول لایه‌ها مجاز نمی‌باشد. بنابراین در این شبکه‌ها، جریان اطلاعات همیشه در یک مسیر یک طرفه و از ورودی به سمت خروجی می‌باشد و به همین دلیل هم به آن پیش‌خور می‌گویند. امروزه در اکثر کاربردهای شبکه‌های عصبی مصنوعی از این نوع شبکه استفاده می‌کنند [۲].

۲- شبکه‌های پس‌خور[۱] (بازخوردی یا برگشتی[۲]) که در آنها، حداقل یک سیگنال برگشتی از یک نرون به همان نرون یا نرون‌های همان لایه و یا لایه‌ی قبلی وجود دارد. بنابراین آن‌ها می‌توانند با استفاده از حلقه‌های برگشتی، سیگنال‌هایی داشته باشند که در هر دو مسیر از ورودی به خروجی و بالعکس، حرکت کنند.[۲].

۱-۶- فرآیند یادگیری در شبکه‌های عصبی به عنوان سیستم‌های آموزش پذیر

قبلاً اشاه شد که مغز یک سامانه‌ی یادگیر است. سامانه‌های یادگیر سامانه‌هایی هستندکه می‌توانند بر اساس اطلاعات جدید و صرفاً با مشاهده‌ی عملکرد فعلی‌شان رفتار خود را جهت دستیابی به هدف خاصی بهبود ببخشند. مثلاً ما می‌توانیم چهره‌ی جدیدی را به خاطر بسپاریم بی آن که چهره‌های قبلی را از یاد ببریم.

شبکه‌های عصبی مصنوعی هم که از روی مغز انسان الگوبرداری شده‌اند، می‌توانند آموزش ببینند و یاد بگیرند و این یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های آن‌هاست.

به طور کلی دو نوع یادگیری برای شبکه‌ها وجود دارد:یادگیری با ناظر[۳] و یادگیری بدون ناظر[۴]. در یادگیری با ناظر، در هر مرحله از تکرار الگوریتم یادگیری، جواب واقعی سیستم یادگیرنده وجود دارد. لذا الگوریتم یادگیری به خطای یادگیری یعنی تفاوت بین مقدار واقعی و مقدار پیش‌بینی شده دسترسی دارد. در اکثر شبکه‌های عصبی از این نوع یادگیری استفاده می‌شود. در یادگیری بدون ناظر یا خودسامان‌ده، جواب واقعی برای سیستم یادگیرنده موجود نیست. در این نوع یادگیری، شبکه می‌آموزد که الگوهای ورودی را به تعداد مساوی از گروه‌ها تقسیم‌بندی یا خوشه‌بندی کند و بعد ارتباطات موجود بین آن‌ها را پیدا کرده و در خروجی شبکه کد نماید. در این حالت فرد کاربر است که هدف نهایی را مشخص می‌کند.

رفتار سیستم‌های آموزش‌پذیر (یادگیر) توسط الگوریتم‌های برگشتی بیان می‌شود که به این الگوریتم‌ها قوانین یادگیری می‌گویند. انواع مختلفی از قوانین یادگیری برای شبکه‌های عصبی وجود دارند که یادگیری

۱- feed back

۲- recurrent

۳- supervised learning

۴- unsupervised learning

عملکردی[1] یکی از آن‌ها است و طبقه‌ی وسیعی از قوانین یادگیری برای شبکه‌های عصبی را شامل می‌شود. در این نوع یادگیری، پارامترهای شبکه 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. بنابراین یادگیری عملکردی، یک یادگیری با ناظر است زیرا جواب واقعی برای نمونه‌های مورد بررسی سیستم یادگیرنده وجود دارد.

برای بهینه‌سازی عملکرد، باید دو قدم اساسی برداشته شود:

۱- درقدم اول باید عملکرد را به زبان ریاضی تعریف کنیم. برای این منظور باید معیاری که به طور کمی، عملکرد شبکه را بیان می‌کند پیدا کنیم. این معیار را شاخص عملکرد[2] می‌گویند که رابطه‌ی معکوسی با نحوه‌ی عملکرد شبکه دارد یعنی هرچه عملکرد شبکه بهتر باشد، مقدار شاخص عملکرد کوچکتر خواهد بود و بالعکس. شاخص عملکرد در بیشتر الگوریتم‌ها، متوسط مربعات خطا[3] (MSE) می‌باشد. شاخص عملکرد را اصطلاحاً تابع هدف یا تابع خطا نیز می‌گویند، یعنی تابعی که کمینه کردن آن مورد نظر است.

۲- دومین قدم، تنظیم پارامترهای شبکه برای کاهش مقدار شاخص عملکرد می‌باشد.

هدف تمام قوانین یادگیری، آموزش شبکه‌های عصبی جهت هدف خاصی است و نوع یادگیری شبکه از روندی که طبق آن پارامترهای شبکه تنظیم می‌گردند مشخص می‌شود [۳].

۱-۷- معرفی روش‌های مختلف بهینه‌سازی عملکرد شبکه‌های عصبی

با این مقدمه سراغ الگوریتم‌های می‌رویم که در آموزش شبکه‌ها به کار می‌رود. الگوریتم‌های مختلف بهینه‌سازی عملکرد تقریباً همگی دوری[4] هستند یعنی یک مقدار اولیه برای تابع حدس زده می‌شود. سپس این مقدار اولیه طی مراحلی که از قاعده‌ی زیر پیروی می‌کند، بهینه می‌شود:

$$\mathbf{x}_{k+1} = \mathbf{x}_k + \alpha \boldsymbol{P}_k \qquad (۱-۱)$$

که در آن $\mathbf{x}_k$ حدس نقطه‌ی مینیمم تابع در مرحله‌ی k ام است و $\mathbf{x}_{k+1}$ حدس مرحله‌ی بعد نقطه‌ی مینیمم تابع می‌باشد، $\boldsymbol{P}_k$ ، مسیر جستجو یا همان بردار مسیر است که از روی آن حدس مرحله‌ی بعد، یعنی $\mathbf{x}_{k+1}$، به دست می‌آید و α سرعت یادگیری[5] نامیده می‌شود و مقدارش بین صفر و یک تغییر می‌کند. α، طول

۱- performance learning

۲- performance

۳- mean square error

۴- iterative

۵- learning rate

قدم‌ها یا همان کم و زیاد بودن تغییرات پارامترهای شبکه در هر دور را معین می‌کند. روش‌های مختلف بهینه‌سازی در نحوه‌ی انتخاب مسیر جستجو و سرعت یادگیری با هم تفاوت دارند.

۱-۷-۱- روش نزول گرادیانی[۱]

الگوریتم نزول‌گرادیانی یا الگوریتم سریع‌ترین نزول[۲] یکی‌ازتکنیک‌های ابتدایی و درعین حال کاملاً مؤثر در آموزش شبکه می‌باشد.

گرادیان یک تابع n متغیره مثل $F(\mathbf{x})$، یک بردار n بعدی است که به شکل کلی (۱-۳) بیان می‌شود:

$$F(\mathbf{x}) = F(x_1, x_2, \ldots, x_n) \qquad (۱-۲)$$

$$\nabla F(\mathbf{x}) = \left[\frac{\partial}{\partial x_1} F(\mathbf{x}) \quad \frac{\partial}{\partial x_2} F(\mathbf{x}) \quad \ldots \quad \frac{\partial}{\partial x_n} F(\mathbf{x}) \right]^T_{n\times 1} \qquad (۱-۳)$$

بالانویس T باعث جابجایی سطرها و ستون‌های هر ماتریس می‌شود و به آن ترانسپوز[۳] می‌گویند. گرادیان تابع خاصیت جالبی دارد که کاربردی منحصر به فرد برای آن به وجود آورده است. برای استفاده از این خاصیت، ابتدا یک تابع عملکرد یا تابع خطا (E) بر حسب پارامترهای شبکه انتخاب می‌شود. این تابع بیانگر خطایی است که بین مقادیر واقعی و پاسخ شبکه وجود دارد. تابع انتخاب شده باید نسبت به تک تک پارامترهای شبکه مشتق‌پذیر باشد. در این صورت گرادیان تابع خطا در هر نقطه از فضای پارامترها، قابل محاسبه خواهد شد:

$$\mathbf{g}_k^T = \nabla E(\mathbf{W})^T\Big|_{\mathbf{W}=\mathbf{W}_k} = \left[\frac{\partial}{\partial w_1} E(\mathbf{W}) \quad \frac{\partial}{\partial w_2} E(\mathbf{W}) \quad \ldots \quad \frac{\partial}{\partial w_n} E(\mathbf{W}) \right]^T_{n\times 1}\Bigg|_{\mathbf{W}=\mathbf{W}_k} \qquad (۱-۴)$$

که در آن $\mathbf{W}$ برداری است که مؤلفه‌هایش پارامترهای شبکه هستند. از طرف دیگر تابع خطا هنگام اصلاح شدن مقدار حدس اولیه با استفاده از رابطه‌ی (۱-۱) باید در هر دور کاهش یابد، یعنی:

$$E(\mathbf{W}_{k+1}) < E(\mathbf{W}_k) \qquad (۱-۵)$$

بسط سری تیلور مرتبه‌ی اول تابع $E(\mathbf{W})$ حول حدس قبلی یعنی $\mathbf{W}_k$ چنین است:

$$E(\mathbf{W}_{k+1}) = E(\mathbf{W}_k) + \nabla E(\mathbf{W})^T\Big|_{\mathbf{W}=\mathbf{W}_k} \Delta\mathbf{W}_k \qquad (۱-۶)$$

برای این که $E(\mathbf{W}_{k+1})$ کوچکتر از $E(\mathbf{W}_k)$ شود باید جمله‌ی دوم سمت راست عبارت (۱-۶) منفی باشد:

$$\nabla E(\mathbf{W})^T\Big|_{\mathbf{W}=\mathbf{W}_k} \Delta\mathbf{W}_k = \mathbf{g}_k^T \Delta\mathbf{W}_k < 0 \qquad (۱-۷)$$

۱- steepest descent algorithm

۲- gradient descent algorithm

۳- transpose

اگر رابطه‌ی (۱-۱) را به صورت جدیدی بازآرایی کنیم:

$$\mathbf{W}_{k+1} = \mathbf{W}_k + \alpha \boldsymbol{P}_k \Rightarrow \Delta \mathbf{W}_k = \alpha \boldsymbol{P}_k \qquad (۱-۸)$$

با جای‌گذاری رابطه‌ی (۱-۸) در (۱-۷) به دست می‌آید:

$$\alpha \Delta \mathrm{E}(\mathbf{W})_k = \alpha \mathbf{g}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{P}_k < 0 \qquad (۱-۹)$$

چون ضریب یادگیری یک مقدار مثبت است، لذا باید داشته باشیم:

$$\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{p}_k < 0 \qquad (۱-۱۰)$$

هر بردار $\boldsymbol{P}_k$ که در این معادله صدق کند، مسیر نزول[۱] نام دارد و مقدار تابع با حرکت در این مسیر کاهش می‌یابد. اما در کدام مسیر بیشترین تنزل رخ می‌دهد؟ مسلماً مسیری که $\mathbf{g}_k^{\mathrm{T}} \boldsymbol{p}_k$ مربوط به آن منفی‌تر از بقیه باشد باعث بیشترین نزول در مقدار تابع می‌شود. چون عبارت (۱-۱۰) حاصلضرب درونی دو بردار است وقتی مقدارش کمینه است که بردار مسیر و بردار گرادیان تابع در عکس جهت یکدیگر باشند. بنابراین، برداری که مسیر سریع‌ترین نزول را نشان می‌دهد، چنین است:

$$\boldsymbol{p}_k = -\mathbf{g}_k \qquad (۱-۱۱)$$

خاصیت جالب گرادیان تابع که قبلاً به آن اشاره شد همین است. چرا که طبق رابطه‌ی (۱-۱۱) در هر نقطه از فضای پارامترها، اگر در جهت گرادیان محلی حرکت کنیم مقدار تابع با بیشترین سرعت افزایش می‌یابد و برعکس اگر درخلاف جهت گرادیان تابع حرکت کنیم مقدار تابع با همان سرعت کاهش می‌یابد. با به کارگیری رابطه‌ی (۱-۱۱)، تغییر پارامترهای شبکه به گونه‌ای صورت می‌گیرد که باعث مینیمم شدن تابع خطا می‌گردد [۹]:

$$\mathbf{W}_{k+1} = \mathbf{W}_k - \alpha \mathbf{g}_k = \mathbf{W}_k - \alpha \nabla \mathrm{E}(\mathbf{W})\big|_{\mathbf{W}=\mathbf{W}_k} \qquad (۱-۱۲)$$

یکی از عمده‌ترین عیوب این شیوه گرفتار شدن تابع خطا در دام مینیمم‌های موضعی می‌باشد. دراین صورت مقدار گرادیان در این نواحی کم شده و آموزش شبکه به سکون می‌افتد و نقطه‌ی مینیمم جامع[۲] تابع خطا به دست نمی‌آید [۳]. مشکل دیگری که ممکن است بروز کند پرش‌های متوالی و نوسانات دائم حول نقطه‌ی مینیمم به خاطر بزرگ بودن سرعت یادگیری α است. زیرا انتخاب مقادیر کوچک سرعت یادگیری باعث افزایش تعداد دورهای لازم برای مینیمم کردن تابع عملکرد و افزایش زمان آموزش شبکه می‌شود. از این رو لازم است سرعت یادگیری بزرگتر انتخاب شود تا تابع عملکرد در مقدار دورهای کمتری مینیمم شود. اما همین سرعت یادگیری بزرگتر، باعث تغییرات شدید در پارامترهای شبکه شده و تابع عملکرد دچار نوسان می‌شود. در مواردی که سرعت یادگیری خیلی بزرگ انتخاب شود، نوسانات آن قدر شدید است که همگرایی

۱- descent direction

۲- global minimum

به نقطه‌ی مینیمم تابع رخ نمی‌دهد که در این حالت یادگیری را ناپایدار[1] می‌گویند [۱۰]. راه حل مناسب ارائه شده برای این که α بزرگ باشد و ناپایداری هم رخ ندهد استفاده از ترم ممنتم است، به این معنی که ضریبی از وزن‌های مرحله‌ی قبل به مرحله‌ی فعلی اضافه می‌شود:

$$\Delta \mathbf{W}_k^{new} = -\alpha \nabla \mathrm{E}(\mathbf{W})\big|_{\mathbf{W}=\mathbf{W}_k} + \eta \Delta \mathbf{W}_k^{old} \qquad (۱-۱۳)$$

که ضریب η، ممنتم است. طبق این رابطه، در دور $(k+1)$ ام، به جای $\Delta \mathbf{W}_k = -\alpha \nabla \mathrm{E}(\mathbf{W})\big|_{\mathbf{W}=\mathbf{W}_k}$ در رابطه‌ی (۱-۱۲)، $\Delta \mathbf{W}_k^{new}$ به عنوان تغییر وزن‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد [۳].

۱-۷-۲- الگوریتم پس انتشار خطا[2]

یکی از بهترین و موثرترین روش‌های آموزشی شبکه‌های عصبی در یادگیری با ناظر، روش پس انتشار خطا می‌باشد. این قانون یادگیری در اصل یک الگوریتم سریع‌ترین نزول با شاخص عملکرد متوسط مربعات خطا (MSE) است که برای آموزش شبکه‌های چند لایه با تابع محرک غیرخطی، به کار می‌رود. اساس کار در این روش به این ترتیب است که در ابتدا وزن‌های شبکه به صورت تصادفی انتخاب می‌شوند. سپس ورودی‌ها همراه با این وزن‌های تصادفی به پرسپترون اعمال شده و خروجی شبکه محاسبه می‌گردد. این خروجی با خروجی مطلوب مقایسه شده و سپس شاخص عملکرد محاسبه می‌شود. برای کمینه کردن تابع عملکرد، از الگوریتم سریع‌ترین نزول استفاده می‌شود لذا طبق این الگوریتم وزن‌ها و پیش قدرها تغییر می‌یابند. از آن جا که در این مرحله خطای خروجی شبکه برای اصلاح وزن‌ها و پیش قدرها به شبکه برگشت داده می‌شود به آن الگوریتم پس انتشار خطا می‌گویند. محاسبات دوباره با این وزن‌ها و پیش قدرهای جدید تکرار می‌شود و تکرار این مراحل که اصطلاحاً دورهای آموزشی نامیده می‌شود تا رسیدن به حد قابل قبولی از تابع خطا ادامه می‌یابد.

