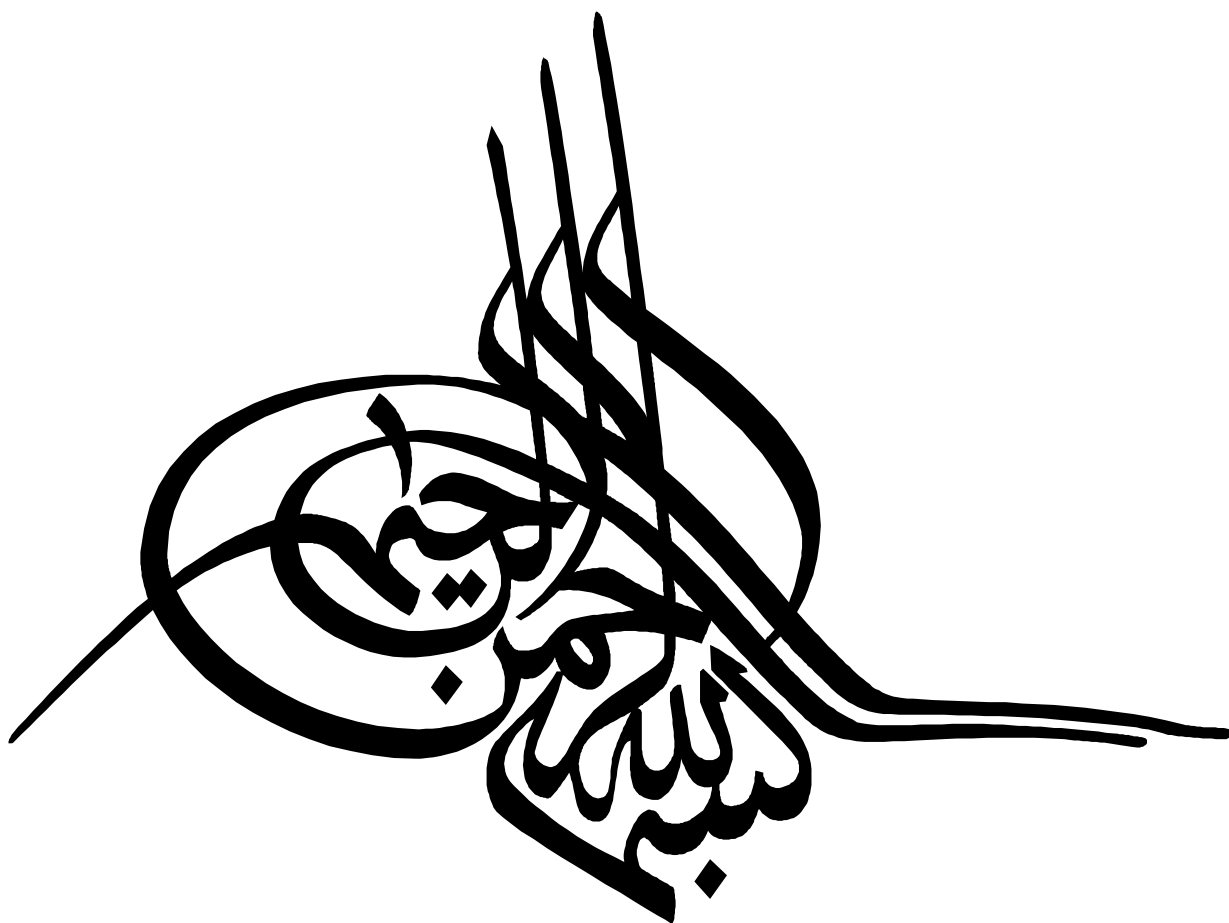






دانشکده شیمی

گروه شیمی فیزیک

عنوان:

مدل سازی شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از روش سهم گروه‌ها برای
پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار

دانشجو:

نجمه خاتون نامجو

استاد راهنما:

خانم دکتر زهرا کلانتر

استاد مشاور:

آقای دکتر حسین نیکوفرد

پاییز ۸۸

پروردگارا

به پیشگاه پاک و مقدس تقدیم می‌دارم که بندگی را فقط و فقط تو را سزده، آنچه به من داده‌ای
بیش از شایستگی من است گرچه در خور بخشندگی توست.

تقدیم به الهی عشق و ایثار مادرم
به تکیه‌گاه و تمام هستی‌ام که ترنم کلامش، فروغ
نگاهش، افتخار حضورش و گرمی دستان پرمهرش،
آرامشی ستودنی برایم به ارمغان آورده و امید-
بخش زندگیم می‌باشد.

تقدیم به مظهر قدرت و رشادت پدرم
به وجود پرمهرش، صلابت کلامش و به مهربانی نگاهش
که همیشه در همه‌ی لحظات زندگی بهترین دوست من
هستند.

تقدیم به همسر مهربانم: جناب آقای
مجتبی ارغان

که قلب دریایش همیشه نیلگون است و افتخار حضور
و مهر بی‌دریغش امیدبخش زندگی‌ام است و در لحظه-
لحظه‌ی زندگی‌ام مانند یک دوست همراه همیشگی من
است. آرزوی موفقیت ایشان را دارم.

سپاسگزارم از استاد راهنمای عزیزم سرکار
خانم دکتر زهرا کلانتر که با راهنمایی‌های

ارزشمندشان مرا در به پایان رساندن این
پروژه یاری نمودند .

با تشکر فراوان از جناب آقای دکتر حسین
نیکوفرد استاد بزرگوارم که زحمت مشاوره‌ی
پروژه‌ی اینجانب را متقبل شدند .

و از همه‌ی کسانی که مرا در به ثمر رساندن این
پروژه یاری نمودند ، کمال تشکر را دارم .

دانشجو تأیید می‌نماید که مطالب مندرج در این پایان‌نامه نتیجه‌ی تحقیقات خودش
می‌باشد و در صورت استفاده از نتایج دیگران مرجع آن را ذکر نموده است.

کلیه‌ی حقوق مادی، مترتب از نتایج مطالعات، آزمایشات و نوآوری ناشی از تحقیق
موضوع این پایان‌نامه متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می‌باشد.

پاییز ۸۸

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فهرست مطالب.....	ز
فهرست اشکال.....	ک
فهرست جداول.....	س
چکیده.....	ق

فصل اول: شبکه‌های عصبی مصنوعی

مقدمه.....	۱
۱-۱- انسان و سلول‌های عصبی مصنوعی، در جستجوی شباهت‌ها.....	۱
۱-۱-۱- مغز انسان چگونه می‌آموزد؟.....	۱
۱-۱-۲- از سلول‌های عصبی انسان تا شبکه‌های عصبی مصنوعی.....	۳
۲-۱- تاریخچه‌ی شبکه‌های عصبی مصنوعی.....	۴
۳-۱- ساختار شبکه‌های عصبی مصنوعی.....	۴
۴-۱- دسته‌بندی لایه‌ای شبکه‌های عصبی مصنوعی.....	۶
۵-۱- معماری شبکه‌های عصبی مصنوعی.....	۹
۶-۱- فرایند یادگیری شبکه‌های عصبی به عنوان سیستم‌های آموزش‌پذیر.....	۱۰
۷-۱- معرفی روشهای مختلف بهینه‌سازی عملکرد شبکه‌های عصبی.....	۱۱
۷-۱-۱- روش نزول گرادیانی.....	۱۲
۷-۱-۲- الگوریتم پس انتشار خطا.....	۱۴
۸-۱- شیوه‌های نوین آموزش شبکه.....	۱۵
۹-۱- شبکه‌ی عصبی موجک.....	۱۵
۹-۱-۱- موج، موجک و تبدیل موجک.....	۱۶
۹-۱-۲- موجک مادر.....	۱۸
۹-۱-۳- الگوریتم شبکه‌ی عصبی موجک.....	۱۹

فصل دوم: روش سهم گروه و کاربردهای آن

مقدمه.....	۲۳
۱-۲- خواص ترمودینامیکی استاندارد.....	۲۴
۲-۲- کاربرد روش سهم گروه برای پیش‌بینی ویسکوزیته‌ی مایعات یونی.....	۲۵
۳-۲- پیش‌بینی دمای خوداشتعالی برای ترکیبات آلی.....	۲۵
۴-۲- پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال.....	۲۶
۱-۴-۲- روش جوباک.....	۲۶
۲-۴-۲- روش گانی.....	۲۷
۳-۴-۲- روش الیوت.....	۲۸
۵-۲- پیش‌بینی دانستیه‌ی مایعات خالص.....	۲۹
۱-۵-۲- پیش‌بینی دانستیه‌ی هیدروکربن‌های مایع اشباع.....	۲۹
۲-۵-۲- پیش‌بینی دانستیه‌ی پلیمرها برحسب دما.....	۳۰
۶-۲- کاربردهای جدید از روش سهم گروه‌ها.....	۳۱
۱-۶-۲- کاربرد روش سهم گروه-شبکه‌ی عصبی مصنوعی (NNGC) درپیش‌بینی دمای نقطه‌ی اشتعال ترکیبات خالص.....	۳۱
۲-۶-۲- کاربرد روش سهم گروه-شبکه‌ی عصبی مصنوعی برای پیش‌بینی دمای خود اشتعالی ترکیبات خالص.....	۳۲
۳-۶-۲- کاربرد روش سهم گروه-شبکه‌ی عصبی مصنوعی درپیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی.....	۳۳
۷-۲- کاربردهای دیگر روش سهم گروه‌ها.....	۳۳
فصل سوم: پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌ها با استفاده از توصیف‌کننده‌هایی بر مبنای روش سهم گروه و روش شبکه‌ی عصبی موجک	

مقدمه.....	۳۴
۳-۱- قوائد تجربی در سیالات آلی چگال.....	۳۴
۳-۱-۱- معادله ی تیت.....	۳۵
۳-۱-۲- معادله ی مارناگان.....	۳۵
۳-۱-۳- فشار برحسب دما برای هم حجم ها.....	۳۶
۳-۱-۴- خط زینو.....	۳۶
۳-۱-۵- قاعده ی هوانگ واکانل.....	۳۶
۳-۱-۶- قاعده ی همدمای خطی (LIR).....	۳۷
۳-۱-۶-الف- تعمیم معادله ی حالت LIR به کتون ها با استفاده از روش سهم گروه ها.....	۳۸
۳-۲- ارائه شبکه ی عصبی موجک برای پیش بینی دانسیته ی هریک از کتون ها.....	۴۲
۳-۲-۱- انتخاب سری داده ها.....	۴۲
۳-۲-۲- انتخاب توصیف کننده ها.....	۴۳
۳-۲-۳- ساخت مدل با استفاده از شبکه ی عصبی.....	۴۵
۳-۳-۴- آگوریتم برنامه ی نوشته شده.....	۴۷
۳-۳-۵- بهینه سازی پارامترهای شبکه ی عصبی موجک برای پیش بینی دانسیته ی هریک از کتون ها.....	۴۹
۳-۳-۵-الف- بهینه سازی پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون های لایه ی مخفی.....	۴۹
۳-۳-۵-ب- بهینه سازی تعداد دورهای آموزش.....	۵۰
۳-۳-۵-ج- ارزیابی شبکه های بهینه شده برای هریک از کتون ها با استفاده از سری های پیش بینی و تائید.....	۵۳

- ۶-۳-۳- ارائه یک شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌ها.....۷۳
- ۶-۳-۳-الف- طراحی و بهینه‌سازی شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی ۲-بوتانول و ۲-پنتانول.....۷۳
- ۶-۳-۳-ب- طراحی و بهینه‌سازی شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی همه‌ی کتون‌ها.....۸۰
- ۶-۳-۳-ج- ارزیابی شبکه‌ی جامع بهینه شده با استفاده از سری‌های پیش‌بینی و تأیید.....۸۲
- ۶-۳-۳-د- ارزیابی شبکه‌ی جامع بهینه شده با استفاده روش Y- تصادفی.....۸۳
- ۷-۳-۳- اثر افزایش تعداد کربن کتون‌ها در ماتریس ورودی.....۹۶
- ۸-۳-۳- معماری شبکه‌ی عصبی موجک جامع نهایی.....۱۱۱
- ۹-۳-۳- مقایسه نتایج حاصل از شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته کتون‌ها با معادله‌ی حالت MLIR..... ۱۱۲

فصل چهارم بحث و نتیجه‌گیری

- ۱-۴- بحث و نتیجه‌گیری.....۱۱۳
- ۲-۴- آینده‌نگری.....۱۱۷
- مراجع.....۱۱۸

فهرست اشکال

صفحه

عنوان

- شکل (۱-۱): ساختار یک نرون زیستی..... ۲
- شکل (۲-۱): ساختمان یک نرون محاسباتی..... ۵
- شکل (۳-۱): ساختار یک شبکه‌ی تک‌لایه..... ۶
- شکل (۴-۱): ساختار یک شبکه‌ی سه‌لایه..... ۷
- شکل (۵-۱): مقایسه‌ی یک موج سینوسی (سمت چپ) با یک موجک (سمت راست)..... ۱۷
- شکل (۶-۱): موجک‌های گوسین همراه با موجک‌های معروف کلاه مکزیکی، مورلت و میر..... ۱۹
- شکل (۷-۱): ساختار عمومی شبکه‌ی عصبی موجک..... ۲۰
- شکل (۱-۳): نمودارهای (الف) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ب) مقادیر سرعت آموزش، (ج) ممتم، (د) MSE سری پیش‌بینی برحسب بردار مرجع..... ۵۱
- شکل (۲-۳): نمودار MSE برحسب بردار تعداد دور آموزش برای دو سری آموزش و پیش‌بینی برای ۲- بوتانون..... ۵۲
- شکل (۳-۳): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۴ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- پروپانون در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۲-۳)..... ۶۷
- شکل (۴-۳): نمودار برگشت سری تائید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۴ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- پروپانون در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۲-۳)..... ۶۷
- شکل (۵-۳): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- بوتانون در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۲-۳)..... ۶۸

شکل (۳-۶): نمودار برگشت سری تائید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- بوتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲)..... ۶۸

شکل (۳-۷): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- پنتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲)..... ۶۹

شکل (۳-۸): نمودار برگشت سری تائید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- پنتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲)..... ۶۹

شکل (۳-۹): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۳- پنتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲)..... ۷۰

شکل (۳-۱۰): نمودار برگشت سری تائید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۳- پنتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲)..... ۷۰

شکل (۳-۱۱): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- هگزانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲)..... ۷۱

شکل (۳-۱۲): نمودار برگشت سری تائید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- هگزانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲)..... ۷۱

شکل (۳-۱۳): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی

بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۴-متیل-۲-پنتانول در

محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).....۷۲

شکل (۳-۱۴): نمودار برگشت سری تأیید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه

شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۴-متیل-۲-پنتانول در محدوده‌ی

وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).....۷۲

شکل (۳-۱۵): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی

بهینه شده برحسب مقادیر تجربی برای ۲-بوتانول و ۲-پنتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و

فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).....۷۹

شکل (۳-۱۶): نمودار برگشت سری تأیید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه

شده برحسب مقادیر تجربی برای ۲-بوتانول و ۲-پنتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار

موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).....۷۹

شکل (۳-۱۷): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده هم‌زمان توسط

شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای همه‌ی کتون‌ها

در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).....۹۵

شکل (۳-۱۸): نمودار برگشت سری تأیید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده هم‌زمان توسط

شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای همه‌ی کتون‌ها

در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).....۹۵

شکل (۳-۱۹): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده هم‌زمان توسط

شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای همه‌ی کتون‌ها در

محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).....۱۰۹

شکل (۳-۲۰): نمودار برگشت سری تأیید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده هم‌زمان توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای همه‌ی کتون‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲)..... ۱۰۹

شکل (۳-۲۱): نمودار مقایسه‌ی متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده با شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف‌کننده برحسب شماره‌ی ترکیب مربوط به سری الف) پیش‌بینی ب) تأیید. شماره‌ی ترکیب در سمت راست نمودار درج شده است..... ۱۱۰

شکل (۳-۲۲): ساختار شبکه‌ی عصبی موجک جامع نهایی..... ۱۱۱

فهرست جداول

صفحه

عنوان

جدول (۱-۲): متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال روش جوباک، گانی و الیوت.....	۲۹
جدول (۲-۲): مقایسه‌ای بین NNGC و مدل‌های قبلی برای پیش‌بینی دمای نقطه‌ی اشتعال.....	۳۲
جدول (۱-۳): مقایسه‌ی مقدار ضریب همبستگی (R^2) و متوسط خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته با استفاده از LIR و MLIR برای همدماهای معینی از کتون‌ها در محدوده‌ی فشار، ΔP ، داده شده.	۴۰
جدول (۲-۳): تعداد کربن، محدوده‌ی دما و فشار و تعداد الگوهای آموزشی، پیش‌بینی و تأیید شبکه برای کتون‌های مورد استفاده در پیش‌بینی دانسیته.....	۴۳
جدول (۳-۳): تعداد ورودی‌ها و نوع توصیف‌کننده‌ها بر مبنای سهم گروه برای هر ترکیب.....	۴۴
جدول (۴-۳): مقدار پارامترهای شبکه‌های عصبی موجک بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی هریک از کتون‌ها.....	۵۲
جدول (۵-۳): متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی در محدوده‌ی دما (ΔT) و فشار داده شده (ΔP) مربوط به سری پیش‌بینی و تأیید.....	۵۴
جدول (۶-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۴ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته سری پیش‌بینی برای ۲-پروپانول.....	۵۵
جدول (۷-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۴ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته سری تأیید برای ۲-پروپانول.....	۵۶
جدول (۸-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری پیش‌بینی برای ۲-بوتانول.....	۵۷

- جدول (۳-۹): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی
 دانسیته سری تأیید برای ۲-بوتانون..... ۵۸
- جدول (۳-۱۰): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی
 دانسیته سری پیش‌بینی برای ۲-پنتانون..... ۵۹
- جدول (۳-۱۱): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی
 دانسیته سری تأیید برای ۲-پنتانون..... ۶۰
- جدول (۳-۱۲): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی
 دانسیته سری پیش‌بینی برای ۳-پنتانون..... ۶۱
- جدول (۳-۱۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی
 دانسیته سری تأیید برای ۳-پنتانون..... ۶۲
- جدول (۳-۱۴): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی
 دانسیته سری پیش‌بینی برای ۲-هگزانون..... ۶۳
- جدول (۳-۱۵): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی
 دانسیته سری تأیید برای ۲-هگزانون..... ۶۴
- جدول (۳-۱۶): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی
 دانسیته سری پیش‌بینی برای ۴-متیل ۲-پنتانون..... ۶۵
- جدول (۳-۱۷): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی
 دانسیته سری تأیید برای ۴-متیل ۲-پنتانون..... ۶۶
- جدول (۳-۱۸): مقدار پارامترهای شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده با استفاده از ۵
 توصیف‌کننده برای پیش‌بینی هم‌زمان ۲-بوتانون و ۲-پنتانون..... ۷۴

جدول (۱۹-۳): متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی در محدوده‌ی دما (ΔT) و فشار داده شده (ΔP) با استفاده از مقادیر بهینه شده برای سری پیش‌بینی و تأیید..... ۷۴

جدول (۲۰-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته سری پیش‌بینی برای ۲-بوتانول و ۲-پنتانول..... ۷۵

جدول (۲۱-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته سری تأیید برای ۲-بوتانول و ۲-پنتانول..... ۷۷

جدول (۲۲-۳): توصیف‌کننده‌های مورد استفاده در طراحی شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی جدول (۲-۳)..... ۸۱

جدول (۲۳-۳): مقدار پارامترهای شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی تمام کتون‌های موجود در جدول (۲-۳)..... ۸۲

جدول (۲۴-۳): متوسط درصد خطای نسبی و MSE در پیش‌بینی دانسیته‌ی هم‌زمان کتون‌ها در محدوده‌ی دما (ΔT) و فشار داده شده (ΔP) برای شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده برای سری پیش‌بینی و تأیید..... ۸۳

جدول (۲۵-۳): ضریب همبستگی به‌دست آمده با استفاده از روش Y-تصادفی برای سری پیش‌بینی و تأیید شبکه عصبی موجک جامع با ۶ توصیف‌کننده..... ۸۴

جدول (۲۶-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته سری پیش‌بینی برای تمام کتون‌های موجود در جدول (۲-۳)..... ۸۵

جدول (۲۷-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته سری تأیید برای تمام کتون‌های موجود در جدول (۲-۳)..... ۹۰

جدول (۳-۲۸): مقدار پارامترهای شبکه عصبی موجک بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف کننده
 برای پیش بینی همزمان دانسیته ی تمام کتون های مورد بررسی در جدول (۳-۲).....۹۶
 جدول (۳-۲۹): متوسط درصد خطای نسبی در پیش بینی همزمان دانسیته ی تمام کتون ها با
 ۷ توصیف کننده برای سری پیش بینی و تائید.....۹۸
 جدول (۳-۳۰): مقایسه ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف کننده با مقادیر تجربی
 دانسیته سری پیش بینی برای تمام کتون های موجود در جدول (۳-۲).....۹۹
 جدول (۳-۳۱): مقایسه ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف کننده با مقادیر تجربی
 دانسیته سری تائید برای تمام کتون های موجود در جدول (۳-۲).....۱۰۴
 جدول (۳-۳۲): مقایسه ی نتایج حاصل از سری تائید شبکه ی عصبی موجک جامع با ۶ توصیف
 کننده برای پیش بینی دانسیته کتون ها با معادله ی حالت MLIR.....۱۱۲

چکیده

در این پایان نامه، از مدل شبکه ی عصبی موجک (WNN) برای پیش بینی دانسیته ی کتون ها در

محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار استفاده شده است. در ابتدا مدل شبکه‌ی عصبی موجک با دو متغیر دما، فشار و توصیف کننده‌هایی بر مبنای روش سهم گروه شامل تعداد گروه‌های متیل، متیلن، متین و گروه عاملی کربونیل برای هریک از کتون‌ها طراحی گردید. سپس جهت به کارگیری شبکه‌ی عصبی موجک برنامه‌ای رایانه‌ای در محیط برنامه‌نویسی MATLAB نوشته شد. با آموزش هریک از شبکه‌ها پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش، تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی و تعداد دور آموزش به صورت هم‌زمان بهینه‌سازی گردید. کارایی شبکه‌های بهینه‌شده با ترسیم نمودار مقادیر تجربی دانسیته در مقابل مقادیر به دست آمده از آن‌ها برای دو سری پیش‌بینی و تائید مورد ارزیابی قرار گرفت. نتایج حاصل از این نمودارها کارایی مطلوب شبکه را تائید می‌کند. در پیش‌بینی دانسیته این شبکه‌ها متوسط درصد خطای نسبی کمتر از $1/3\%$ می‌باشد. در مرحله‌ی بعد برای ایجاد یک شبکه‌ی عصبی جامع ابتدا طبق روش فوق شبکه‌ای برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی دو ترکیب ۲-بوتانول و ۲-پنتانول طراحی و بهینه‌سازی گردید که در این مورد نیز نتیجه‌ی مطلوبی به دست آمد. به طوری که متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته برای این ترکیبات کمتر از $0/60\%$ می‌باشد. پس از به دست آوردن نتایج مطلوب با استفاده از مدل بهینه‌شده، شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی همه‌ی کتون‌ها با ۶ توصیف‌کننده شامل دما، فشار و تعداد گروه متیل، متیلن، متین و گروه عاملی کربونیل طراحی و بهینه گردید که متوسط درصد خطای نسبی این شبکه برای پیش‌بینی دانسیته‌ی همه‌ی کتون‌ها کمتر از $1/05\%$ و ماکزیمم درصد خطای نسبی کمتر از $1/95\%$ می‌باشد. به علاوه، کارایی مدل بهینه‌شده با ترسیم نمودار مقادیر تجربی بر حسب مقادیر به دست آمده از مدل برای دو سری پیش‌بینی و تائید ارزیابی گردید که ضریب همبستگی بیشتر از $0/99$ نشان دهنده‌ی کارایی مطلوب مدل بهینه‌شده می‌باشد.

کلید واژه‌ها: شبکه‌ی عصبی موجک، دانسیته، سهم گروه

مقدمه

پیاده‌سازی ویژگی‌های شگفت‌انگیز مغز انسان در یک سیستم مصنوعی از دیرباز وسوسه‌انگیز و مورد توجه بوده است. همین انگیزه باعث شده است تا دانشمندان با الهام از ساختار مغز انسان ایده‌ی شبکه‌های عصبی مصنوعی^۱ (ANN) را به‌صورت یک مدل بسیار ساده که فقط می‌تواند بخشی از عملکرد مغز را شبیه‌سازی کند، ارائه نمایند [۱].

یادگیری در شبکه‌های عصبی مصنوعی مثل مغز بصورت تطبیقی است و از طریق مثال انجام می‌شود، بدین معنی که اغلب (نه همواره) مجموعه‌ای از ورودی و خروجی‌های درست به شبکه داده می‌شود. سپس شبکه با استفاده از این مثال‌ها، وزن ارتباطات (متغیرهای) خود را به گونه‌ای تغییر می‌دهد که در صورت دادن ورودی‌های جدید بتواند پاسخ‌های درستی را تولید کند به همین خاطر به این سیستم‌ها هوشمند گفته می‌شود زیرا شبکه‌ها بر اساس محاسبات روی داده‌های عددی یا مثال‌ها، قوانین کلی را فرا می‌گیرند [۲].

امروزه از شبکه‌های عصبی در زمینه‌های مختلف علمی از جمله شیمی استفاده می‌شود. مانند پیش‌بینی گرانیوز گازها در محدوده‌ی وسیع دما و فشار [۳] و پیش‌بینی خصوصیات آشکارساز یونیزاسیون شعله [۴] و ...

۱-۱- انسان و سلول‌های عصبی مصنوعی، در جستجوی شباهت‌ها

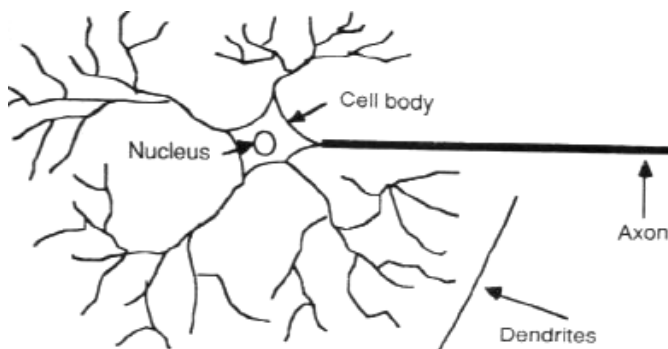
۱-۱-۱- مغز انسان چگونه می‌آموزد؟

تحقیق درباره‌ی سلول‌های مغزی انسان‌ها و همچنین شناخت نرون^۲‌ها یا رشته‌های مغزی و بیان یک راه نسبتاً متفاوت که یک سیستم هوشمند را بنا می‌کند هنوز ادامه دارد. با بررسی روی مغز انسان مشخص شده است که مغز انسان متشکل از میلیون‌ها نرون عصبی منحصر به فرد است

^۱-Artificial neural networks

^۲-Neuron

که دارای شکل و اندازه‌های مختلف می‌باشند. نرون کوچکترین واحد مستقل پردازش اطلاعات است که متشکل از دندریت^۱، بدنه‌ی سلول (سوما)^۲ و اکسون^۳ می‌باشد. در شکل (۱-۱)، ساختار یک نرون زیستی را مشاهده می‌کنید.



شکل (۱-۱): ساختار یک نرون زیستی

دندریت‌ها که ساختاری درخت‌گونه دارند، شبکه‌هایی تشکیل یافته از فیبرهای سلولی هستند که دارای سطح نامنظم بوده و پس از دریافت اطلاعات به شکل سیگنال آن را به هسته‌ی سلول که در بدنه‌ی سلول قرار دارد، هدایت می‌کنند.