۱-۸- شبکه‌ی عصبی موجک[3]

در سال‌های اخیر ایده‌ی تلفیق موجک[4] با شبکه‌های عصبی باعث ایجاد نوع جدیدی از شبکه‌های عصبی به نام شبکه‌ی عصبی موجک گردیده است. [۱۳- ۱۱]. این شبکه‌ها نیز مانند سایر شبکه‌های عصبی، جزء تقریب‌زننده‌های عمومی هستند اما به واسطه‌ی همگرایی سریع‌تر، می‌توانند در مدت زمان کمتری مدل

۱- unstable

۲- error back propagation algorithm

۳- Wavelet Neural Network (WNN)

۴- wavelet

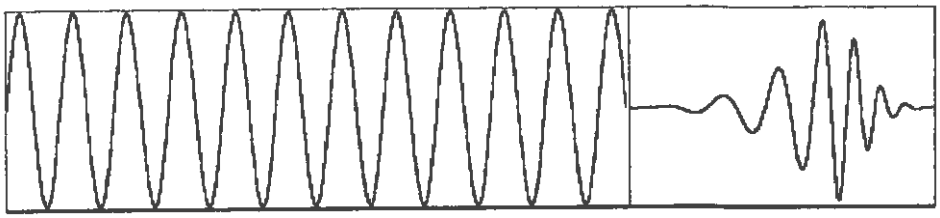
غیرخطی حاکم بر سیستم را به طور مطلوب ارائه دهند. از دیگر مزایای شبکه‌های عصبی موجک، جلوگیری از مینیمم‌های موضعی و سهولت تنظیم ساختار می‌باشد. این شبکه‌ها به واسطه‌ی مزایای فوق به طور خاصی مورد توجه قرار گرفته‌اند [۱۵ و ۱۴].

شبکه‌های عصبی موجک اولین بار در سال ۱۹۸۸ توسط دوگمان[۱] مورد استفاده قرار گرفت و پس از فعالیت‌های پتی[۲]، زانگ[۳] و زو[۴] به طور فراگیر در زمینه‌های مختلف علوم به کار گرفته شد [۱۶].

در ادامه‌ی این مبحث ابتدا توضیح مختصری درباره‌ی موجک و تبدیل موجک داده خواهد شد و سپس الگوریتم شبکه‌ی عصبی موجک ارائه می‌شود.

۱-۸-۱- موجک و تبدیل موجک

موجک، یک موج کوچک با انرژی معین است که این تمرکز انرژی در زمان یا مکان، آن را به ابزاری قدرتمند در آنالیز پدیده‌های زودگذر، غیرایستا[۵] و متغیر نسبت به زمان تبدیل کرده است. در شکل (۱-۶) یک موج سینوسی و یک موجک مورلت[۶]، نشان داده شده است [۱۷]. همان طور که در این شکل می‌بینید یک موج سینوسی، نامتناهی، یکنواخت و قابل پیش‌بینی است در حالی که موجک دارای شکل نامنظم بوده و متناهی است.



شکل (۱-۶): مقایسه‌ی یک موج سینوسی (سمت چپ) با یک موجک (سمت راست).

اگر $\psi(t)$ یک موجک مادر[۷] را نشان دهد، می‌توان با تغییر موقعیت[۸] و یا تغییر پهنا[۱] در موجک مادر، توابع موجک مختلف را به صورت زیر به دست آورد:

۱- Dougman

۲- Pati

۳- Zhang

۴- Szu

۵- non-stationary

۶- Morlet

۷- Mother wavelet

۸- translation or shifting (delaying or hastening)

$$\psi_{a,b}(t)=\frac{1}{\sqrt{a}}\psi\left(\frac{t-b}{a}\right) \qquad (۱-۱۴)$$

که در آن a پارامتر پهنا و b پارامتر موقعیت است. موجک مادر با تغییر پارامتر a، کشیده یا فشرده می‌شود و با تغییر پارامتر b نسبت به زمان عقب و جلو می‌رود. از آن جا که توابع موجک مختلف می‌توانند به ازاء مقادیر مختلف a و b و با استفاده از تابع $\psi(t)$ به دست آیند به $\psi(t)$ تابع موجک مادر می‌گویند [۱۷]. به تمام توابع موجکی که براساس رابطه‌ی (۱-۱۴) از موجک مادر $\psi(t)$ تولید می‌شوند توابع پایه‌ی موجک[۲] می‌گویند [۱۸].

مشابه تبدیل فوریه، هر تابع پیوسته می‌تواند به طور منحصر به فردی روی توابع پایه‌ی موجک تصویر شده و به صورت یک ترکیب خطی از این توابع بیان شود. مجموعه‌ی ضرایب بسط که وزن توابع پایه موجک را نشان می‌دهد، تبدیل موجک[۳] تابع مورد نظر است [۱۸]. از نظر ریاضی تبدیل موجک تابع $f(t)$ چنین نوشته می‌شود:

$$C(a,b)=\int_{-\infty}^{+\infty}f(t)\psi_{a,b}(t)dt=\frac{1}{\sqrt{a}}\int_{-\infty}^{+\infty}f(t)\psi\left(\frac{t-b}{a}\right)dt \qquad (۱-۱۵)$$

که در آن، جمع روی حاصلضرب سیگنال $f(t)$ در توابع پایه‌ی موجک زده شده است. نتیجه‌ی تبدیل موجک، ضرایب موجک، $C(a,b)$ هستند که تابعی از پهنا و موقعیت می‌باشند. حاصل‌ضرب هر ضریب در موجک مرتبط با آن ضریب (از نظر پهنا و موقعیت)، موجک‌های سازنده‌ی سیگنال اصلی را نشان می‌دهد [۱۷]. بنابراین تبدیل موجک شبیه تبدیل فوریه می‌تواند توابع یا سیگنال‌ها را به اجزاء تشکیل دهنده‌اش بشکند. به عبارت دیگر، تبدیل فوریه، سیگنال را به یک سری از موج‌های سینوسی با فرکانس‌های مختلف و تبدیل موجک، سیگنال را به موجک‌های آن می‌شکند. باتوجه به توضیحات فوق، نمایش تابع مورد نظر توسط مجموعه‌ای از موجک‌ها، در نگاه اول چندان ارزشمند به نظر نمی‌رسد چراکه تجزیه‌ی توابع برحسب توابع پایه‌ی متعامد[۴] موضوع تازه‌ای نیست و سال‌هاست که شناخته شده است. اما نکته‌ی جدیدی که در تجزیه‌ی موجک وجود دارد این است که توابع پایه‌ی موجک مگر در یک بازه‌ی محدود، صفر هستند در حالی که توابع پایه‌ی سینوسی نامتناهی هستند و همین ویژگی باعث می‌شود که تبدیل موجک بتواند به خوبی توابع یا سیگنال‌های مستقر را نمایش دهد، کاری که از عهده‌ی تبدیل فوریه به خوبی برنمی‌آید [۱۸].

۱- scaling or dilating (stretching or compressing)

۲- wavelet basis function

۳- wavelet transform

۴- orthogonal

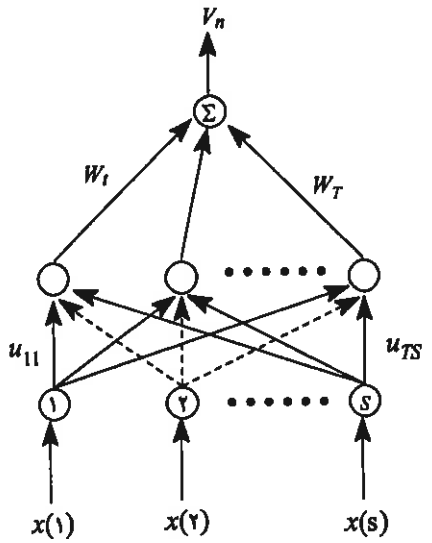
۱-۸-۲- موجک مادر

اولین مشتق تابع گوسین را می‌توان به عنوان موجک مادر انتخاب کرد. توابع پیچیده‌تر مثل مشتقات مرتبه‌ی بالاتر تابع گوسین، موجک‌های مادر مورلت، کلاه مکزیکی[۱] و میر[۲] نیز می‌توانند به عنوان تابع موجک مادر مورد استفاده قرار گیرند. موجک مادری که در این گزارش مورد استفاده قرار گرفته است، موجک مادر مورلت است که به صورت زیر بیان می‌شود [۱۷]:

$$h(t)=\cos(1.75t)\exp\left(\frac{-t^2}{2}\right) \qquad (۱۷-۱)$$

۱-۸-۳ آلگوریتم شبکه‌ی عصبی موجک

شکل (۱-۷) ساختار عمومی و متداول شبکه‌ی عصبی موجک را نشان می‌دهد. همان طور که مشاهده می‌شود این ساختار شبیه شبکه‌ی پرسپترون چندلایه‌ای است با این تفاوت که مقادیر پیش قدر مربوط به لایه‌های پنهانی و خروجی حذف شده‌اند. به علاوه، از تابع محرک موجک به جای تابع محرک سیگموئید استفاده شده است.



شکل (۱-۷): ساختار عمومی شبکه‌ی عصبی موجک.

مراحل طراحی و ساخت مدل به صورت زیر می‌باشد:

۱- پارامترهای a_i و b_i که به ترتیب پارامترهای پهنا و موقعیت هستند و همچنین وزن‌های شبکه، شامل u_{ii} و W_i به صورت تصادفی از اعداد بین صفر تا یک انتخاب می‌شوند.

۲- داده‌های نمونه‌های مختلف به صورت اتفاقی به دو سری آموزش و سری پیش‌بینی تقسیم می‌شوند. ورودی‌های $x_n(i)$ و خروجی‌های مربوط به آن‌ها V_n^T برای تمام نمونه‌های سری آموزش به شبکه وارد می‌شوند. i می‌تواند از ۱ تا S تغییر کند که S نشان دهنده‌ی تعداد نرون‌های ورودی است. n نیز نشان دهنده‌ی n امین نمونه از سری آموزش است و T برای نشان دادن پاسخ واقعی به کار می‌رود.

۱- Mexican hat

۲- Mayer

۳- خروجی n امین نمونه‌ی سری آموزش به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$V_n = \sum_{t=1}^{T} W_t h\left[\frac{\sum_{i=1}^{s} u_{ti} x_n(i) - b_t}{a_t}\right] \qquad (۱-۱۸)$$

در این معادله، h تابع موجک مادر مورلت است که در معادله‌ی (۱-۱۷) معرفی گردید.

۴- تابع خطای شبکه به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$E = \frac{1}{2}\sum_{n=1}^{N}\left(V_n^T - V_n\right)^2 \qquad (۱-۱۹)$$

۵- برای کاهش خطای شبکه از آلگوریتم نزول گرادیانی همراه با جمله‌ی ممنتم استفاده می‌شود. براساس این آلگوریتم، پارامترهای شبکه W_t، u_{ti}، a_t و b_t باید به صورت زیر تغییر کنند تا در هر دور آموزش، تابع خطا کاهش یابد.

$$\Delta W_t^{new} = -\eta \frac{\partial E}{\partial W_t^{old}} + \alpha \Delta W_t^{old} \qquad (۱-۲۰)$$

$$\Delta u_{ti}^{new} = -\eta \frac{\partial E}{\partial u_{ti}^{old}} + \alpha \Delta u_{ti}^{old} \qquad (۱-۲۱)$$

$$\Delta a_t^{new} = -\eta \frac{\partial E}{\partial a_t^{old}} + \alpha \Delta a_t^{old} \qquad (۱-۲۲)$$

$$\Delta b_t^{new} = -\eta \frac{\partial E}{\partial b_t^{old}} + \alpha \Delta b_t^{old} \qquad (۱-۲۳)$$

که در معادلات فوق η سرعت یادگیری و α ممنتم است. حال می‌توان مقادیر جدید پارامترهای شبکه را با استفاده از معادلات زیر به دست آورد:

$$W_t^{new} = W_t^{old} + \Delta W_t^{new} \qquad (۱-۲۴)$$

$$u_{ti}^{new} = u_{ti}^{old} + \Delta u_{ti}^{new} \qquad (۱-۲۵)$$

$$a_t^{new} = a_t^{old} + \Delta a_t^{new} \qquad (۱-۲۶)$$

$$b_t^{new} = b_t^{old} + \Delta b_t^{new} \qquad (۱-۲۷)$$

همان طور که در معادلات (۱-۲۰) تا (۱-۲۳) مشاهده می‌شود، برای تصحیح پارامترهای شبکه به مقادیر عددی مشتق تابع خطا نسبت به این پارامترها یعنی $\frac{\partial E}{\partial W_t}$، $\frac{\partial E}{\partial u_{ti}}$، $\frac{\partial E}{\partial a_t}$ و $\frac{\partial E}{\partial b_t}$ نیاز داریم که این مقادیر با استفاده از معادلات (۱-۲۸) تا (۱-۳۶) به دست می‌آیند:

$$\frac{\partial E}{\partial W_i} = -\sum_{n=1}^{N}\left(V_n^T - V_n\right)h\left[\frac{\sum_{i=1}^{s} u_{ii}x_n(i) - b_i}{a_i}\right] \qquad (۲۸-۱)$$

$$\frac{\partial E}{\partial u_{ii}} = -\sum_{n=1}^{N}\left(V_n^T - V_n\right)W_i\frac{\partial h}{\partial x'_n}x_n(i) \qquad (۲۹-۱)$$

$$\frac{\partial E}{\partial a_i} = -\sum_{n=1}^{N}\left(V_n^T - V_n\right)W_i\frac{\partial h}{\partial a_i} \qquad (۳۰-۱)$$

$$\frac{\partial E}{\partial b_i} = -\sum_{n=1}^{N}\left(V_n^T - V_n\right)W_i\frac{\partial h}{\partial b_i} \qquad (۳۱-۱)$$

که در این معادلات:

$$x'_n = \sum_{i=1}^{s} u_{ii}x_n(i) \qquad (۳۲-۱)$$

$$t'_n = \frac{x'_n - b_i}{a_i} \qquad (۳۳-۱)$$

$$\frac{\partial h}{\partial x'_n} = -\cos(1.75t'_n)\exp\left(-\frac{t'^2_n}{2}\right)\frac{t'_n}{a_i} - 1.75\sin(1.75t'_n)\exp\left(-\frac{t'^2_n}{2}\right)\frac{1}{a_i} \qquad (۳۴-۱)$$

$$\frac{\partial h}{\partial a_i} = \cos(1.75t'_n)\exp\left(-\frac{t'^2_n}{2}\right)\frac{t'^2_n}{a_i} + 1.75\sin(1.75t'_n)\exp\left(-\frac{t'^2_n}{2}\right)\frac{t'_n}{a_i} \qquad (۳۵-۱)$$

$$\frac{\partial h}{\partial b_i} = \cos(1.75t'_n)\exp\left(-\frac{t'^2_n}{2}\right)\frac{t'_n}{a_i} + 1.75\sin(1.75t'_n)\exp\left(-\frac{t'^2_n}{2}\right)\frac{1}{a_i} \qquad (۳۶-۱)$$

۶- پس از محاسبه‌ی مقادیر جدید پارامترهای شبکه با استفاده از روابط فوق، به مرحله‌ی ۳ باز می‌گردیم و با استفاده از این مقادیر جدید مراحل فوق را برای دور دیگری از آموزش شبکه تکرار می‌کنیم. مراحل آموزش تا زمانی تکرار می‌شود که خطای شبکه به مقدار قابل قبولی کاهش یابد. در این صورت آموزش شبکه‌ی عصبی موجک به پایان می‌رسد [۱۹].

۷- در آخر برای اثبات کارایی مدل، مقادیر خروجی برای داده‌های سری پیش‌بینی توسط شبکه‌ی بهینه شده محاسبه می‌شود و با بررسی مقادیر خطا، کارآیی مدل طراحی شده مورد بررسی قرار می‌گیرد.

فصل دوم: طراحی و بهینه‌سازی شبکه‌ی عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱-آلکانول‌ها

مقدمه

۱- آلکانول‌ها با فرمول عمومی ($C_nH_{2n+1}OH$)، یک سری همولوگ از الکل‌های آلیفاتیک هستند که دارای یک گروه هیدروکسیل متصل به یک رادیکال آلکیل راست زنجیر می‌باشند. از نظر صنعتی، الکلهای آلیفاتیک تک عاملی برحسب کاربردشان به سه دسته‌ی اصلی تقسیم می‌شوند:

۱- الکل‌های دارای یک تا پنج اتم کربن که اکثراً به عنوان حلال و یا ضدیخ استفاده می‌شوند. استرهای حاصل از این الکل‌ها نیز به طور گسترده‌ای به عنوان حلال در تهیه‌ی رنگ‌های نقاشی، جوهر، چسب و رزین استفاده می‌شود.

۲- الکل‌های دارای شش تا دوازده اتم کربن که به عنوان نرم‌کننده در تهیه‌ی اسفنج‌ها و همچنین به عنوان روان‌کننده در دستگاه‌های با سرعت بالا استفاده می‌شود.

۳- الکل‌های دارای دوازده اتم کربن و بالاتر که مهمترین کاربردشان در تهیه‌ی شوینده‌ها می‌باشد.

نظر به کاربرد این ترکیبات در صنایع مختلف، خواص ترمودینامیکی و همچنین وابستگی این خواص به دما و فشار از اهمیت خاصی برخوردار است. یکی از مهمترین خواص ترمودینامیکی مورد نیاز صنایع شیمیایی، دانسیته می‌باشد. اما همیشه یافتن مقادیر تجربی معتبر برای دانسیته در شرایط مختلف دما و فشار، خصوصاً از منابع علمی امکانپذیر نیست. به علاوه، اندازه گیری تجربی این خواص مشکل بوده و به صرف هزینه و وقت زیادی نیاز دارد. در این شرایط، استفاده از معادله‌ی حالت (EOS) یا هر روش پیش‌بینی دیگر مثل توابع همبستگی می‌تواند برای پیش‌بینی این کمیت مدنظر قرار گیرد. اما به دلیل وجود پیوند هیدروژنی بین گروه‌های هیدروکسیل و ایجاد خودتجمعی، به دست آوردن یک معادله‌ی حالت دقیق برای چنین سیالاتی کار بسیار مشکلی می‌باشد. از طرف دیگر همین عوامل سبب شده تا توابع همبستگی مناسبی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی این ترکیبات ارائه نگردد. همان طور که در فصل اول دیدیم شبکه‌ی عصبی مصنوعی ابزار پردازش اطلاعات قدرتمندی را در اختیار محققین قرار داده است تا بتوانند بر عدم موفقیت روش‌های پیش‌بینی قدیمی فائق آیند. از طرف دیگر، در سال‌های اخیر نوع جدیدی از شبکه‌ها به نام شبکه‌های عصبی موجک پدید آمده‌اند که به واسطه‌ی مزایایی که بر سایر شبکه‌های عصبی مصنوعی دارند به عنوان یکی از کارآمدترین شبکه‌های عصبی مطرح شده و مورد توجه خاص قرار گرفته‌اند. به همین دلیل

در این کار از شبکه‌ی عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی انواع الکل‌ها استفاده شده است. آن چه در ادامه‌ی این فصل می‌آید، شبکه‌ی عصبی موجکی است که برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱- آلکانول‌ها طراحی و بهینه شده است.

۲-۱- پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱- آلکانول‌ها با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار

۲-۱-۱- انتخاب سری داده‌ها

اولین مرحله در طراحی مدل، جمع‌آوری و انتخاب یک سری مولکولی است که خاصیت مورد نظر آن‌ها به صورت تجربی در دسترس باشد. در این قسمت چون هدف پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱- آلکانول‌هاست، لذا داده‌های دانسیته برای این ترکیبات آلی از دو کربنی تا ۱۰ کربنی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار گردآوری شدند. نام این ترکیبات به همراه محدوده‌ی دما و فشار، تعداد کربن و مرجع مورد استفاده برای هر ترکیب در جدول (۲-۱) آمده است. لازم به تذکر است که داده‌های مربوط به هر کدام از این ترکیبات به صورت اتفاقی به سه سری آموزش[۱]،پیش‌بینی[۲] و تایید[۳] تقسیم شده‌اند.

جدول (۲-۱): تعداد کربن، محدوده‌ی دما و فشار و مرجع داده‌های تجربی دانسیته‌ی ۱-آلکانول‌ها

سیال	تعداد کربن	محدوده‌ی دما (K)	محدوده‌ی فشار (MPa)	مرجع
اتانول	۲	۲۹۸/۱۵-۳۲۳/۱۵	۱-۷۰	[۲۰]
۱- پروپانول	۳	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۲۰۶/۹	[۲۰]
۱- بوتانول	۴	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۲۰۵	[۲۰]
۱- پنتانول	۵	۲۸۳/۵-۳۴۳	۱۰-۲۰۰	[۲۱]
۱- هگزانول	۶	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۴۰	[۲۲]
۱- هپتانول	۷	۳۲۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۰/۱-۱۰	[۲۳]
۱- اکتانول	۸	۲۹۸-۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۴۰	[۲۲]
۱- نونانول	۹	۳۲۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۰/۱-۱۰	[۲۳]
۱- دکانول	۱۰	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۴۰	[۲۲]

۱- train set

۲- prediction set

۳- validation set

۲-۱-۲- انتخاب توصیف‌کننده‌ها

انتخاب توصیف‌کننده‌های مناسب که دانسیته را به ساختار مولکولی مرتبط کند در ساخت مدل پیش‌بینی کننده از اهمیت خاصی برخوردار است. برای پیش‌بینی دانسیته دو ویژگی دما و فشار به عنوان اولین توصیف‌کننده‌ها به کارگرفته شدند، زیرا دانسیته‌ی هر ترکیب به دما و فشار سیستم وابسته است. این توصیف‌کننده‌ها ستون‌های اول و دوم ماتریس ورودی را می‌سازند. برای انتخاب سایر توصیف‌کننده‌ها در این کار برای اولین بار از مفهوم سهم گروه‌ها استفاده گردیده است. نتایج به دست آمده در کار اخیر ما [۲۴] نشان داد که الکل‌های نوع اول را می‌توان براساس مفهوم سهم گروه‌ها به چهار گروه عاملی سازنده‌ی آن‌ها شکست. این گروه‌های عاملی عبارتند از: گروه‌های متیل، گروه‌های متیلن انتهایی (گروه‌های متیلنی که فقط از یک طرف به یک گروه متیلن دیگر متصل شده‌اند)، گروه‌های متیلن میانی (گروه‌های متیلنی که از هر دو طرف به دو گروه متیلن دیگر متصل شده‌اند) و گروه عاملی الکل نوع اول CH_2OH-. به این ترتیب چهار توصیف‌کننده‌ی دیگر برمبنای مفهوم سهم گروه‌ها برای این ترکیبات آلی مورد بررسی عبارتند از:

۱- تعداد گروه‌های متیل

۲- تعداد گروه‌های متیلن انتهایی

۳- تعداد گروه‌های متیلن میانی

۴- تعداد گروه‌های عاملی الکل نوع اول CH_2OH-

اما تعداد گروه عاملی الکل نوع اول CH_2OH- در تمام این ترکیبات یکسان بوده و عملاً نمی‌تواند نقش خاصی را در ارتباط بین ساختار و دانسیته بازی کند. بنابراین فقط تعداد گروه‌های متیل، متیلن انتهایی و متیلن میانی به عنوان سه توصیف‌کننده‌ی بعدی انتخاب شدند که با همین ترتیب ستون‌های سوم تا پنجم ماتریس ورودی را تشکیل می‌دهند. همچنین نتایج موجود در مرجع [۲۴] نشان می‌دهد که در محاسبه‌ی دانسیته بر مبنای سهم گروه‌ها، دانسیته علاوه بر دما، فشار و سهم گروه‌های عاملی به تعداد کربن ترکیب آلی نیز وابسته است. بنابراین، تعداد کربن هر ترکیب نیز به عنوان ششمین توصیف‌کننده در نظر گرفته شد. به این ترتیب ماتریس ورودی شبکه یک ماتریس ۶× Q خواهد بود که Q تعداد سطرهای ماتریس ورودی است و به اندازه‌ی تعداد نقاط تجربی در دسترس برای ترکیبات مورد بررسی در سری آموزش می‌باشد و ۶ تعداد ستونهای ماتریس ورودی است که به تعداد توصیف‌کننده‌های مورد استفاده برای هر ترکیب می‌باشد.

۲-۱-۳- ساخت مدل با استفاده از شبکه عصبی موجک

برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات آلی مختلف، مدل شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از شش توصیف‌کننده طبق ساختار ارائه شده در قسمت (۱-۸-۳) طراحی گردید. هر شش توصیف‌کننده‌ی مربوط به

یک نمونه یک سطر از ماتریس ورودی Q را تشکیل می‌دهند و نشان می‌دهند که شبکه طراحی شده شامل شش نرون ورودی است که هر نرون مربوط به یک توصیف‌کننده می‌باشد. به ازای شش ورودی که به طور هم‌زمان در شبکه پردازش می‌شوند، یک خروجی در اختیار است تا خروجی شبکه با آن سنجیده شود. لذا لایه‌ی خروجی شامل یک نرون خواهد بود که نشان دهنده‌ی دانسیته‌ی متناظر با این ورودی‌ها می‌باشد. تعداد نرون‌ها در لایه‌ی مخفی نامعلوم است و جزء پارامترهایی است که باید بهینه شود. علاوه بر تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی باید پارامترهای دیگر شبکه شامل ممنتم (α)، سرعت آموزش (η) و تعداد دورها نیز بهینه شوند. برای این کار روش معمول این است که پارامترها را یکی یکی تغییر می‌دهند و با توجه به خطای سری پیش‌بینی، مقدار بهینه‌ی هر پارامتر را به طور جداگانه انتخاب می‌کنند. اشکال این روش این است که تعداد زیادی از مقادیر پارامترهایی که در ابتدا بهینه‌سازی شده‌اند، در نظر گرفته نمی‌شوند. لذا در این کار از روش هم‌زمانی برای تغییر پارامترها استفاده گردید. در این روش برنامه به گونه‌ای نوشته می‌شود که مقادیر ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی به طور هم‌زمان تغییر داده شوند. با توجه به تعداد نرون‌های لایه‌ی ورودی، مقادیر ۴ تا ۱۵ برای تعداد نرون‌های لایه مخفی انتخاب شد. همچنین مقادیر ۰/۱ تا ۰/۹ با فواصل ۰/۱ برای ممنتم و مقادیر ۰/۰۱ تا ۰/۰۹ با فواصل ۰/۰۱ برای سرعت آموزش در نظر گرفته شدند. به این ترتیب به ازای هر تغییر در تعداد نرون‌ها، کلیه‌ی تغییرات مربوط به ممنتم و سرعت آموزش در نظر گرفته می‌شود و تمام مدل‌های شبکه‌ی عصبی موجک به ازای همه‌ی ترکیب‌های ممکن از این سه پارامتر ساخته می‌شود. با توجه به این که در تعداد دورهای مختلف روند طی شده یکسان می‌باشد، لذا برای صرفه‌جویی در زمان بهینه‌سازی پارامترها، ابتدا تعداد دور آموزش ثابت و برابر ۱۰۰۰ در نظر گرفته می‌شود و پس از بهینه شدن این پارامترها، تعداد دور آموزش نیز بهینه می‌گردد. برای مشخص شدن مقادیر بهینه‌ی این پارامترها، برنامه به گونه‌ای نوشته می‌شود که در آن به ازای هر مدل شبکه‌ی عصبی موجک، مقادیرتابع خطا، MSE مربوط به دو سری آموزش و پیش‌بینی در یک ماتریس ثبت گردد و در ضمن تغییرات پارامترهای مختلف همراه با مقادیر MSE دو سری آموزش و پیش‌بینی به طور جداگانه برحسب یک بردار مرجع رسم می‌شود. هر عدد بردار مرجع، یکی ترکیب از سه متغیر فوق را نشان می‌دهد و تعداد کل اعداد بردار مرجع با تعداد کل ترکیب‌های ممکن از این سه متغیر برابر است. به این ترتیب می‌توان پارامترهای با کمترین خطای سری پیش‌بینی را به عنوان مقادیر بهینه برای شبکه ثبت کرد. پس از مشخص شدن مقادیر بهینه این پارامترها باید تعداد دور بهینه شود. برای تعیین تعداد دور بهینه مقادیر ۱۰۰۰ تا ۳۰۰۰۰ با فاصله ۱۰۰۰ در نظر گرفته شد. همان طور که قبلاً اشاره شد، در هر دور آموزش شبکه، تابع خطا، MSE محاسبه می‌شود. سپس پارامترهای شبکه طبق آلگوریتم نزول گرادیانی در جهت کاهش خطا، اصلاح می‌شوند و دور بعدی با مقادیر جدید آغاز می‌گردد. بنابراین 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. این پدیده به معنی توقف روند کاهشی خطا بوده و در این شرایط مدل اصطلاحاً به همگرایی رسیده است. اکنون می‌توان به کمک این نمودار، تعداد دور بهینه جهت آموزش شبکه را تعیین کرد، به این ترتیب که شروع قسمت مسطح نمودار به عنوان تعداد دور بهینه انتخاب می‌شود. لازم بذکر است که با وجودی که با افزایش تعداد دور پس از مقدار بهینه‌ی آن، MSE سری آموزش چندان تغییر نمی‌کند اما MSE سری پیش‌بینی به آرامی‌افزایش می‌یابد که این پدیده را اصطلاحاً فراتطبیق[1] می‌نامند. به همین دلیل تعداد دور آموزش مربوط به ابتدای قسمت مسطح نمودار به عنوان مقدار بهینه انتخاب می‌شود که در اصل به کمترین مقدار MSE سری پیش‌بینی مربوط است. پس به طور کلی برای انتخاب تعداد دور بهینه باید:

اولاً، تغییرات شدید و ناگهانی در نمودار MSE سری آموزش و سری پیش‌بینی نسبت به تعداد دور مشاهده نشود.

ثانیاً، افزایش تدریجی در MSE سری پیش‌بینی نسبت به تعداد دور ایجاد نشود.

ثالثاً، خطای MSE برای سری پیش‌بینی حداقل باشد.

زمانی که تعداد دور نیز بهینه شدند، کار آموزش متوقف می‌شود. در این مرحله چهار پارامتر شبکه شامل وزن‌های ورودی و خروجی شبکه، موقعیت موجک و پهنای موجک نیز تنظیم شده‌اند و خروجی شبکه طبق پارامترهای بهینه شده‌ی شبکه اعلام می‌شود.

۲-۱-۴- آلگوریتم برنامه‌ی نوشته شده

با توجه به توضیحات فوق برنامه‌ای رایانه‌ای در محیط برنامه نویسی MATLAB جهت به کارگیری شبکه عصبی موجک نوشته شد که آلگوریتم آن را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:

۱- ابتدا اطلاعات ورودی برای دوسری آموزش و پیش‌بینی به صورت دو ماتریس جداگانه وارد می‌شوند. همراه این ماتریسها، دو ماتریس هدف (خروجی واقعی) متناظر با ورودی‌های دو سری آموزش و پیش‌بینی نیز در اختیار شبکه قرار می‌گیرد تا شبکه بتواند خروجی‌های محاسبه شده‌ی خودش را با آن مقایسه کرده و تابع خطا را محاسبه کند. بزرگ‌ترین عدد موجود در هر ستون از ماتریس‌های ورودی و خروجی و همچنین ماتریس‌های هدف تعیین شده و تمام اعداد موجود در هر ستون از این ماتریس‌ها، بر بزرگ‌ترین عدد موجود در همان ستون تقسیم می‌شود.

۱- overfitting

۲- پارامترهای ثابت شبکه یعنی تعداد نرون‌های ورودی و خروجی شبکه تعریف می‌شوند.

۳- سه حلقه‌ی[1] داخل هم برای تغییر همزمان سه پارامتر ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون‌های لایه مخفی در نظر گرفته می‌شود. اما تعداد دور به صورت یک پارامتر ثابت وارد می‌گردد.