بدنه‌ی سلول ضمن فراهم کردن انرژی لازم برای فعالیت نرون، بر روی سیگنال‌های دریافتی عملیات لازم را انجام داده که این عملیات شبیه یک عمل جمع ساده از کل سیگنال‌ها و مقایسه با یک سطح آستانه^۴ می‌باشد. اکسون که برخلاف دندریت‌ها از سطحی هموارتر و تعداد شاخه‌های کمتری برخوردار می‌باشد، سیگنال‌های الکتروشیمیایی دریافتی از هسته سلول را به نرون‌های دیگر منتقل می‌کند. محل تلاقی یک اکسون از یک سلول به دندریت‌های سلول‌های دیگر را سیناپس^۵ می‌گویند. توسط سیناپس‌ها ارتباطات مابین نرون‌ها برقرار می‌شود. به فضای مابین

۱-Dendrite
۲-Soma
۳-Axon
۴-Threshold
۵-Synapse

دندریته‌ها و اکسون فضای سیناپسی می‌گویند. در حقیقت دندریته‌ها به عنوان ورودی نرون، اکسون به عنوان خروجی آن و فضای سیناپسی محل اتصال اکسون یک نرون و دندریته نرون دیگر می‌باشد، زمانی که سیگنال عصبی از اکسون به نرون‌های بعدی یا عناصر دیگر بدن مثل ماهیچه‌ها می‌رسد، باعث تحریک آن‌ها می‌شود [۵].

نرون‌ها از هریک از اتصالات ورودی خود یک ولتاژ کم دریافت می‌کنند و آن‌ها را با هم جمع می‌زنند که اگر این حاصل جمع به یک مقدار آستانه رسید اصطلاحاً نرون آتش می‌کند. اکنون این نرون روی اکسون خود یک ولتاژ خروجی ارسال می‌نماید که این ولتاژ به دندریته‌هایی که به این اکسون متصلند می‌رسند و باعث یکسری فعل و انفعالات شیمیایی در اتصالات سیناپسی شده و در نهایت باعث تحریک نرون‌های دیگر می‌شود. یعنی زمانی که شدت اتصال یک سلول عصبی به سلول دیگر در محل سیناپس‌ها تغییر کند، یادگیری انجام می‌شود.

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

شبکه‌ی عصبی مصنوعی دارای یک پیکربندی ریاضی بر اساس تقلید بسیار ساده از سیستم شبکه عصبی بیولوژیک بوده و دارای یک لایه‌ی ورودی یک یا چندین لایه‌ی میانی و یک لایه‌ی خروجی است. اجزاء اصلی شبکه‌های عصبی مانند مغز انسان بر اساس دو جزء اصلی نرون‌ها و سیناپس‌ها می‌باشند [۶]. بنابراین شبکه‌های عصبی برنامه‌های نرم‌افزاری هستند که می‌توانند همانند مغز انسان عمل نمایند به گونه‌ای که:

الف- به مرور زمان و تعامل بیشتر با محیط کارآزموده‌تر گردد.

ب- علاوه بر انجام محاسبات قادر به نتیجه‌گیری منطقی باشد.

ج- در شرایط جدید راهکار مناسب ارائه دهد.

امروزه شبکه‌های عصبی مصنوعی در کاربردهای مختلفی نظیر مسائل تشخیص الگو، شناسایی گفتار، پردازش تصویر و ... به کار می‌روند. همچنین در کنترل یا مدل‌سازی سیستم‌هایی که ساختار

داخلی ناشناخته یا بسیار پیچیده‌ای دارند نیز به‌صورت روزافزون از شبکه‌های عصبی مصنوعی استفاده می‌شود [۷].

۱-۲- تاریخچه‌ی شبکه‌های عصبی مصنوعی

در سال ۱۹۴۹ اولین مدل شبکه‌های عصبی مصنوعی توسط مک کلوت^۱ و پیتز^۲ مطرح شد که یک مدل خطی ساده بود. سپس در سال ۱۹۵۸ فرانک روزنبلات^۳ شبکه‌ی پرسپترون^۴ که شامل الگوریتم‌های یادگیری بود ارائه نمود. سال ۱۹۶۹ آغاز افول موقت شبکه‌های عصبی بود زیرا عدم توانایی شبکه‌های عصبی در حل مسائل غیرخطی آشکار شد. در سال ۱۹۸۲ هاپفیلد^۵ با معرفی شبکه‌های چندلایه و الگوریتم‌های یادگیری برگشتی^۶، راه حلی را برای حل موارد غیرخطی ارائه نمود [۵و۲]. از آن موقع تا امروز قابلیت‌های بیشتری به شبکه‌های عصبی مصنوعی افزوده شده و پیشرفت‌های مهمی در این زمینه صورت گرفته است به گونه‌ای که شبکه‌ها توانسته‌اند به عنوان یک ابزار علمی قدرتمند در حل مسائل جدید مطرح شوند [۸].

۱-۳- ساختار شبکه‌های عصبی مصنوعی

نرون‌ها کوچکترین واحد پردازش شبکه‌ی عصبی مصنوعی بوده و حکم سلول‌های مغز انسان را دارند. هر شبکه از یک لایه‌ی ورودی و یک لایه‌ی خروجی و یک یا چند لایه‌ی میانی تشکیل شده است. نرون‌های هر لایه به‌وسیله وزن‌هایی که مربوط به ایجاد سیگنال تحریک می‌باشند به نرون‌های لایه‌ی بعدی متصل می‌شوند. طی فرایند آموزش شبکه، این وزن‌ها و مقادیر ثابتی که با

۱-Mc culloch

۲-Pitts

۳-Frank Rosenblat

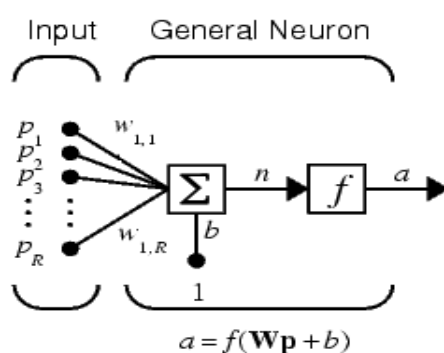
۴-Perceptron

۵-Hopfield

۶-Feedback

آن‌ها جمع می‌شوند و اصطلاحاً بایاس^۱ نامیده می‌شوند به طور پی‌درپی تغییر می‌کنند تا این‌که مجموع مربعات خطا به کمترین مقدار خود برسد.

برای انتقال خروجی‌های هر لایه به لایه‌های بعدی از توابع محرک استفاده می‌شود. از توابع محرک معروف می‌توان توابع سیگموئیدی^۲ و توابع محرک خطی^۳ را نام برد. شکل زیر ساختمان یک نرون محاسباتی را نشان می‌دهد.



شکل (۱-۲): ساختمان یک نرون محاسباتی

در این شکل کمیت‌های $\mathbf{P}$ و a به ترتیب ورودی و خروجی نرون می‌باشد. میزان تاثیر $\mathbf{P}$ روی a بوسیله مقدار کمیت $\mathbf{W}$ (وزن کمیت $\mathbf{P}$) تعیین می‌شود. ورودی دیگر یک مقدار ثابت ۱ است که در جمله بایاس b ضرب شده و سپس با $\mathbf{WP}$ جمع می‌شود. این حاصل جمع، ورودی خالص^۴ n برای تابع محرک F را تشکیل می‌دهد.

$$n = \mathbf{WP} + b = W_{1,1}P_1 + W_{1,2}P_2 + \dots + W_{1,R}P_R + b \quad (1-1)$$

سپس خروجی نرون به کمک معادله‌ی زیر به دست می‌آید:

$$a = F(\mathbf{WP} + b) \quad (2-1)$$

۱-Bias

۲-Log-sigmoid transfer function

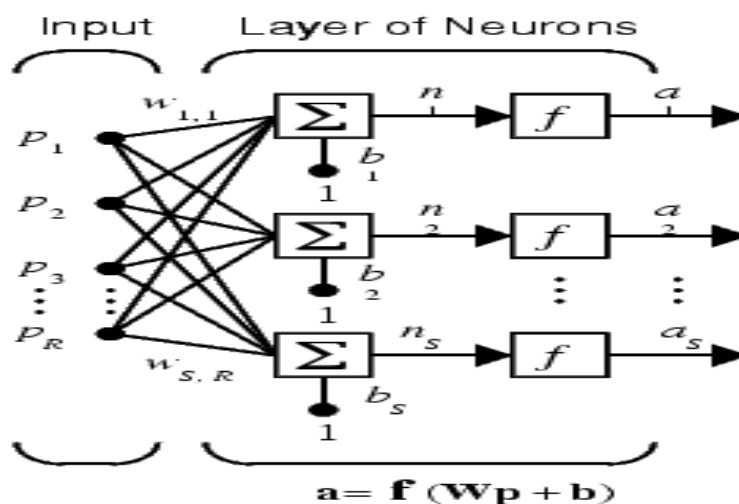
۳-Linear transfer function

4-Net input

باید توجه داشت که پارامترهای b و W قابل تنظیم هستند و تابع محرک F نیز توسط طراح انتخاب می‌شود. مسیری که برای دستیابی وزن‌ها و بایاس‌ها به مقدار مطلوب نهایی انتخاب می‌گردد، قانون یادگیری نام دارد. قانون یادگیری در واقع یک الگوریتم ریاضی پیچیده است [۹].

۴-۱- دسته‌بندی لایه‌ای شبکه‌های عصبی مصنوعی

بر اساس ساختار، شبکه‌های عصبی را به دو دسته تک‌لایه و چندلایه تفکیک می‌کنند. در یک شبکه‌ی تک‌لایه نرون‌های خروجی و ورودی یکی هستند. در نتیجه به تعداد سیگنال‌های خروجی، نرون در شبکه وجود دارد. در شکل (۳-۱) ساختار یک شبکه‌ی تک‌لایه با S نرون و R ورودی نشان داده شده است که در این شکل ورودی به عنوان لایه در نظر گرفته نشده است.



شکل (۳-۱): ساختار یک شبکه‌ی تک‌لایه

هر ورودی در این شکل به‌عنوان یک عضو از بردار ورودی P به تمام نرون‌ها متصل است و به ازای وزن‌های متعلق به آن، یک ستون از ماتریس وزن‌ها را به‌صورت زیر ایجاد می‌کند:

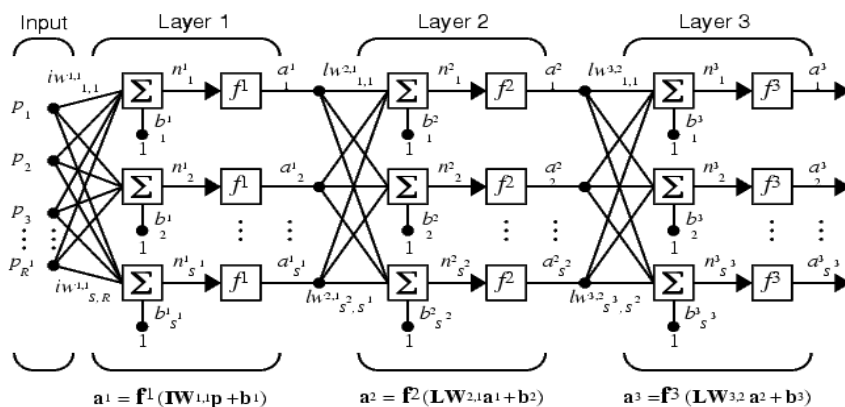
$$\mathbf{W} = \begin{bmatrix} W_{11} & W_{12} & \cdots & W_{1R} \\ W_{21} & W_{22} & \cdots & W_{2R} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ W_{S1} & W_{S2} & & W_{SR} \end{bmatrix}_{S \times R} \quad (3-1)$$

همچنین هر نرون دارای یک بایاس b_i است بنابراین بردار بایاس چنین است:

$$\mathbf{b} = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_s \end{bmatrix}_{s \times 1} \quad (4-1)$$

مقادیر ورودی n و خروجی هر نرون از روابط (۱-۱) و (۲-۱) تعیین می‌شود. ماتریس‌های b ، $\mathbf{W}$ اهمیت زیادی دارند، زیرا در مسائل مختلف، شبکه آن‌ها را تغییر می‌دهد تا مقادیر بهینه به دست آیند. در مواردی که برای دستیابی به عملکرد مطلوب، به درجات آزادی و پارامترهای قابل تنظیم بیشتری نیاز داریم، از شبکه‌های چندلایه استفاده می‌کنیم. در این ساختار خروجی نرون‌های لایه‌ی قبلی به ورودی نرون‌های لایه‌ی بعدی منتقل می‌شود [۱۰].

تعداد نرون‌ها در لایه یا لایه‌های میانی به تعداد ورودی‌ها و خروجی‌های کل شبکه بستگی ندارد، بنابراین پارامترهای قابل تنظیم شبکه بالا می‌رود. بعلاوه، برای لایه‌های مختلف می‌توان توابع تحریک متفاوتی را اختیار نمود و به ساختار مناسبی دست یافت. در شکل (۴-۱) یک شبکه‌ی سه‌لایه نشان داده شده است.



شکل (۴-۱): ساختار یک شبکه‌ی سه‌لایه

در یک شبکه‌ی چندلایه، مطابق شکل، هرلایه، ماتریس وزن، بردار بایاس، بردار ورودی خالص و بردار خروجی مخصوص به‌خود را دارد، که برای مشخص کردن لایه‌های مختلف از بالانویس^۱ استفاده می‌شود. در این شبکه، لایه‌ای که خروجی آن همان خروجی شبکه است لایه‌ی خروجی^۲ نام دارد و سایر لایه‌ها را لایه‌ی مخفی^۳ می‌نامند[۵].

شبکه‌های چندلایه بسیار قدرتمندتر از شبکه‌های تک‌لایه هستند. به تجربه نیز ثابت شده است که خطی بودن در لایه‌ی خروجی باعث می‌شود که شبکه از زمانی که تابع خروجی، سیگموئید باشد، بهتر به جواب برسد زیرا محدوده‌ی خطی بودن تابع خطی از تابع سیگموئید بیشتر است. همچنین با حضور تابع سیگموئید در لایه‌ی آخر، انحراف از محدوده‌ی خطی بودن در دو انتهای تابع مشاهده می‌شود[۱۱].

تعداد ورودی‌ها و خروجی‌های شبکه جزء پارامترهای آزاد کاربر نیستند و بر اساس مسئله خاصی که شبکه قرار است آن را حل کند به‌دست می‌آیند. اما تعداد لایه‌های مخفی، تعداد نرون‌های لایه‌های مخفی و سایر پارامترها (بسته به الگوریتم مورد استفاده) جزء درجات آزادی بوده و باید توسط کاربر بهینه شوند[۵]. با توجه به افزایش تعداد درجات آزادی در شبکه‌های چندلایه نسبت به تک‌لایه، حجم محاسبات و زمان آموزش افزایش می‌یابد. از این‌رو باید شبکه را تا حد امکان کوچک انتخاب کرد تا از کاهش تأثیر ورودی‌ها روی خروجی در اثر عبور از لایه‌های مختلف اجتناب شود. معمولاً افزایش تعداد لایه‌ها بیش از سه‌لایه نیز مرسوم نمی‌باشد[۱۰].

تعداد نرون‌های هر لایه‌ی مخفی بین نصف تا یک و نیم برابر تعداد ورودی‌های سیستم در نظر گرفته می‌شود. اگر تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی زیاد انتخاب شود شبکه با تغییرات متعدد وزن‌ها و بایاس‌ها می‌کوشد بهترین تطبیق را با داده‌های سری آموزش به‌دست آورد در حالی که این

^۱-Superscript

^۲-Output layer

^۳-Hidden layer

موضوع باعث می‌شود که شبکه نتواند با داده‌های سری پیش‌بینی تطبیق ایجاد نماید و اگر تعداد نرون‌ها کم باشد قدرت تجزیه و تحلیل و دقت کم می‌شود [۹].

۱-۵- معماری^۱ شبکه‌های عصبی مصنوعی

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

۱- شبکه‌های از قبل تغذیه شده (پیش‌خور)^۲

۲- شبکه‌های بازخوردی یا برگشتی^۳ (پس‌خور^۴)

در شبکه‌های پیش‌خور، خروجی هر نرون چه به صورت مستقیم و چه به صورت غیرمستقیم به ورودی همان نرون بر نمی‌گردد. با این الگو ورودی نرون‌های لایه‌ی اول، خروجی را محاسبه کرده و به لایه‌ی دوم می‌فرستند. این عمل در بین لایه‌ها تکرار می‌شود تا جایی که به لایه‌ی خروجی برسد و خروجی کل شبکه محاسبه شود. بنابراین در این شبکه‌ها جریان اطلاعات همیشه در یک مسیر یک طرفه و از ورودی به خروجی می‌باشد و به همین دلیل هم به آن پیش‌خور می‌گویند [۲].

در شبکه‌های پس‌خور یا برگشتی، حداقل یک سیگنال برگشتی از یک نرون به همان نرون یا نرون‌های همان لایه یا لایه‌ی قبلی وجود دارد [۵]. بنابراین آن‌ها با استفاده از حلقه‌های برگشتی، سیگنال‌هایی دارند که در هر دو مسیر از ورودی به خروجی و بالعکس حرکت می‌کنند. شبکه‌های پس‌خور، پویا هستند و وضعیت آن‌ها پیوسته در حال تغییر است تا به یک نقطه‌ی تعادل برسند. این وضعیت تعادل تا زمان دریافت ورودی جدید باقی می‌ماند [۲]. این شبکه‌ها بهتر از شبکه‌های پیش‌خور می‌توانند ویژگی‌های زمانی سیستم‌ها را نشان دهند [۵].

۱-Topology

۲-Feed forward

۳-Feed back

۴-Recurrent

۱-۶- فرایند یادگیری شبکه‌های عصبی به عنوان سیستم‌های

آموزش‌پذیر

شبکه‌های عصبی مصنوعی که از روی مغز انسان الگوبرداری شده‌اند می‌توانند آموزش ببینند و یاد بگیرند. به‌طور کلی دو نوع یادگیری برای شبکه‌ها وجود دارد:

۱- یادگیری با ناظر^۱

۲- یادگیری بدون ناظر^۲

در یادگیری با ناظر در هر مرحله از تکرار الگوریتم یادگیری، جواب واقعی سیستم یادگیرنده وجود دارد. لذا الگوریتم یادگیری به تفاوت بین مقدار واقعی و مقدار پیش‌بینی شده (که خطای یادگیری نام دارد) دسترسی دارد. در بیشتر شبکه‌ها از این نوع یادگیری استفاده می‌شود. در یادگیری بدون ناظر جواب واقعی برای سیستم یادگیرنده موجود نیست. به این ترتیب که شبکه می‌آموزد که الگوهای ورودی را به تعداد مساوی تقسیم‌بندی کند. بعد ارتباطات موجود بین آن‌ها را پیدا کرده و در خروجی شبکه کد نماید. در این حالت فرد کاربر، طراح است و هدف نهایی را مشخص می‌کند [۵].

رفتار سیستم‌های یادگیر توسط قوانین یادگیری بیان می‌شود. یکی از این قوانین، یادگیری عملکردی^۳ است که در این نوع یادگیری، پارامترهای شبکه (وزن‌ها و بایاس‌ها) طوری تنظیم می‌شوند که عملکرد بهینه شود. یادگیری عملکردی یک یادگیری با ناظر است زیرا جواب واقعی برای نمونه‌های مورد بررسی سیستم یادگیرنده وجود دارد و خطایی که بین مقادیر تجربی و پاسخ شبکه وجود دارد به حداقل می‌رسد [۵].

برای بهینه‌سازی عملکرد نیز، باید دو قدم اساسی برداشته شود:

۱-Supervised learning

۲-UnSupervised learning

۳-Performance learning

۱- ابتدا باید به زبان ریاضی مسئله‌ی عملکرد را بیان کنیم. برای این منظور باید معیاری که به طور کمی، عملکرد شبکه را بیان می‌کند و به آن شاخص عملکرد^۱ می‌گویند پیدا کنیم. شاخص عملکرد با نحوه‌ی عملکرد شبکه رابطه عکس دارد یعنی هر چه عملکرد شبکه بهتر باشد، مقدار شاخص عملکرد کوچکتر خواهد بود و بالعکس. شاخص عملکرد در بیشتر الگوریتم‌ها، متوسط مربعات خطا^۲ (MSE) است که به آن اصطلاحاً تابع هدف یا تابع خطا می‌گویند.

۲- قدم دوم، تنظیم پارامترهای شبکه برای کاهش مقدار شاخص عملکرد می‌باشد [۵].

۷-۱- معرفی روشهای مختلف بهینه‌سازی عملکرد شبکه‌های عصبی

الگوریتم‌های مختلف بهینه‌سازی عملکرد در آموزش شبکه‌ها تقریباً همگی دوری^۳ هستند یعنی یک مقدار اولیه برای تابع حدس زده می‌شود. سپس این مقدار اولیه طی مراحل که از قاعده زیر پیروی می‌کند، بهینه می‌شود:

$$X_{K+1} = X_K + \alpha P_K \quad (۵-۱)$$

که در آن X_K حدس نقطه‌ی مینیمم تابع در مرحله Kام است و X_{K+1} حدس مرحله‌ی بعدی نقطه‌ی مینیمم تابع می‌باشد. P_K مسیر جستجو یا همان بردار مسیر است بدین معنی که از روی آن حدس مرحله‌ی بعد، X_{K+1} به دست می‌آید و α سرعت یادگیری^۴ نامیده می‌شود و مقدار آن بین صفر و یک می‌باشد. سرعت یادگیری کم و زیاد بودن تغییرات پارامترهای شبکه در هر دور را معین می‌کند. روش‌های مختلف بهینه‌سازی که در ادامه می‌آیند در نحوه‌ی انتخاب مسیر جستجو و سرعت یادگیری با هم تفاوت دارند.

۱-Performance

۲-Mean square error

۳-Iterative

۴-Learning rate

۱-۷-۱- روش نزول گرادیانی¹

الگوریتم نزول گرادیانی یا الگوریتم سریع‌ترین نزول² یکی از تکنیک‌های ابتدایی و کاملاً موثر در آموزش شبکه می‌باشد. گرادیان یک تابع n متغیره مثل $F(x)$ یک بردار n بعدی است که به شکل کلی (۶-۱) بیان می‌شود:

$$F(x) = F(x_1, x_2, \dots, x_n) \quad (۶-۱)$$

$$\nabla F(x) = \left[\frac{\partial}{\partial x_1} F(x) \quad \frac{\partial}{\partial x_2} F(x) \cdots \frac{\partial}{\partial x_n} F(x) \right]_{n \times 1}^T \quad (۷-۱)$$

بالانویس T علامت ترانسپوز³ می‌باشد که باعث جابجایی سطرها و ستون‌های هر ماتریس می‌گردد. گرادیان تابع خاصیت جالبی دارد. برای استفاده از این خاصیت، ابتدا یک تابع عملکرد E برحسب پارامترهای شبکه که به آن اصطلاحاً تابع خطا گفته می‌شود، انتخاب می‌کنند. این تابع بیانگر خطای بین مقادیر واقعی و پاسخ شبکه می‌باشد. تابع انتخاب شده بایستی نسبت به تک تک پارامترهای شبکه مشتق‌پذیر باشد. در این صورت گرادیان تابع خطا در هر نقطه از فضای پارامترها قابل محاسبه خواهد شد:

$$g_K^T = \nabla E(W)^T \Big|_{W=W_K} = \left[\frac{\partial}{\partial W_1} E(W) \quad \frac{\partial}{\partial W_2} E(W) \cdots \frac{\partial}{\partial W_n} E(W) \right]_{n \times 1}^T \Big|_{W=W_K} \quad (۸-۱)$$

که در آن W برداری است که مولفه‌هایش پارامترهای شبکه هستند. از طرف دیگر تابع خطا هنگام اصلاح شدن مقدار حدس اولیه با استفاده از رابطه‌ی (۵-۱) باید در هر دور کاهش یابد، یعنی:

$$E(W_{K+1}) < E(W_K) \quad (۹-۱)$$

بسط سری تیلور مرتبه‌ی اول تابع $E(W)$ حول حدس قبلی یعنی W_K چنین است:

$$E(W_{K+1}) = E(W_K) + \nabla E(W)^T \Big|_{W=W_K} \Delta W_K \quad (۱۰-۱)$$

1-Gradient descent algorithm

2-Steepest descent algorithm

۳-Transpose

برای این که $E(W_{K+1})$ کوچکتر از $E(W_K)$ شود باید جمله‌ی دوم سمت راست عبارت (۱۰-۱) منفی باشد:

$$\nabla E(W)^T \Big|_{W=W_K} \Delta W_K = g_K^T \Delta W_K < 0 \quad (11-1)$$

اگر رابطه‌ی (۱۱-۱) را به صورت جدید بازآرایی کنیم:

$$W_{K+1} = W_K + \alpha P_K \Rightarrow \Delta W_K = \alpha P_K \quad (12-1)$$

با جایگذاری رابطه‌ی (۱۲-۱) در (۱۱-۱) به دست می‌آید:

$$\nabla E(W)^T \Big|_{W=W_K} \Delta W_K = \alpha g_K^T P_K < 0 \quad (13-1)$$

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

$$g_K^T P_K < 0 \quad (14-1)$$

هر بردار P_K که در این معادله صدق کند، مسیر نزول^۱ نام دارد و مقدار تابع با حرکت در این مسیر کاهش می‌یابد. مسیری که $g_K^T P_K$ مربوط به آن منفی تر از بقیه باشد باعث بیشترین نزول در مقدار تابع می‌شود.

عبارت فوق وقتی مقدارش حداقل است که بردار مسیر و بردار گرادیان تابع در جهت عکس یکدیگر باشند زیرا عبارت (۱۴-۱) حاصل ضرب درونی دو بردار می‌باشد. بنابراین برداری که مسیر سریع‌ترین نزول را نشان می‌دهد، چنین است:

$$P_K = -g_K \quad (15-1)$$

طبق رابطه‌ی (۱۵-۱) در هر نقطه از فضای پارامترها، اگر در جهت گرادیان محلی حرکت کنیم مقدار تابع به سرعت افزایش می‌یابد و بر عکس اگر در خلاف جهت گرادیان تابع حرکت کنیم مقدار تابع با همان سرعت کاهش می‌یابد. در نتیجه رابطه‌ی (۱۵-۱) به گونه‌ای پارامترهای شبکه را تغییر می‌دهد که باعث مینیمم شدن تابع خطا می‌گردد [۱۰].

با جایگذاری رابطه‌ی (۱۵-۱) در رابطه‌ی (۱۲-۱) به دست می‌آید:

^۱-Descent direction

$$W_{K+1} = W_K - \alpha g_K = W_K - \alpha \nabla E(W) \Big|_{W=W_K} \quad (16-1)$$

در این الگوریتم سرعت یادگیری α نقش حیاتی دارد. انتخاب مقادیر بزرگ α با وجود آموزش سریع شبکه و اتلاف زمان کمتر، در خیلی از موارد باعث ناپایداری آموزش شبکه شده و نتایج مناسبی حاصل نمی‌گردد. از طرف دیگر انتخاب مقادیر کوچک α باعث افزایش مدت زمان آموزش می‌شود اما مسیر تغییرات تابع هموارتر خواهد بود. از این رو یک انتخاب مناسب برای ضریب یادگیری، اختیار مقادیر بزرگ در ابتدای آموزش می‌باشد که مقدار خطا زیاد است. پس از کاهش یافتن خطا، برای حفظ همگرایی آموزش شبکه، باید مقادیر کوچکی برای α انتخاب نمود [10].

راه دیگر برای اینکه α بزرگ باشد و ناپایداری هم رخ ندهد استفاده از روش نزول گرادیانی با ترم ممتم است، به این معنی که ضریبی از وزن‌های مرحله‌ی قبل به مرحله‌ی فعلی اضافه می‌شود:

$$\Delta W_k^{new} = -\alpha \nabla E(W) \Big|_{W=W_k} + \eta \Delta W_k^{old} \quad (17-1)$$

که ضریب η ، ممتم است. طبق این رابطه در دور $(k+1)$ ام، به جای $\Delta W_k = -\alpha \nabla E(W) \Big|_{W=W_k}$ در رابطه‌ی (17-1)، ΔW_k^{new} به عنوان تغییر وزن‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد [5].