۴- در شروع برنامه، پارامترهای شبکه شامل موقعیت، پهنای موجک، وزنهای ورودی و وزنهای خروجی به صورت تصادفی از اعداد بین صفر تا یک انتخاب می‌شوند.

۵- اکنون با وارد شدن داده‌های ورودی هر نمونه به شبکه، عملیات خروجی مربوط به آن انجام شده و MSE متناظر با آن محاسبه می‌شود و به این ترتیب یک سطر از ماتریس خطا MSE به دست می‌آید. 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 (۱-۲۰) تا (۱-۳۶) به گونه‌ای اصلاح می‌شوند که در هر دور آموزش، تابع خطا کاهش یابد.

۷- با استفاده از مقادیر جدید پارامترهای شبکه، دور بعدی آموزش از مرحله ۵ تکرار می‌شود. این کار تا زمانی ادامه می‌یابد که تعداد دور به ۱۰۰۰ برسد در این صورت آموزش متوقف می‌شود.

۸- پس از توقف آموزش، به ازای سه پارامتر ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون‌های لایه مخفی معین، پارامترهای نهایی شبکه جهت محاسبه خروجی‌های سری پیش‌بینی استفاده می‌شود. از مقایسه پاسخ شبکه با مقادیر تجربی، MSE سری پیش‌بینی به ازای این سه پارامتر به دست می‌آید.

۹- تمام مراحل فوق به ازای کلیه تغییرات تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی، سرعت آموزش و ممنتم به صورت جداگانه انجام می‌شود و نتایج MSE مربوط به دو سری آموزش و پیش‌بینی برای آن‌ها ثبت می‌گردد تا بتوان براساس حداقل مقدار MSE سری پیش‌بینی، مقادیر بهینه این سه پارامتر را به دست آورد.

۱۰- پس از تعیین مقادیر بهینه‌ی این سه پارامتر باید تعداد دور بهینه تعیین گردد. برای تعیین تعداد دور بهینه، مقادیر ۱۰۰۰ تا ۳۰۰۰۰ با فواصل ۱۰۰۰ در نظر گرفته می‌شود و نمودار MSE برحسب تعداد دور آموزش برای دو سری آموزش و پیش‌بینی رسم می‌گردد. به کمک این نمودار می‌توان تعداد دور بهینه را تعیین کرد به این ترتیب که تعداد دور مربوط به کمترین MSE سری پیش‌بینی، تعداد دور بهینه است. در این مرحله آموزش شبکه به پایان رسیده است و مدلی که همه پارامترهایش بهینه و تثبیت شده‌اند آماده استفاده می‌باشد.

صحت برنامه‌ی نوشته شده نیز به دو صورت کنترل گردید:

۱- اجرای خط به خط برنامه جهت کنترل کردن جوابی که هرخط ارائه می‌دهد که این کنترل جواب نشانگر صحت نتایج برنامه از لحاظ ریاضی بود.

۱- loop

۲- پس از اطمینان ازعدم وجود خطا در محاسبات ریاضی، این برنامه برای داده‌های مرجع [۲۵] به کار گرفته شد و نتایج آن با نتایج موجود در این مرجع مقایسه گردید. در این مقاله از شبکه‌ی عصبی موجک برای پیش‌بینی زمان ماند[۱] نفتال‌ها در کروماتوگرافی گازی استفاده شده است. در این تحقیق با استفاده از دو توصیف‌کننده‌ی ضریب ماند همدما[۲] و چگالی برای ۹۴ نمونه‌ی تجربی که به صورت تصادفی به دو دسته تقسیم شده بود (۶۴ نمونه برای سری آموزش و ۳۰ نمونه برای سری پیش‌بینی) زمان ماند نفتال‌ها در کروماتوگرافی گازی با متوسط درصد خطای نسبی ٪ ۱ پیش‌بینی شده است. مطابقت نتایج به دست آمده از اجرای برنامه‌ی نوشته شده با نتایج به دست آمده از این مرجع درستی برنامه‌ی نوشته را تایید کرد.

برای ارزیابی عملکرد شبکه‌ی بهینه شده باید پاسخی که شبکه با دریافت توصیف‌کننده‌های مربوط به نمونه‌های مختلف سری تایید محاسبه می‌کند با مقادیر تجربی موجود برای این نمونه‌ها مقایسه شود. برای انجام مقایسه، باید علاوه بر گزارش متوسط درصد خطای نسبی برای هر نمونه در جدول، نمودار برگشت[۳] را نیز ترسیم کرد. در نمودار برگشت، مقادیر پیش‌بینی شده برحسب مقادیر تجربی رسم می‌شوند و به کمک مربع مقدار ضریب همبستگی[۴] (R^2) به دست آمده از نمودار، پراکندگی نقاط در اطراف خط برگشت تعیین می‌شود. محدوده تغییرات R^2 بین صفر و یک است که اگر R^2=۱ باشد یعنی همبستگی کاملی بین داده‌های تجربی و محاسبه شده وجود دارد و اگر R^2=۰ باشد یعنی هیچ گونه همبستگی وجود ندارد. بنابراین هرچه مقدار R^2 بدست آمده در نمودار برگشت به یک نزدیکتر باشد، می‌توان گفت نتایج پیش‌بینی شده بیشتر به واقعیت نزدیک هستند.

۲-۱-۵- استفاده از شبکه عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱-آلکانول‌ها

مدل شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از شش توصیف‌کننده (شش نرون ورودی) و یک خروجی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱-آلکانول‌ها طراحی گردید. پس از انتقال اطلاعات ورودی نمونه‌ها به شبکه و آموزش شبکه طبق دستورالعمل قسمت (۲-۱-۴)، پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون‌های لایه مخفی به صورت هم‌زمان بهینه‌سازی گردید. برای مشخص شدن چگونگی انجام کار،در شکل (۲-۱) بخشی از این محاسبات نشان داده شده است. این نمودار نشان می‌دهد که مدل شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده، ۱۲ نرون در لایه‌ی مخفی دارد و مقادیر بهینه‌ی ممنتم و سرعت آموزش به ترتیب ۰/۶ و ۰/۰۲ می‌باشد.

۱- retention time

۲- isothermal retention index

۳- regression

۴- squared correlation coefficient

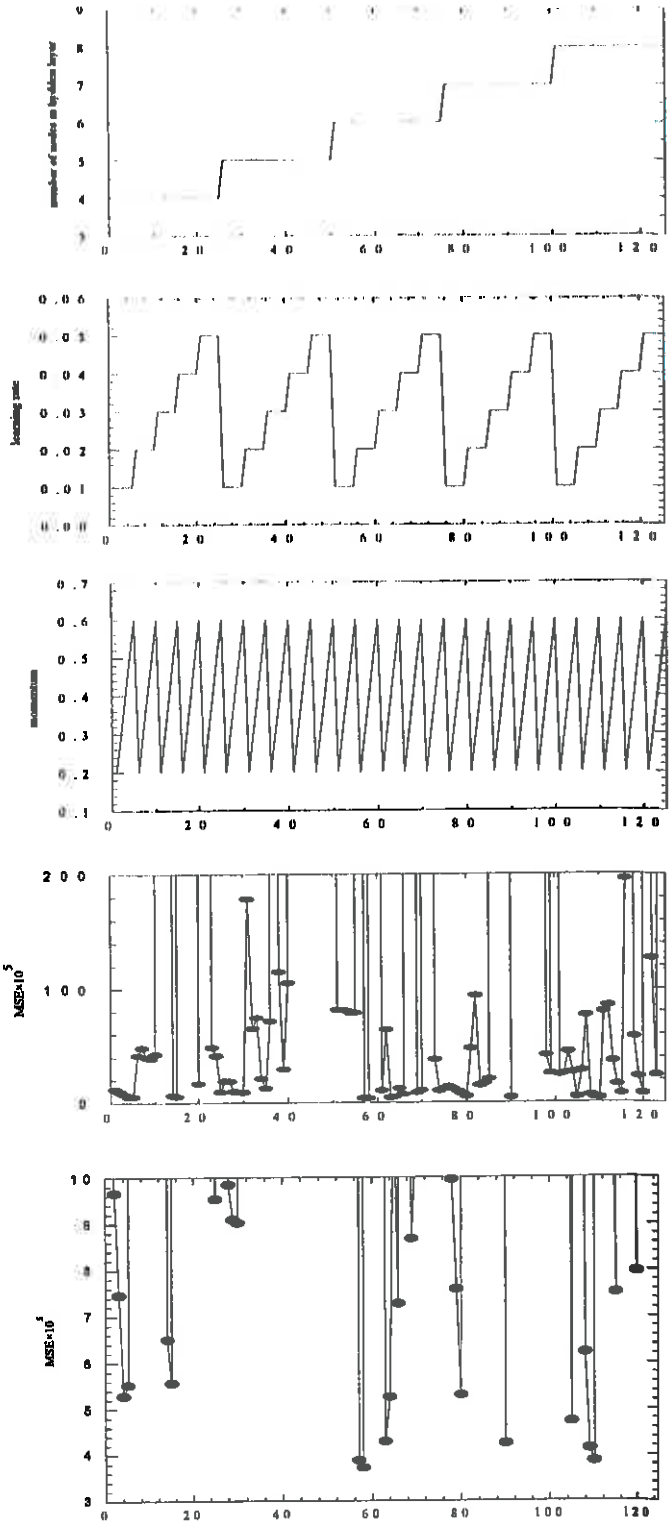
برای تعیین تعداد دور بهینه باید نمودار MSE برحسب تعداد دور آموزش برای دو سری آموزش و پیش‌بینی برای این ترکیبات رسم گردید. این نمودار در شکل (۲-۲) نشان داده شده است. همان طور که در این شکل می‌بینید تعداد ۶۰۰۰ دور، تعداد دور بهینه است که به ازای آن MSE سری پیش‌بینی کمترین مقدار را دارد.

اکنون این شبکه‌ی موجک بهینه شده می‌تواند دانسیته‌ی ۱-آلکانول‌ها را در دما و فشارهای مربوط به سری تایید محاسبه کند. در جدول (۲-۲) متوسط خطای نسبی* و ماکزیمم خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی این ترکیبات گزارش شده است. همچنین مقادیر دانسیته‌های محاسبه شده با استفاده از مدل بهینه شده به همراه مقادیر تجربی و درصد خطای نسبی ناشی از اختلاف این دو مقدار برای هر یک از این ترکیبات در جدول (۲-۳) گزارش شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، دانسیته‌ی هر یک از این ترکیبات در هر دما و فشار معین، با متوسط خطای نسبی کمتر از ٪ ۰/۵ پیش‌بینی شده است که این موضوع نشان دهنده‌ی کارآیی مطلوب شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده است. همچنین نمودار برگشت برای این ترکیبات در شکل (۲-۳) رسم شده است. همان طور که در این شکل مشاهده می‌شود، مربع ضریب همبستگی به دست آمده نزدیک به یک است که این امر بر توافق مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه نسبت به مقادیر تجربی دلالت دارد.

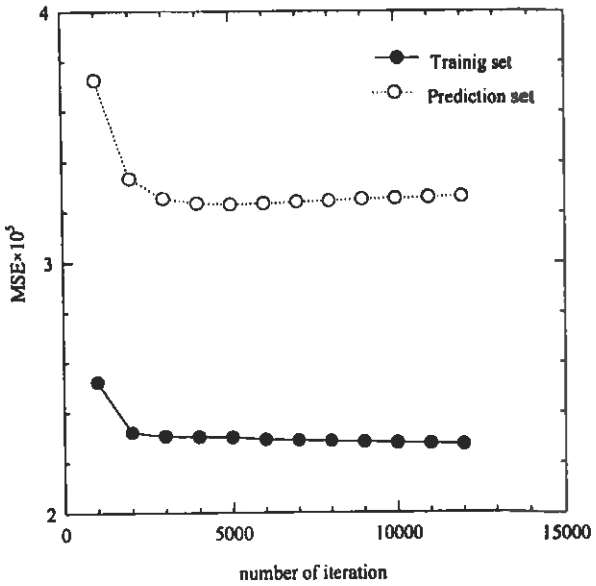
متوسط خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱- آلکانول‌ها با این شبکه‌ی بهینه شده کمتر از ۰/۲۱ به دست آمد. بنابراین فقط با استفاده از توصیف‌کننده‌هایی برمبنای روش سهم گروه‌ها، دما، فشار و تعداد کربن الکل‌ها در شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده می‌توان بدون نیاز به پارامترهای اضافی در ورودی، دانسیته را با خطای ناچیزی پیش‌بینی نمود. همچنین می‌توان این روش را به تعداد زیادی از الکل‌ها از انواع مختلف تعمیم داد و شبکه‌ی عصبی موجک جامعی را برای پیش‌بینی دانسیته‌ی انواع الکل‌ها ارائه داد که چگونگی این کار در قسمت بعدی مورد بررسی قرار گرفته است.

---

* در این کار، منظور از متوسط خطای نسبی در پیش‌بینی، $\overline{x}$، متوسط درصد خطای نسبی کل نقاط است که چنین محاسبه می‌شود: $\overline{x} = \sum_i n_i \overline{x}_i \Big/ \sum_i n_i$ که در آن $\overline{x}_i = 100 \left| x_{i,exp} - x_{i,cal} \right| \Big/ x_{i,exp}$ می‌باشد.



شکل (۲-۱): نمودارهای (الف) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ب)مقادیر ممنتم، (ج) سرعت آموزش، (د) MSE سری پیش‌بینی و (ط) ناحیه‌ای از نمودار MSE سری پیش‌بینی که مینیمم مقدار آن را بهتر نشان می‌دهد برحسب بردار مرجع.



شکل (۲-۲): نمودار MSE برحسب تعداد دور آموزش برای دو سری آموزش و پیش‌بینی برای ۱-آلکانول‌ها.

جدول (۲-۲): متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱-آلکانول‌ها در محدوده‌ی دما (ΔT) و فشار داده شده (Δp) با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده برای سری تایید.

سیال	تعداد کربن	ΔT , K	Δp , MPa	$\langle\lvert\Delta\rho\rvert/\rho\rangle_{av}^{a}\times 100$	Ref.
اتانول	۲	۲۹۸/۱۵-۳۲۳/۱۵	۱-۷۰	-۰/۰۶۴ (-۰/۴۳۳)	[۲۰]
۱- پروپانول	۳	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۲۰۶/۹	۰/۱۳۰ (۰/۶۰۵)	[۲۰]
۱- بوتانول	۴	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۲۰۵	-۰/۱۶۴ (-۰/۴۰۲)	[۲۰]
۱- پنتانول	۵	۲۸۳/۵-۳۴۳	۱۰-۲۰۰	۰/۰۰۱ (-۰/۲۱۱)	[۲۱]
۱- هگزانول	۶	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۴۰	۰/۱۲۹ (۰/۲۸۲)	[۲۲]
۱- هپتانول	۷	۳۲۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۰/۱-۱۰	۰/۰۷۸ (۰/۱۶۰)	[۲۳]
۱- اکتانول	۸	۲۹۸-۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۴۰	۰/۱۰۱ (-۰/۴۷۳)	[۲۲]
۱- نونانول	۹	۳۲۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۰/۱-۱۰	-۰/۰۳۲ (-۰/۱۴۵)	[۲۳]
۱- دکانول	۱۰	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۴۰	-۰/۰۸۰ (۰/۵۳۹)	[۲۲]

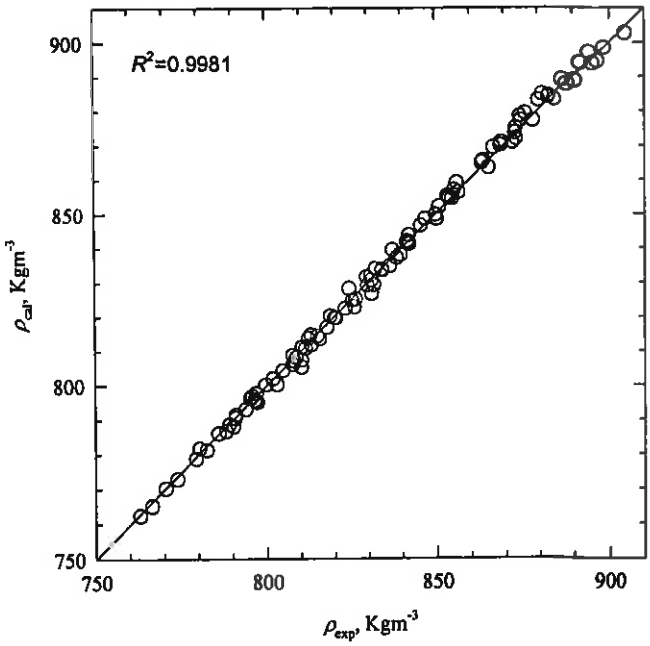
[a] ماکزیمم درصد خطای نسبی در پرانتز گزارش شده است.