۱-۷-۲- الگوریتم پس انتشار خطا¹

روش پس انتشار خطا در اصل یک الگوریتم سریع‌ترین نزول با شاخص عملکرد متوسط مربعات خطا (MSE) است که برای آموزش شبکه‌های چندلایه با تابع محرک غیرخطی به کار می‌رود. انتشار به عقب بدین معنی است که در ابتدا وزن‌های شبکه به صورت تصادفی انتخاب شده و همراه ورودی‌ها به شبکه‌ی چندلایه وارد می‌شود و سپس خروجی شبکه محاسبه می‌گردد. پس از

¹-Error back propagation algorithm

مشخص شدن خروجی شبکه و شاخص عملکرد برای کم شدن خطای شبکه، ابتدا وزن‌های لایه‌ی آخر تصحیح شده و بعد به ترتیب اوزان لایه‌های قبلی تصحیح می‌شوند.

به طور کلی تعداد زیادی چرخه برای آموزش یک شبکه عصبی انتشار به عقب لازم است و معمولاً چرخه‌ی آموزش تا زمانی که میانگین کل خطا به یک مقدار مطلوب یا صفر برسد ادامه می‌یابد. در برخی مواقع نیز خطای میانگین طی چند دوره تغییر نمی‌کند که در این صورت یادگیری شبکه عصبی پایان رسیده است [۱۲].

۸-۱- شیوه‌های نوین آموزش شبکه

نقص‌ها و محدودیت‌هایی که برای دو روش قبل ذکر شد، در شیوه‌های نوین آموزش تا حدود زیادی برطرف شده است. از معروفترین این روش‌ها، روش نیوتن است که اساس کار روش تک مرحله‌ای سکانت^۱ (OSS)، روش لوبنبرگ مارکوارت^۲ (LM) و گرادیان مزدوج^۳ (CG) می‌باشد. در این روش‌ها از بسط تیلور مرتبه‌ی دوم تابع عملکرد استفاده می‌شود [۱۳].

۹-۱- شبکه عصبی موجک^۴

در سال‌های اخیر ایده‌ی تلفیق موجک با شبکه‌های عصبی باعث ایجاد دسته جدیدی از شبکه‌های عصبی مصنوعی به نام شبکه‌ی عصبی موجک گردیده است [۱۴]. شبکه‌های عصبی موجک اولین بار در سال ۱۹۸۸ توسط دوگمان^۵ مورد استفاده قرار گرفت [۱۵].

این شبکه‌ها می‌توانند در مدت زمان کمتری مدل غیرخطی حاکم بر سیستم را به واسطه همگرایی سریع‌تر، به طور مطلوب ارائه دهند. از دیگر مزایای شبکه‌ی عصبی موجک جلوگیری از

۱-One Step Secant(OSS)

۲-Levenberg-Marquardt(LM)

۳-Conjugate gradient(CG)

۴-Wavelent neural network(WNN)

۵-Dougman

مینیمم محلی و سهولت تنظیم ساختار می باشد که به واسطه همین مزیت ها به طور خاصی مورد توجه قرار گرفته اند [۱۶]. در ابتدا توضیح مختصری درباره ی موجک و تبدیل موجک داده می شود و سپس الگوریتم شبکه ی عصبی موجک شرح داده می شود.

۱-۹-۱- موج، موجک و تبدیل موجک

موج به تابعی نوسان کننده نسبت به زمان یا مکان گفته می شود. تابع (۱-۱۷) یک موج سینوسی است که با دامنه A و فرکانس ν نسبت به زمان نوسان می کند.

$$y = A \sin(2\pi \nu t + \phi) \quad (17-1)$$

در صورتی که دو یا چند موج سینوسی با دامنه و فرکانس های مختلف در یک فضا حرکت کنند، مقدار جابجایی کل برابر مجموع جابجایی های حاصل از تک تک امواج است که به آن برهم نهش امواج^۱ می گویند و عبارت ریاضی آن به صورت زیر است:

$$y = \sum_i A_i \sin(2\pi \nu_i t + \phi) \quad (18-1)$$

مهم ترین ویژگی برهم نهش این است که محاسبات فوق می تواند با یک روش ریاضی به نام تبدیل فوریه^۲ معکوس شود به این صورت که، امواج پیچیده را می توان به صورت مجموعه ای از توابع سینوسی با فرکانس های مختلف شکست [۱۷].

از نظر ریاضی فرایند آنالیز فوریه توسط تبدیل فوریه نشان داده می شود:

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} F(t) e^{-j\omega t} dt \quad (19-1)$$

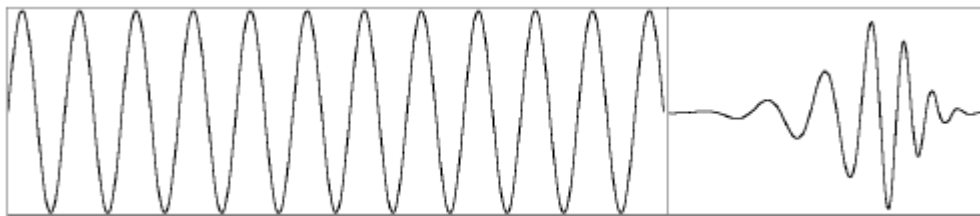
که در این رابطه $F(t)$ جمع روی حاصل ضرب سیگنال اصلی در تابع نمایی در همه ی زمان ها می باشد. نتیجه ی تبدیل فوریه، همان ضرایب، فوریه $F(\omega)$ هستند که وقتی در تابع سینوسی با

^۱-Superposition of waves

^۲-Fourier transform

فرکانس ω ضرب می‌شوند اجزای سینوسی تشکیل دهنده‌ی سیگنال اصلی را نتیجه می‌دهند [۱۸].

موجک، یک موج کوچک با انرژی معین است و به علت تمرکز انرژی در زمان یا مکان در آنالیز پدیده‌های زودگذر، غیر ایستا^۱ و متغیر نسبت به زمان^۲ کارایی ویژه‌ای دارد. همان‌طور که در شکل (۵-۱) می‌بینید یک موج سینوسی، نامتناهی، یکنواخت و قابل پیش‌بینی است در حالی که موجک دارای شکل نامنظم بوده و متناهی است.



شکل (۵-۱): مقایسه یک موج سینوسی (سمت چپ) با یک موجک (سمت راست)

اگر $\psi(t)$ یک موجک مادر^۳ را نشان دهد، توابع موجک مختلف را می‌توان با تغییر موقعیت^۴ و یا تغییر پهنا^۵ با استفاده از تابع $\psi(t)$ به صورت زیر به دست آورد:

$$\psi_{a,b}(t) = \frac{1}{\sqrt{a}} \psi\left(\frac{t-b}{a}\right) \quad (۲۰-۱)$$

که در آن a پارامتر پهنا و b پارامتر موقعیت است که به $\psi(t)$ تابع موجک مادر می‌گویند [۱۸]. به تمام توابع موجکی که براساس رابطه‌ی (۲۰-۱) به دست می‌آیند توابع پایه‌ی موجک^۶ می‌گویند [۱۹].

۱-Non-stationary

۲-Time invariant

۳-Mother wavelet

۴-Translation or shifting(delaying or hastening

۵-Scaling or dilating (stretching or compressing)

۶-Wavelet basis function

مجموعه‌ی ضرایب بسط که وزن توابع پایه‌ی موجک را نشان می‌دهد، تبدیل موجک¹ تابع

موردنظر است [۱۹]. از نظر ریاضی تبدیل موجک تابع $f(t)$ چنین نوشته می‌شود:

$$C(a,b) = \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \psi_{a,b}(t) dt = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(t) \psi\left(\frac{t-b}{a}\right) dt \quad (21-1)$$

که در آن، جمع روی حاصل ضرب سیگنال $f(t)$ در توابع پایه‌ی موجک زده شده است. نتیجه‌ی

تبدیل موجک، ضرایب موجک $C(a,b)$ می‌باشند. حاصل ضرب هر ضریب در موجک مرتبط با آن

ضریب (از نظر پهنا و موقعیت) موجک‌های سازنده سیگنال اصلی را نشان می‌دهد [۱۸].

تبدیل موجک، سیگنال را به موجک‌های آن می‌شکند و تبدیل فوریه، سیگنال را به یک سری

موج‌های سینوسی با فرکانس‌های مختلف می‌شکند. بنابراین این دو تبدیل شبیه یکدیگر می‌باشند.

اما یک نکته جالبی که در مورد تجزیه‌ی موجک وجود دارد این است که توابع پایه‌ی موجک مگر

در یک بازه محدود، صفر هستند در حالی که توابع پایه‌ی سینوسی نامتناهی هستند و به همین

دلیل تبدیل موجک می‌تواند به خوبی سیگنال‌های مستقر را نمایش دهد، کاری که از عهده‌ی تبدیل

فوریه به خوبی بر نمی‌آید [۱۹].

۱-۹-۲- موجک مادر

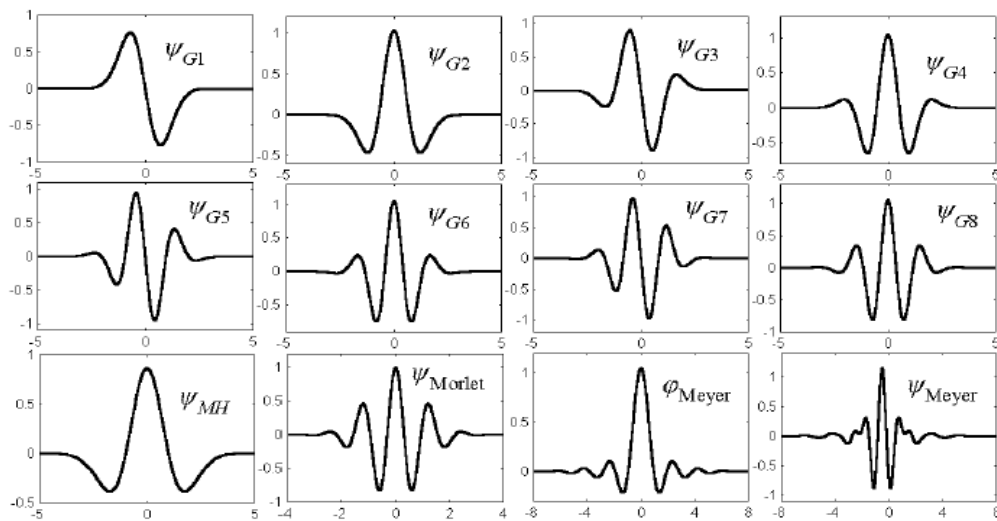
اولین مشتق تابع گوسین را می‌توان به عنوان موجک مادر انتخاب کرد:

$$\psi(x) = \pm x \exp\left(\pm \frac{1}{2} x^2\right) \quad (22-1)$$

مشتقات مرتبه‌ی بالاتر تابع گوسین نیز می‌توانند به عنوان تابع موجک مورد استفاده قرار گیرند. در

شکل (۱-۶) موجک‌های گوسین به دست آمده از مشتقات تابع گوسین نشان داده شده است.

مرتبه‌ی مشتقات گوسین به صورت زیروند همراه با حرف G در نام نمودار آورده شده است [۱۸].



شکل (۱-۶): موجک‌های گوسین همراه با موجک‌های معروف کلاه مکزیکی، مورلت و میئر.

موجک مادر مورد استفاده در این پایان‌نامه، موجک مادر مورلت است که به صورت زیر بیان

می‌شود [۱۸]:

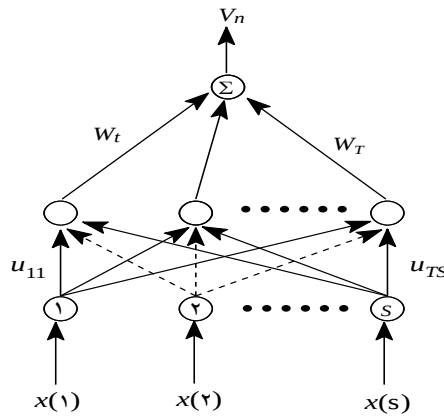
$$h(t) = \cos(1.75t) \exp\left(\frac{-t^2}{2}\right) \quad (۲۳-۱)$$

۱-۹-۳- الگوریتم شبکه‌ی عصبی موجک

شکل (۱-۷) ساختار شبکه‌ی عصبی موجک را نشان می‌دهد که شبیه شبکه‌ی پرسپترون

چندلایه‌ای است. با این تفاوت که مقادیر بایاس مربوط به لایه‌های مخفی و خروجی حذف

شده‌اند. همچنین از تابع محرک موجک به جای تابع محرک سیگموئید استفاده شده است.



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

مراحل طراحی و ساخت مدل به صورت زیر می باشد:

۱- پارامترهای a_t, b_t که به ترتیب پارامترهای پهنای و موقعیت هستند و همچنین وزن های شبکه،

شامل w_t, u_{ti} به صورت تصادفی از اعداد بین صفر تا یک انتخاب می شوند.

۲- ورودی های $x_n(i)$ و خروجی های مربوط به آنها V_n^T برای تمام نمونه های سری آموزش به

شبکه وارد می شوند. i می تواند از ۱ تا s تغییر کند که s نشان دهنده تعداد نرون های ورودی

است. n نیز نشان دهنده n امین نمونه از سری آموزش است و T برای نشان دادن پاسخ واقعی

به کار می رود.

۳- خروجی n امین نمونه سری آموزش به صورت زیر محاسبه می شود [۲۰].

$$V_n = \sum_{t=1}^T W_t h \left[\frac{\sum_{i=1}^s u_n x_n(i) - b_t}{a_t} \right] \quad (24-1)$$

در این معادله، h تابع موجک مورلت معادله (۲۳-۱) می باشد.

۴- تابع خطای شبکه به صورت زیر محاسبه می گردد:

$$E = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N (V_n^T - V_n)^2 \quad (25-1)$$

۵- برای کاهش خطای شبکه از روش نزول گرادیانی همراه با جمله‌ی ممتم استفاده می‌شود. بر این اساس پارامترهای شبکه b_t, a_t, u_{ti}, w_t باید به‌صورت زیر تغییر کند تا در هر دور آموزش، تابع خطا کاهش یابد.

$$\Delta W_t^{new} = -\eta \frac{\partial E}{\partial W_t^{old}} + \alpha \Delta W_t^{old} \quad (26-1)$$

$$\Delta u_{ti}^{new} = -\eta \frac{\partial E}{\partial u_{ti}^{old}} + \alpha \Delta u_{ti}^{old} \quad (27-1)$$

$$\Delta a_t^{new} = -\eta \frac{\partial E}{\partial a_t^{old}} + \alpha \Delta a_t^{old} \quad (28-1)$$

$$\Delta b_t^{new} = -\eta \frac{\partial E}{\partial b_t^{old}} + \alpha \Delta b_t^{old} \quad (29-1)$$

که در معادلات فوق η سرعت یادگیری و α ممتم است. اکنون می‌توان با استفاده از معادلات زیر مقادیر جدید پارامترهای شبکه را به‌دست آورد:

$$W_t^{new} = W_t^{old} + \Delta W_t^{new} \quad (30-1)$$

$$u_{ti}^{new} = u_{ti}^{old} + \Delta u_{ti}^{new} \quad (31-1)$$

$$a_t^{new} = a_t^{old} + \Delta a_t^{new} \quad (32-1)$$

$$b_t^{new} = b_t^{old} + \Delta b_t^{new} \quad (33-1)$$

همان‌طور که در معادلات (۲۶-۱) تا (۲۹-۱) ملاحظه می‌شود برای تصحیح پارامترهای شبکه به

مقادیر عددی مشتق تابع خطا نسبت به این پارامترها $\frac{\partial E}{\partial b_t}, \frac{\partial E}{\partial a_t}, \frac{\partial E}{\partial u_{ti}}, \frac{\partial E}{\partial w_t}$ نیاز داریم که با

استفاده از معادلات (۳۴-۱) تا (۴۲-۱) به‌دست می‌آیند:

$$\frac{\partial E}{\partial w_t} = -\sum_{n=1}^N (V_n^T - V_n) h \left[\frac{\sum_{i=1}^s \partial u_{ti} x_n(i) - b_t}{a_t} \right] \quad (34-1)$$

$$\frac{\partial E}{\partial u_{ti}} = -\sum_{n=1}^N (V_n^T - V_n) w_t \frac{\partial h}{\partial x'_n} x_n(i) \quad (35-1)$$

$$\frac{\partial E}{\partial a_t} = -\sum_{n=1}^N (V_n^T - V_n) w_t \frac{\partial h}{\partial a_t} \quad (36-1)$$

$$\frac{\partial E}{\partial b_t} = -\sum_{n=1}^N (V_n^T - V_n) w_t \frac{\partial h}{\partial b_t} \quad (37-1)$$

که در این معادلات:

$$x'_n = \sum_{i=1}^s u_{ti} x_n(i) \quad (38-1)$$

$$t'_n = \frac{x'_n - b_t}{a_t} \quad (39-1)$$

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

$$\frac{\partial h}{\partial a_t} = \cos(1.75t'_n) \exp\left(\frac{-t_n'^2}{2}\right) \frac{t_n'^2}{a_t} + 1.75 \sin(1.75t'_n) \exp\left(\frac{-t_n'^2}{2}\right) \frac{t'_n}{a_t} \quad (41-1)$$

$$\frac{\partial h}{\partial b_t} = \cos(1.75t'_n) \exp\left(\frac{-t_n'^2}{2}\right) \frac{t'_n}{a_t} + 1.75 \sin(1.75t'_n) \exp\left(\frac{-t_n'^2}{2}\right) \frac{1}{a_t} \quad (42-1)$$

۶- پس از محاسبه مقادیر جدید پارامترهای شبکه با استفاده از معادلات فوق، به مرحله ی ۳ بر می گردیم و با استفاده از این مقادیر جدید مراحل فوق را برای دور دیگری از آموزش شبکه تکرار می کنیم. این عمل را تا زمانی که خطای شبکه به مقدار قابل قبول کاهش یابد تکرار می کنیم. در این صورت آموزش شبکه ی عصبی موجک به پایان می رسد [۲۱].

۷- در مرحله پایانی، برای اثبات کارایی مدل، مقادیر خروجی برای داده های سری پیش بینی توسط شبکه ی بهینه شده محاسبه می شود و با بررسی مقادیر خطا کارایی مدل طراحی شده مورد بررسی قرار می گیرد.

مقدمه

در مطالعه‌های سیستم‌های شیمیایی و بیوشیمیایی داشتن خواص مختلف فیزیکی و شیمیایی مواد خالص یا مخلوط‌ها تحت شرایط خاص لازم می‌باشد. اما یافتن مقادیر تجربی معتبر برای خواص فیزیکی و ترمودینامیکی همیشه امکان‌پذیر نیست و نیاز به صرف وقت و هزینه زیادی دارد. در این شرایط استفاده از معادلات حالت می‌تواند برای پیش‌بینی کمیت‌های مورد نظر مطلوب باشد [۲۲]. با وجودی که معادلات حالت می‌توانند رفتار واقعی سیالات را پیش‌بینی کنند اما به دلیل وجود پارامترهای وابسته به نوع سیال در معادله، استفاده از آن‌ها مشکل می‌باشد. به همین دلیل، حضور روشی ساده، کارآمد و در عین حال معتبر برای پیش‌بینی خواص از روی ساختار مولکولی آن‌ها ضروری به نظر می‌رسید. این ضرورت، باعث پیدایش روشی به نام سهم گروه‌ها^۱ گردید که امروزه به طور گسترده‌ای در پیش‌بینی خواص فیزیکی و ترمودینامیکی مواد به کار می‌رود. دلیل اصلی ایجاد روش سهم گروه‌ها این است که اگر چه هزاران ترکیب شیمیایی مورد توجه علم و صنعت وجود دارد اما تعداد گروه‌های ساختاری و عاملی سازنده‌ای که این مواد را تشکیل می‌دهند بسیار کمتر از تعداد ترکیبات است. لذا در این روش، خاصیت فیزیکی و ترمودینامیکی هر ماده را می‌توان از مجموع سهم همه‌ی گروه‌های موجود در مولکول آن ماده در خاصیت مورد نظر، به دست آورد. به این ترتیب یک روش عملی برای پیش‌بینی خواص تعداد زیادی ماده بر حسب تعداد کمتری پارامتر به دست می‌آید. که این پارامترها، سهم گروه‌های ساختاری را در خاصیت مورد نظر مشخص می‌کنند [۲۳].

بر اساس توضیحات فوق مبنای ایجاد و توسعه‌ی هرروش سهم گروه شامل مراحل زیر است:

- ۱- خواص مواد شناخته شده به ساختار شیمیایی آن‌ها مرتبط می‌گردد تا گروه‌های اصلی در این مواد، شناسایی شده و مقادیر جمع‌پذیر مولی^۲ آن‌ها مشخص شود.

^۱-Group contribution method

^۲-Additive molar quantities

۲- سهم یک گروه مشخص در یک مولکول با تمام مولکول‌ها یکسان در نظر گرفته می‌شود. از این رو می‌توان خواص یک ماده‌ی جدید را از جمع مستقیم مقادیر جمع‌پذیر مولی گروه‌های شیمیایی تشکیل‌دهنده‌ی آن ترکیب پیش‌بینی نمود[۲۴].

البته لازم به توضیح است که تعریف گروه‌های تشکیل‌دهنده‌ی هر ماده، یک مقوله‌ی اختیاری است و هر چه تمایز بین گروه‌ها بیشتر شود، صحت روش سهم گروه‌ها افزایش می‌یابد. با انتخاب صحیح گروه‌ها می‌توان به روش سودمندی دست یافت که با وجود تعداد گروه‌های کم، صحت خواص پیش‌بینی شده قابل قبول باشد[۲۳]. در ادامه به چند مورد از کاربردهای روش سهم گروه‌ها در پیش‌بینی خواص مختلف اشاره می‌شود.

۲-۱- خواص ترمودینامیکی استاندارد

در سال ۱۹۵۸، بنسون^۱ و باس^۲ برای اولین بار مبانی نظری روش سهم گروه‌ها و چگونگی دسته - مختلف را جهت تعیین خواص $S^0(T)$, $\Delta H_f^0(T)$, $C_p^0(T)$ بندی گروه‌های ترمودینامیکی استاندارد شامل ارائه کردند [۲۵]. بعد از گذشت چندین سال بنسون و همکارانش توانستند مقدار سهم گروه‌های مختلف در خواص ترمودینامیکی استاندارد را برای مواد زیر در فشار یک اتمسفر و دمای ۲۹۸k محاسبه و در یک مقاله مروری مفصل گزارش کنند[۲۶].

۱- هیدروکربن‌ها که شامل آلکان‌ها، آلکن‌ها، آلکین‌ها، ترکیبات آروماتیک و.....

۲- ترکیبات حاوی نیتروژن شامل آمین‌ها، ایمین‌ها، سیانیدها، ترکیبات نیترو، نیتريت و تترازین‌ها.....

۳- ترکیبات هالوژن‌دار.

۴- ترکیبات آلی - فلزی.

۵- ترکیبات آلی حاوی فسفر، بور و گوگرد.

^۱-Benson
^۲-Buss

۲-۲- کاربرد روش سهم گروه برای پیش‌بینی ویسکوزیته مایعات یونی

مایعات یونی با $^{1} (IL)$ از ترکیب کاتیون‌های آلی با آنیون‌های آلی یا غیرآلی به دست می‌آیند. وجود گستردگی آنیون‌ها و کاتیون‌های سازنده این ترکیبات، مایعات یونی کاربردهای متنوعی دارند. یک خاصیت فیزیکی مهم و مورد توجه در مایعات یونی ویسکوزیته است، که مقدارش به نوع آنیون و کاتیون سازنده بستگی دارد [۲۷]. اربار^۲ و اریک^۳ در سال ۱۹۸۷ معادله‌ی زیر را برای تخمین ویسکوزیته‌ی مایعات یونی با استفاده از روش سهم گروه‌ها ارائه دادند:

$$\ln \frac{\eta}{\rho M} = A + \frac{B}{T} \quad (۱-۲)$$

که در آن η ویسکوزیته برحسب سانتی‌پواز، ρ دانسیته برحسب گرم بر سانتی‌متر مکعب، M وزن مولکولی T دما برحسب کلین می‌باشد. سپس آن‌ها سهم گروه‌های مختلف در پارامترهای A, B را محاسبه و گزارش نمودند. با استفاده از این روش آن‌ها، ویسکوزیته ۱۸۸ مایع یونی را با متوسط درصد خطای نسبی ۱۵٪ محاسبه نمودند [۲۸].

۲-۳- پیش‌بینی دمای خوداشتعالی برای ترکیبات آلی

دمای خوداشتعالی $^{4} (AIT)$ ، پایین‌ترین دمایی است که یک ماده مشتعل می‌شود و فقط یک جرقه یا شعله‌ی کوچک مشاهده می‌شود [۲۹]. با استفاده از روش سهم گروه‌ها، معادله‌ی زیر برای محاسبه‌ی دمای خوداشتعالی ترکیبات آلی ارائه گردیده است:

$$AIT = 750.3065 + \left(\sum_i \nu_i F_i \right) - 8.644 \times 10^{-4} \times \left(\sum_i \nu_i F_i \right)^2 - 4.5604 \times 10^{-6} \times \left(\sum_i \nu_i F_i \right)^3 \quad (۲-۲)$$

که در آن ν_i تعداد گروه i در مولکول و $F_i (i=1, \dots, n)$ سهم گروه i در دمای خوداشتعالی است [۲۸].

^۱-Ionic Liquids

^۲-Erbar

^۳-Orrick

^۴-Autoignition temperature

البحری^۱ و جورج^۲ سهم ۴۵ گروه عاملی مختلف در دمای خوداشتعالی را محاسبه و در جدولی گردآوری و گزارش کردند [۳۱]. سپس با استفاده از این روش دمای خوداشتعالی ۴۸۳ ترکیب آلی دیگر را با متوسط درصد خطای نسبی ۷/۹۵٪ پیش‌بینی نمودند [۳۰].

۲-۴- پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال

نقطه‌ی جوش نرمال یکی از ثابت‌های فیزیکی است که به‌علت سهولت اندازه‌گیری آن، برای اکثر ترکیبات شیمیایی شناخته شده است. اما زمانی که داده‌های تجربی به‌خصوص هنگامی که یک ماده‌ی جدید سنتز می‌شود، در دسترس نباشد یا ماده‌ی سنتز شده در نقطه‌ی جوش خود تجزیه شود، باید از یک روش پیش‌بینی استفاده نمود. در ادامه به چند روش پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال بر مبنای سهم گروه‌ها اشاره خواهد شد.

۲-۴-۱- روش جوباک^۳

در سال ۱۹۸۴ اولین بار جوباک، روش سهم گروه‌ها را برای پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال استفاده کرد. در این روش جوباک با استفاده از داده‌های تجربی نقطه‌ی جوش، برای تعداد زیادی از ترکیبات، سهم گروه‌های مختلف را در نقطه‌ی جوش نرمال تعیین و گزارش کرد. معادله‌ی ارائه شده توسط جوباک به‌صورت زیر می‌باشد:

$$T_{bj} = 198.0 + \sum_i \delta_i \quad (۳-۲)$$

که در آن T_{bj} نقطه‌ی جوش نرمال برحسب کلون بوده و δ_i سهم گروه عاملی سازنده‌ی مولکول در نقطه‌ی جوش نرمال می‌باشد. او δ_i را برای ۴۱ گروه عاملی مختلف تعیین و گزارش نمود. متوسط درصد خطای نسبی این روش در پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال ۴/۷٪ است [۳۲].

^۱-Albahri

^۲-George

^۳-Joback

۲-۴-۲- روش گانی^۱

در سال ۱۹۵۶ گانی و همکارانش توانستند برای ترکیبات آروماتیک و سیکلوآلیفاتیک با یک حلقه و چند استخلاف با اندازه‌ی متوسط (۳ تا ۶ کربنی) از روی ساختار مولکولی ترکیبات، نقطه‌ی جوش نرمال، نقطه‌ی ذوب نرمال، فشار بحرانی، دمای بحرانی و حجم بحرانی و همچنین آنتالپی تبخیر استاندارد، انرژی آزادگیس و آنتالپی تشکیل استاندارد را در ۲۹۸k پیش‌بینی نمایند. آن‌ها ساختار مولکولی هر ترکیب را به صورت مجموعه‌ای از گروه‌های عاملی مرتبه‌ی اول مثل گروه متیل، متیلن و ...، گروه‌های عاملی مرتبه‌ی دوم مانند: گروه ایزوبوتیل، ترشیو بوتیل و ... در نظر گرفتند که این گروه‌های عاملی مرتبه‌ی دوم خود دارای دو یا چند گروه عاملی مرتبه‌ی اول به صورت یک واحد ساختمانی می‌باشند [۳۳].

در سال ۲۰۰۳ به منظور تعمیم این روش به ترکیبات پیچیده‌ی هتروسیکل و ترکیبات غیرحلقوی چند عاملی بزرگ، گروه عاملی مرتبه‌ی سوم نیز توسط آن‌ها معرفی گردید که شامل قطعات مولکولی موجود در این ترکیبات می‌باشند [۳۳].

آن‌ها با استفاده از سهم این سه نوع گروه عاملی، معادله‌ی اصلی (۲-۴) را برای پیش‌بینی هر خاصیت X معرفی کردند.

$$F(X) = \sum_i N_i C_{1i} + W \sum_j M_j D_{2j} + Z \sum_K O_K E_{3K} \quad (۲-۴)$$

که در آن C_{1i} سهم گروه مرتبه‌ی اول نوع i به تعداد N_i ، D_{2j} سهم گروه مرتبه‌ی دوم نوع j با تعداد M_j ، E_{3K} سهم گروه مرتبه‌ی سوم نوع K با تعداد O_K می‌باشد. ثابت‌های W و Z در تخمین مرتبه‌ی اول برابر صفر هستند. در تخمین مرتبه‌ی دوم به ترتیب برابر یک و صفر می‌باشند و در تخمین مرتبه‌ی سوم هر دوی آن‌ها مقدار یک را دارند. $F(X)$ هم تابع ساده‌ای از خاصیت مورد نظر X است که باید جمع‌پذیری سهم‌های C_{1i} ، D_{2j} ، E_{3K} را نشان دهد و بهترین تطبیق را با داده‌های

^۱-Gani

تجربی داشته باشد. در ضمن این تابع باید خاصیت برون‌یابی داشته باشد تا بتواند در دامنه‌ی وسیعی به کار رود [۳۳].

بر این اساس، معادله‌ای که گانی برای پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال ارائه داد به صورت زیر می‌باشد:

$$T_b = 204.359 \times \ln \left[\sum v_k (\Delta T_b)_k \right] \quad (5-2)$$

که در آن T_b نقطه‌ی جوش نرمال برحسب کلوین و $(\Delta T_b)_k$ سهم گروه عاملی نوع k به تعداد v_k در نقطه‌ی جوش نرمال می‌باشد. آنها v_k را برای ۷۸ گروه عاملی مختلف محاسبه و در جدولی گزارش نمودند. متوسط درصد خطای نسبی برای پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال با این روش ۴/۱٪ است [۳۲].

۲-۴-۳- روش الیوت^۱

در سال ۲۰۰۸ ریچارد الیوت و همکارانش معادله‌ی زیر را برای تعیین نقطه‌ی جوش نرمال ارائه دادند:

$$T_b = \frac{1000}{C_1 + \frac{C_2}{\sqrt{\sum v_k (\Delta T_b)_k}} + \frac{1000}{C_3 + \sum v_K (\Delta T_b)_k}} \quad (6-2)$$

که در آن T_b نقطه‌ی جوش نرمال برحسب کلوین و $(\Delta T_b)_k$ سهم گروه عاملی نوع k در نقطه‌ی جوش نرمال به تعداد v_K می‌باشد. و در فشار ۱۰۱/۳۳ کیلوپاسکال $C_1 = 0.5, C_2 = 38.36, C_3 = 256.6$ و برای فشار ۱/۳۳ کیلوپاسکال $C_1 = 0.5, C_2 = 59.156, C_3 = 274.22$ می‌باشند. در این روش سهم ۷۲ گروه عاملی در نقطه‌ی جوش نرمال محاسبه و در جدولی گزارش شده است [۳۴]. متوسط درصد خطای نسبی این روش برای پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال ۳۳۶ ترکیب هیدروکربنی و ۶۴۲ ترکیب غیرهیدروکربنی در فشار ۱۰۱/۳۳ کیلوپاسکال ۲/۹٪ و در فشار ۱/۳۳ کیلوپاسکال ۴/۱٪ است. در جدول (۱-۲) متوسط درصد خطای نسبی برای پیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال روشهای جوباک، گانی و الیوت با هم مقایسه شده است.

^۱-Elliott

جدول (۲-۱): متوسط درصد خطای نسبی درپیش‌بینی نقطه‌ی جوش نرمال روش جوباک، گانی و الیوت.

روش گانی	روش جوباک	روش الیوت	فشار p/KPa
۳/۱	۴/۱	۲/۹	۱۰۱/۳۳
۵/۲	۵/۲	۴/۱	۱/۳۳
۴/۱	۴/۷	۳/۵	متوسط درصد خطای نسبی

۲-۵- پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات خالص

دانسیته‌ی مایع، پارامتر بسیار مهمی برای محاسبات انتقال جرم و انتقال حرارت در طراحی فرایندهای شیمیایی است. تهیه‌ی داده‌های تجربی برای دانسیته‌ی مایعات بیشتر بر مبنای اصل حالت‌های متناظر است [۳۵]. اما این روش‌ها با وجود موفقیت در پیش‌بینی دانسیته به دلیل استفاده از خواص فیزیکی دیگر مانند فشاربخار و خواص بحرانی و همچنین عملیات ریاضی پیچیده از نظر کاربرد مشکل هستند. به همین دلیل ارائه‌ی یک روش ساده و آسان در عین حال معتبر برای پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات در صنایع شیمیایی ضروری به نظر می‌رسد. روش سهم گروه‌ها یکی از روش‌های کارآمد می‌باشد که ابزار مفیدی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات در اختیار مهندسين قرار می‌دهد [۳۵].

۲-۵-۱- پیش‌بینی دانسیته‌ی هیدروکربن‌های مایع اشباع

در سال ۱۹۷۰ راکت^۱ برای محاسبه دانسیته‌ی مایعات اشباع معادله‌ی زیر را ارائه داد [۳۶].

$$\log V_r = \log(Z_{RA})(1 - T_r)^{\frac{2}{7}} \quad (۲-۷)$$

که در این معادله T_r دمای کاهش یافته، V_r حجم کاهش یافته و Z_{RA} در این عبارت صرفاً یک پارامتر تنظیم‌پذیر است و آن را با فاکتور تراکم‌پذیری بحرانی نباید اشتباه گرفت [۳۷].

^۱-Rackett

در سال ۱۹۹۰ معادله (۸-۲) بر اساس معادله‌ی راکت برای پیش‌بینی دانسیته‌ی هیدروکربن‌های مایع اشباع برحسب دما پیشنهاد گردید [۳۸].

$$V_S = V^* Z_{RA} (1 - T_r)^{\frac{2}{7}} \quad (۸-۲)$$

که در این رابطه پارامترهای، $V^* Z_{RA}$ برای آلکان‌ها چنین تعریف می‌شوند:

$$Z_{RA} = 0.3096 - 0.00630V^{\frac{1}{3}} \quad (۹-۲)$$

$$V^* = 19.05 - 0.005465T_b^{1.75} + \sum_{J=1}^4 V_J G_J - 5.8V_{St} \quad (۱۰-۲)$$

که در آن T_b نقطه‌ی جوش نرمال، G_J تعداد گروه نوع J ، V_J سهم گروه J در V^* ، V_{St} جمله‌ی ساختاری است که برای انواع ساختارهای مولکولی تعیین و در یک جدول ارائه شده است [۳۹]. متوسط درصد خطای نسبی این روش در پیش‌بینی دانسیته‌ی ۲۰۷ هیدروکربن برحسب دما، ۴٪ می‌باشد.

۲-۵-۲- پیش‌بینی دانسیته‌ی پلیمرها برحسب دما

فردن اسلاند^۱ و همکارانش در سال ۱۹۹۱ یک روش سهم گروه برای پیش‌بینی دانسیته‌ی حلال-ها، پلیمرهای آمورف برحسب دما ارائه دادند [۴۰]. آن‌ها مدل ساده‌ای را به‌صورت زیر برای پیش‌بینی حجم مولی مایعات پیشنهاد دادند:

$$V = \sum_i n_i \Delta V_i \quad (۱۱-۲)$$

که در آن n_i تعداد گروه‌های نوع i ، ΔV_i حجم مولی گروه i است و وابستگی دمایی آن از تابع زیر محاسبه می‌شود:

$$\Delta V_i = A_i + B_i T + C_i T^2 \quad (۱۲-۲)$$

^۱-Fredenslund

مقادیر پارامترهای حجم مولی ۳۶ گروه عاملی مختلف (A_i و B_i و C_i) تعیین و در جدولی گزارش شد. با استفاده از این روش می‌توان دانسیته‌ی حلال‌ها حتی حلال‌های بسیار قطبی را برحسب دما با متوسط درصد خطای نسبی حدود ۱٪ و دانسیته‌ی پلیمرهای آمورف برحسب دما را با متوسط درصد خطای نسبی ۲/۷٪ پیش‌بینی کرد [۴۰].

۲-۶- کاربردهای جدیدی از روش سهم گروه

۲-۶-۱- کاربرد روش سهم گروه- شبکه‌ی عصبی مصنوعی^۱ (NNGC)

در پیش‌بینی دمای نقطه‌ی اشتعال ترکیبات خالص

قراقیسی^۲ در این کار ابتدا داده‌های نقطه‌ی اشتعال برای ۱۳۷۸ ترکیب خالص را گردآوری نمود سپس ورودی‌های شبکه‌ی عصبی پیش‌خور^۳ (FFNN) سه‌لایه را ۷۹ گروه عاملی مختلف موجود در این ترکیبات، بر مبنای مفهوم سهم گروه‌ها و خروجی را دمای نقطه اشتعال در نظر گرفت [۴۱]. در این شبکه‌ی عصبی ۹۰٪ داده‌ها (۱۲۴۱ ترکیب) در سری آموزش و ۱۰٪ داده‌ها (۱۳۷ ترکیب) در سری تأیید قرار گرفتند. ماکزیمم درصد خطای به دست آمده را در حدود ۲/۶٪ گزارش نمود. تنها درصد خطای ۱۹ ترکیب خالص بیشتر از ۱۰٪ است و درصد خطای ۴۵۰ ترکیب کمتر از ۱٪ است. در این مدل با توجه به تعداد ترکیبات به کار رفته محدودیت کاربردی وجود ندارد اما دامن‌های دمای نقطه‌ی اشتعال به کار رفته در آن ۵۹۷-۱۸۵ کلوین است. در جدول (۲-۲) مقایسه‌ای بین این مدل و مدل‌های قبلی که برای پیش‌بینی دمای نقطه‌ی اشتعال به کار رفته، نشان داده شده است.

N, S, AE, R^2 به ترتیب مربع ضریب همبستگی، متوسط خطای مطلق، ریشه‌ی دوم متوسط

خطا و تعداد ترکیبات به کار رفته در هر مدل می‌باشد.

1-New neural network- contribution method

2-Gharagheizi

۳-Feed forward neural network

جدول (۲-۲): مقایسه‌ی بین مدل NNGC با مدل‌های قبلی در پیش‌بینی دمای نقطه‌ی اشتعال

Model	R ²	AE	S	N
Suzuki	۰/۹۳۵۱	۱۰/۳	۱۳/۵۲	۴۰۰
Tetteh	۰/۹۳۲۶	۱۰/۲	۱۳/۱	۴۰۰
Katritzky	۰/۹۰۲	—	۱۶/۱	۲۷۱
Katritzky	۰/۸۷۸	۱۳/۹	—	۷۵۸
Gharagheici & Alamdari	۰/۹۶۶۹	۱/۲	۱۲/۷	۱۰۳۰
NNGC	۰/۹۷۵۷	۸/۱۰۱	۱۱/۲۰۶	۱۳۷۸

۲-۶-۲- کاربرد روش سهم گروه-شبکه‌ی عصبی مصنوعی برای

پیش‌بینی دمای خوداشتعالی ترکیبات خالص.

در این کار البحری و جورج از روش سهم گروه‌ها برای انتخاب توصیف‌کننده‌ها استفاده نمودند و داده‌های تجربی برای دمای خوداشتعالی ۴۹۰ ترکیب مختلف را جمع‌آوری کردند [۴۲]. که ۴۷۰ داده در سری آموزش و ۲۰ داده را در سری تأیید قرار دادند. برای تعیین توصیف‌کننده‌ها بر مبنای روش سهم گروه، ۵۸ گروه عاملی سازنده‌ی این ترکیبات را مشخص نمودند که به عنوان ورودی‌های شبکه و خروجی شبکه را دمای خوداشتعالی در نظر گرفتند. پس از آموزش شبکه‌ی عصبی مصنوعی، متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دمای خوداشتعالی توسط شبکه‌ی بهینه شده برای سری تأیید را ۲/۸۵٪ گزارش نمودند [۴۳].

۲-۶-۳- کاربرد روش سهم گروه-شبکه‌ی عصبی مصنوعی در

پیش‌بینی دانسیته‌ی مایعات یونی

در این مدل، روش سهم گروه به عنوان ابزار ترمودینامیکی و شبکه‌ی عصبی مصنوعی به عنوان ابزار محاسباتی، بین دانسیته و ساختار مولکولی مایعات یونی ارتباط برقرار می‌کنند. در این روش والدرا¹ داده‌های تجربی دانسیته برای ۱۰۳ مایع یونی را جمع‌آوری نمود که در دو سری آموزش و تأیید قرار داد. سپس برای انتخاب توصیف‌کننده‌های مناسبی که بتواند ارتباط بین ساختار و دانسیته برقرار کند از روش سهم گروه استفاده کرد و ۲۲ گروه عاملی مختلف در این ترکیبات را به عنوان ورودی‌های شبکه و خروجی شبکه را دانسیته در نظر گرفت. پس از آموزش شبکه، از آن برای پیش‌بینی دانسیته استفاده نمود که متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته توسط شبکه‌ی بهینه شده نزدیک به صفر گزارش گردیده است [۴۴].

۲-۷- کاربردهای دیگر روش سهم گروه‌ها

از روش سهم گروه‌ها برای پیش‌بینی گرمای تبخیر [۴۵]، کشش سطحی مایعات آلی [۴۶]، هدایت گرمایی [۴۸ و ۴۷] و پارامترهای بحرانی [۴۹ و ۳۳] نیز استفاده شده است.

1-Valderrama

مقدمه

شبکه‌های عصبی مصنوعی در واقع ابزار ریاضی قدرتمندی هستند که با تقلید از سیستم عصبی بیولوژیکی طراحی شده‌اند. قدرت انعطاف و تصحیح‌پذیری بالایی در انطباق خود با داده‌های موجود را دارند، به طوری که می‌توانند نظم و هماهنگی موجود در داخل این داده‌ها را پیدا نموده و وقوع پدیده‌ای را بر اساس بردارهای ورودی پیش‌بینی کنند. به واسطه‌ی مزایایی که شبکه‌ی عصبی موجک بر سایر شبکه‌های عصبی مصنوعی دارد، در این پایان‌نامه از این شبکه برای پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌ها استفاده گردید. اگر چه متداولترین ابزار برای پیش‌بینی دانسیته، معادله‌های حالت ارائه شده در متون علمی می‌باشند، اما با توجه به پیچیدگی‌های معادله‌های حالت ارائه شده، وجود پارامترهای متعدد برای هر سیال، دقت پیش‌بینی و سختی استفاده از آن‌ها، به کار بردن شبکه‌ی عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته بسیار مطلوب می‌باشد [۲].

۳-۱- قوائد تجربی در سیالات آلی چگال

اصولاً بررسی سیالات چگال از نقطه نظر مولکولی بسیار مشکل است، زیرا توزیع ذرات در سیستم نه مانند گاز رقیق به صورت تصادفی است و نه مانند جامدات، مولکول‌ها در شبکه به صورت منظم توزیع شده‌اند. بلکه فقط یک نظم موضعی^۱ در این سیالات وجود دارد. سیالات چگال دو ویژگی مهم دارند. اول اینکه به علت وجود نیروهای دافعه، تراکم به سختی انجام می‌شود. و ویژگی دوم این است که یک برهم‌کنش مؤثر یکسانی بین جفت‌های تشکیل‌دهنده‌ی سیستم حاکم می‌باشد. به طوری که تمام این سیستم‌ها از قاعده‌بندی‌های یکسانی تبعیت می‌کنند [۵۰]. که در ادامه به بعضی از این قواعد اشاره خواهیم کرد.

^۱-local ordering

۳-۱-۱- معادله‌ی تیت^۱

در سال ۱۸۸۸ تیت در طی تحقیقات تجربی خود بر روی تراکم‌پذیری شیشه، جیوه و آب‌دریا، اولین معادله‌ی حالت را برای سیالات چگال ارائه کرد [۵۱].

$$\frac{V - V_0}{PV_0} = \frac{A}{B + P} \quad (۱-۳)$$

که V_0 حجم در فشار صفر، A ، B پارامترهای وابسته به دما هستند. در سال ۱۹۷۶ هی‌وارد^۲ از معکوس معادله‌ی تیت یک عبارت خطی برحسب فشار به دست آورد که به صورت زیر می‌باشد:

$$\frac{PV_0}{V_0 - V} = \frac{B}{A} + \frac{P}{A} \quad (۲-۳)$$

این معادله همخوانی بسیار خوبی با نتایج تجربی برای جامدات تا فشارهای ۱۰۰۰ مگاپاسکال و برای مایعات تا فشارهای حدود ۲۰۰ مگاپاسکال نشان می‌دهد [۵۰].

۳-۱-۲- معادله‌ی مارناگان^۳

مارناگان معادله‌ی تیت را به صورت دیفرانسیلی چنین پیشنهاد کرد [۵۰].

$$B' = \left(\frac{\partial B}{\partial p} \right)_T = - \left[\frac{\partial \ln \kappa_T}{\partial \ln p} \right]_T = C(T) \quad (۳-۳)$$

که B ضریب کشیدگی^۴ است و چنین تعریف می‌شود:

$$B = \frac{1}{\kappa_T} = -V \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_T \quad (۴-۳)$$

اگر از معادله‌ی (۳-۳) در دمای ثابت انتگرال بگیریم، نتیجه می‌گیریم که:

$$B = B_0 + B'_0 P \quad (۵-۳)$$

که به معادله‌ی مارناگان یا تیت-مارناگان موسوم است. در این معادله B_0 مقدار ضریب کشیدگی

^۱-Tait

^۲-Hiwaurd

^۳-Marnagan

^۴-Bulk modulus

درفشار صفر و B'_0 مقدار مشتق ضریب کشیدگی نسبت به فشار، در فشار صفر است. این معادله برای سیالات متراکم تا زیر دمای بحرانی، تا حدود ۱۰۰ مگاپاسکال و برای سیالات چگال فوق بحرانی با دانسیته‌ی بالاتر از دانسیته‌ی بویل تا حدود ۱۰۰۰ مگاپاسکال صادق است [۵۰].

۳-۱-۳- فشار برحسب دما برای هم‌حجم‌ها

در این قاعده منحنی‌های فشار برحسب دما برای هم‌حجم‌های مختلف یک سیال تقریباً رفتار خطی دارند [۵۰].

۳-۱-۴- خط زینو^۱

طبق این قاعده اگر دما برحسب دانسیته برای مقادیر مختلف فاکتور تراکم‌پذیری یک سیال رسم شود، فقط برای $Z=1$ رفتار کاملاً خطی مشاهده می‌شود که به خط زینو معروف است. معادله‌ی خط زینو به صورت زیر است:

$$\frac{T}{T_Z} + \frac{\rho}{\rho_Z} = 1 \quad (۳-۶)$$

که پارامترهای T_Z و ρ_Z محل تقاطع منحنی دما برحسب دانسیته به ازای $Z=1$ به ترتیب با محورهای دما و دانسیته است. که مقادیرشان را باید به طور تجربی تعیین کنیم [۵۰].

۳-۱-۵- قاعده‌ی هوانگ^۲ واکانل^۳

بر اساس این قاعده ضریب کشیدگی کاهش یافته، $B = \frac{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_T}{kT}$ همدمای مختلف یک سیال بر

^۱-Zeno line

^۲-Huang

^۳-Oconnell

حسب دانسیته (یا حجم) همگی از یک نقطه می‌گذرند که این نقطه، نقطه‌ی ضریب کشیدگی مشترک نام دارد. که این دو دانشمند وجود این نقطه را برای بیش از ۲۵۰ مایع مختلف به طور تجربی تأیید کردند [۵۰].

۳-۱-۶- قاعده‌ی همدمای خطی^۱ (LIR)

در این قاعده که در سال ۱۹۹۳ برای سیالات متراکم زیر بحرانی و فوق بحرانی ارائه شده است و دارای مبنای نظری است کمیت $(Z-1)v^2$ بر حسب ρ^2 برای هر همدمای سیال چگال، خطی است. که به صورت زیر بیان می‌گردد:

$$(Z-1)v^2 = A + B\rho^2 \quad (۷-۳)$$

سپس با استفاده از مدلی که برای استخراج معادله به کار رفت، وابستگی دمایی پارامترهای A و B نیز به صورت زیر تعیین گردید:

$$B = B_2 + \frac{B_1}{RT} \quad A = A_2 - \frac{A_1}{RT} \quad (۸-۳)$$

این معادله در محدوده‌ی $\rho_B \langle \rho \rangle T < 2T_B$ کارآیی دارد که T_B ، ρ_B به ترتیب دانسیته و دمای بویل سیال می‌باشند. قاعده‌ی همدمای خطی برای انواع سیالات چگال قطبی و غیرقطبی استفاده می‌شود [۵۲].

در مرحله‌ی بعد در سال ۱۹۹۴ با استفاده از تقریب تک سیال واندروالس، این معادله به مخلوط سیالات چگال نیز تعمیم داده شد [۵۳]. براساس این تقریب، هر معادله‌ی حالتی که برای سیال خالص قابل استفاده باشد عیناً برای مخلوط سیالات نیز کارآیی دارد. با این تفاوت که در حالت مخلوط پارامترهای معادله‌ی حالت علاوه بر دما به ترکیب سیستم نیز وابستگی دارند. با استفاده از مدلی که برای استخراج خود معادله به کار رفته بود وابستگی پارامترهای LIR به ترکیب سیستم به صورت زیر درآمد:

^۱-Linear isotherm regularity

$$B_{mix} = \sum_i \sum_j x_i x_j B_{ij} \quad \text{و} \quad \left(\frac{A}{B}\right)_{mix} = \sum_i \sum_j x_i x_j \left(\frac{A_{ij}}{B_{ij}}\right) \quad (9-3)$$

x_i کسر مولی گونه‌ی i در مخلوط بوده، B_{ij} و $\left(\frac{A_{ij}}{B_{ij}}\right)$ مقدار پارامترها برای مخلوطی است که تمام

برهم‌کنش‌های آن از نوع ij باشد. سپس با استفاده از قاعده‌ی ترکیبی لورنتز- برتولت پارامترهای

ناجور B_{ij} و $\left(\frac{A_{ij}}{B_{ij}}\right)$ برحسب پارامترهای جور¹ به صورت زیر به دست آمدند:

$$B_{ij} = \sqrt{B_{ii} B_{jj}} \quad \text{و} \quad \left(\frac{A_{ij}}{B_{ij}}\right) = \sqrt{\left(\frac{A_{ii}}{B_{ii}}\right) \left(\frac{A_{jj}}{B_{jj}}\right)} \quad (10-3)$$

۳-۱-۶-الف- تعمیم معادله‌ی حالت LIR به کتون‌ها با استفاده از روش

سه‌م گروه‌ها

در قاعده‌ی همدمای خطی که بر مبنای مفهوم پتانسیل جفت مؤثر استخراج شده است، شکل ریاضی تابع پتانسیل جفت مؤثر مانند جفت منزوی به صورت لنارد- جونز (۱۲،۶) در نظر گرفته شده است. اما برخلاف پارامترهای تابع پتانسیل منزوی، پارامترهای این تابع در منطقه‌ی چگال به حالت ترمودینامیکی سیستم وابسته است.

پارسافر وکلانتر با استفاده از داده‌های تجربی برای کتون‌ها و ترسیم نمودار $(Z-1)v^2$ برحسب ρ^2 نشان دادند که کتون‌ها، از رفتار خطی معادله‌ی LIR انحراف دارند [۵۴]. زیرا این تابع پتانسیل به طور کیفی برای ذرات متقارن کروی مناسب بود و برای ذرات نامتقارن مثل کتون‌ها کارایی لازم را نداشت. بدلیل آنکه این معادله برای سیالات چگال فرم بسیار ساده و تفسیر فیزیکی خوبی دارد آن‌ها تصمیم گرفتند با استفاده از روش سه‌م گروه‌ها این معادله را به کتون‌ها تعمیم دهند. برای این منظور آن‌ها

1-Like

هر سیال کتون را به صورت مخلوطی فرضی از گروه‌های سازنده‌شان یعنی متیل، متیلن و گروه عاملی کربونیل در نظر گرفتند و سپس طبق تقریب تک‌سیال وان‌دروالس معادله‌ی 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. آن‌ها، با استفاده از دانسیته‌ی سیال (ρ) دانسیته‌ی کل گروه‌ها در مخلوط فرضی در دمای T و فشار p را برابر $n\rho$ در نظر گرفتند و معادله‌ی LIR را به صورت زیر نوشتند:

$$\left(\frac{P}{n\rho RT} - 1 \right) \frac{1}{n^2 \rho^2} = A_m + B_m n^2 \rho^2 \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{Z}{n} - 1 \right) v^2 = A_m n^2 + B_m n^4 \rho^2 \quad (11-3)$$

که در آن A_m, B_m پارامترهای معادله‌ی حالت LIR به ازای یک گروه کربنی اعم از متیل یا متیلن و گروه عاملی کربونیل در نظر گرفته شد. سپس با تعریف دو پارامتر $A' = A_m n^2$ و $B' = B_m n^4$ معادله‌ی (11-3) را به شکل زیر ارائه نمودند و آن را قاعده‌ی همدمای خطی اصلاح شده¹ (MLIR) نامیدند.

$$\left(\frac{Z}{n} - 1 \right) v^2 = A' + B' \rho^2 \quad (12-3)$$

در مرحله‌ی بعد با استفاده از داده‌های تجربی برای کتون‌ها نشان دادند که رفتار خطی نمودار $v^2(Z/n-1)$ برحسب ρ^2 برای هر همدمای کتون با افزایش طول زنجیر حفظ می‌شود.

جدول (1-3) را ملاحظه کنید. همچنین آن‌ها وابستگی دمایی پارامترهای A_m, B_m را به صورت زیر به دست آوردند و مقادیر $a_1/R, a_2, b_1/R, b_2$ را برای کتون‌های مختلف در جدولی گزارش نمودند.

$$A_m = \frac{a_1}{RT} + a_2 \quad \text{و} \quad B_m = \frac{b_1}{RT} + b_2 \quad (13-3)$$

1-Modified linear isotherm regularity (MLIR)

جدول (۳-۱): مقایسه‌ی مقدار ضریب همبستگی (R^2) و متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته با استفاده از LIR و MLIR برای همدماهای معینی از کتون‌ها در محدوده‌ی فشار (Δp) داده شده.