جدول (۲-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه عصبی موجک بهینه شده با مقادیر تجربی دانسیته برای ۱-آلکانول‌ها

$\frac{(\rho_{exp}-\rho_{cal})}{\rho_{exp}}\times 100$	دانسیته(kgm^{-3})		دانسیته(kgm^{-3})	$\frac{(\rho_{exp}-\rho_{cal})}{\rho_{exp}}\times 100$
	پاسخ شبکه	مقدار تجربی	پاسخ شبکه	مقدار تجربی
۰/۶۰۵	۸۰۵/۳۴۰	۸۱۰/۲۴۰	۷۹۶/۸۳۰	۷۹۵/۸۰۰
۰/۲۰۶	۸۳۴/۸۹۰	۸۳۶/۶۱۰	۸۱۹/۶۸۰	۸۲۰/۰۸۰
-۰/۱۴۲	۸۵۲/۲۰۰	۸۵۰/۹۹۰	۸۳۷/۲۰۰	۸۳۸/۶۴۰
-۰/۱۷۰	۸۶۴/۸۸۰	۸۶۳/۴۱۰	۸۵۴/۵۵۰	۸۵۴/۷۷۰
-۰/۲۰۶	۸۵۵/۲۹۰	۸۵۳/۵۳۰	۸۷۳/۵۸۰	۸۷۳/۲۱۰
-۰/۲۶۰	۸۷۷/۲۵۰	۸۷۴/۹۷۰	۸۸۴/۴۲۰	۸۸۳/۳۱۰
-۰/۲۰۶	۸۸۹/۰۶۰	۸۸۷/۲۳۰	۸۹۳/۹۱۰	۸۹۵/۱۸۰
$-۴/۴۵۲\times ۱۰^{-۳}$	۸۹۸/۴۳۰	۸۹۸/۳۹۰	۷۸۱/۷۴۰	۷۸۰/۳۴۰
-۰/۱۱۸	۸۴۶/۵۹۰	۸۴۵/۵۹۰	۷۹۵/۳۷۰	۷۹۶/۸۸۰
-۰/۲۸۲	۸۶۹/۳۰۰	۸۶۶/۸۵۰	۸۰۸/۱۳۰	۸۰۸/۶۷۰
-۰/۳۲۸	۸۸۳/۱۰۰	۸۸۰/۲۰۰	۸۳۲/۱۳۰	۸۳۰/۹۱۰
-۰/۲۲۳	۸۹۳/۹۷۰	۸۹۱/۹۸۰	۸۵۴/۷۳۰	۸۵۳/۹۰۰
۰/۰۴۵	۸۳۰/۷۵۰	۸۳۱/۱۲۰	۸۷۸/۴۵۰	۸۷۴/۶۶۰
-۰/۱۹۷	۸۵۷/۰۵۰	۸۵۵/۳۶۰	۸۸۴/۱۲۰	۸۸۳/۰۸۰
-۰/۱۱۸	۸۶۹/۹۹۰	۸۶۸/۹۶۰	۸۹۷/۱۶۰	۸۹۴/۲۱۰
-۰/۴۰۲	۸۸۴/۸۳۰	۸۸۱/۲۹۰	۸۲۹/۳۲۰	۸۳۱/۸۸۰
۰/۲۶۵	۸۱۳/۵۷۰	۸۱۵/۷۳۰	۸۴۸/۵۵۰	۸۵۰/۲۷۰
-۰/۰۵۹	۸۴۲/۱۸۰	۸۴۱/۶۸۰	۸۷۰/۷۴۰	۸۷۲/۴۵۰
-۰/۳۴۰	۸۵۹/۰۸۰	۸۵۶/۱۶۰	۸۸۳/۳۳۰	۸۸۵/۰۳۰
-۰/۱۹۳	۸۷۰/۸۷۰	۸۶۹/۱۹۰	۸۹۴/۵۶۰	۸۹۶/۶۲۰
-۰/۲۱۱	۸۳۴/۰۶۰	۸۳۲/۳۰۰	۸۲۲/۵۰۰	۸۲۳/۳۲۰
۰/۱۷۸	۸۷۱/۹۵۰	۸۷۳/۵۰۰	۸۴۱/۲۷۰	۸۴۲/۳۲۰
۰/۱۸۴	۹۰۲/۷۴۰	۹۰۴/۴۰۰	۸۶۳/۵۲۰	۸۶۵/۴۳۰
-۰/۱۷۳	۸۱۳/۷۱۰	۸۱۲/۳۰۰	۸۷۷/۲۰۰	۸۷۸/۵۸۰
۰/۰۳۹	۸۵۶/۲۷۰	۸۵۶/۶۰۰	۸۸۸/۸۲۰	۸۹۰/۳۱۰
۰/۰۶۶	۸۸۷/۸۱۰	۸۸۸/۴۰۰	۸۰۶/۱۵۰	۸۰۷/۶۲۰
-۰/۰۶۶	۷۹۱/۴۲۰	۷۹۰/۹۰۰	۸۲۲/۸۴۰	۸۲۶/۰۴۰
۰/۱۸۱	۸۳۸/۱۸۰	۸۳۹/۷۰۰	۸۴۹/۸۲۰	۸۴۹/۹۸۰
-۰/۱۸۷	۸۷۵/۰۴۰	۸۷۳/۴۰۰	۸۶۵/۶۱۰	۸۶۳/۸۶۰
۰/۰۶۵	۸۲۴/۷۶۰	۸۲۵/۳۰۰	۸۷۹/۳۵۰	۸۷۶/۲۷۰
۰/۰۸۱	۸۲۹/۲۳۰	۸۲۹/۹۰۰	۷۸۶/۷۹۰	۷۸۸/۰۸۰

ادامه‌ی جدول (۲-۳):

$\frac{(\rho_{exp}-\rho_{cal})}{\rho_{exp}}\times 100$	دانسیته(kgm^{-3})		دانسیته(kgm^{-3})		$\frac{(\rho_{exp}-\rho_{cal})}{\rho_{exp}}\times 100$
	پاسخ شبکه	مقدار تجربی	پاسخ شبکه	مقدار تجربی	
۰/۳۴۰	۸۰۰/۲۸۰	۸۰۳/۰۰۰	۸۳۳/۵۲۰	۸۳۴/۳۰۰	۰/۰۹۴
۰/۳۶۸	۸۰۷/۴۳۰	۸۱۰/۴۰۰	۸۰۷/۱۱۰	۸۰۸/۱۰۰	۰/۱۲۳
-۰/۱۴۵	۸۰۸/۸۱۰	۸۰۷/۶۴۰	۸۱۱/۷۳۰	۸۱۳/۲۰۰	۰/۱۸۱
-۰/۰۹۷	۸۱۱/۲۰۰	۸۱۰/۴۱۰	۸۱۹/۶۹۰	۸۲۰/۶۰۰	۰/۱۱۱
-۰/۱۰۰	۷۹۷/۶۸۰	۷۹۶/۸۸۰	۷۸۸/۰۷۰	۷۹۰/۳۰۰	۰/۲۸۳
-۰/۰۵۵	۸۰۰/۱۷۰	۷۹۹/۷۳۰	۷۹۵/۷۴۰	۷۹۶/۵۰۰	۰/۰۹۶
-۰/۰۳۲	۷۸۶/۱۶۰	۷۸۵/۹۱۰	۸۰۱/۸۹۰	۸۰۱/۸۵۰	$-۴/۹۸۸\times۱۰^{-۳}$
۰/۰۳۹	۷۸۸/۷۳۰	۷۸۹/۰۴۰	۸۰۴/۳۴۰	۸۰۴/۷۷۰	۰/۰۵۳
۰/۰۲۲	۷۷۰/۲۲۰	۷۷۰/۳۹۰	۷۹۰/۵۰۰	۷۹۰/۸۱۰	۰/۰۳۹
۰/۱۱۳	۷۷۲/۹۰۰	۷۷۳/۷۷۰	۷۹۳/۰۵۰	۷۹۳/۸۴۰	۰/۱۰۰
-۰/۲۴۳	۸۳۱/۶۲۰	۸۲۹/۶۰۰	۷۷۸/۷۴۰	۷۷۹/۲۵۰	۰/۰۶۵
-۰/۲۴۵	۸۳۹/۴۶۰	۸۳۷/۴۰۰	۷۸۱/۳۶۰	۷۸۲/۵۴۰	۰/۱۵۱
-۰/۱۹۹	۸۴۳/۷۸۰	۸۴۲/۱۰۰	۷۶۲/۵۰۰	۷۶۲/۹۴۰	۰/۰۵۸
-۰/۱۹۶	۸۴۸/۵۶۰	۸۴۶/۹۰۰	۷۶۵/۲۳۰	۷۶۶/۴۶۰	۰/۱۶۰
-۰/۲۱۸	۸۱۴/۷۸۰	۸۱۳/۰۰۰	۸۲۸/۳۰۰	۸۲۴/۴۰۰	-۰/۴۷۳
-۰/۱۶۸	۸۲۰/۲۸۰	۸۱۸/۹۰۰	۸۳۳/۹۱۰	۸۳۴/۲۰۰	۰/۰۳۵
۰/۱۷۸	۸۲۹/۷۲۰	۸۳۱/۲۰۰	۸۴۱/۴۷۰	۸۴۱/۷۰۰	۰/۰۲۷
-۰/۱۱۸	۷۹۶/۲۴۰	۷۹۵/۳۰۰	۸۱۰/۸۹۰	۸۱۱/۵۰۰	۰/۰۷۵
-۰/۰۱۷	۸۰۲/۱۴۰	۸۰۲/۰۰۰	۸۱۶/۸۵۰	۸۱۷/۹۰۰	۰/۱۲۹
۰/۰۶۹	۸۱۴/۴۴۰	۸۱۵/۰۰۰	۸۲۵/۱۷۰	۸۲۶/۴۰۰	۰/۱۴۹
			۷۹۵/۱۷۰	۷۹۷/۳۰۰	۰/۲۶۸



شکل (۲-۳): نمودار برگشت برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با شبکه‌عصبی موجک بهینه شده برای ۱- آلکانول‌ها بر حسب مقادیر تجربی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار در سری تایید.

فصل سوم: طراحی و بهینه‌سازی شبکه‌ی عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها

مقدمه

الکل‌ها گروهی از ترکیبات آلی هستند که از طریق جایگزینی یک یا چند هیدروژن در هیدروکربن‌ها با یک یا چند گروه هیدروکسیل به وجود می‌آیند. گروه هیدروکسیل موجود در الکل‌ها می‌توانند با یکدیگر پیوند هیدروژنی تشکیل دهند. بنابراین، این مواد جزء سیالات تجمع‌کننده هستند. به دست آوردن یک معادله‌ی حالت دقیق برای چنین سیالاتی یک چالش در حوزه‌ی تحقیقات ترمودینامیکی است. عمومی‌ترین اثرات شیمیایی موجود در ترمودینامیک سیالات تجمعی پیوند هیدروژنی و انتقال بار می‌باشد که باعث می‌شود مولکول‌ها به صورت دیمر، تریمر و یا سایر گونه‌های تجمعی به هم متصل شوند. در متون علمی، روش‌های مختلفی برای مطالعه‌ی ترمودینامیکی این سیالات وجود دارد. قدیمی‌ترین روش نظری مطالعه‌ی سیالات تجمعی را دولزالک[1] ارائه نموده است که در این نظریه فرض می‌شود گونه‌های مولکولی مجزا در محلول وجود دارند. اگرچه در این نظریه انحراف‌های مثبت و منفی از حالت ایده‌آل در نظر گرفته می‌شود اما عیب اصلی این روش آن است که انتخاب گونه‌های موجود در محلول اختیاری می‌باشد [۲۶]. معمول‌ترین روش مطالعه‌ی نظری سیالات تجمعی، کاربرد مستقیم معادلات حالت سیالات غیر تجمعی برای این سیالات بدون توجه به تفاوت مولکولی‌شان می‌باشد. این روش می‌تواند نتایج رضایت‌بخشی را برای نواحی مشخصی در دیاگرام فازی ارائه دهد اما، برونیابی به نواحی فازی دیگر و همچنین مخلوط‌ها به توابع همبستگی تجربی جدیدی برای ثابت‌های معادله‌ی حالت نیاز دارد[۲۷]. استفاده از تئوری افت و خیز برای محاسبه‌ی خواص و تعادل فازی این سیالات [۲۸]، جداکردن سهم فیزیکی و شیمیایی در فاکتور تراکم‌پذیری و در نظرگرفتن تابع تقسیم این سیالات به صورت حاصلضرب یک تابع تقسیم فیزیکی و یک تابع تقسیم شیمیایی [۲۹] و توصیف بهتر خواص سیالات خودتجمعی با استفاده از ترمودینامیک سیالات پلی‌دیسپرس[2] به دلیل وجود تجمع‌های مولکولی مختلف در این سیالات [۳۰] نیز از جمله مطالعات انجام شده‌ی دیگر روی این سیالات است. اما یکی از معایب روش‌های فوق، وجود پارامترهای وابسته به نوع سیال در معادله است که برای پیش‌بینی خواص ماده باید در دسترس باشد. همچنین اکثر این معادلات برای یک یا چند سیال مشخص در

۱- Dolezalek

۲- polydisperse

محدوده‌ی خاصی از دما و فشار کارایی دارد. در نتیجه، چنین معادلاتی برای کاربردهای مهندسی، سخت و پیچیده بوده و چندان مناسب نیستند. از این رو روش‌های پیش‌بینی ساده، کارامد و معتبر برای پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی این سیالات در کاربردهای مهندسی و طراحی صنعتی ضروری است. در فصل قبل چگونگی طراحی و بهینه‌سازی شبکه‌ی عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱- آلکانول‌ها ارائه‌گردید. نتایج به دست آمده در فصل قبل حاکی از آن است که ایده‌ی به کارگیری روش سهم گروه‌ها در انتخاب توصیف‌کننده‌ها، به شبکه‌ی عصبی موجک این امکان را می‌دهد که ارتباط بسیار خوبی بین ورودی‌ها و خروجی‌ها برقرار کند به طوری که شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱- آلکانول‌ها توانست به خوبی دانسیته‌ی این ترکیبات آلی را پیش‌بینی کند. این موضوع سبب شکل‌گیری ایده‌ی طراحی یک شبکه‌ی عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی انواع الکل‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشارگردید. آن چه در ادامه‌ی این فصل می‌آید، چگونگی طراحی و بهینه‌سازی شبکه‌ی عصبی موجکی است که می‌تواند برای پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌های نوع اول، دوم و سوم به کار رود.

۳-۱- پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار

۳-۱-۱- انتخاب سری داده‌ها

اولین مرحله در طراحی مدل، جمع‌آوری داده‌های دانسیته برای انواع الکل‌ها از دو کربنی تا ده کربنی در محدوده‌ی وسیعی از دما (۳۴۸/۱۵K- ۲۸۳/۱۵) و فشار (۳۲۰MPa- ۰/۱) بود. نام این ترکیبات به همراه محدوده‌ی دما و فشار، تعداد کربن و مرجع مورد استفاده برای هر ترکیب در جدول (۳-۱) آمده است. در این جا نیز داده‌های مربوط به هر کدام از این ترکیبات به صورت اتفاقی به سه سری آموزش،پیش‌بینی و تایید تقسیم گردیدند.

۳-۱-۲- انتخاب توصیف‌کننده‌ها

برای پیش‌بینی دانسیته دو ویژگی دما و فشار به عنوان اولین توصیف‌کننده‌ها به کارگرفته شدند، زیرا دانسیته‌ی هر ترکیب به دما و فشار سیستم وابسته است. این توصیف‌کننده‌ها ستون‌های اول و دوم ماتریس ورودی را می‌سازند. نتایج فصل قبل نشان داد که انتخاب توصیف‌کننده‌های مولکولی برمبنای روش سهم گروه‌ها به شبکه این امکان را می‌دهد که ارتباط بسیار عالی بین ساختار و دانسیته‌ی این ترکیبات برقرار کند. لذا طبق گزارش اخیر ما [۲۴]، الکل‌ها به شش گروه عاملی سازنده‌ی آن‌ها شکسته شدند. این گروه‌های

عاملی عبارتند از: گروه‌های متیل، گروه‌های متیلن انتهایی (گروه‌های متیلنی که فقط از یک طرف به یک گروه متیلن دیگر متصل شده‌اند)، گروه‌های متیلن میانی (گروه‌های متیلنی که از هر دو طرف به دو گروه متیلن دیگر متصل شده‌اند)، گروه عاملی الکل نوع اول CH_2OH-، گروه‌های عاملی الکل نوع دوم CHOH(و گروه‌های عاملی الکل نوع سوم $\overset{|}{\underset{|}{C}}OH$-. به این ترتیب تعداد این گروه‌های عاملی در هر ترکیب، به عنوان شش توصیف‌کننده‌ی بعدی انتخاب گردیدند. همچنین نتایج موجود در مرجع [۲۴] نشان می‌دهد که در محاسبه‌ی دانسیته بر مبنای سهم گروه‌ها، دانسیته علاوه بر دما، فشار و سهم گروه‌های عاملی، به تعداد کربن ترکیب آلی نیز وابسته است. بنابراین، تعداد کربن هر ترکیب نیز به عنوان نهمین توصیف‌کننده در نظر گرفته شد. به این ترتیب ماتریس ورودی شبکه یک ماتریس ۹× Q خواهد بود که Q تعداد سطرهای ماتریس ورودی است و به اندازه‌ی تعداد نقاط تجربی در دسترس برای ترکیبات مورد بررسی در سری آموزش می‌باشد و ۹، تعداد ستونهای ماتریس ورودی است که به تعداد توصیف‌کننده‌های مورد استفاده برای هر ترکیب می‌باشد.

جدول (۳-۱): تعداد کربن، محدوده‌ی دما و فشار و مرجع داده‌های تجربی دانسیته‌ی الکل‌ها

مرجع	محدوده‌ی فشار (MPa)	محدوده‌ی دما (K)	تعداد کربن	سیال
[۲۰]	۰/۱-۳۲۰	۲۹۸/۱۵-۳۲۳/۱۵	۲	اتانول
[۲۰]	۰/۱-۲۰۶/۹	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۳	۱- پروپانول
[۲۰]	۰/۱-۱۷۵	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۳	۲- پروپانول
[۲۰]	۰/۱-۲۰۵	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۴	۱- بوتانول
[۲۰]	۰/۱-۲۰۵	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۴	۲- بوتانول
[۲۰]	۰/۱-۱۰۰	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۴	tert- بوتانول
[۲۱]	۱۰-۲۰۰	۲۸۳/۵-۳۴۳	۵	۱- پنتانول
[۲۱]	۱۰-۲۰۰	۲۸۳/۴-۳۴۲/۹	۵	۲- پنتانول
[۲۲]	۰/۱-۴۰	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۶	۱- هگزانول
[۲۳]	۰/۱-۱۰	۳۲۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۷	۱- هپتانول
[۲۲]	۰/۱-۴۰	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۸	۱- اکتانول
[۲۳]	۰/۱-۱۰	۳۲۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۹	۱- نونانول
[۲۲]	۰/۱-۴۰	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۱۰	۱- دکانول

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

برای پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌های مختلف، مدل شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از نه توصیف‌کننده طراحی گردید. به ازای نه ورودی که به طور هم‌زمان در شبکه پردازش می‌شوند، یک خروجی در اختیار است تا خروجی شبکه با آن سنجیده شود. لذا لایه‌ی خروجی شامل یک نرون خواهد بود که نشان دهنده‌ی دانسیته‌ی متناظر با این ورودی‌ها می‌باشد. تابع انتقال مورد استفاده در این شبکه، موجک مادر مورلت می‌باشد. به این ترتیب، مدل شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از نه نرون ورودی، یک موجک مادر مورلت و یک خروجی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها طبق ساختار ارائه شده در قسمت (۱-۸-۳) طراحی گردید. تعداد نرون‌ها در لایه‌ی مخفی نامعلوم است و جزء پارامترهایی است که باید بهینه شود. علاوه بر تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی باید پارامترهای دیگر شبکه شامل ممنتم (α)، سرعت آموزش (η) و تعداد دورها نیز بهینه شوند. در این کار از روش هم‌زمانی برای تغییر پارامترها استفاده گردید؛ یعنی برنامه‌ی رایانه‌ای شبکه عصبی موجک (WNN) در محیط برنامه نویسی MATLAB به گونه‌ای نوشته شد که مقادیر ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی به طور هم‌زمان تغییر داده شوند. به این ترتیب به ازای هر تغییر در تعداد نرون‌ها، کلیه‌ی تغییرات مربوط به ممنتم و سرعت آموزش در نظر گرفته می‌شود. با توجه به تعداد نرون‌های لایه‌ی ورودی، مقادیر ۴ تا ۱۸ برای تعداد نرون‌های لایه مخفی انتخاب شد. همچنین مقادیر ۰/۱ تا ۰/۹ با فواصل ۰/۱ برای ممنتم و مقادیر ۰/۰۱ تا ۰/۰۹ با فواصل ۰/۰۱ برای سرعت آموزش در نظر گرفته شدند. به این ترتیب به ازای هر تغییر در تعداد نرون‌ها، کلیه‌ی تغییرات مربوط به ممنتم و سرعت آموزش در نظر گرفته می‌شود و تمام مدل‌های شبکه‌ی عصبی موجک به ازای همه‌ی ترکیب‌های ممکن از این سه پارامتر ساخته می‌شود. با توجه به این که در تعداد دورهای مختلف روند طی شده یکسان می‌باشد، لذا برای صرفه‌جویی در زمان بهینه‌سازی پارامترها، ابتدا تعداد دور آموزش ثابت و برابر ۱۰۰۰ در نظر گرفته می‌شود و پس از بهینه شدن این پارامترها، تعداد دور آموزش نیز بهینه می‌گردد. برای مشخص شدن مقادیر بهینه‌ی این پارامترها، برنامه به گونه‌ای نوشته می‌شود که در آن به ازای هر مدل شبکه‌ی عصبی موجک طراحی شده، مقدارتابع خطا، MSE مربوط به دو سری آموزش و پیش‌بینی در یک ماتریس ثبت گردد و در ضمن تغییرات پارامترهای مختلف همراه با مقادیر MSE دو سری آموزش و پیش‌بینی به طور جداگانه برحسب یک بردار مرجع رسم می‌شود. هر عدد بردار مرجع، یکی ترکیب از سه متغیر فوق را نشان می‌دهد و تعداد کل اعداد بردار مرجع با تعداد کل ترکیب‌های ممکن از این سه متغیر برابر است. به این ترتیب می‌توان پارامترهای با کمترین خطای سری پیش‌بینی را به عنوان مقادیر بهینه برای شبکه ثبت نمود. پس از مشخص شدن مقادیر بهینه این پارامترها باید تعداد دور بهینه شود. برای تعیین تعداد دور بهینه مقادیر ۱۰۰۰ تا ۳۰۰۰۰ با فاصله ۵۰۰ در نظر گرفته شد و در هر دور آموزش شبکه، MSE محاسبه و نمودار MSE

برحسب تعداد دور آموزش برای دو سری آموزش و پیش‌بینی رسم گردید. به کمک این نمودار، تعداد دور بهینه جهت آموزش شبکه را می‌توان تعیین نمود، به این صورت که شروع قسمت مسطح نمودار MSE سری آموزش به عنوان تعداد دور بهینه انتخاب می‌شود که این قسمت با کمترین مقدار MSE سری پیش‌بینی مطابقت دارد.

زمانی که تعداد دور نیز بهینه گردید، کار آموزش متوقف می‌شود. در این مرحله چهار پارامتر شبکه شامل وزن‌های ورودی و خروجی شبکه، موقعیت موجک و پهنای موجک نیز تنظیم شده‌اند و خروجی شبکه طبق پارامترهای بهینه شده‌ی شبکه اعلام می‌شود.اکنون مدلی که همه پارامترهایش بهینه و تثبیت شده‌اند آماده استفاده می‌باشد. برای ارزیابی عملکرد شبکه‌ی بهینه شده باید پاسخی که شبکه با دریافت توصیف‌کننده‌های مربوط به نمونه‌های مختلف سری تایید محاسبه می‌کند با مقادیر تجربی موجود برای این نمونه‌ها مقایسه شود. برای انجام مقایسه، باید علاوه بر گزارش متوسط درصد خطای نسبی برای هر نمونه در جدول، نمودار برگشت را نیز ترسیم نمود. در نمودار برگشت، مقادیر پیش‌بینی شده برحسب مقادیر تجربی رسم می‌شوند و به کمک مربع مقدار ضریب همبستگی (R^2) به دست آمده از نمودار، پراکندگی نقاط در اطراف خط برگشت تعیین می‌شود. در صورتی که مقدار R^2 بدست آمده در نمودار برگشت به یک نزدیکتر باشد، می‌توان گفت شبکه به خوبی آموزش دیده است.

۳-۱-۴- استفاده از شبکه عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها

مدل شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از نه توصیف‌کننده (نه نرون ورودی) و یک خروجی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها طراحی گردید. پس از انتقال اطلاعات ورودی نمونه‌ها به شبکه و آموزش شبکه طبق دستورالعمل قسمت (۲-۱-۴)، پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون‌های لایه مخفی به صورت هم‌زمان بهینه‌سازی شد. برای مشخص شدن چگونگی انجام کار،در شکل (۳-۱) بخشی از این محاسبات نشان داده شده است. این نمودار نشان می‌دهد که مدل شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده، ۱۵ نرون در لایه‌ی مخفی دارد و مقادیر بهینه‌ی ممنتم و سرعت آموزش به ترتیب ۰/۹ و ۰/۰۲ می‌باشد.

برای تعیین تعداد دور بهینه نمودار MSE برحسب تعداد دور آموزش برای دو سری آموزش و پیش‌بینی برای این ترکیبات رسم گردید و مشخص شد تعداد ۲۰۰۰ دور، تعداد دور بهینه است که به ازای آن، MSE سری پیش‌بینی کمترین مقدار را دارد.

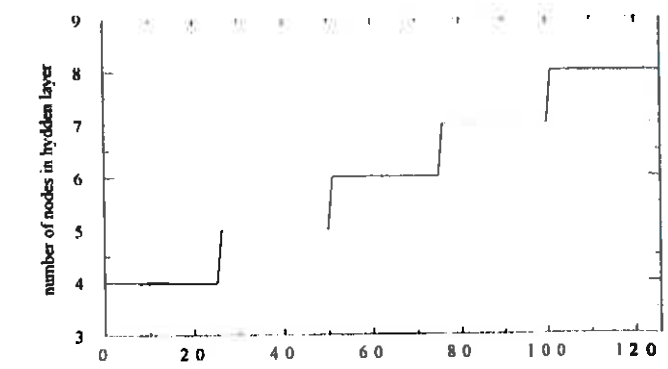
اکنون این شبکه‌ی موجک بهینه شده می‌تواند دانسیته‌ی الکل‌ها را در دما و فشارهای مربوط به سری تایید محاسبه کند. در جدول (۳-۲) متوسط خطای نسبی و ماکزیمم خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی این ترکیبات گزارش شده است. متوسط خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها با این شبکه‌ی بهینه

شده کمتر از٪ ۰/۳۳ به دست آمد. مقادیر دانسیته‌های محاسبه شده با استفاده از مدل بهینه شده به همراه مقادیر تجربی و درصد خطای نسبی ناشی از اختلاف این دو مقدار برای هر یک از این ترکیبات در جدول (۳-۳) گزارش شده است. نتایج این جدول نشان می‌دهد، دانسیته‌ی هر یک از این ترکیبات در هر دما و فشار معین، با متوسط خطای نسبی کمتر از ٪ ۰/۵۵ پیش‌بینی شده است که این موضوع نشان دهنده‌ی کارآیی مطلوب شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده است. نمودار برگشت برای این ترکیبات نیز در شکل (۳-۲) رسم شده است. همان طور که در این شکل مشاهده می‌شود، مربع ضریب همبستگی به دست آمده نزدیک به یک است که این امر بر توافق مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه نسبت به مقادیر تجربی دلالت دارد.

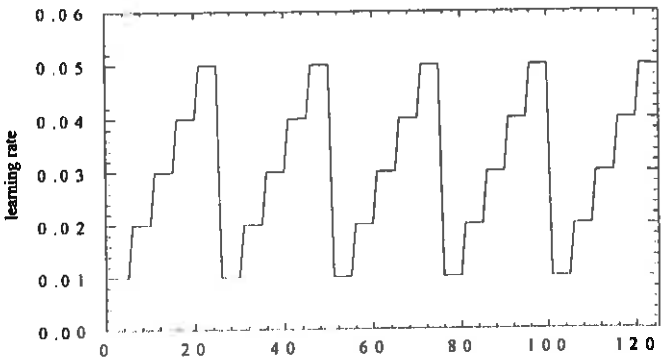
جدول (۳-۲): متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها در محدوده‌ی دما (ΔT) و فشار داده شده (Δp) با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده برای سری تایید.

سیال	تعداد کربن	ΔT , K	Δp , MPa	$\left\|\Delta\rho\right\|/\rho\|_{av}^{a}\times 100$	Ref.
اتانول	۲	۲۹۸/۱۵-۳۲۳/۱۵	۰/۱-۳۲۰	۰/۱۳۳ (۰/۳۱۱)	[۲۰]
۱- پروپانول	۳	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۲۰۶/۹	۰/۱۳۲ (۰/۳۰۳)	[۲۰]
۲- پروپانول	۳	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۱۷۵	۰/۱۶۷ (-۰/۴۰۹)	[۲۰]
۱- بوتانول	۴	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۲۰۵	۰/۱۶۱ (۰/۳۱۴)	[۲۰]
۲- بوتانول	۴	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۲۰۵	۰/۲۰۱ (۰/۵۰۲)	[۲۰]
tert- بوتانول	۴	۲۸۳/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۱۰۰	۰/۲۳۹ (۰/۵۵۴)	[۲۰]
۱- پنتانول	۵	۲۸۳/۵-۳۴۳	۱۰-۲۰۰	۰/۲۳۸ (-۰/۳۵۰)	[۲۱]
۲- پنتانول	۵	۲۸۳/۴-۳۴۲/۹	۱۰-۲۰۰	۰/۱۰۱ (-۰/۱۵۵)	[۲۱]
۱- هگزانول	۶	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۴۰	۰/۱۱۸ (۰/۳۷۲)	[۲۲]
۱- هپتانول	۷	۳۲۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۰/۱-۱۰	۰/۱۲۱ (۰/۲۹۹)	[۲۳]
۱- اکتانول	۸	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۴۰	۰/۱۷۴ (۰/۴۰۱)	[۲۲]
۱- نونانول	۹	۳۲۳/۱۵-۳۷۳/۱۵	۰/۱-۱۰	۰/۰۹۲ (۰/۱۷۳)	[۲۳]
۱- دکانول	۱۰	۲۹۸/۱۵-۳۴۸/۱۵	۰/۱-۴۰	۰/۱۵۱ (-۰/۲۶۲)	[۲۲]

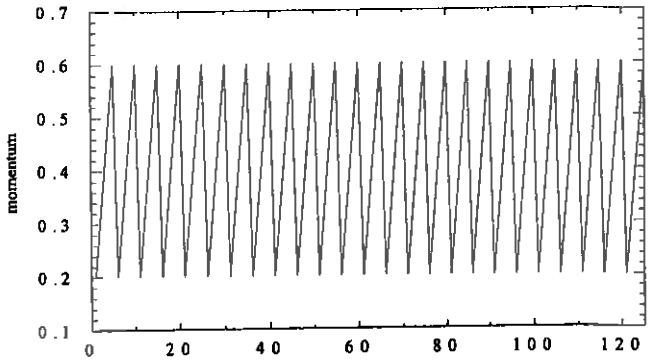
[a] ماکزیمم درصد خطای نسبی در پرانتز گزارش شده است.