سیال	$T(K)$	$\Delta p(MPa)$	R^2		$\left(\frac{ \Delta\rho }{\rho}\right)_{av}^a \times 100$		Ref.
			LIR	MLIR	LIR	MLIR	
۲- پروپانون	۲۹۸/۱۵	۲/۵۵-۳۸۹/۸۲	۰/۹۹۷۴	۰/۹۹۹۵	۱/۱(۱/۸)	۰/۳۴(۰/۵۸)	[۵۵]
۲- بوتانول	۲۹۸/۱۵	۲/۶۹-۲۸۱/۶۶	۰/۹۹۸۹	۰/۹۹۹۹	۰/۸۹(۱/۲)	۰/۱۴(۰/۲۴)	[۵۶]
۲- پنتانول	۲۹۸/۱۵	۲/۵۵-۳۷۳/۷۸	۰/۹۹۷۳	۰/۹۹۹۹	۱/۰(۱/۵)	۰/۱۸(۰/۳۳)	[۵۷]
۳- پنتانول	۲۹۸/۱۵	۲/۷۳-۲۸۰/۱۸	۰/۹۹۷۶	۰/۹۹۹۹	۱/۲(۱/۸)	۰/۱۶(۰/۲۴)	[۵۸]
۲- هگزانول	۲۹۸/۱۴	۲/۵۵-۳۲۳/۴۲	۰/۹۹۵۷	۰/۹۹۹۸	۱/۵(۲/۸)	۰/۲۰(۰/۳۹)	[۵۷]

^a ماکزیمم درصد خطای نسبی در پیرانتز گزارش شده است.

اما هنوز مهم‌ترین مشکل معادله‌ی حالت MLIR مثل سایر معادلات حالت باقی بود و آن وابستگی پارامترهای معادله‌ی حالت به نوع سیال بود. زیرا اگر برای ترکیبی مقادیر $b_2, b_1/R, a_2, a_1/R$ وجود نمی‌داشت، معادله‌ی حالت کارآیی لازم را نداشت. به همین دلیل در مرحله‌ی بعد، برای رفع این مشکل از روش سهم گروه‌ها در پیش‌بینی پارامترهای معادله‌ی حالت MLIR استفاده نمودند. آن‌ها برای تعیین سهم سه نوع گروه کربنی متیل، متیلن و گروه عاملی کربونیل (کتونی) در پارامترهای B_m, A_m از سه ترکیب پایه پروپان، n-بوتان و ۲-پنتانول استفاده کردند. با توجه به اینکه وابستگی پارامترهای معادله‌ی حالت به ترکیب سیستم در مخلوط‌ها قبلاً به دست آمده بود. لذا با استفاده از حل دومعادله، دوجمله‌ی (۳-۱۴) و (۳-۱۵) سهم گروه‌های متیل و متیلن در پارامترهای B_m, A_m در دمای مورد نظر را به دست آوردند.

$$\begin{cases} (B_m)_{propane} = \left(\frac{2}{3} \sqrt{B_{11}} + \frac{1}{3} \sqrt{B_{22}} \right)^2 \\ (B_m)_{n-butane} = \left(\frac{2}{4} \sqrt{B_{11}} + \frac{2}{4} \sqrt{B_{22}} \right)^2 \end{cases} \quad (۳-۱۴)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{A_m}{B_m} \right)_{propane} = \left(\frac{2}{3} \sqrt{\frac{A_{11}}{B_{11}}} + \frac{1}{3} \sqrt{\frac{A_{22}}{B_{22}}} \right)^2 \\ \left(\frac{A_m}{B_m} \right)_{n-butane} = \left(\frac{2}{4} \sqrt{\frac{A_{11}}{B_{11}}} + \frac{2}{4} \sqrt{\frac{A_{22}}{B_{22}}} \right)^2 \end{array} \right. \quad (15-3)$$

که در آن $A_{11}, B_{11}, A_{22}, B_{22}$ سهم گروه‌های متیل و متیلن در پارامترهای A_m, B_m در دمای مورد نظر می‌باشد.

برای تعیین سهم گروه عاملی کتونی بر اساس ترکیب ۲-پنتانول از معادله‌های زیر استفاده می‌گردد.

$$(B_m)_{2-pentanol} = \left(\frac{2}{5} \sqrt{B_{11}} + \frac{2}{5} \sqrt{B_{22}} + \frac{1}{5} \sqrt{B_{33}} \right)^2 \quad (16-3)$$

$$\left(\frac{A_m}{B_m} \right)_{2-pentanol} = \left(\frac{2}{5} \sqrt{\frac{A_{11}}{B_{11}}} + \frac{2}{5} \sqrt{\frac{A_{22}}{B_{22}}} + \frac{1}{5} \sqrt{\frac{A_{33}}{B_{33}}} \right)^2 \quad (17-3)$$

سپس با دانستن سهم سه نوع گروه مختلف در پارامترهای A_m, B_m و تقریب متوسط هندسی A_m, B_m را برای هر کتون دیگر با استفاده از روابط زیر محاسبه نمودند:

$$(B_m)_{ketone} = \left(x_1 \sqrt{B_{11}} + x_2 \sqrt{B_{22}} + x_3 \sqrt{B_{33}} \right)^2 \quad (18-3)$$

$$\left(\frac{A_m}{B_m} \right)_{ketone} = \left(x_1 \sqrt{\frac{A_{11}}{B_{11}}} + x_2 \sqrt{\frac{A_{22}}{B_{22}}} + x_3 \sqrt{\frac{A_{33}}{B_{33}}} \right)^2 \quad (19-3)$$

که در آن x_i کسر مولی گروه i می‌باشد و از معادله‌ی زیر محاسبه می‌شود.

$$x_i = \frac{\text{number of group } i}{\text{total number of groups}(n)} \quad (20-3)$$

با استفاده از مقادیر A_m, B_m محاسباتی و معادله‌ی (۱۴-۳) دانسیته‌ی کتون‌ها را در محدوده‌ی

وسیعی از دما و فشار با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۱/۱٪ و ماکزیمم درصد خطای نسبی

۱/۵٪ پیش‌بینی نمودند [۵۴].

۳-۲- ارائه شبکه‌ی عصبی موجک برای پیش‌بینی دانسیته‌ی هریک از کتون‌ها

در قسمت قبل معادله‌ی حالت MLIR معرفی شد و گفته شد که با استفاده از آن می‌توان دانسیته‌ی کتون‌های 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 B_m, A_m با استفاده از ترکیبات پایه محاسبه شود. سپس با استفاده از روابط ارائه شده B_m, A_m برای ترکیب مورد نظر در آن دمای خاص به‌دست آید. بعد با استفاده از B_m, A_m محاسبه شده و معادله MLIR، مقدار دانسیته برحسب فشار در همان دمای معین برای ترکیب مورد نظر به‌دست آید. برای محاسبه دانسیته‌ی همین ترکیب در دمای دیگر باید روش از ابتدا برای محاسبه‌ی سهم جدید گروه‌ها در پارامترهای B_m, A_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 چهار ترکیب پایه (پروپان، n-بوتان، سیکلوپنتان و ۲-پنتان) برای سایر کتون‌ها محاسبه کند اما حجم محاسبات ریاضی به شدت افزایش یافت. همچنین به دلیل مبنای فیزیکی برای استخراج معادله، این معادله بعد از دمای بحرانی پروپان ($T_C = 369K$) معتبر نیست. به همین دلیل در این پایان‌نامه از شبکه‌ی عصبی موجک به عنوان ابزار پردازش اطلاعات، به جای معادله‌ی حالت برای پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار استفاده گردید. آنچه در ادامه می‌آید چگونگی فرایند رسیدن به یک شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی دانسیته‌ی این ترکیبات براساس مفهوم سهم گروه‌ها می‌باشد.

۳-۲-۱- انتخاب سری داده‌ها

اولین مرحله در طراحی مدل، جمع‌آوری و انتخاب یک سری مولکول است که خاصیت مورد نظر آن‌ها به صورت تجربی در دسترس باشد، در این قسمت چون هدف پیش‌بینی دانسیته کتون‌ها است،

بنابراین داده‌های دانسیته برای کتون‌ها از ۳ کربنی تا ۶ کربنی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار گردآوری شدند. نام این ترکیبات به همراه محدوده‌ی دما و فشار، تعداد نقاط به کار رفته از هر ترکیب در سری‌های آموزش، پیش‌بینی و تأیید، به همراه مرجع مورد استفاده برای هر ترکیب در جدول (۲-۳) آورده شده است. لازم به تذکر است که داده‌های مربوط به هریک از ترکیبات به‌صورت تصادفی به سه سری آموزش، پیش‌بینی و تأیید تقسیم شده‌اند.

جدول (۲-۳): تعداد کربن، محدوده‌ی دما و فشار و تعداد الگوهای آموزشی، پیش‌بینی و تأیید شبکه برای کتون‌های مورد استفاده در پیش‌بینی دانسیته.

سیال	تعداد کربن	محدوده‌ی دما (K)	محدوده‌ی فشار Δp (MPa)	تعداد الگوهای آموزش شبکه	تعداد الگوهای پیش‌بینی شبکه	تعداد الگوهای تأیید شبکه	Ref.
۲-پروپانون	۳	۲۷۸-۳۲۳	۲/۵۰-۳۸۸/۲۰	۶۵	۲۰	۲۰	[۵۵]
۲-بوتانون	۴	۲۷۸-۳۳۸	۲/۳۲-۳۷۵/۵۴	۹۰	۲۴	۲۴	[۵۶]
۲-پنتانون	۵	۲۷۸-۳۳۸	۲/۵۵-۳۷۵/۵۰	۸۶	۲۴	۲۴	[۵۷]
۳-پنتانون	۵	۲۷۸-۳۲۳	۲/۵۵-۳۸۱/۰۶	۶۳	۲۰	۲۰	[۵۸]
۲-هگزانون	۶	۲۷۸-۳۳۸	۲/۵۵-۳۶۹/۶۰	۷۹	۲۴	۲۴	[۵۷]
۴-متیل-۲-پنتانون	۶	۲۷۸-۳۳۸	۲/۵۵-۳۸۰/۵۰	۸۴	۲۴	۲۴	[۵۷]

۳-۲-۲- انتخاب توصیف‌کننده‌ها

انتخاب توصیف‌کننده‌های مناسب که دانسیته را به ساختار مولکولی مرتبط کند در ساخت مدل پیش‌بینی‌کننده از اهمیت خاصی برخوردار است. دو ویژگی دما و فشار به‌عنوان اولین توصیف‌کننده‌ها در پیش‌بینی دانسیته به کار گرفته شدند، زیرا دانسیته‌ی هر ترکیب به دما و فشار وابسته است. این

توصیف‌کننده‌ها ستون‌های اول و دوم ماتریس ورودی را می‌سازند. برای انتخاب سایر توصیف‌کننده‌ها از روش سهم گروه استفاده گردید. بر اساس مفهوم سهم گروه می‌توان کتون‌های مورد بررسی در این پایان‌نامه را به ۴ گروه عاملی سازنده‌ی این مولکولها شکست که شامل گروه‌های متیل، متیلن، متین و گروه عاملی کربونیل ($>O=C$) می‌باشد، به این ترتیب تعداد هریک از گروه‌های عاملی، ستون‌های بعدی ماتریس ورودی را تشکیل می‌دهند.

در جدول زیر نام ترکیبات، تعداد ورودی و نوع توصیف‌کننده‌ها بر مبنای روش سهم گروه برای هریک از آن‌ها گزارش شده است.

جدول (۳-۳): تعداد ورودی‌ها و نوع توصیف‌کننده‌ها بر مبنای سهم گروه برای هر ترکیب

نام ترکیبات	تعداد ورودی‌ها بر مبنای سهم گروه	نوع توصیف‌کننده‌ها بر مبنای سهم گروه
۲- پروپانول	۲	دو گروه متیل - یک گروه کربونیل
۲- بوتانول	۳	دو گروه متیل - یک گروه متیلن - یک گروه کربونیل
۲- پنتانول	۳	دو گروه متیل - دو گروه متیلن - یک گروه کربونیل
۳- پنتانول	۳	دو گروه متیل - دو گروه متیلن - یک گروه کربونیل
۲- هگزانول	۳	دو گروه متیل - سه گروه متیلن - یک گروه کربونیل
۴- متیل - ۲- پنتانول	۴	سه گروه متیل - یک گروه متیلن - یک گروه متین - یک گروه کربونیل

اگر Q را به عنوان تعداد سطرهای ماتریس ورودی که همان تعداد نقاط تجربی می‌باشد در نظر بگیریم، ماتریس ورودی شبکه یک ماتریس $N \times Q$ خواهد بود که N تعداد ستون‌های ماتریس ورودی است و برابر تعداد توصیف‌کننده‌های مربوط به هر ترکیب می‌باشد. لازم به تذکر است که تعداد ستون‌های ماتریس ورودی برابر دو متغیر دما و فشار به علاوه‌ی تعداد ورودی‌ها بر مبنای سهم گروه

می‌باشد. به این ترتیب برای ترکیب ۲- پروپانون ۴ ستون مطابق ۴ توصیف‌کننده، ۲- بوتانون، ۲- پنتانون، ۳- پنتانون و ۲- هگزانون ۵ ستون مطابق ۵ توصیف‌کننده و برای ۴- متیل-۲- پنتانون ۶ ستون مطابق با ۶ توصیف‌کننده در ماتریس ورودی وجود دارد.

۳-۲-۳- ساخت مدل با استفاده از شبکه‌ی عصبی موجک

برای پیش‌بینی دانسیته‌ی هریک از کتون‌ها، ابتدا مدل شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از توصیف‌کننده‌های مربوط به هریک از آن‌ها طبق ساختار ارائه شده در قسمت (۱-۹-۳) طراحی گردید که توصیف‌کننده‌های مربوط به هریک از کتون‌ها، یک سطر از ماتریس ورودی Q را تشکیل می‌دهند. به ازای این نرون‌های ورودی برای هر کتون، که هم‌زمان در شبکه پردازش می‌شوند یک خروجی واقعی در اختیار شبکه است تا پاسخ شبکه با آن سنجیده شود. لایه‌ی خروجی شامل یک نرون است که نشان‌دهنده‌ی دانسیته‌ی متناظر با این ورودی‌ها می‌باشد. تعداد نرون لایه‌ی مخفی نامعلوم است و باید بهینه شود. علاوه بر آن، باید پارامترهای ممنتم، سرعت یادگیری (آموزش) و تعداد دورها نیز بهینه شود. روش معمول بهینه کردن این است که پارامترها را یکی‌یکی تغییر می‌دهند و با توجه به خطای سری پیش‌بینی مقدار بهینه‌ی هر پارامتر را جداگانه انتخاب می‌کنند. در این روش چون تعداد زیادی از مقادیر پارامترها که در ابتدا بهینه شده‌اند در نظر گرفته نمی‌شوند، اشکال ایجاد می‌شود. به همین دلیل در این پایان‌نامه از روش هم‌زمانی برای تغییر پارامترها استفاده می‌شود. در اینجا برنامه به گونه‌ای نوشته می‌شود که در ابتدا مقادیر سرعت آموزش، ممنتم و همچنین تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی به طور هم‌زمان تغییر می‌کنند و از آنجا که در دورهای مختلف روند طی شده یکسان است، تعداد دورها ثابت و برابر ۱۰۰۰ در نظر گرفته می‌شود. با توجه به تعداد نرون‌های لایه‌ی ورودی مقادیر ۳ تا ۱۸ برای تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی 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 می‌شود. برای مشخص کردن مقادیر بهینه این پارامترها، برنامه به گونه‌ای نوشته می‌شود که مقدار تابع خطا

(MSE) مربوط به دو سری آموزش و پیش‌بینی به ازای کلیه‌ی تغییرات این سه پارامتر در یک ماتریس ثبت گردد. در ضمن تغییرات پارامترهای مختلف همراه با مقادیر MSE دو سری آموزش و پیش‌بینی به طور جداگانه برحسب یک بردار مرجع (تعداد ترکیبات منتم و سرعت آموزش در هر نرون لایه‌ی مخفی) رسم می‌شود و پارامترها با کمترین خطای سری پیش‌بینی به‌عنوان مقادیر بهینه انتخاب می‌شوند. پس از بهینه شدن این پارامترها، برای تعیین تعداد دور بهینه مقادیر ۵۰۰ تا ۲۰۰۰ با فاصله‌ی ۵۰۰ 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 کاهش 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 پدیده، مدل اصطلاحاً به همگرایی رسیده است. به دلیل اینکه در هر دور آموزش تابع خطای MSE محاسبه می‌شود و سپس طبق روند الگوریتم نزول گرادیانی پارامترهای شبکه به گونه‌ای تغییر می‌یابند که میزان خطا کاهش یابد و سپس دور بعدی با مقادیر جدید آغاز می‌گردد. 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 تعداد دور بهینه باید به نکات زیر توجه شود:

۱- تغییرات شدید ناگهانی در نمودار MSE نسبت به تعداد دور 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 متوقف می‌شود. در این مرحله خروجی شبکه طبق پارامترهای بهینه شده شبکه اعلام می‌شود و پارامترهای وزن ورودی و خروجی شبکه، موقعیت و پهنای موجک نیز تنظیم می‌شوند.

۳-۳-۴- الگوریتم برنامه‌ی نوشته شده

- با توجه به توضیحات فوق برنامه‌ای رایانه‌ای در محیط برنامه‌نویسی MATLAB جهت به‌کارگیری شبکه‌ی عصبی موجک نوشته شد که الگوریتم آن را می‌توان به صورت زیر بیان کرد:
- ۱- ابتدا اطلاعات ورودی برای دو سری 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 اعداد موجود در همان ستون تقسیم می‌شود.
 - ۲- پارامترهای ثابت شبکه، تعداد نرون‌های ورودی و خروجی شبکه تعریف می‌شوند.
 - ۳- سه حلقه‌ی داخل هم برای تغییرات هم‌زمان سه پارامتر ممتم، سرعت آموزش و تعداد نرون‌های لایه‌ی 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 خروجی به صورت تصادفی از اعداد بین صفر تا یک انتخاب می‌شوند.
 - ۵- در این مرحله با وارد شدن داده‌های ورودی هر نمونه به شبکه، عملیات خروجی مربوط به آن انجام شده و MSE متناظر با آن محاسبه می‌شود. 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 (۱-۲۶) تا (۱-۴۲) 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 ۳ 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 لایه‌ی مخفی معین، پارامترهای نهایی شبکه جهت محاسبه خروجی‌های سری پیش‌بینی استفاده می‌شود. از مقایسه‌ی 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 بر اساس 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 مقدار دور بهینه، مقادیر ۵۰۰ تا ۲۰۰۰۰ با فواصل ۵۰۰ در نظر گرفته می‌شود. تعداد دور مربوطه به کمترین MSE سری پیش‌بینی، تعداد دور بهینه است. در این مرحله آموزش شبکه به پایان رسیده است و مدلی که همه‌ی پارامترهایش بهینه و تثبیت شده‌اند آماده استفاده می‌باشد.

۱۱- در این مرحله شبکه‌ی موزون شده برای پیش‌بینی دانستیه‌ی سری تأیید مورد استفاده قرار می‌گیرد و خروجی شبکه با خروجی واقعی این سری مقایسه می‌گردد. داده‌های سری تأیید، داده‌هایی هستند که شبکه آن‌ها را ندیده است و تقریباً کل محدوده‌ی داده‌ها در سری آموزش و پیش‌بینی را شامل می‌شوند.

صحت برنامه‌ی نوشته شده نیز به دو صورت مورد بررسی قرار گرفت:

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

۲- پس از اطمینان از عدم وجود خطا در محاسبات ریاضی، این برنامه برای داده‌های مرجع [۲۰] به کار گرفته شد و نتایج آن با نتایج موجود در مرجع مقایسه گردید. در این مقاله از شبکه‌ی عصبی موزون برای پیش‌بینی زمان ماند نفتال‌ها در کروماتوگرافی گازی استفاده شده است.

در این تحقیق با استفاده از دو توصیف‌کننده‌ی ضریب ماند همدم¹ 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 تأیید کرد.

برای ارزیابی عملکرد شبکه‌ی بهینه شده نمودار برگشت^۲ یعنی نمودار مقادیر پیش‌بینی شده برحسب مقادیر تجربی برای سری تأیید مورد ارزیابی قرار می‌گیرد و با مربع مقدار ضریب همبستگی $(R^2)^3$ پراکندگی نقاط در اطراف خط برگشت تعیین می‌شود. محدوده‌ی تغییرات (R^2) بین صفر و یک است که اگر $R^2 = 1$ باشد یعنی همبستگی کاملی بین داده‌های تجربی و محاسبه شده وجود دارد و اگر $R^2 = 0$ یعنی هیچ‌گونه همبستگی وجود ندارد. بنابراین هر چه مقدار R^2 بدست آمده در نمودار برگشت به ۱ نزدیک‌تر باشد، می‌توان گفت نتایج پیش‌بینی شده بیشتر به واقعیت نزدیک هستند.

۳-۳-۵- بهینه‌سازی پارامترهای شبکه‌ی عصبی موجک برای

پیش‌بینی دانسیته‌ی هریک از کتون‌ها

۳-۳-۵-الف- بهینه‌سازی پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش و تعداد

نرون‌های لایه‌ی مخفی

مدل‌های شبکه‌ی عصبی موجک با استفاده از دو متغیر دما و فشار و توصیف‌کننده‌های موجود در جدول (۳-۳) برای هریک از کتون‌ها و یک خروجی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی این ترکیبات به

1-Isothermal retention index

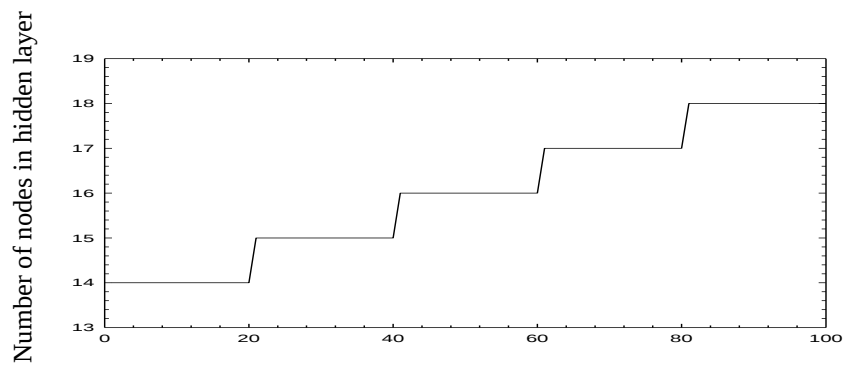
2-Regression

3-Squared correlation coefficient

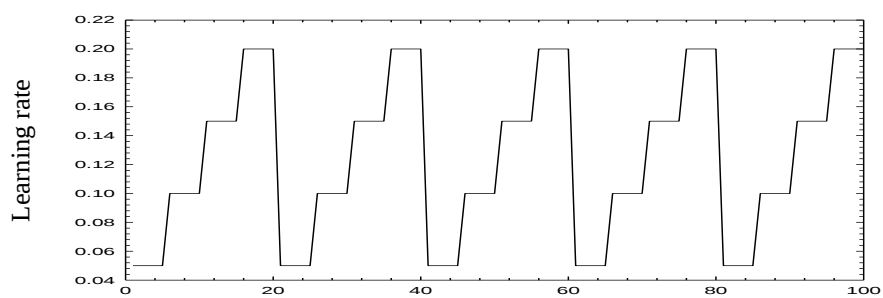
صورت جداگانه طراحی گردیدند. پس از انتقال اطلاعات ورودی نمونه‌ها به شبکه و آموزش شبکه طبق دستورالعمل قسمت (۳-۳-۴) پارامترهای ممنت، سرعت آموزش، تعداد نرون‌های لایه مخفی به طور هم‌زمان برای هریک از آن‌ها بهینه‌سازی شد. برای مشخص شدن چگونگی انجام کار، در شکل (۳-۱) بخشی از این محاسبات برای ۲- بوتانون نشان داده شده است.

۳-۳-۵-ب- بهینه‌سازی تعداد دور آموزش

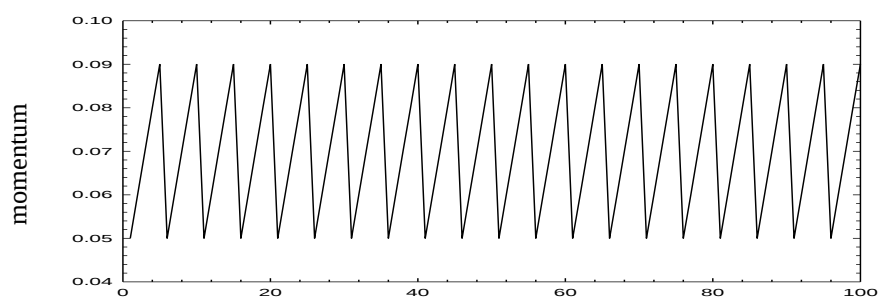
برای تعیین تعداد دور بهینه، باید نمودار MSE برحسب تعداد دور، برای دو سری آموزش و پیش‌بینی رسم گردد. تعداد دوری که در آن MSE سری پیش‌بینی کمترین مقدار است، به‌عنوان تعداد دور بهینه برای ترکیبات مورد نظر انتخاب می‌گردد. این نمودار در شکل (۳-۲) برای ۲-بوتانون رسم شده است. به این ترتیب ۶ شبکه‌ی عصبی موجک مختلف برای پیش‌بینی دانسیته‌ی هریک از کتون‌های موجود در جدول (۳-۲) برحسب دما و فشار بهینه شدند که مقدار بهینه‌ی پارامترهای این شبکه‌ها در جدول (۳-۴) آورده شده است.



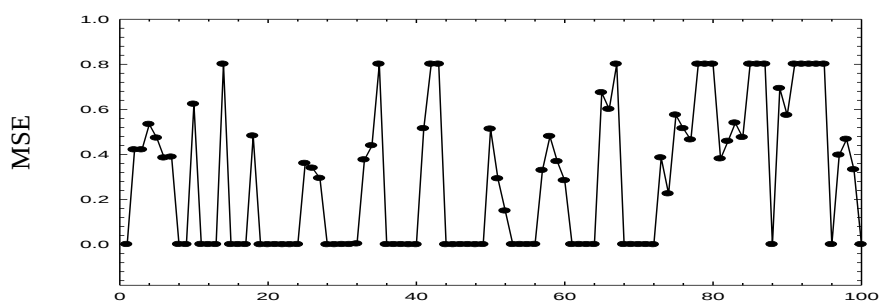
(الف)



(ب)



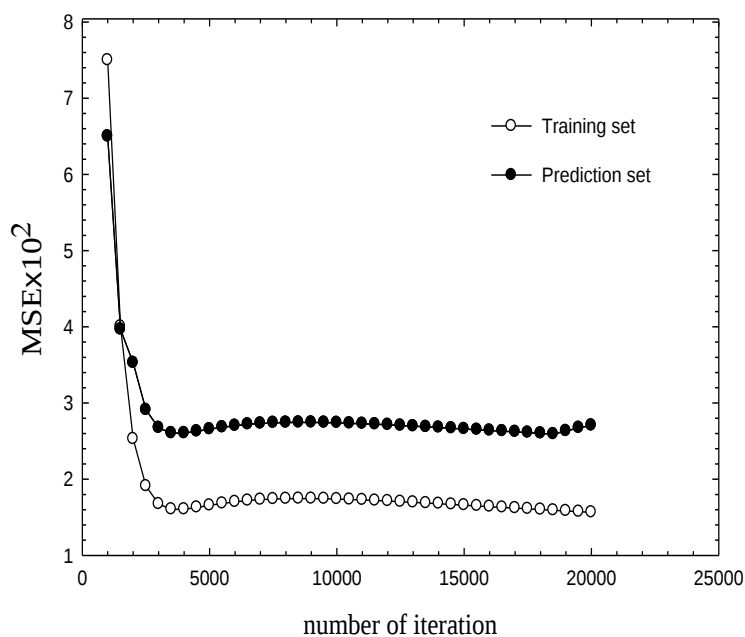
(ج)



(د)

شکل (۳-۱): نمودارهای (الف) تعداد نرون لایه‌ی مخفی، (ب) مقادیر سرعت آموزش، (ج) ممتم و (د) MSE سری

پیش‌بینی برحسب بردار مرجع



شکل (۳-۲): نمودار MSE برحسب تعداد دور آموزش برای دو سری آموزش و پیش‌بینی برای ۲- بوتانون

جدول (۳-۴): مقدار پارامترهای شبکه‌های عصبی موجک بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی هریک از کتون‌ها

مقدار عددی پارامتر هریک از شبکه‌های بهینه شده						پارامتر شبکه‌ی عصبی موجک
۴-متیل-۲-پنتانون	۲- هگزانون	۳- پنتانون	۲- پنتانون	۲- بوتانون	۲- پروپانون	
۶	۵	۵	۵	۵	۴	تعداد نرون‌های ورودی
۵	۵	۵	۵	۵	۶	تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی
۱	۱	۱	۱	۱	۱	تعداد نرون‌های خروجی
۰/۴	۰/۳	۰/۳	۰/۳	۰/۱	۰/۹	ممنتم
۰/۰۱	۰/۰۱	۰/۰۱	۰/۰۱	۰/۰۷	۰/۰۳	سرعت آموزش
۷۰۰	۱۴۵۰	۱۰۰۰	۱۹۵۰	۳۲۵۰	۱۰۰۰	تعداد دورهای آموزش

۳-۵-ج- ارزیابی شبکه‌های بهینه شده برای هر ترکیب با استفاده

از سری‌های پیش‌بینی و تأیید

اکنون برای ارزیابی کارایی شبکه‌های بهینه شده برای هر ترکیب، از پارامترهای بهینه شده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی سری پیش‌بینی و تأیید در دما و فشارهای مربوط به این سری‌ها برای هریک از آن‌ها استفاده گردید. در جدول (۳-۵) متوسط درصد خطای نسبی^۲ و ماکزیمم درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی این ترکیبات برای هر دو سری گزارش شده است. همچنین مقادیر دانسیته‌های محاسبه شده با استفاده از مدل بهینه شده برای این دو سری به همراه مقادیر تجربی و درصد خطای نسبی ناشی از اختلاف این دو مقدار برای هریک از کتون‌ها در جداول (۳-۶) تا (۳-۱۷) گزارش شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود دانسیته‌ی هردسته از این ترکیبات با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۱/۳٪ پیش‌بینی شده است. که این موضوع نشان دهنده‌ی کارایی مطلوب شبکه‌های عصبی موجک بهینه شده است. همچنین نمودارهای برگشت سری پیش‌بینی و تأیید برای هریک از این ترکیبات در شکل‌های (۳-۳) تا (۳-۱۴) رسم شده است. همان‌طور که در این شکل‌ها مشاهده می‌کنید مربع ضریب همبستگی به‌دست آمده برای تمامی این ترکیبات نزدیک به یک است که این امر بر توافق دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده نسبت به مقادیر تجربی دلالت دارد.