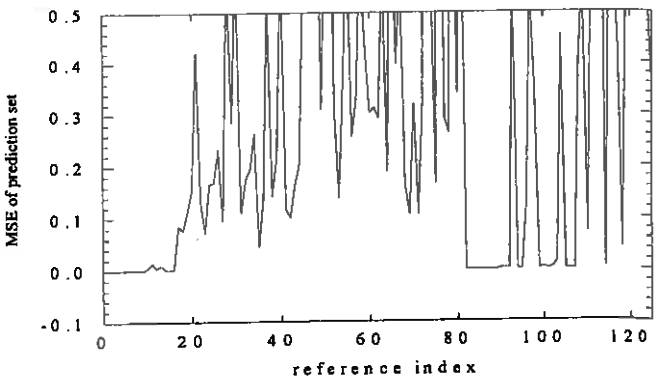
الف)



ب)



ج)



د)

شکل (۳-۱): نمودارهای (الف) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ب)مقادیر ممنتم، (ج) سرعت آموزش، (د) MSE سری پیش‌بینی برحسب بردار مرجع.

جدول (۳-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه عصبی موجک بهینه شده با مقادیر تجربی دانسیته برای الکل‌ها

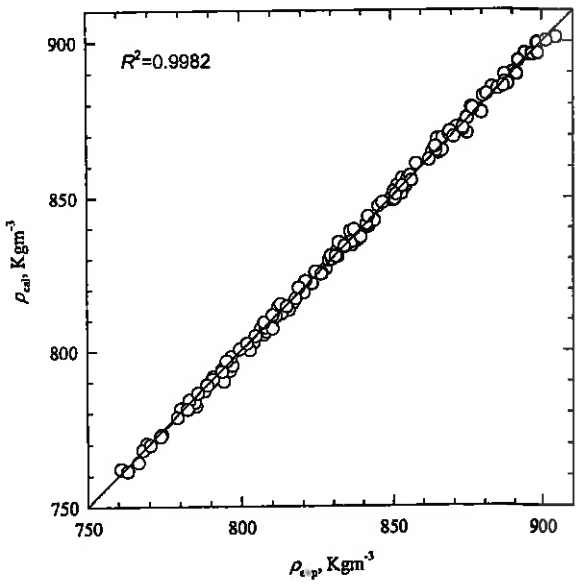
$\frac{(\rho_{exp}-\rho_{cal})}{\rho_{exp}}\times 100$	دانسیته(kgm^{-3})		دانسیته(kgm^{-3})	$\frac{(\rho_{exp}-\rho_{cal})}{\rho_{exp}}\times 100$
	پاسخ شبکه	مقدار تجربی	پاسخ شبکه	مقدار تجربی
۰/۰۹۱	۸۰۹/۵۰۰	۸۱۰/۲۴۰	۷۹۴/۵۵۰	۰/۱۵۷
۰/۲۷۶	۸۳۴/۳۰۰	۸۳۶/۶۱۰	۸۱۹/۳۳۰	۰/۰۹۱
$۳/۵۲۵\times۱۰^{-۳}$	۸۵۰/۹۶۰	۸۵۰/۹۹۰	۸۳۶/۰۳۰	۰/۳۱۱
-۰/۰۸۸	۸۶۴/۱۷۰	۸۶۳/۴۱۰	۸۵۳/۴۳۰	۰/۱۵۷
۰/۱۹۵	۸۱۵/۲۷۰	۸۱۶/۸۶۰	۸۷۲/۹۱۰	۰/۰۳۴
۰/۰۷۲	۸۳۴/۸۹۰	۸۳۵/۴۹۰	۸۸۴/۵۷۰	-۰/۱۴۳
-۰/۲۸۷	۸۶۰/۶۱۰	۸۵۸/۱۵۰	۸۹۵/۶۷۰	-۰/۰۵۵
-۰/۱۲۲	۸۷۲/۲۹۰	۸۷۱/۲۳۰	۷۸۱/۲۱۰	-۰/۱۱۱
۰/۲۵۱	۸۰۶/۱۸۰	۸۰۸/۲۱۰	۷۹۵/۲۱۰	۰/۲۱۰
۰/۱۵۶	۸۲۶/۸۰۰	۸۲۸/۰۹۰	۸۰۸/۰۵۰	۰/۰۷۷
-۰/۲۱۰	۸۵۳/۶۵۰	۸۵۱/۸۶۰	۸۳۱/۸۲۰	-۰/۱۱۰
-۰/۴۰۹	۸۶۸/۶۷۰	۸۶۵/۱۳۰	۸۵۴/۱۷۰	-۰/۰۳۲
$۷/۶۰۵\times۱۰^{-۳}$	۷۸۸/۸۹۰	۷۸۸/۹۵۰	۸۷۵/۳۶۰	-۰/۰۸۰
$-۷/۳۹۷\times۱۰^{-۳}$	۸۱۱/۱۶۰	۸۱۱/۱۰۰	۸۸۵/۰۸۰	-۰/۲۲۶
-۰/۱۸۲	۸۳۷/۹۹۰	۸۳۶/۴۷۰	۸۹۶/۰۳۰	-۰/۲۰۴
-۰/۱۲۳	۸۵۱/۷۵۰	۸۵۰/۷۰۰	۸۳۰/۶۴۰	۰/۱۴۹
-۰/۱۲۹	۷۷۰/۱۰۰	۷۶۹/۱۱۰	۸۴۸/۷۴۰	۰/۱۸۰
$-۶/۲۹۹\times۱۰^{-۳}$	۷۹۳/۸۳۰	۷۹۳/۷۸۰	۸۷۱/۷۷۰	۰/۰۷۸
-۰/۱۸۳	۸۲۲/۵۹۰	۸۲۱/۰۹۰	۸۸۴/۶۵۰	۰/۰۴۳
-۰/۳۳۰	۸۳۸/۸۱۰	۸۳۶/۰۵۰	۸۹۵/۸۰۰	۰/۰۹۱
-۰/۲۷۹	۸۵۵/۹۱۰	۸۵۳/۵۳۰	۸۲۱/۸۶۰	۰/۱۷۷
-۰/۰۲۴	۸۷۵/۱۸۰	۸۷۴/۹۷۰	۸۴۰/۳۸۰	۰/۲۳۰
-۰/۲۱۳	۸۸۹/۱۲۰	۸۸۷/۲۳۰	۸۶۴/۱۴۰	۰/۱۴۹
-۰/۱۱۲	۸۹۹/۴۰۰	۸۹۸/۳۹۰	۸۷۷/۷۷۰	۰/۰۹۲
-۰/۱۶۲	۸۴۶/۹۶۰	۸۴۵/۵۹۰	۸۸۹/۸۶۰	۰/۰۵۱
-۰/۲۱۷	۸۶۸/۷۳۰	۸۶۶/۸۵۰	۸۰۵/۱۷۰	۰/۳۰۳
-۰/۲۳۹	۸۸۲/۳۰۰	۸۸۰/۲۰۰	۸۲۵/۶۲۰	۰/۰۵۱
-۰/۱۸۶	۸۹۳/۶۴۰	۸۹۱/۹۸۰	۸۴۹/۸۲۰	۰/۰۱۹
۰/۰۴۵	۸۳۰/۷۵۰	۸۳۱/۱۲۰	۸۶۵/۱۵۰	-۰/۱۴۹
-۰/۰۵۷	۸۵۵/۸۵۰	۸۵۵/۳۶۰	۸۷۸/۷۸۰	-۰/۲۸۶
-۰/۱۴۴	۸۷۰/۲۱۰	۸۶۸/۹۶۰	۷۸۶/۹۶۰	۰/۱۴۲

ادامه‌ی جدول (۳-۳):

$\frac{(\rho_{exp}-\rho_{cal})}{\rho_{exp}}\times 100$	دانسیته(kgm^{-3})		دانسیته(kgm^{-3})		$\frac{(\rho_{exp}-\rho_{cal})}{\rho_{exp}}\times 100$
	پاسخ شبکه	مقدار تجربی	پاسخ شبکه	مقدار تجربی	
۰/۳۵۵	۹۰۱/۱۹۰	۹۰۴/۴۰۰	۸۸۲/۹۱۰	۸۸۱/۲۹۰	-۰/۱۸۴
-۰/۲۶۵	۸۱۴/۴۵۰	۸۱۲/۳۰۰	۸۱۳/۱۷۰	۸۱۵/۷۳۰	۰/۳۱۴
۰/۱۵۵	۸۵۵/۲۷۰	۸۵۶/۶۰۰	۸۴۰/۶۳۰	۸۴۱/۶۸۰	۰/۱۲۵
۰/۲۵۲	۸۸۶/۱۶۰	۸۸۸/۴۰۰	۸۵۶/۷۴۰	۸۵۶/۱۶۰	-۰/۰۶۸
-۰/۰۷۰	۷۹۱/۴۵۰	۷۹۰/۹۰۰	۸۷۰/۹۹۰	۸۶۹/۱۹۰	-۰/۲۰۷
۰/۳۳۷	۸۳۶/۸۷۰	۸۳۹/۷۰۰	۸۵۱/۰۱۰	۸۵۳/۳۲۰	۰/۲۷۱
۰/۱۳۷	۸۷۲/۲۰۰	۸۷۳/۴۰۰	۸۷۰/۵۰۰	۸۷۴/۸۹۰	۰/۵۰۲
-۰/۰۶۵	۸۲۹/۴۴۰	۸۲۸/۹۰۰	۸۸۶/۶۶۰	۸۸۷/۳۱۰	۰/۰۷۳
۰/۱۴۰	۸۶۹/۲۸۰	۸۷۰/۵۰۰	۸۹۶/۰۶۰	۸۹۸/۵۵۰	۰/۲۷۷
۰/۱۲۸	۹۰۰/۱۵۰	۹۰۱/۳۰۰	۸۴۲/۲۸۰	۸۴۴/۱۷۰	۰/۲۲۴
-۰/۰۷۱	۸۰۷/۲۷۰	۸۰۶/۷۰۰	۸۶۴/۹۴۰	۸۶۶/۷۰۰	۰/۲۰۳
۰/۰۲۰	۸۵۳/۴۳۰	۸۵۳/۶۰۰	۸۷۶/۹۸۰	۸۷۹/۶۶۰	۰/۳۰۵
۰/۱۵۰	۸۸۵/۴۷۰	۸۸۶/۸۰۰	۸۸۹/۲۹۰	۸۹۱/۴۲۰	۰/۲۳۹
-۰/۱۱۵	۷۸۴/۰۰۰	۷۸۳/۱۰۰	۸۲۵/۱۶۰	۸۲۶/۶۵۰	۰/۱۸۰
-۰/۱۵۵	۸۲۵/۵۸۰	۸۲۴/۳۰۰	۸۴۹/۲۱۰	۸۵۱/۰۶۰	۰/۲۱۷
۰/۰۵۷	۸۶۱/۹۱۰	۸۶۲/۴۰۰	۸۶۴/۷۸۰	۸۶۴/۶۸۰	-۰/۰۱۲
-۰/۰۲۳	۸۲۵/۴۹۰	۸۲۵/۳۰۰	۸۷۸/۴۰۰	۸۷۶/۷۳۰	-۰/۱۹۰
۰/۰۱۲	۸۲۹/۸۰۰	۸۲۹/۹۰۰	۸۰۹/۵۸۰	۸۱۰/۳۷۰	۰/۰۹۷
۰/۰۴۶	۸۳۳/۹۲۰	۸۳۴/۳۰۰	۸۳۵/۵۶۰	۸۳۶/۷۵۰	۰/۱۴۲
۰/۰۷۴	۸۰۷/۵۰۰	۸۰۸/۱۰۰	۸۵۰/۸۳۰	۸۵۱/۴۳۰	۰/۰۷۰
۰/۱۴۵	۸۱۲/۰۲۰	۸۱۳/۲۰۰	۸۶۶/۱۷۰	۸۶۴/۴۵۰	-۰/۱۹۹
۰/۲۲۳	۸۱۸/۷۷۰	۸۲۰/۶۰۰	۷۶۸/۰۴۰	۷۶۷/۸۷۰	-۰/۰۲۲
۰/۰۵۲	۷۸۹/۸۹۰	۷۹۰/۳۰۰	۷۷۲/۸۸۰	۷۷۴/۲۳۰	۰/۱۷۴
۰/۳۷۲	۷۹۳/۵۴۰	۷۹۶/۵۰۰	۷۸۲/۱۱۰	۷۸۵/۴۸۰	۰/۴۲۹
-۰/۰۶۰	۸۰۲/۳۳۰	۸۰۱/۸۵۰	۷۹۰/۰۱۰	۷۹۴/۴۱۰	۰/۵۵۴
$۳/۷۲۸\times۱۰^{-۳}$	۸۰۴/۷۴۰	۸۰۴/۷۷۰	۸۰۲/۷۱۰	۸۰۴/۳۱۰	۰/۱۹۹
۰/۰۲۳	۷۹۰/۶۳۰	۷۹۰/۸۱۰	۷۶۲/۰۱۰	۷۶۰/۸۰۰	-۰/۱۵۹
۰/۰۸۶	۷۹۳/۱۶۰	۷۹۳/۸۴۰	۷۸۳/۲۴۰	۷۸۴/۹۳۰	۰/۲۱۵
۰/۱۰۵	۷۷۸/۴۳۰	۷۷۹/۲۵۰	۸۰۱/۰۱۰	۸۰۲/۳۱۰	۰/۱۶۲
۰/۱۸۷	۷۸۱/۰۸۰	۷۸۲/۵۴۰	۸۳۵/۲۱۰	۸۳۲/۳۰۰	-۰/۳۵۰
۰/۲۰۷	۷۶۱/۳۶۰	۷۶۲/۹۴۰	۸۷۱/۶۰۰	۸۷۳/۵۰۰	۰/۲۱۸

ادامه‌ی جدول (۳-۳):

دانسیته(kgm^{-3})		$\frac{(\rho_{exp}-\rho_{cal})}{\rho_{exp}}\times 100$	دانسیته(kgm^{-3})		$\frac{(\rho_{exp}-\rho_{cal})}{\rho_{exp}}\times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		مقدار تجربی	پاسخ شبکه	
۷۶۶/۴۶۰	۷۶۴/۱۷۰	۰/۲۹۹	۷۸۵/۹۱۰	۷۸۶/۱۸۰	-۰/۰۳۴
۸۲۴/۴۰۰	۸۲۵/۶۸۰	-۰/۱۵۵	۷۸۹/۰۴۰	۷۸۸/۷۵۰	۰/۰۳۷
۸۳۴/۲۰۰	۸۳۴/۰۷۰	۰/۰۱۶	۷۷۰/۳۹۰	۷۶۹/۷۰۰	۰/۰۹۰
۸۴۱/۷۰۰	۸۴۱/۳۲۰	۰/۰۴۵	۷۷۳/۷۷۰	۷۷۲/۴۳۰	۰/۱۷۳
۸۱۱/۵۰۰	۸۱۱/۱۵۰	۰/۰۴۳	۸۲۹/۶۰۰	۸۳۰/۹۰۰	-۰/۱۵۷
۸۱۷/۹۰۰	۸۱۶/۹۵۰	۰/۱۱۶	۸۳۷/۴۰۰	۸۳۹/۴۲۰	-۰/۲۴۱
۸۲۶/۴۰۰	۸۲۴/۹۹۰	۰/۱۷۱	۸۴۲/۱۰۰	۸۴۳/۵۶۰	-۰/۱۷۳
۷۹۷/۳۰۰	۷۹۵/۱۰۰	۰/۲۷۶	۸۴۶/۹۰۰	۸۴۸/۱۳۰	-۰/۱۴۵
۸۰۳/۰۰۰	۸۰۰/۱۴۰	۰/۳۵۶	۸۱۳/۰۰۰	۸۱۵/۱۳۰	-۰/۲۶۲
۸۱۰/۴۰۰	۸۰۷/۱۵۰	۰/۴۰۱	۸۱۸/۹۰۰	۸۲۰/۴۶۰	-۰/۱۹۰
۸۰۷/۶۴۰	۸۰۹/۱۹۰	-۰/۱۹۲	۸۳۱/۲۰۰	۸۳۰/۶۸۰	۰/۰۶۳
۸۱۰/۴۱۰	۸۱۱/۵۳۰	-۰/۱۳۸	۷۹۵/۳۰۰	۷۹۶/۵۱۰	-۰/۱۵۲
۷۹۶/۸۸۰	۷۹۷/۹۴۰	-۰/۱۳۳	۸۰۲/۰۰۰	۸۰۲/۳۲۰	-۰/۰۴۰
۷۹۹/۷۳۰	۸۰۰/۴۰۰	-۰/۰۸۴	۸۱۵/۰۰۰	۸۱۴/۳۴۰	۰/۰۸۱



شکل (۳-۲): نمودار برگشت برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده با شبکه‌عصبی موجک بهینه شده برای الکل‌ها بر حسب مقادیر تجربی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار در سری تایید.

۳-۱-۵- بحث و نتیجه‌گیری

در این کار با استفاده از روش نوین پردازش اطلاعات به نام شبکه‌های عصبی مصنوعی دانسیته‌ی الکل‌ها را پیش‌بینی نمودیم. ابتدا مدل را برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ۱-آلکانول‌ها طراحی و بهینه‌سازی کردیم. برای ساخت مدل، داده‌های دانسیته را برای ۱-آلکانول‌ها دارای ۲ تا ۱۰ کربن در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار گردآوری نمودیم که نام این ترکیبات به همراه محدوده‌ی دما و فشار و مرجع مورد استفاده برای هر ترکیب در جدول (۲-۱) آمده است. در مرحله‌ی بعد، باید توصیف‌کننده‌هایی را انتخاب می‌کردیم که بتواند دانسیته را به ساختار مولکولی مرتبط کند. دما و فشار را به عنوان اولین توصیف‌کننده‌ها به کارگرفتیم زیرا دانسیته هر ترکیب به دما و فشار سیستم وابسته است. برای انتخاب سایر توصیف‌کننده‌ها در این کار برای اولین بار، از مفهوم سهم گروه‌ها استفاده کردیم. برای این منظور، براساس مفهوم سهم گروه‌ها، این ترکیبات را به چهار گروه عاملی سازنده‌ی آن‌ها شکستیم. این گروه‌های عاملی عبارتند از: گروه‌های متیل، گروه‌های متیلن انتهایی (گروه‌های متیلنی که فقط از یک طرف به یک گروه متیلن دیگر متصل شده‌اند)، گروه‌های متیلن میانی (گروه‌های متیلنی که از هر دو طرف به دو گروه متیلن دیگر متصل شده‌اند) و گروه عاملی الکل نوع اول CH_2OH-. اما تعداد گروه عاملی الکل نوع اول CH_2OH- در تمام این ترکیبات یکسان بود و عملاً نمی‌توانست نقش خاصی را در ارتباط بین ساختار و دانسیته بازی کند. بنابراین فقط تعداد گروه‌های متیل، متیلن انتهایی و متیلن میانی را به عنوان سه توصیف‌کننده‌ی بعدی انتخاب کردیم. همچنین نتایج موجود در مرجع [۲۴] نشان داده بود که در محاسبه‌ی دانسیته بر مبنای سهم گروه‌ها، دانسیته علاوه بر دما، فشار و سهم گروه‌های عاملی، به تعداد کربن ترکیب آلی نیز وابسته است. بنابراین، تعداد کربن هر ترکیب نیز به عنوان ششمین توصیف‌کننده در نظر گرفته شد. سپس مدل شبکه‌ی عصبی موجک را با استفاده از شش توصیف‌کننده (شش نرون ورودی) و یک خروجی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی ترکیبات مورد بررسی طراحی کردیم. پس از انتقال توصیف‌کننده‌های سیال‌ها به شبکه و آموزش شبکه طبق دستورالعمل بخش (۲-۱-۴) با برنامه‌ای رایانه‌ای که در محیط برنامه‌نویسی MATLAB جهت به کارگیری شبکه عصبی موجک نوشته بودیم، پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون‌های لایه مخفی به صورت هم‌زمان و همچنین تعداد دور آموزش را بهینه‌سازی کردیم. در شکل‌های (۲-۱) و (۲-۲) بخشی از این محاسبات نشان داده شده است. با بررسی این نمودارها مشخص گردید که مدل شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده، ۱۲ نرون در لایه‌ی مخفی دارد، مقادیر بهینه‌ی ممنتم و سرعت آموزش به ترتیب ۰/۶ و ۰/۰۲ می‌باشد و تعداد ۶۰۰۰ دور، تعداد دور بهینه است. سپس شبکه‌ی موجک بهینه شده را برای محاسبه‌ی دانسیته‌ی ۱-آلکانول‌ها در دما و فشارهای مربوط به سری تایید به کار بردیم که نتایج آن در جداول (۲-۲) و (۲-۳) گزارش شده است. نتایج موجود در جدول نشان می‌دهد که شبکه‌ی بهینه شده، دانسیته‌ی هر یک از این ترکیبات را در هر دما و

فشار معین، با متوسط خطای نسبی کمتر از ٪ ۰/۲۱ و ماکزیمم خطای نسبی ٪ ۰/۵۵ پیش‌بینی کرده است که این موضوع نشان دهنده‌ی کارآیی مطلوب شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده است. مربع ضریب همبستگی به دست آمده از نمودار برگشت ترسیم شده برای این ترکیبات نیز نزدیک به یک است که این امر بر توافق مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه نسبت به مقادیر تجربی دلالت دارد (شکل (۲-۳) را ملاحظه کنید).

پس از آن که دیدیم ایده‌ی به کارگیری روش سهم گروه‌ها در انتخاب توصیف‌کننده‌ها، به شبکه‌ی عصبی موجک این امکان را می‌دهد که ارتباط بسیار خوبی بین ورودی‌ها و خروجی‌ها برقرار کند و به خوبی دانسیته‌ی این ترکیبات را پیش‌بینی کند ایده‌ی ارائه‌ی یک شبکه‌ی عصبی موجک جامع را مورد بررسی قرار دادیم. هدف از این کار ارائه‌ی یک شبکه‌ی عصبی موجک واحد بود به طوری که بتواند برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی انواع الکل‌های ذکر شده در جدول (۳-۱) در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود در این جدول کارآیی داشته باشد.

برای این منظور، الکل‌های موجود در جدول (۳-۱) را براساس مفهوم سهم گروه‌ها، به شش گروه عاملی سازنده‌ی آن‌ها شکستیم. این گروه‌های عاملی عبارتند از: گروه‌های متیل، گروه‌های متیلن انتهایی (گروه‌های متیلنی که فقط از یک طرف به یک گروه متیلن دیگر متصل شده‌اند)، گروه‌های متیلن میانی (گروه‌های متیلنی که از هر دو طرف به دو گروه متیلن دیگر متصل شده‌اند)، گروه عاملی الکل نوع اول $-CH_2OH$، گروه‌های عاملی الکل نوع دوم $\rangle CHOH$ و گروه‌های عاملی الکل نوع سوم $-\overset{|}{\underset{|}{C}}OH$. با استفاده از این گروه‌های عاملی می‌توان کلیه‌ی ساختارهای مولکولی مورد استفاده در این جدول را ایجاد نمود. سپس تعداد هر یک از این گروه‌های عاملی را به عنوان یک توصیف‌کننده به کار بردیم. به این ترتیب ۶ توصیف‌کننده برمبنای مفهوم سهم گروه‌ها برای هر یک از ترکیبات آلی مورد بررسی انتخاب کردیم. با این روش تمام ترکیبات آلی مورد بررسی با یک کد شش رقمی منحصر به فرد معرفی‌می‌شوند به گونه‌ای که هیچ دو مولکولی دارای کد یکسان نباشند. همچنین دما، فشار و تعداد کربن هر یک از ترکیبات را به عنوان سه توصیف‌کننده‌ی بعدی انتخاب کردیم. این بار شبکه‌ی عصبی موجک را با نه توصیف‌کننده (نه نرون ورودی) و یک خروجی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی الکل‌ها طراحی و طبق دستورالعمل بخش (۲-۱-۴) با برنامه‌ی رایانه‌ای نوشته شده در محیط برنامه‌نویسی MATLAB جهت به کارگیری شبکه عصبی موجک، بهینه نمودیم که برای مشخص شدن چگونگی انجام کار، بخشی از این محاسبات در شکل (۳-۱) نشان داده شده است. این نمودار نشان می‌دهد که مدل شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده دارای، ۱۵ نرون در لایه‌ی مخفی بوده و مقادیر بهینه‌ی ممنتم و سرعت آموزش به ترتیب ۰/۹ و ۰/۰۲ می‌باشد. همچنین تعداد دور آموزش بهینه برای این شبکه ۲۰۰۰ دور به دست آمد. بعد این شبکه‌های بهینه شده را برای پیش‌بینی دانسیته این

ترکیبات در دما و فشارهای مربوط به سری تایید به کار بردیم که نتایج آن در جداول (۳-۲) و (۳-۳) گزارش شده است. نتایج به دست آمده نشان داد که شبکه‌ی بهینه شده می‌تواند دانسیته را با متوسط خطای نسبی کمتر از ٪ ۰/۳۳ و ماکزیمم خطای نسبی ٪ ۰/۵۴ پیش‌بینی کند که این نشانگر کارآیی مطلوب مدل بهینه شده است. همچنین مربع ضریب همبستگی نزدیک به یک در نمودار برگشت نیز دلیل بر صحت مقادیر پیش‌بینی شده توسط این شبکه است. بنابراین، با داشتن فقط و فقط فرمول گسترده‌ی مولکول (ساختار مولکولی) در هر دما و فشار (در دامنه‌ی دما و فشار ارائه شده در جدول (۳-۱) برای هر ترکیب) و بدون نیاز به پارامترهای اضافی وابسته به نوع سیال در ورودی می‌توان دانسیته را با خطای ناچیزی پیش‌بینی نمود. اگر این روش با متداول‌ترین روش برای پیش‌بینی دانسیته، یعنی معادله‌های حالت مختلف ارائه شده در متون علمی مقایسه کنیم ملاحظه خواهیم کرد که این روش بدون نیاز به معادله‌های حالت پیچیده و تعداد پارامترهای زیاد برای هر سیال قادر به پیش‌بینی دانسیته با درصد خطای بسیار کمتری می‌باشد.

این کار اولین قدم در مدل‌سازی شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از مفهوم سهم گروه‌ها برای پیش‌بینی خواص ترمودینامیکی سیالات بود که با موفقیت انجام شد و توسعه‌ی این مدل به سایر خواص ترمودینامیکی و انتقالی برای دسته‌های دیگر ترکیبات آلی نیز در دست انجام است.

مراجع:

[۱] Stuart, J., Norving, P., Artificial Intelligence, Hall Inc., Newjersey, 1996.

[۲] http://www.doc.ic.ac.uk/~nd/suprise_96/journal/vol.4/cs11/report.html

[۳] منهاج، م، هوش محاسباتی (جلد اول)، دانشگاه صنعتی امیرکبیر (واحد تفرش)، چاپ اول، ۱۳۷۹

[۴] http://www.dacs.dtic.mit/techs/neural.html

[۵] jalali-Heravi, M., Fatemi, M. H., "Prediction of flame ionization detector response factors using artificial neural nerwork", J. Chromato A., No. 825, pp: 161-169, 1998.

[۶] Kardanpoura, Z., B. Hemmateenejad, B., T. Khayamian, T., "Wavelet neural network-based QSPR for prediction of critical micelle concentration of Gemini surfactants", Analytica Chimica Acta, Vol. 531, pp: 285-291, 2005.

[۷] Fatemi, M. H., Jalali-Heravi, M., Konuze, E., "Prediction of bioconcentration factor using genetic algorithm and artificial neural network" Analytica Chimica Acta , Vol. 486, pp: 101-108, 2003.

[۸] بیل، آر، جکسون، تی، آشنایی با شبکه‌های عصبی، ترجمه‌ی البرزی، دانشگاه صنعتی شریف، ۱۳۸۰.

[۹] Hagan, M. T., Demuth, B., Beale, M., Neural Network Design, PWS, 1995.

[۱۰] Stamations, V. K., Understanding Neural Networks and Fuzzy Logic, IEEE Press, 1996.

[۱۱] Zhang, Q. H., "Using wavelet network in nonparametric estimation", IEEE Trans. Neural Networks, Vol. 8, pp: 227-236, 1997.

[۱۲] Zhang, Q. H., Benvensite, A., "Wavelet networks", IEEE Trans. Neural Networks, Vol. 3, pp: 889-898, 1992.

[۱۳] Pati, Y. C., Krishnaprasad, P. S., "Analysis and synthesis of feed-forward neural networks using discrete affine wavelet transformations" IEEE Trans. Neural Networks, Vol. 4, pp: 73-87, 1993.

[۱۴] Delyon, B., Juditsky, A., Benvensite, A., IEEE Trans. Neural Networks, Vol. 6, pp: 332, 1995.

[۱۵] Zhang, J., Walter, G. G., Miao, Y., Lee, W. N. W., "Wavelet neural networks for function learning", IEEE Trans. Signal Processing, Vol. 43, pp: 1485-1496, 1995.

[۱۶] Sheng, T. L., Shu, C. C., Function approximation using robust wavelet neural networks, Kaohslung, Taiwan, ROC.

[۱۷] Skoog, D. A., Principles of instrumental analysis, Saunders College Publishing, 1985.

[۱۸] http://www.xilinx.com

[۱۹] http://www_star.stanford.edu/projects/sswrg/basics.html.

[۲۰] Kubota, H., Tanaka, Y., Makita, T., "Volumetric behavior of pure alcohols and their water mixtures under high pressure", Int. J. Thermophys., Vol. 8, No. 1, pp. 47-70, 1987.

[۲۱] Wappmann, S., Karger, N., Lüdemann, H.-D., "pVT Data of liquid 1-, 2-, and 3-pentanol from 10 to 200 MPa and from 233 to 433", J. Chem. Eng. Data, Vol. 40, pp. 233-236, 1995.

[۲۲] Matsuo, S., Makita, T., "Volumetric properties of 1-alkanols at temperatures in the range 298-348 K and pressure up to 40 MPa", Int. J. Thermophys., Vol. 10, No. 4, pp. 885-897, 1989.

[۲۳] Garg, S. K., Banipal T. S., Ahluwalia, J. C., "Densities, molar volumes, cubic expansion coefficients and isothermal compressibilities of 1-alkanols from 323.15 to 373.15 K and at pressures up to 10 MPa", J. Chem. Eng. Data, Vol. 38, pp. 227-230, 1993.

[۲۴] Parsafar. G. A., Kalantar. Z., "Extension of linear isotherm regularity to long chain primary, secondary and tertiary alcohols, ketones and 1-carboxylic acids by group contribution method", Fluid Phase Equilibria, Vol. 234, pp. 19-29, 2005.

[۲۵] Zhang, X., Qi, J., Zhang, R., Liu, M., Hu, Z., Xue, H., Fan, B., "Prediction of programmed-temprature retention values of naphtals by wavelet neural networks", Comput. Chem., Vol. 25, pp: 125-133, 2001.

[۲۶] Dolezalek, F., Z. Physick. Chem., Vol. 64, pp: 727-747, 1908.

[۲۷] Benmekki, E. H., Mansoori, G. A., "Phase equilibrium calculations of highly polar systems", Fluid Phase Equilibria, Vol. 32, pp: 139-149, 1987.

[۲۸] Hamed, E. Z., El-Nafaty, U. A., Mansoori, G. A., "Statistical mechanical modeling of associating solutions", Fluid Phase Equilibria, Vol. 79, pp: 21-31, 1992.

[۲۹] Anderko, A., "Modeling phase equilibria using an equation of state incorporating association", Fluid Phase Equilibria, Vol. 75, pp: 89-103, 1992.

[۳۰] Al-Mutawa, A. H., Hwang, C. A., Kim, S. T., Mansoori, G. A., "Development of an analytic theory for thermodynamic properties of associating fluids", Trends in Chem. Eng., Vol. 1, pp: 175-192, 1993.