^۲ در تمام این فصل منظور از متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی، $\bar{X}$ ، متوسط درصد خطای نسبی کل نقاط است که چنین

$$\bar{X} = \frac{\sum n_i \bar{X}_i}{\sum n_i} \quad \text{که در آن} \quad \bar{X}_i = \frac{100 \left(|X_{i,\text{exp}} - X_{i,\text{cal}}| \right)}{X_{i,\text{exp}}} \quad \text{محاسبه می‌شود؛}$$

جدول (۵-۳): متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی در محدوده‌ی دما (ΔT)

وفشار داده شده (Δp) مربوط به سری پیش‌بینی و تأیید

سیال	تعداد نرون ورودی	$\Delta T(K)$	$\Delta p (MPa)$	$\left(\frac{ \Delta \rho }{\rho}\right)_{av}^a \times 100$	
				سری پیش‌بینی	سری تأیید
۲- پروپانون	۲	۲۷۸-۳۲۳	۲/۵۰۰-۳۸۸/۲	۰/۵۰ (۱/۶۳)	۰/۶۴ (۱/۸۰)
۲- بوتانول	۵	۲۷۸-۳۳۸	۲/۳۲-۳۷۵/۵۴	۰/۴۸ (۱/۱۸)	۰/۳۳ (۰/۷۵)
۲- پنتانول	۵	۲۷۸-۳۳۸	۲/۵۴۷-۳۷۵/۵	۰/۲۶ (۱/۰۱)	۰/۳۳ (۱/۱۵)
۳- پنتانول	۵	۲۷۸-۳۲۳	۲/۵۵-۳۸۱/۰۶	۰/۳۴ (۰/۷۲)	۱/۲۳ (۲/۲۹)
۲- هگزانول	۵	۲۷۸-۳۳۸	۲/۵۴۷-۳۶۹/۶	۰/۷۱ (۱/۵۱)	۰/۵۰ (۱/۱۶)
۴- متیل ۲- پنتانول	۶	۲۷۸-۳۳۸	۲/۵۴۷-۳۸۰/۵	۰/۲۹ (۰/۷۴)	۰/۷۴ (۲/۵۶)

^a ماکزیمم درصد خطای نسبی در پیرانتز گزارش شده است.

جدول (۳-۶): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۴ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری

پیش‌بینی برای ۲- پروپانون

دانسیته (kgm^{-3})		$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه	
۸۱۱/۰۸	۸۱۱/۱۹	-۰/۰۱
830/27	828/3۲	0/23
870/77	870/7۶	0/001
909/96	911/7۹	-0/2۱
800/30	799/42	0/1۱
821/28	817/10	0/5۱
885/84	885/8۴	0/0001
957/24	954/31	0/3۱
789/41	787/47	0/2۵
806/96	801/3۳	0/69
879/43	877/32	0/2۴
907/42	906/52	0/09
772/97	769/1۹	0/4۹
820/31	808/7۳	1/41
868/89	862/87	0/69
906/77	903/84	0/32
762/50	756/80	0/7۵
782/86	771/0۲	1/51
837/84	824/20	1/6۳
884/06	877/89	0/69

جدول (۷-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۴ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری تأیید

برای ۲- پروپانون

دانسیته (kgm^{-3})		$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه	
۸۱۹/۲۳	۸۲۰/۴۹	-۰/۱۵
۸۵۰/۳۱	۸۴۹/۴۷	۰/۱۰
۸۹۲/۳۵	۸۹۴/۶۰	-۰/۲۵
۹۴۸/۶۸	۹۴۲/۴۱	۰/۶۸
۸۱۲/۸۱	۸۱۱/۷۳	۰/۱۳
۸۶۲/۴۱	۸۵۹/۹۸	۰/۲۸
۹۰۵/۰۸	۹۰۵/۵۶	-۰/۰۵
۹۶۰/۴۸	۹۵۵/۹۵	۰/۴۷
۸۰۱/۱۸	۷۹۷/۰۵	۰/۵۱
۸۴۳/۳۱	۸۳۷/۵۲	۰/۶۱
۹۳۸/۶۹	۹۳۱/۹۸	۰/۷۱
۹۵۵/۹۷	۹۵۰/۰۲	۰/۶۲
۷۹۷/۵۵	۷۸۹/۶۲	۰/۹۹
۹۳۵/۵۱	۹۲۷/۸۶	۰/۸۲
۹۴۳/۵۶	۹۳۵/۴۷	۰/۸۶
۹۴۸/۶۹	۹۴۱/۵۳	۰/۷۵
۷۷۳/۴۱	۷۶۶/۱۷	۰/۹۴
۸۱۳/۵۱	۷۹۸/۸۲	۱/۸۰
۸۶۲/۳۹	۸۵۱/۸۹	۱/۲۲
۹۱۸/۶۳	۹۱۱/۸۰	۰/۷۴

جدول (۸-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری

پیش‌بینی برای ۲- بوتانول

دانسیته (kgm^{-3})		$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه	
824/61	814/8۷	1/18
849/01	840/7۷	0/97
880/6۳	883/00	-0/2۷
925/8۴	922/85	0/32
814/5۶	807/59	0/85
839/80	833/90	0/70
873/57	877/98	-0/50
919/99	919/29	0/0۸
808/6۳	803/45	0/64
831/24	826/97	0/51
875/36	882/85	-0/85
913/24	914/9۳	-0/18
788/80	787/30	0/19
818/02	815/27	0/3۴
854/9۶	861/25	-0/7۴
903/95	907/4۲	-0/38
778/43	778/4۹	-0/0۱
809/99	807/7۶	0/27
848/29	854/29	-0/7۱
898/89	901/6	-0/30
762/37	764/2۹	-0/25
795/80	793/57	0/28
835/79	841/39	-0/67
888/0۸	891/9۵	-0/4۴

جدول (۳-۹): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری تأیید

برای ۲- بوتانول

دانسیته (kgm^{-3})		$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه	
۸۳۲/۳۱	۸۲۶/۰۴	۰/۷۵
۸۶۰/۶۸	۸۵۵/۱۴	۰/۶۴
۸۹۸/۲۷	۸۹۹/۸۷	-۰/۱۸
۹۰۵/۴۱	۹۰۷/۱۵	-۰/۱۹
۸۲۲/۴۱	۸۱۸/۷۷	۰/۴۴
۸۵۲/۰۸	۸۴۸/۴۹	۰/۴۲
۸۹۰/۷۷	۸۹۳/۸۸	۰/۳۵
۹۳۲/۳۸	۹۲۵/۷۵	۰/۷۱
۸۱۶/۷۳	۸۱۴/۴۰	۰/۲۸
۸۴۳/۷۸	۸۴۱/۴۰	۰/۲۸
۸۹۲/۱۶	۸۹۶/۵۶	-۰/۴۹
۹۲۵/۹۳	۹۲۱/۳۲	۰/۵۰
۸۰۲/۵۳	۸۰۲/۲۳	۰/۰۴
۸۳۸/۰۵	۸۳۷/۱۹	-۰/۲۶
۸۴۴/۲۸	۸۴۴/۲۹	-۰/۰۰۲
۸۸۲/۰۹	۸۸۶/۹۰	-۰/۵۴
۷۹۲/۸۸	۷۹۳/۵۴	-۰/۰۸
۸۳۰/۷۱	۸۲۹/۶۲	۰/۱۳
۸۶۷/۵۳	۸۷۱/۰۴	-۰/۴۰
۹۱۲/۶۹	۹۰۸/۰۸	۰/۵۰
۷۷۳/۵۹	۷۷۶/۱۹	-۰/۳۴
۷۸۴/۳۶	۷۸۳/۴۰	۰/۱۲
۸۱۷/۹۱	۸۱۶/۳۴	۰/۱۹
۸۴۶/۵۵	۸۴۸/۵۷	-۰/۲۴

جدول (۳-۱۰): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری

پیش‌بینی برای ۲- پنتانول

دانسیته (kgm^{-3})		$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{(\rho_{\text{exp}} \rho_{\text{exp}} \rho_{\text{cal}})} \times 100$ $\times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه	ρ_{exp}
824/34	823/7۵	0/07
845/92	843/13	0/3۳
905/47	905/40	0/0۱
949/36	943/19	0/6۵
821/09	820/63	0/05
860/64	857/9۷	0/31
916/46	916/71	-0/0۳
956/34	946/6۵	1/01
805/72	807/5۵	-0/2۳
830/95	828/52	0/29
894/08	893/83	0/0۳
932/57	931/82	0/08
791/58	794/8۵	-0/41
819/10	816/50	0/3۲
885/37	884/63	0/08
925/46	926/34	-0/09
791/92	792/58	-0/08
836/57	831/0۸	0/6۶
897/81	897/9۹	-0/0۲
933/82	933/85	-0/003
777/41	779/20	-0/23
825/06	819/22	0/7۱
888/4۷	889/4۲	-0/1۱
925/37	928/7۱	-0/36

مقدار تجربی	پاسخ شبکه	
۸۳۱/۲۷	۸۳۳/۴۹	۰/۲۷
۸۶۷/۱۱	۸۶۸/۷۳	$\frac{(\rho_{exp} - \rho_{ref})}{\rho_{exp}} \times 100$
۹۲۱/۶۴	۹۲۵/۷۶	$\rho_{exp} / ۴۵$
۹۶۰/۷۰	۹۵۲/۸۵	۰/۸۲
۸۱۵/۰۶	۸۱۹/۴۹	-۰/۵۴
۸۴۰/۳۱	۸۴۱/۵۱	-۰/۱۴
۸۹۹/۶۹	۹۰۳/۹۱	-۰/۴۷
۹۴۴/۵۳	۹۴۴/۸۰	-۰/۰۳
۸۱۳/۹۰	۸۱۷/۷۳	-۰/۴۷
۸۵۳/۸۸	۸۵۴/۸۴	-۰/۱۱
۹۱۱/۱۵	۹۱۶/۱۴	-۰/۵۵
۹۴۵/۲۲	۹۴۵/۴۸	-۰/۲۷
۸۰۰/۳۶	۸۰۴/۹۱	-۰/۵۷
۸۴۲/۹۷	۸۴۳/۲۰	-۰/۰۳
۹۰۲/۴۳	۹۰۷/۸۱	-۰/۶۰
۹۳۸/۴۹	۹۴۱/۶۴	-۰/۳۳
۷۸۲/۶۰	۷۸۹/۷۵	-۰/۹۱
۸۱۱/۹۳	۸۱۲/۰۱	-۰/۰۱
۸۸۰/۱۲	۸۸۲/۳۱	-۰/۲۱
۹۲۰/۹۹	۹۲۶/۵۷	-۰/۶۰
۷۶۷/۴۶	۷۷۶/۳۵	-۱/۱۶
۷۹۸/۲۰	۷۹۸/۴۸	-۰/۰۳
۸۷۰/۴۰	۸۷۲/۴۲	-۰/۲۳
۹۱۲/۲۰	۹۲۰/۱۳	-۰/۸۷

جدول (۱۱-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری تأیید

برای ۲-پنتانول

جدول (۱۲-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری

پیش‌بینی برای ۳-پنتانول

مقدار تجربی	پاسخ شبکه	
۸۳۸/۳۹	۸۳۷/۷۹	۰/۰۷
854/73 (kgm ⁻³)	853/33 دانسیته	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{ref}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
875/04	874/35	$\rho_{\text{exp}} / 0.8$
914/74	915/۰۰	-0/0۳
830/37	829/98	0/0۵
851/97	850/96	0/1۲
901/47	903/16	-0/1۹
915/17	916/17	-0/1۱
844/43	843/46	0/11
870/5۰	871/03	-0/06
909/02	911/8۰	-0/3۱
927/99	927/1۰	0/09
808/37	808/84	-0/0۶
839/8۰	839/04	0/09
891/32	896/1۰	-0/5۴
931/65	930/19	0/1۶
799/33	800/38	-0/13
821/24	820/05	0/14
875/26	879/61	-0/49
939/92	933/14	0/72

جدول (۳-۱۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری تأیید

برای ۳- پنتانون

مقدار تجربی	پاسخ شبکه	
۸۳۲/۵۰	۸۱۳/۴۲	۲/۲۹
۸۴۴/۹۷	۸۲۸/۴۷	$\frac{(\rho_{exp} - \rho_{cal}^{95})}{\rho_{exp}} \times 100$
۸۶۵/۴۴	۸۵۴/۹۵	
۸۸۴/۳۸	۸۷۸/۹۶	
۸۲۳/۲۸	۸۰۵/۰۱	۲/۲۲
۸۳۶/۲۲	۸۲۰/۲۶	۱/۹۱
۸۶۲/۷۳	۸۵۴/۹۸	۰/۹۰
۸۸۶/۰۷	۸۸۴/۰۶	۰/۲۳
۸۱۳/۷۰	۷۹۶/۵۷	۲/۱۰
۸۳۰/۹۱	۸۱۶/۷۷	۱/۷۱
۸۶۰/۷۸	۸۵۵/۵۲	۰/۶۱
۸۹۴/۳۵	۸۹۵/۶۸	-۰/۱۵
۷۹۹/۵۹	۷۸۳/۶۴	۱/۹۹
۸۱۹/۳۷	۸۰۵/۸۰	۱/۶۶
۸۷۱/۲۹	۸۷۴/۳۲	-۰/۳۵
۹۱۶/۹۲	۹۱۱/۲۳	۰/۶۲
۷۸۹/۹۹	۷۷۴/۹۷	۱/۹۰
۸۰۹/۸۰	۷۹۶/۷۷	۱/۶۱
۸۵۲/۶۳	۸۵۳/۴۶	-۰/۱۰
۹۰۲/۹۴	۹۰۷/۵۷	-۰/۵۱

جدول (۳-۱۴): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری

پیش‌بینی برای ۲- هگزانون

مقدار تجربی	پاسخ شبکه	
۸۲۸/۵۱	۸۱۵/۹۷	۱/۵۱
844/28	835/1۵	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{net}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
869/83	865/49	۰/۴۹
902/67	900/25	0/2۷
819/73	809/32	1/2۷
842/76	835/5۴	0/8۶
872/60	868/8۲	0/43
909/46	906/11	0/3۷
818/19	810/31	0/96
846/25	841/12	0/60
895/45	892/03	0/38
933/03	928/72	0/46
797/71	791/70	0/75
823/12	816/81	0/7۷
886/89	881/9۵	0/5۶
925/15	921/15	0/43
789/90	784/27	0/71
818/30	810/79	0/9۲
882/40	874/89	0/85
921/87	916/40	0/59
789/47	784/19	0/6۷
829/52	821/1۱	1/01
898/72	891/82	0/7۷
926/72	922/67	0/4۴

جدول (۳-۱۵): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری تائید

برای ۲- هگزانون

مقدار تجربی	پاسخ شبکه	
۸۳۵/۳۹	۸۳۸/۷۵	-۰/۴۰
۸۵۵/۳۱	۸۵۷/۳۴	$\frac{(\rho_{exp} - \rho_{cal})}{\rho_{exp}} \times 100$
۸۷۹/۱۰	۸۸۱/۶۹	
۹۱۷/۹۴	۹۱۹/۲۰	-۰/۱۴
۸۲۶/۴۶	۸۳۰/۲۸	-۰/۴۶
۸۵۳/۷۰	۸۵۵/۶۴	-۰/۲۳
۸۸۸/۶۶	۸۹۲/۳۵	-۰/۴۱
۹۱۵/۷۰	۹۲۱/۸۸	-۰/۶۷
۸۱۰/۹۵	۸۱۶/۴۰	-۰/۶۷
۸۲۸/۰۱	۸۳۱/۱۰	-۰/۳۷
۸۷۶/۶۷	۸۸۰/۹۶	-۰/۴۹
۹۱۸/۹۰	۹۲۱/۷۵	-۰/۳۱
۸۰۵/۹۷	۸۱۰/۴۴	-۰/۵۵
۸۴۵/۹۴	۸۴۸/۴۰	-۰/۲۹
۹۰۳/۵۵	۹۱۰/۵۸	-۰/۷۸
۹۳۷/۸۴	۹۳۱/۳۰	۰/۷۰
۷۹۸/۱۰	۸۰۱/۸۱	-۰/۴۶
۸۴۰/۵۵	۸۴۲/۰۱	-۰/۱۷
۸۹۹/۳۸	۹۰۷/۰۵	-۰/۸۵
۹۳۴/۹۴	۹۳۰/۶۵	۰/۴۶
۷۷۹/۸۰	۷۸۶/۱۶	-۰/۸۱
۸۰۴/۶۵	۸۰۶/۶۲	-۰/۲۴
۸۸۲/۳۵	۸۹۲/۶۴	-۱/۱۷
۹۱۳/۷۵	۹۲۲/۴۳	-۰/۹۵

جدول (۳-۱۶): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری

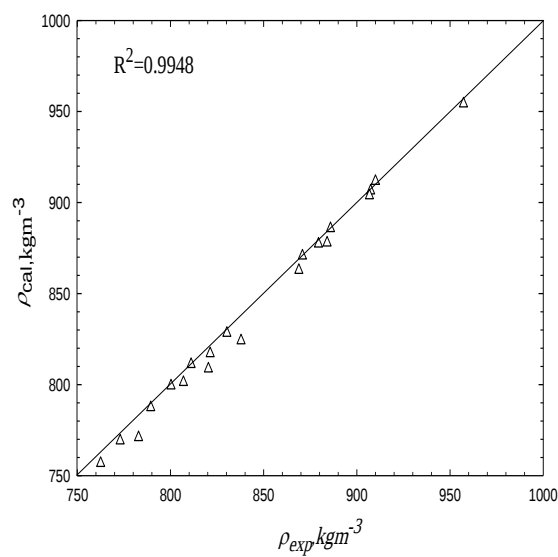
پیش‌بینی برای ۴- متیل ۲-پنتانول

مقدار تجربی	پاسخ شبکه	
۸۲۵/۱۲	۸۲۵/۱۲	۰/۷۴
861/70	861/70	$\frac{(\rho_{exp} - \rho_{cal})}{\rho_{exp}} \times 100$
915/35 (kgm ⁻³) دانسیته	915/35	
948/51	948/51	
809/33	809/33	0/67
844/46	844/46	-0/01
893/65	893/65	-0/55
930/84	930/84	-0/4۱
800/49	800/49	0/43
825/73	825/73	0/1۹
888/18	888/18	-0/41
926/20	926/20	-0/40
796/00	796/00	0/1۶
838/22	838/22	0/01
896/82	896/82	-0/2۶
931/86	931/86	-0/3۳
787/68	787/68	0/10
831/63	831/63	0/1۹
891/75	891/75	-0/0۵
927/79	927/79	-0/29
774/41	774/41	-0/0۹
821/16	821/16	0/3۹
883/49	883/49	0/19
920/35	920/35	-0/2۸

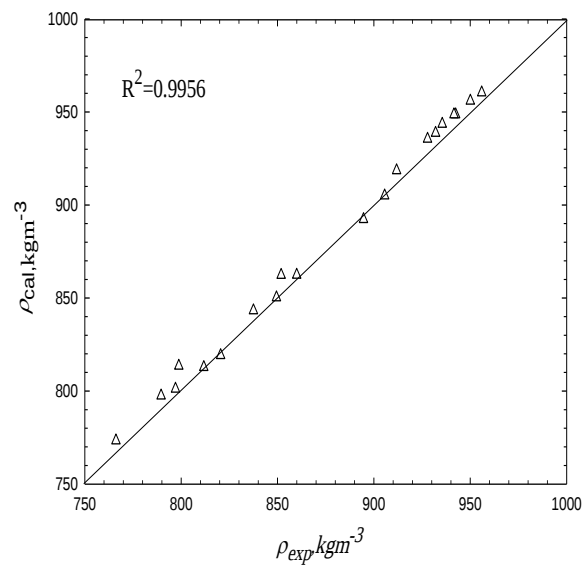
جدول (۳-۱۷): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری تائید

برای ۴- متیل ۲-پنتانول

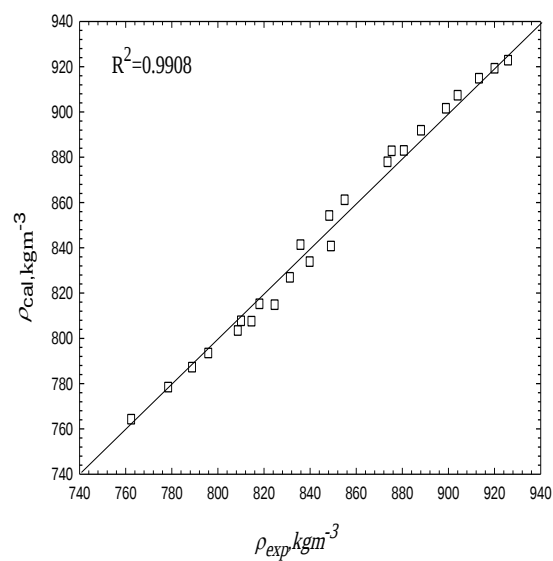
مقدار تجربی	پاسخ شبکه	
۸۱۸/۱۵	۷۹۷/۱۶	۲/۵۶
۸۴۰/۹۶	۸۲۲/۷۱	۲/۱۷
۸۹۹/۳۸	۸۹۲/۲۰	۰/۸۰
۹۳۶/۰۸	۹۲۹/۸۲	۰/۶۷
۸۱۶/۸۸	۸۰۱/۷۷	۱/۸۵
۸۵۴/۵۸	۸۴۳/۹۸	۱/۲۴
۹۰۹/۸۰	۹۰۵/۴۳	۰/۴۸
۹۴۴/۴۸	۹۳۹/۳۴	۰/۵۴
۸۰۸/۲۱	۷۹۸/۲۵	۱/۲۳
۸۴۷/۷۰	۸۴۰/۲۰	۰/۸۸
۹۰۴/۷۳	۹۰۱/۹۷	۰/۳۰
۹۳۹/۸۶	۹۳۶/۱۲	۰/۴۰
۷۸۷/۱۱	۷۸۶/۰۰	۰/۱۴
۸۱۳/۵۵	۸۰۹/۷۹	۰/۴۶
۸۷۹/۴۸	۸۷۹/۱۸	۰/۰۳
۹۱۸/۷۳	۹۱۷/۹۶	۰/۰۸
۷۷۸/۴۸	۷۸۲/۴۱	-۰/۵۰
۸۰۶/۹۹	۸۰۶/۷۲	۰/۰۳
۸۷۴/۴۱	۸۷۵/۴۶	-۰/۱۲
۹۱۴/۵۲	۹۱۴/۶۷	-۰/۰۲
۷۶۴/۵۰	۷۷۷/۰۲	-۱/۶۴
۷۹۷/۹۴	۸۰۳/۵۲	-۰/۷۰
۸۶۵/۷۵	۸۶۹/۹۷	-۰/۴۹
۹۰۷/۰۴	۹۰۹/۸۷	-۰/۳۱



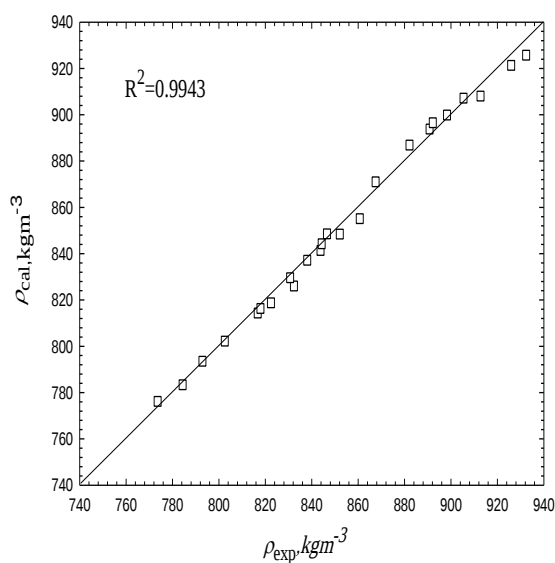
شکل (۳-۳): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۴ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- پروپانون در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۲-۳).



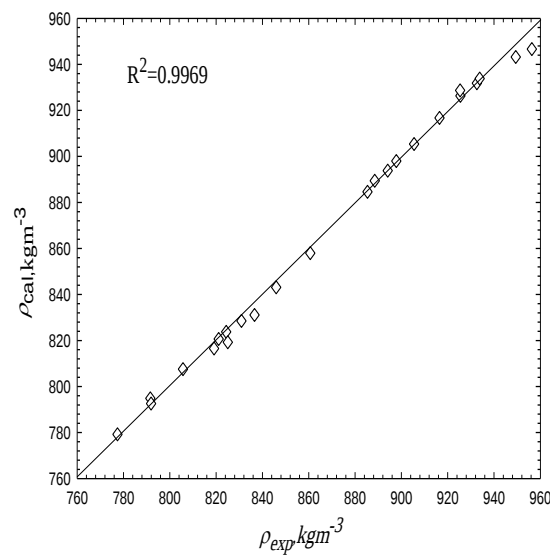
شکل (۴-۳): نمودار برگشت سری تأیید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۴ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- پروپانون در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۲-۳).



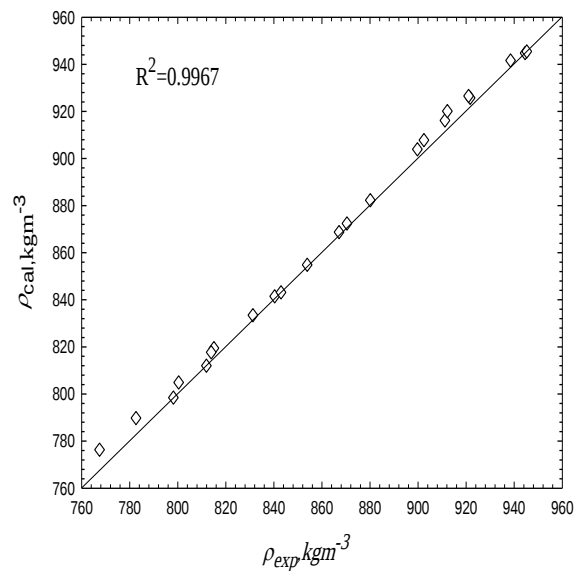
شکل (۳-۵): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- بوتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).



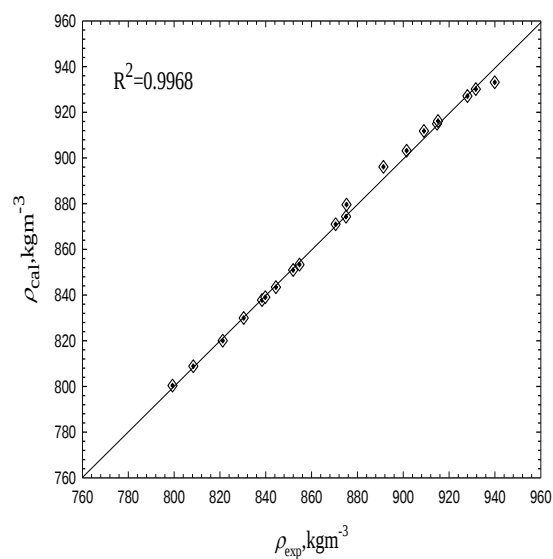
شکل (۳-۶): نمودار برگشت سری تأیید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- بوتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).



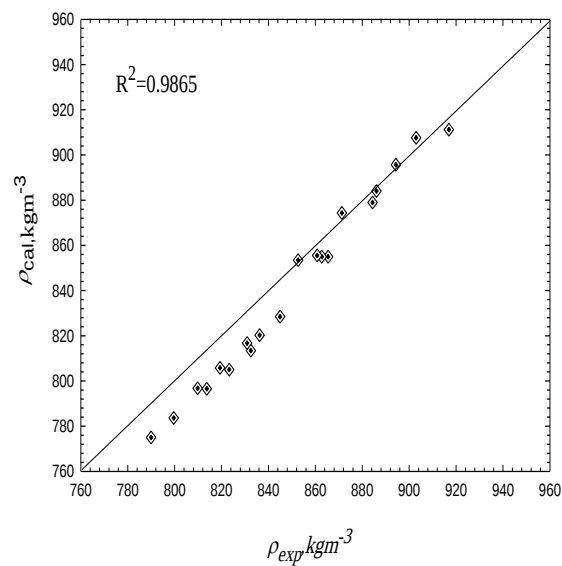
شکل (۷-۳): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- پنتانون در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۲-۳).



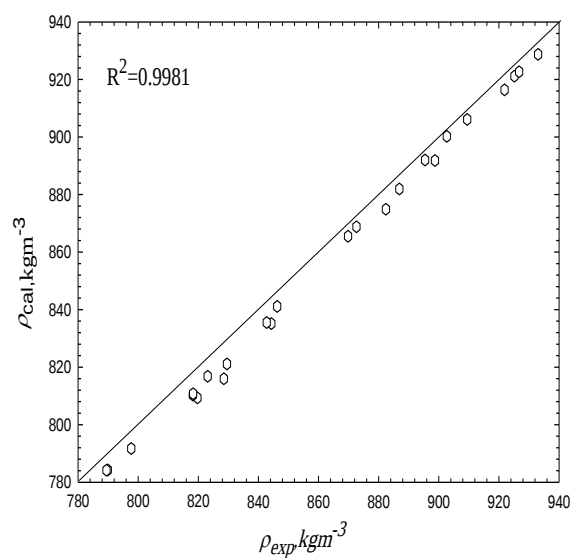
(نمودار برگشت سری تأیید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ شکل (۳-۳): توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- پنتانون در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۲-۳).



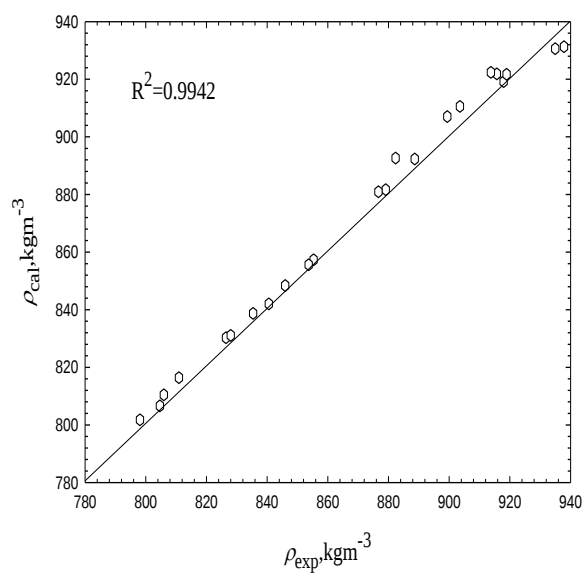
شکل (۳-۹): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۳- پنتانون در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).



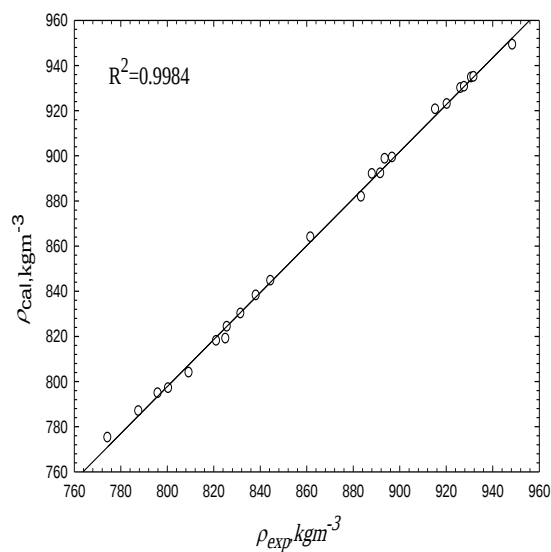
شکل (۳-۱۰): نمودار برگشت سری تأیید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۳- پنتانون در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).



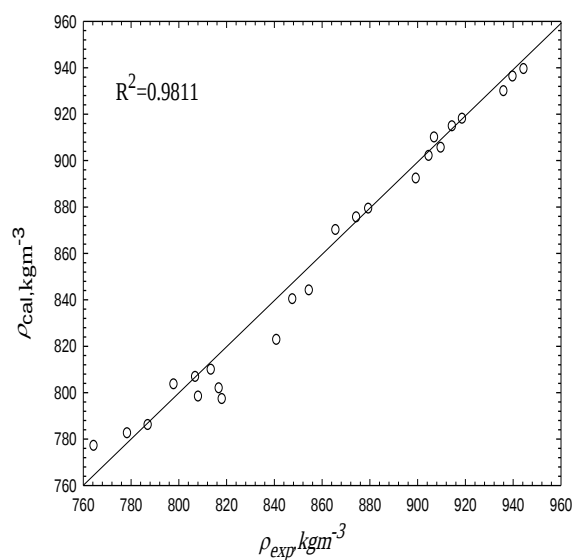
شکل (۳-۱۱): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- هگزانون در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).



شکل (۳-۱۲): نمودار برگشت سری تأیید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲- هگزانون در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).



شکل (۳-۱۳): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۴- متیل ۲- پنتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).



شکل (۳-۱۴): نمودار برگشت سری تائید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۴- متیل ۲- پنتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).

۳-۳-۶- ارائه یک شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی

دانشیته‌ی کتون‌ها

نتایجی که در قسمت ۳-۳-۵ به‌دست آمد حاکی از آن است که ایده‌ی به کارگیری روش سهم گروه‌ها در انتخاب توصیف‌کننده‌ها همراه با دو متغیر دما و فشار، به شبکه‌ی عصبی موجک این امکان را می‌دهد که ارتباط بسیارخوبی بین ورودی‌ها و خروجی‌ها برقرار کند به‌طوری‌که شبکه‌های بهینه شده توانسته‌اند به خوبی دانشیته‌ی کتون‌ها را پیش‌بینی کنند. این موضوع باعث شد که این سؤال در ذهن ایجاد شود که آیا می‌توان یک شبکه‌ی عصبی موجک جامع را طراحی کرد که بتواند با استفاده از دو متغیر دما و فشار و توصیف‌کننده‌های برمبنای سهم گروه‌ها برای پیش‌بینی دانشیته‌ی تمام کتون‌های موجود در جدول (۳-۲) در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار کارایی داشته باشد؟ در ادامه‌ی این قسمت چگونگی طراحی این شبکه‌ی عصبی موجک جامع توضیح داده می‌شود.

۳-۳-۶-الف- طراحی و بهینه‌سازی شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای

پیش‌بینی هم‌زمان دانشیته‌ی ۲- بوتانون و ۲- پنتانون

برای رسیدن به این هدف، در ابتدا تصمیم براین شد که شبکه‌ای طراحی گردد که بتواند دانشیته‌ی ۲- بوتانون و ۲- پنتانون را پیش‌بینی کند. بنابراین با این ایده، یک شبکه‌ی عصبی موجک با ۵ نرون ورودی و یک نرون خروجی طراحی شد. با استفاده از توصیف‌کننده‌های معرفی شده در جدول (۳-۳) برای کتون‌های موردنظر و انتقال اطلاعات ورودی، شبکه طبق دستورالعمل قسمت (۳-۳-۴) آموزش داده شد و مقدار بهینه‌ی پارامترهای شبکه تعیین می‌گردد. این مقادیر در جدول (۳-۱۸) گزارش شده است. بعد از این مرحله، برای ارزیابی عملکرد شبکه‌ی بهینه شده، از این شبکه جهت پیش‌بینی دانشیته‌ی دو کتون به طور هم‌زمان برای سری‌های پیش‌بینی و تأیید استفاده گردید

که نتایج آن در جدول (۳-۱۹) گزارش شده است. همچنین مقادیر دانسیته‌ی محاسبه شده، تجربی و درصد خطای نسبی برای این کتون‌ها در جداول (۳-۲۰) و (۳-۲۱) گردآوری شده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که شبکه‌ی بهینه شده می‌تواند دانسیته را با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۵۸٪/پیش‌بینی کند که این نشانگر کارایی مطلوب مدل بهینه شده است. همچنین نمودارهای برگشت سری پیش‌بینی و تأیید در شکل‌های (۳-۱۵) و (۳-۱۶) رسم گردیده است. مربع ضریب همبستگی نزدیک به یک در این نمودارها دلیل بر تأیید مقادیر پیش‌بینی شده توسط این شبکه است.

جدول (۳-۱۸): مقدار پارامترهای شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برای پیش‌بینی

هم‌زمان ۲- بوتانول و ۲- پنتانول.

پارامتر شبکه‌ی عصبی موجک	مقدار عددی پارامتر
تعداد نرون‌های ورودی	۵
تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی	۵
تعداد نرون‌های خروجی	۱
ممنتم	۰/۷
سرعت آموزش	۰/۰۱
تعداد دورهای آموزش	۱۰۰۰

جدول (۳-۱۹): متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی در محدوده‌ی دما (ΔT)

وفشار داده شده (ΔP) با استفاده از مقادیر بهینه شده برای سری پیش‌بینی و تأیید

سیال	تعداد نرون ورودی	$\Delta T (K)$	$\Delta p (MPa)$	$\left(\frac{ \Delta \rho }{\rho} \right)_{av}^a \times 100$	
				سری پیش‌بینی	سری تأیید
۲- بوتانول	۵	۲۷۸-۳۳۸	۲/۳۲-۳۷۵/۵۴	۰/۵۵ (۱/۵۲)	۰/۳۱ (۱/۱۲)
۲- پنتانول	۵	۲۷۸-۳۳۸	۲/۵۴۷-۳۷۵/۵	۰/۵۷ (۱/۸۴)	۰/۴۶ (۱/۳۱)

^a ماکزیمم درصد خطای نسبی در پرائنتر گزارش شده است.

جدول (۳-۲۰): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته‌ی سری

پیش‌بینی ۲- بوتانول و ۲- پنتانول.

دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۸۲۴/۶۱	824/63		۰/۰۰۳
849/01	844/56		0/52
880/63	875/26		0/6۱
925/84	920/18	4	0/61
814/56	814/92	4	-0/04
839/8	835/24	4	0/54
873/57	867/87	4	0/65
920/۰۰	915/57	4	0/48
808/63	807/98	4	0/08
831/24	825/93	4	0/6۴
875/36	869/35	4	0/6۹
913/25	910/18	4	0/33
788/8۰	789/44	4	-0/08
818/02	811/17	4	0/8۴
854/96	846/43	4	0/99
903/96	901/67	4	0/25
778/43	778/89	4	-0/05
809/99	801/64	4	1/03
848/3۰	837/84	4	1/23
898/9۰	895/37	4	0/39
762/37	762/48	4	-0/01
795/80	785/32	4	1/31
835/80	823/03	5	1/52
888/08	885/29	5	0/31
824/34	823/58	5	0/09
845/92	842/43	5	0/41
905/47	905/45		0/00۳
949/36	938/۰۰		1/19
821/09	818/61۹		0/30

ادامه‌ی جدول (۳-۲۰):

دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۸۶۰/۶۴	۸۵۶/۱۴		۰/۵۲
916/46	916/73		-0/0۳
956/34	938/68	5	1/84
805/72	803/85	5	0/23
830/95	824/83	5	0/73
894/08	893/15	5	0/10
932/57	930/74	5	0/19
791/58	788/39	5	0/40
819/1۰	810/36	5	1/0۷
885/37	882/76	5	0/29
925/46	925/87	5	-0/04
791/92	784/3۰	5	0/96
836/57	824/3۰	5	1/4۷
897/81	896/68	5	0/1۳
933/82	932/29	5	0/16
777/41	768/03	5	1/20
825/06	809/86	5	1/84
888/47	886/51		0/22
925/37	927/37		-0/21

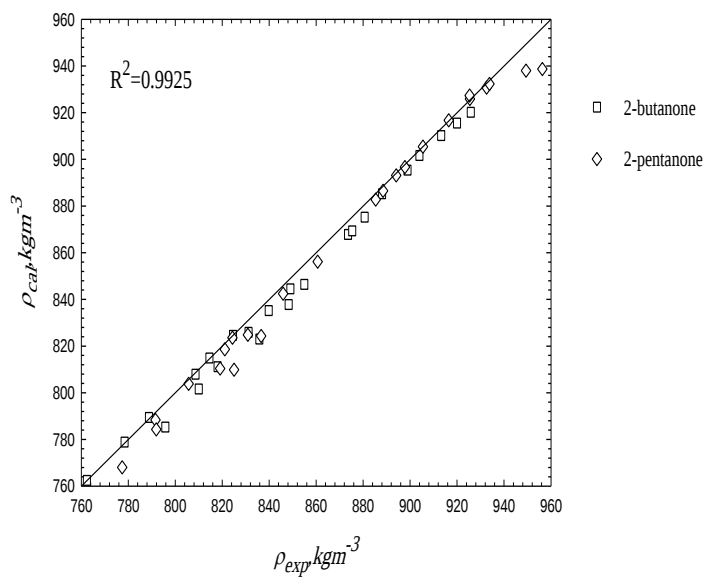
جدول (۳-۲): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته‌ی سری تائید

۲- بوتانول و ۲- پنتانول.

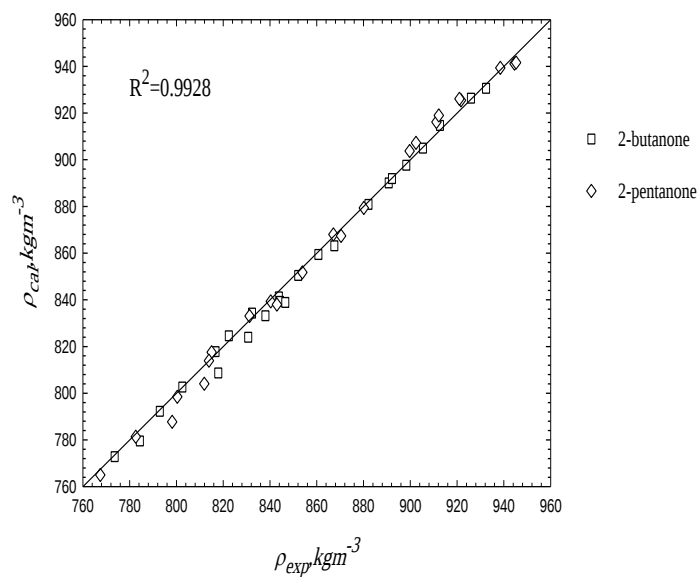
دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کرین	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۸۳۲/۳۱	۸۳۴/۳۰	۴	-۰/۲۴
۸۶۰/۶۸	۸۵۹/۴۱	۴	۰/۱۵
۸۹۸/۲۷	۸۹۷/۶۵	۴	۰/۰۷
۹۰۵/۴۱	۹۰۴/۹۹	۴	۰/۰۵
۸۲۲/۴۱	۸۲۴/۶۰	۴	-۰/۲۷
۸۵۲/۰۸	۸۵۰/۴۶	۴	۰/۱۹
۸۹۰/۷۷	۸۹۰/۰۹	۴	۰/۰۷
۸۳۲/۳۸	۹۳۰/۶۰	۴	۰/۱۹
۸۱۶/۷۳	۸۱۷/۸۱	۴	-۰/۱۳
۸۴۳/۷۸	۸۴۱/۲۷	۴	۰/۳۰
۸۹۲/۱۶	۸۹۱/۹۵	۴	۰/۱۱
۹۲۵/۹۳	۹۲۶/۳۸	۴	-۰/۰۵
۸۰۲/۵۳	۸۰۲/۶۷	۴	-۰/۰۲
۸۳۸/۰۵	۸۳۳/۲۰	۴	۰/۲۲
۸۴۴/۲۸	۸۳۹/۳۳	۴	۰/۵۸
۸۸۲/۰۹	۸۸۰/۸۹	۴	۰/۱۴
۷۹۲/۸۸	۷۹۲/۲۵	۴	۰/۰۸
۸۳۰/۷۱	۸۲۳/۹۸	۴	۰/۸۱
۸۶۷/۵۳	۸۶۳/۱۴	۴	۰/۵۰
۹۱۲/۶۹	۹۱۴/۶۹	۴	-۰/۲۲
۷۷۳/۵۹	۷۷۲/۸۷	۴	۰/۰۹
۷۸۴/۳۶	۷۷۹/۵۷	۴	۰/۶۱
۸۱۷/۹۱	۸۰۸/۶۹	۴	۱/۱۳
۸۴۶/۵۵	۸۳۸/۸۸	۴	۰/۹۱
۸۳۱/۲۷	۸۳۳/۱۰	۵	-۰/۲۲
۸۶۷/۱۱	۸۶۸/۰۰	۵	-۰/۱۰
۹۲۱/۶۴	۹۲۵/۴۸	۵	-۰/۴۲
۹۶۰/۷۰	۹۴۲/۳۷	۵	۱/۹۱
۸۱۵/۰۶	۸۱۷/۵۷	۵	-۰/۳۱
۸۴۰/۳۱	۸۳۹/۳۴	۵	۰/۱۱
۸۹۹/۶۹	۹۰۳/۷۳	۵	-۰/۴۵

ادامه‌ی جدول (۳-۲۱):

دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۹۴۴/۵۳	۹۴۱/۱۵	۵	۰/۳۶
۸۱۳/۹۰	۸۱۳/۹۶	۵	-۰/۰۱
۸۵۳/۸۸	۸۵۱/۷۸	۵	۰/۰۲۴
۹۱۱/۱۵	۹۱۶/۱۴	۵	-۰/۵۵
۹۴۵/۲۲	۹۴۱/۶۵	۵	۰/۳۸
۸۰۰/۳۶	۷۹۸/۴۵	۵	۰/۲۴
۸۴۲/۹۷	۸۳۸/۰۰	۵	۰/۵۹
۹۰۲/۴۳	۹۰۷/۲۴	۵	۰/۵۳
۹۳۸/۴۹	۹۳۹/۳۴	۵	-۰/۰۹
۷۸۲/۶۰	۷۸۱/۳۶	۵	۰/۱۶
۸۱۱/۹۳	۸۰۴/۰۸	۵	۰/۹۷
۸۸۰/۱۲	۸۷۹/۳۵	۵	۰/۰۹
۹۲۰/۹۹	۹۲۶/۰۹	۵	-۰/۵۵
۷۶۷/۴۶	۷۶۵/۰۲	۵	۰/۳۲
۷۹۸/۲۰	۷۸۷/۷۳	5	۱/۳۱
۸۷۰/۴۰	۸۶۷/۴۲	5	۰/۳۴
۹۱۲/۲۰	۹۱۹/۰۱	۵	-۰/۷۵



شکل (۳-۱۵): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده هم‌زمان توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲-پنتانول و ۲-پنتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).



شکل (۳-۱۶): نمودار برگشت سری تأیید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده هم‌زمان توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۵ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای ۲-پنتانول و ۲-پنتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).

۳-۳-۶-ب- طراحی و بهینه‌سازی شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای

پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی همه‌ی کتون‌ها

پس از به دست آوردن نتیجه‌ی مطلوب از مدل بهینه شده برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی این دوکتون، اطلاعات کتون‌های دیگر مرحله‌به‌مرحله به داده‌های ورودی اضافه گردید و به ازای افزایش هریک از این کتون‌ها شبکه‌ی موجک طراحی و بهینه‌سازی شد. اما در اینجا برای جلوگیری از طولانی شدن مطلب، فقط شبکه‌ی عصبی موجک نهایی که برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی همه‌ی کتون‌های موجود در جدول (۲-۳) طراحی و بهینه شده است، ارائه می‌شود. برای این منظور تمام کتون‌ها با ۴ گروه عاملی سازنده‌ی مولکول‌هایشان که متیل، متیلن، متین و گروه عاملی کربونیل می‌باشد، کدگذاری می‌شوند. این کد ۴ رقمی که بر مبنای مفهوم سهم گروه‌ها برای هر کتون شکل می‌گیرد، یک کد منحصر به فرد برای آن کتون است و هیچ دو کتونی دارای کد یکسان نخواهند بود. به عنوان مثال نحوه‌ی کدگذاری برای ترکیبات ۲- پروپانون و ۴- متیل-۲- پنتانون در ادامه توضیح داده می‌شود. در ترکیب ۲- پروپانون، فقط دو گروه متیل و یک گروه عاملی کربونیل ($>O=C$) وجود دارد و سایر گروه‌های عاملی وجود ندارند. بنابراین بعد از دما و فشار در ماتریس ورودی کد چهار رقمی (۲۰۰۱) در ستون‌های سوم تا ششم وارد می‌شود که مشخصه‌ی این مولکول می‌باشد و به صورت زیر در می‌آید:



در ترکیب ۴- متیل-۲- پنتانون، سه گروه متیل، یک گروه متیلن، یک گروه متین و یک گروه عاملی کربونیل وجود دارد. بنابراین در ماتریس ورودی بعد از دما و فشار کد چهار رقمی (۳۱۱۱) در ستون‌های سوم تا ششم آورده می‌شود که مشخصه‌ی این مولکول می‌باشد به صورت زیر:



در جدول (۲۲-۳) توصیف‌کننده‌هایی که بر مبنای سهم گروه‌ها می‌باشد، برای تمام کتون‌های مورد بررسی جدول (۲-۳) آورده شده است.

جدول (۲۲-۳): توصیف‌کننده‌های مورد استفاده در طراحی شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی جدول (۲-۳).

سیال	توصیف‌کننده‌های ماتریس ورودی					
	ستون اول	ستون دوم	ستون سوم	ستون چهارم	ستون پنجم	ستون ششم
۲- پروپانول	T	P	۲	۰	۰	۱
۲- بوتانول	T	P	۲	۱	۰	۱
۲- پنتانول	T	P	۲	۲	۰	۱
۳- پنتانول	T	P	۲	۲	۰	۱
۲- هگزانول	T	P	۲	۳	۰	۱
۴- متیل ۲- پنتانول	T	P	۳	۱	۱	۱

با استفاده از توصیف‌کننده‌های موجود در جدول (۲۲-۳) شبکه‌ی عصبی موجک با ۶ نرون ورودی و یک نرون خروجی طراحی گردید. اطلاعات ورودی همه‌ی این ترکیبات به صورت ۳ ماتریس جداگانه 467×6 برای سری آموزش، 136×6 برای سری پیش‌بینی و 136×6 برای سری تأیید تقسیم شد. اطلاعات خروجی متناظر با این ورودی‌ها نیز به صورت سه ماتریس جداگانه 467×1 برای سری آموزش، 136×1 برای سری پیش‌بینی و 136×1 برای سری تأیید درآمد. پس از آموزش شبکه طبق دستورالعمل (۴-۳-۳) مقدار بهینه‌ی پارامترهای شبکه تعیین گردید که این مقادیر در جدول (۲۳-۳) گزارش شده است.

جدول (۳-۲۳): مقدار پارامترهای شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده برای پیش‌بینی

هم‌زمان دانسیته‌ی تمام کتون‌های موجود در جدول (۳-۲)

مقدار عددی پارامتر	پارامتر شبکه‌ی عصبی موجک
۶	تعداد نرون‌های ورودی
۹	تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی
۱	تعداد نرون‌های خروجی
۰/۴	ممنتم
۰/۰۲	سرعت آموزش
۱۰۰۰	تعداد دورهای آموزش

۳-۳-۶-ج- ارزیابی شبکه‌ی عصبی موجک جامع بهینه شده با

استفاده از سری‌های پیش‌بینی و تائید

سپس شبکه‌ی آموزش‌دیده در پیش‌بینی دانسیته‌ی دو سری پیش‌بینی و تایید مورد استفاده قرار گرفت، تا عملکرد شبکه‌ی بهینه شده مورد ارزیابی قرار گیرد. نتایج محاسبه‌ی دانسیته توسط این شبکه در جدول (۳-۲۴) گزارش شده است. نتایج موجود در جدول نشان می‌دهد که شبکه توانسته است با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۱/۰۵٪ و ماکزیمم درصد خطای نسبی ۱/۹۵٪ دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی را پیش‌بینی کند. مقادیر دانسیته‌های محاسبه شده برای دو سری پیش‌بینی و تائید با استفاده از این شبکه به همراه مقادیر تجربی و درصد خطای نسبی کتون‌های مورد بررسی در جداول (۳-۲۶) و (۳-۲۷) گردآوری شده است. همچنین در شکل‌های (۳-۱۷) و (۳-۱۸) نمودارهای برگشت سری پیش‌بینی و تائید برای مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط این

شبکه برحسب مقادیر تجربی کتون‌های مورد بررسی رسم شده است. مقدار ضریب همبستگی در این نمودارها نشان دهنده‌ی این است که شبکه‌ی عصبی موجک جامع، کارایی مطلوبی در پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی جدول (۳-۲) در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار را دارد.

جدول (۳-۲۴): متوسط درصد خطای نسبی و MSE در پیش‌بینی دانسیته‌ی هم‌زمان کتون‌ها در محدوده‌ی دما (ΔT) و فشار داده شده (Δp) برای شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده برای سری پیش‌بینی و تأیید.

سیال	$\left(\frac{ \Delta \rho }{\rho} \right)_{av}^a \times 100$		MSE	
	سری پیش‌بینی	سری تأیید	سری پیش‌بینی	سری تأیید
۲- پروپان	۰/۷۷(۱/۶۷)	۰/۵۸(۱/۹۳)	۵۶/۶۲	۴۹/۸۳
۲- بوتان	۰/۸۴(۱/۴۱)	۰/۸۰(۱/۴۳)	۶۱/۴۴	۵۴/۸۲
۲- پنتان	۰/۵۱(۱/۲۱)	۰/۳۹(۱/۸۳)	۲۸/۳۸	۲۳/۹۵
۳- پنتان	۱/۰۳(۱/۵۹)	۰/۸۷(۱/۵۲)	۸۷/۹۸	۶۱/۰۰
۲- هگزان	۰/۶۴(۱/۹۲)	۰/۳۱(۱/۲۵)	۴۳/۵۸	۱۳/۴۶
۴- متیل ۲- پنتان	۰/۵۰(۱/۶۸)	۰/۴۳(۱/۷۲)	۳۱/۹۲	۲۴/۶۳

^a ماکزیمم درصد خطای نسبی در پیرامون گزارش شده است.

برای ارزیابی کارایی شبکه‌ی عصبی موجک جامع بهینه شده داده‌های یکی از کتون‌ها را به صورت تصادفی از شبکه‌ی عصبی موجک جامع حذف کرده (مثلاً ۲- هگزان)، سپس با ۵ کتون دیگر یک شبکه‌ی عصبی موجک طراحی و بهینه‌سازی شد. در مرحله بعد داده‌های دانسیته ۲- هگزان به صورت تصادفی به این شبکه‌ی بهینه شده داده شد و شبکه توانست دانسیته‌ی ۲- هگزان را با متوسط درصد خطای نسبی ۰/۴۰٪ پیش‌بینی کند که این نیز نشان‌دهنده‌ی کارایی مطلوب شبکه‌ی عصبی موجک جامع می‌باشد.

۳-۳-۶-۵- ارزیابی شبکه‌ی عصبی موجک جامع بهینه شده با

استفاده از روش Y- تصادفی^۳

به منظور اجتناب از همبستگی‌های تصادفی و تضمین قدرت شبکه، آزمون Y- تصادفی برای شبکه‌ی جامع نهایی انجام شد. لذا داده‌های دانسیته (متغیر وابسته) به صورت تصادفی ایجاد شدند. مدل شبکه‌ی عصبی موجک جامع بهینه شده با استفاده از ماتریس متغیرهای مستقل اصلی و مقادیر تصادفی دانسیته ترکیبات توسعه یافت. نتایج حاصل از چندین مجموعه تصادفی ایجاد شده در جدول (۳-۲۵) آورده شده است. مربع ضریب همبستگی پایین نشان‌دهنده‌ی عدم همبستگی تصادفی در مدل شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده می‌باشد.

جدول (۳-۲۵): مربع ضریب همبستگی به‌دست آمده با استفاده از روش Y- تصادفی برای سری پیش‌بینی و تأیید

شبکه‌ی عصبی موجک جامع با ۶ توصیف‌کننده

مربع ضریب همبستگی (R^2)	
سری پیش‌بینی	سری تأیید
۰/۱۱	۰/۲۴
۰/۱۴	۰/۰۴
۰/۰۶	۰/۱۰
۰/۱۸	۰/۲۲
۰/۰۸	۰/۰۳
۰/۲۰	۰/۰۲
۰/۰۵	۰/۰۹
۰/۲۳	۰/۱۸
۰/۱۰	۰/۱۵
۰/۲۱	۰/۲۴

جدول (۳-۲۶): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری

پیش‌بینی برای تمام کتون‌های موجود در جدول (۳-۲)

دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۸۱۱/۰۸	۸۰۸/۴۶	۳	0/32
۸۳۰/۲۷	۸۲۲/۸۷	۳	0/89
۸۷۰/۷۷	۸۵۹/۹۰	۳	1/25
۹۰۹/۹۶	۹۰۰/۷۹	۳	1/01
۸۰۰/۳۰	۸۰۱/۱۳	۳	-0/10
۸۲۱/۲۸	۸۱۵/۹۸	۳	0/64
۸۸۵/۸۴	۸۷۶/۹۸	۳	1/00
۹۵۷/۲۴	۹۴۱/۲۲	۳	1/67
۷۸۹/۴۱	۷۹۳/۵۳	۳	-0/52
۸۰۶/۹۶	۸۰۵/۱۶	۳	0/22
۸۷۹/۴۳	۸۷۱/۶۱	۳	0/89
۹۰۷/۴۲	۹۰۱/۵۱	۳	0/65
۷۷۲/۹۷	۷۸۱/۶۴	۳	-1/12
۸۲۰/۳۱	۸۱۴/۸۳	۳	0/67
۸۶۸/۸۹	۸۶۱/۸۸	۳	0/81
۹۰۶/۷۷	۹۰۲/۹۳	۳	0/42
۷۶۲/۵۰	۷۷۳/۳۸	۳	-1/43
۷۸۲/۸۶	۷۸۵/۲۸	۳	-0/31
۸۳۷/۸۴	۸۳۰/۰۱	۳	0/93
۸۸۴/۰۶	۸۷۸/۲۷	۳	0/65
۸۲۴/۶۱	۸۲۱/۸۱	۴	0/34
۸۴۹/۰۱	۸۴۰/۶۰	۴	0/99
۸۸۰/۶۳	۸۶۹/۸۸	۴	1/22
۹۲۵/۸۴	۹۱۵/۳۴	۴	1/13
۸۱۴/۵۶	۸۱۳/۹۴	۴	0/07
۸۳۹/۸۰	۸۳۲/۹۰	۴	0/82
۸۷۳/۵۷	۸۶۳/۵۸	۴	1/14
۹۲۰/۰۰	۹۱۰/۶۹	۴	1/01
۸۰۸/۶۳	۸۰۸/۵۸	۴	0/01
۸۳۱/۲۴	۸۲۵/۱۶	۴	0/73
۸۷۵/۳۶	۸۶۵/۵۵	۴	1/12

ادامه‌ی جدول (۳-۲۶):

[illegible]

ادامه‌ی جدول (۳-۲۶):

دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کرین	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۹۳۳/۸۲	929/49	۵	0/46
۷۷۷/۴۱	779/58	۵	-0/28
	815/11		
۸۲۵/۰۶	881/68	۵	1/21
۸۸۸/۴۷	922/21	۵	0/76
۹۲۵/۳۷	833/53	۵	0/34
	846/78		
۸۳۸/۳۹	865/32	۵	0/58
۸۵۴/۷۳	905/24	۵	0/93
۸۷۵/۰۴	825/71	۵	1/11
۹۱۴/۷۴	843/45	۵	1/04
	891/56		
۸۳۰/۳۷	905/63	۵	0/56
۸۵۱/۹۷	835/39	۵	0/99
۹۰۱/۴۷	859/37	۵	1/09
	899/29		
۹۱۵/۱۷	918/66	۵	1/04
۸۴۴/۴۳	803/70	۵	1/07
۸۷۰/۵۰	828/44	۵	1/28
	879/74		
۹۰۹/۰۲	922/18	۵	1/00
۹۲۷/۹۹	794/46	۵	0/58
۸۰۸/۳۷	810/22	۵	1/35
۸۳۹/۸۰	861/27	۵	1/29
	929/83		
۸۹۱/۳۲	831/58	۵	0/61
۹۳۱/۶۵	843/54	۵	1/34
۷۹۹/۳۳	866/09	۵	1/59
	898/80		
۸۲۱/۲۴	822/57	۵	-0/37
۸۷۵/۲۶	839/91	۵	0/09
۹۳۹/۹۲	867/14	۵	0/43
۸۲۸/۵۱		۶	0/43
			-0/35
۸۴۴/۲۸		۶	0/34
۸۶۹/۸۳		۶	0/62
۹۰۲/۶۷		۶	
۸۱۹/۷۳		۶	
۸۴۲/۷۶		۶	
۸۷۲/۶۰		۶	

ادامه‌ی جدول (۳-۲۶):

دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۹۰۹/۴۶	904/91	۶	0/50
۸۱۸/۱۹	818/36	۶	-0/02
	840/93		0/63
۸۴۶/۲۵	889/89	۶	0/62
۸۹۵/۴۵	927/83	۶	0/56
۹۳۳/۰۳	798/88	۶	-0/15
	816/77		0/77
۷۹۷/۷۱	878/80	۶	0/91
۸۲۳/۱۲	920/09	۶	0/55
۸۸۶/۸۹	788/96	۶	0/12
	808/50		1/19
۹۲۵/۱۵	870/92	۶	1/30
۷۸۹/۹۰	915/01	۶	0/74
۸۱۸/۳۰	782/01	۶	0/94
۸۸۲/۴۰	813/56	۶	1/92
	888/94		1/09
۹۲۱/۸۷	920/43	۶	0/68
۷۸۹/۴۷	831/83	۶	-0/81
۸۲۹/۵۲	861/93	۶	-0/03
۸۹۸/۷۲	914/84	۶	0/05
	941/45		0/74
۹۲۶/۷۲	817/70	۶	-1/03
۸۲۵/۱۲	844/17	۶	0/03
۸۶۱/۷۰	892/24	۶	0/16
	928/93		0/20
۹۱۵/۳۵	808/11	۶	-0/95
۹۴۸/۵۱	825/63	۶	0/01
۸۰۹/۳۳	885/09	۶	0/35
۸۴۴/۴۶	924/44	۶	0/19
	798/69		-۰/۳۴
۸۹۳/۶۵	831/36	۶	0/8۲
۹۳۰/۸۴	892/77	۶	0/45
۸۰۰/۴۹		۶	
۸۲۵/۷۳		۶	
۸۸۸/۱۸		۶	
۹۲۶/۲۰		۶	
۷۹۶/۰۰		۶	
۸۳۸/۲۲		۶	
۸۹۶/۸۲		۶	

ادامه‌ی جدول (۳-۲۶):

دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۹۳۱/۸۶	۹۲۸/۹۲	۶	0/31
۷۸۷/۶۸	788/37	۶	-0/09
۸۳۱/۶۳	۸۲۱/۸۰	۶	1/18
۸۹۱/۷۵	۸۸۵/۲۹	۶	0/72
۹۲۷/۷۹	۹۲۴/۶۳	۶	0/34
۷۷۴/۴۱	۷۷۲/۷۸	۶	0/21
۸۲۱/۱۶	۸۰۷/۳۲	۶	1/68
۸۸۳/۴۹	۸۷۳/۹۸	۶	1/07
۹۲۰/۳۵	۹۱۶/۹۴	۶	0/37

جدول (۳-۲۷): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته‌ی سری تائید

برای تمام کتون‌های موجود در جدول (۳-۲)

دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۸۱۹/۲۳	۸۱۹/۲۳	۳	۰
۸۵۰/۳۱	۸۴۵/۵۰	۳	۰/۵۶
۸۹۲/۳۵	۸۸۸/۳۴	۳	۰/۴۵
۹۴۸/۶۸	۹۳۷/۵۹	۳	۱/۱۷
۸۱۲/۸۱	۸۱۳/۳۴	۳	-۰/۰۶
۸۶۲/۴۱	۸۵۷/۴۱	۳	۰/۵۸
۹۰۵/۰۸	۹۰۲/۳۰	۳	۰/۳۱
۹۶۰/۴۸	۹۴۱/۹۳	۳	۱/۹۳
۸۰۱/۱۸	۸۰۲/۰۷	۳	-۰/۱۱
۸۴۳/۳۱	۸۳۸/۸۰	۳	۰/۵۳
۹۳۸/۶۹	۹۳۳/۳۳	۳	۰/۵۷
۹۵۵/۹۷	۹۴۱/۵۴	۳	۱/۵۱
۷۹۷/۵۵	۷۹۸/۲۶	۳	-۰/۰۹
۹۳۵/۵۱	۹۳۲/۵۸	۳	۰/۳۱
۹۴۳/۵۶	۹۳۷/۶۶	۳	۰/۶۲
۹۴۸/۶۹	۹۴۰/۱۱	۳	۰/۹۰
۷۷۳/۴۱	۷۷۸/۸۹	۳	-۰/۷۱
۸۱۳/۵۱	۸۰۸/۴۷	۳	۰/۶۲
۸۶۲/۳۹	۸۵۷/۲۱	۳	۰/۶۰
۹۱۸/۶۳	۹۱۸/۶۱	۳	۰/۰۰۲
۸۳۲/۳۱	۸۲۸/۰۱	۴	۰/۵۲
۸۶۰/۶۸	۸۵۲/۵۵	۴	۰/۹۴
۸۹۸/۲۷	۸۹۰/۳۸	۴	۰/۸۸
۹۰۵/۴۱	۸۹۷/۸۰	۴	۰/۸۴
۸۲۲/۴۱	۸۱۹/۲۴	۴	۰/۳۸
۸۵۲/۰۸	۸۴۴/۳۵	۴	۰/۹۱
۸۹۰/۷۷	۸۸۳/۲۰	۴	۰/۸۵
۹۳۲/۳۸	۹۲۴/۹۱	۴	۰/۸۰
۸۱۶/۷۳	۸۱۳/۲۹	۴	۰/۴۲
۸۴۳/۷۸	۸۳۵/۹۳	۴	۰/۹۳
۸۹۲/۱۶	۸۸۵/۳۳	۴	۰/۷۶

ادامه‌ی جدول (۳-۲۷):

دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۹۲۵/۹۳	۹۲۰/۴۳	۴	۰/۵۹
۸۰۲/۵۳	۷۹۹/۵۴	۴	۰/۳۷
۸۳۸/۰۵	۸۲۸/۷۹	۴	۱/۱۰
۸۴۴/۲۸	۸۳۴/۶۷	۴	۱/۱۴
۸۸۲/۰۹	۸۷۴/۸۰	۴	۰/۸۳
۷۹۲/۸۸	۷۹۰/۰۶	۴	۰/۳۵
۸۳۰/۷۱	۸۲۰/۳۱	۴	۱/۲۵
۸۶۷/۵۳	۸۵۷/۸۰	۴	۱/۱۲
۹۱۲/۶۹	۹۰۸/۳۸	۴	۰/۴۷
۷۷۳/۵۹	۷۷۲/۲۶	۴	۰/۱۷
۷۸۴/۳۶	۷۷۸/۶۱	۴	۰/۷۳
۸۱۷/۹۱	۸۰۶/۲۱	۴	۱/۴۳
۸۴۶/۵۵	۸۳۴/۸۴	۴	۱/۳۸
۸۳۱/۲۷	۸۳۳/۴۷	۵	-۰/۲۶
۸۶۷/۱۱	۸۶۶/۲۶	۵	۰/۱۰
۹۲۱/۶۴	۹۲۱/۶۵	۵	۰/۰۰۱
۹۶۰/۷۰	۹۴۳/۰۷	۵	۱/۸۳
۸۱۵/۰۶	۸۱۹/۱۰	۵	-۰/۴۹
۸۴۰/۳۱	۸۳۹/۴۶	۵	۰/۱۰
۸۹۹/۶۹	۹۰۰/۲۲	۵	-۰/۰۶
۹۴۴/۵۳	۹۳۸/۸۳	۵	۰/۶۰
۸۱۳/۹۰	۸۱۵/۸۷	۵	-۰/۲۴
۸۵۳/۸۸	۸۵۱/۱۳	۵	۰/۳۲
۹۱۱/۱۵	۹۱۲/۱۹	۵	-۰/۱۱
۹۴۵/۲۲	۹۳۹/۴۶	۵	۰/۶۱
۸۰۰/۳۶	۸۰۱/۵۷	۵	-۰/۱۵
۸۴۲/۹۷	۸۳۸/۲۷	۵	۰/۵۶
۹۰۲/۴۳	۹۰۳/۳۴	۵	-۰/۱۰
۹۳۸/۴۹	۹۳۶/۲۷	۵	۰/۲۴
۷۸۲/۶۰	۷۸۵/۷۶	۵	-۰/۴۰
۸۱۱/۹۳	۸۰۶/۷۹	۵	۰/۶۳
۸۸۰/۱۲	۸۷۶/۶۹	۵	۰/۳۹
۹۲۰/۹۹	۹۲۱/۷۶	۵	-۰/۰۸

ادامه‌ی جدول (۳-۲۷):

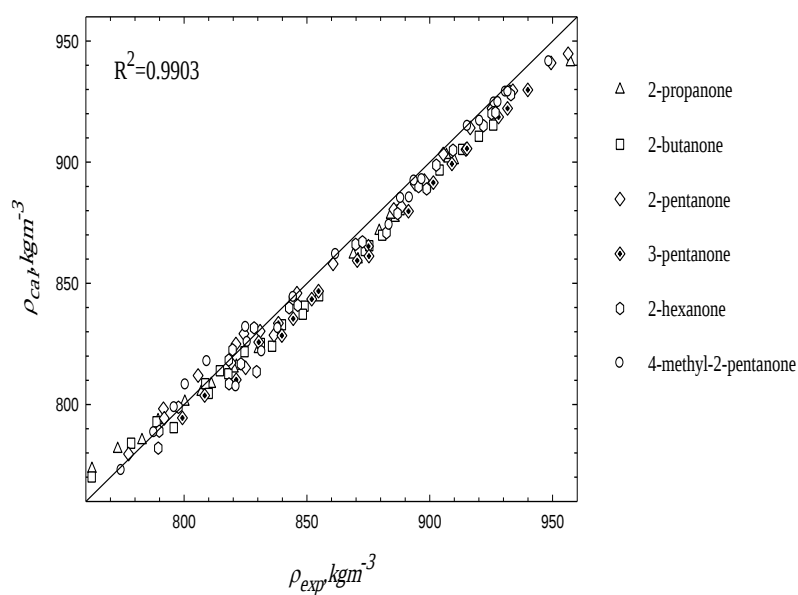
دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۷۶۷/۴۶	۷۷۰/۶۵	۵ 5 6 6 6 6 6 6 6	-۰/۴۱
۷۹۸/۲۰	۷۹۱/۶۱		۰/۸۲
۸۷۰/۴۰	۸۶۵/۲۶		۰/۵۹
۹۱۲/۲۰	۹۱۴/۳۷		-۰/۲۴
۸۳۲/۵۰	۸۲۸/۰۷		۰/۵۳
۸۴۴/۹۷	۸۳۸/۱۳		۰/۸۱
۸۶۵/۴۴	۸۵۶/۹۲		۰/۹۸
۸۸۴/۳۸	۸۷۵/۹۹		۰/۹۵
۸۲۳/۲۸	۸۱۹/۱۰		۰/۵۱
۸۳۶/۲۲	۸۲۹/۲۰		۰/۸۴
۸۶۲/۷۳	۸۵۳/۸۳		۱/۰۳
۸۸۶/۰۷	۸۷۷/۷۸		۰/۹۳
۸۱۳/۷۰	۸۰۹/۹۰		۰/۴۷
۸۳۰/۹۱	۸۲۳/۲۲		۰/۹۳
۸۶۰/۷۸	۸۵۰/۸۷		۱/۱۵
۸۹۴/۳۵	۸۸۶/۶۸		۰/۸۶
۷۹۹/۵۹	۷۹۵/۵۷		۰/۵۰
۸۱۹/۳۷	۸۰۹/۹۶		۱/۱۵
۸۷۱/۲۹	۸۶۰/۸۲		۱/۲۰
۹۱۶/۹۲	۹۱۱/۸۹		۰/۵۵
۷۸۹/۹۹	۷۸۵/۷۶		۰/۵۳
۸۰۹/۸۰	۷۹۹/۷۲		۱/۲۴
۸۵۲/۶۳	۸۳۹/۶۷		۱/۵۲
۹۰۲/۹۴	۸۹۶/۷۷		۰/۶۸
۸۳۵/۳۹	۸۳۷/۰۲		-۰/۱۹
۸۵۵/۳۱	۸۵۴/۶۱		۰/۰۸
۸۷۹/۱۰	۸۷۸/۴۳		۰/۰۸
۹۱۷/۹۴	۹۱۸/۵۳		-۰/۰۶
۸۲۶/۴۶	۸۲۷/۷۱		-۰/۱۵
۸۵۳/۷۰	۸۵۱/۶۴		۰/۲۴
۸۸۸/۶۶	۸۸۸/۱۴		۰/۰۶
۹۱۵/۷۰	۹۲۱/۲۸		-۰/۶۱
۸۱۰/۹۵	۸۱۳/۲۰		-۰/۲۸

ادامه‌ی جدول (۳-۲۷):

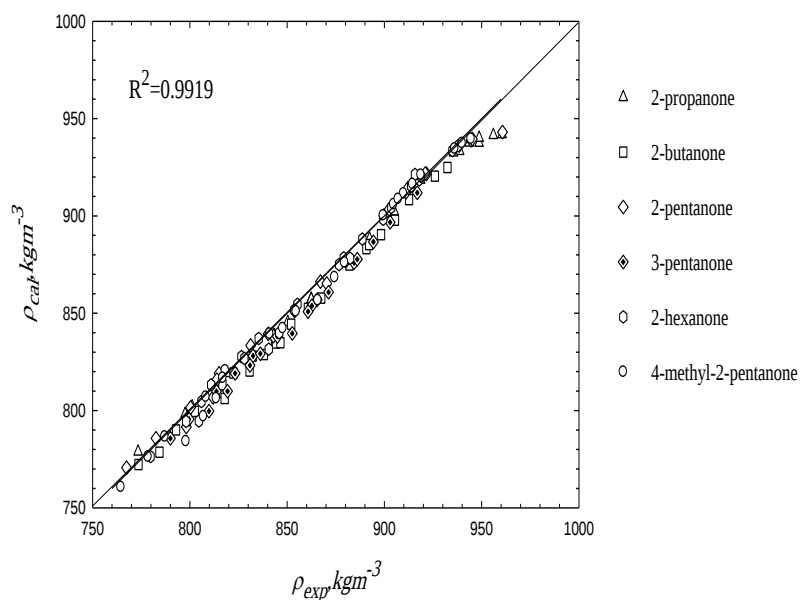
دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۸۲۸/۰۱	۸۲۶/۷۸	۶	۰/۱۵
۸۷۶/۶۷	۸۷۴/۹۷	۶	۰/۱۹
۹۱۸/۹۰	۹۲۰/۳۳	۶	-۰/۱۵
۸۰۵/۹۷	۸۰۴/۶۸	۶	۰/۱۶
۸۴۵/۹۴	۸۴۰/۰۲	۶	۰/۷۰
۹۰۳/۵۵	۹۰۴/۳۷	۶	-۰/۰۹
۹۳۷/۸۴	۹۳۶/۰۲	۶	۰/۱۹
۷۹۸/۱۰	۷۹۴/۴۵	۶	۰/۴۶
۸۴۰/۵۵	۸۳۱/۵۲	۶	۱/۰۷
۸۹۹/۳۸	۸۹۸/۲۷	۶	۰/۱۲
۹۳۴/۹۴	۹۳۳/۵۵	۶	۰/۱۵
۷۷۹/۸۰	۷۷۶/۳۳	۶	۰/۴۴
۸۰۴/۶۵	۷۹۴/۶۲	۶	۱/۲۵
۸۸۲/۳۵	۸۷۸/۲۶	۶	۰/۴۶
۹۱۳/۷۵	۹۱۵/۴۰	۶	-۰/۱۸
۸۱۸/۱۵	۸۲۰/۵۹	۶	-۰/۳۰
۸۴۰/۹۶	۸۳۹/۴۰	۶	۰/۱۸
۸۹۹/۳۸	۹۰۰/۱۹	۶	-۰/۰۹
۹۳۶/۰۸	۹۳۴/۵۴	۶	۰/۱۶
۸۱۶/۸۸	۸۱۶/۸۱	۶	۰/۰۰۸
۸۵۴/۵۸	۸۵۰/۹۷	۶	۰/۴۲
۹۰۹/۸۰	۹۱۱/۴۵	۶	-۰/۱۸
۹۴۴/۴۸	۹۳۹/۵۷	۶	۰/۵۲
۸۰۸/۲۱	۸۰۷/۰۵	۶	۰/۱۴
۸۴۷/۷۰	۸۴۲/۲۴	۶	۰/۶۴
۹۰۴/۷۳	۹۰۵/۹۴	۶	-۰/۱۳
۹۳۹/۸۶	۹۳۷/۴۱	۶	۰/۲۶
۷۸۷/۱۱	۷۸۶/۵۶	۶	۰/۰۷
۸۱۳/۵۵	۸۰۶/۲۹	۶	۰/۸۹
۸۷۹/۴۸	۸۷۶/۰۹	۶	۰/۳۸
۹۱۸/۷۳	۹۲۱/۱۰	۶	-۰/۲۶
۷۷۸/۴۸	۷۷۶/۳۰	۶	۰/۲۸
۸۰۶/۹۹	۷۹۷/۰۲	6	۱/۲۳

ادامه‌ی جدول (۳-۲۷):

دانسیته (kgm^{-3})		تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۸۷۴/۴۱	۸۴۶/۴۹	6	۰/۶۸
۹۱۴/۵۲	۹۱۶/۳۵	۶	-۰/۲۰
۷۶۴/۵۰	۷۶۰/۷۰	6	۰/۵۰
۷۹۷/۹۴	۷۸۴/۲۲	6	۱/۷۲
۸۶۵/۷۵	۸۵۶/۶۳	6	۱/۰۵
۹۰۷/۰۴	۹۰۸/۶۳	6	-۰/۱۷



شکل (۳-۱۷): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده هم-زمان توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای همه‌ی کتون‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).



شکل (۳-۱۸): نمودار برگشت سری تأیید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده هم-زمان توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۶ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای همه‌ی کتون‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).

۳-۷- اثر افزایش تعداد کربن کتون‌ها در ماتریس ورودی

پس از ارائه‌ی یک شبکه‌ی عصبی موجک جامع با ۶ توصیف‌کننده برای پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌ها، این موضوع مد نظر قرار گرفت که آیا می‌توان عملکرد شبکه‌ی جامع را بهبود داد به گونه‌ای که بتواند با خطای کمتری دانسیته را پیش‌بینی کند؟

نتایج قسمت (۳-۱-۶) نشان می‌داد که در محاسبه‌ی دانسیته بر مبنای سهم گروه‌ها، دانسیته علاوه بر دما و فشار و سهم گروه‌های عاملی به تعداد کربن نیز وابسته است لذا با این ایده، اثر افزایش تعداد کربن کتون‌ها به عنوان یک توصیف‌کننده‌ی جدید مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور، تعداد کربن مربوط به هر ترکیب در ستون هفتم ماتریس ورودی اضافه شد. در نتیجه یک شبکه‌ی عصبی موجک جامع با ۷ توصیف‌کننده (۷ نرون ورودی) و یک نرون خروجی طراحی گردید. پس از انتقال اطلاعات ورودی مربوط به هریک از کتون‌ها به شبکه و آموزش آن، مقدار بهینه‌ی پارامترهای شبکه مشخص گردید که نتایج آن در جدول (۳-۲۸) گزارش شده است.

جدول (۳-۲۸): مقدار پارامترهای شبکه‌عصبی موجک بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف‌کننده برای پیش‌بینی همزمان

دانسیته‌ی تمام کتون‌های مورد بررسی

مقدار عددی پارامتر	پارامتر شبکه‌ی عصبی موجک
۷	تعداد نرون‌های ورودی
۱۷	تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی
۱	تعداد نرون‌های خروجی
۰/۹	ممنتم
۰/۰۱	سرعت آموزش
۱۲۰۰۰	تعداد دورهای آموزش

در مرحله‌ی بعد دانسیته‌ی کتون‌ها در دما و فشارهای مربوط به سری پیش‌بینی و تائید توسط شبکه‌ی بهینه شده، محاسبه گردید که نتایج آن در جدول (۳-۲۹) آمده است. با توجه به نتایج موجود در جدول، شبکه‌ی بهینه شده توانسته است دانسیته‌ی همه کتون‌ها را با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۱/۱٪ و ماکزیمم درصد خطای نسبی ۲/۱٪ پیش‌بینی کند. مقادیر دانسیته‌های محاسبه شده سری پیش‌بینی و تائید با استفاده از این شبکه به همراه مقادیر تجربی و درصد خطای نسبی برای همه‌ی کتون‌ها در جداول (۳-۳۰) و (۳-۳۱) گردآوری شده است. همچنین نمودارهای برگشت سری پیش‌بینی و تائید برای مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط این شبکه برحسب مقادیر تجربی در شکل‌های (۳-۱۹) و (۳-۲۰) رسم شده است. مقایسه‌ی بین متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته با استفاده از شبکه‌ی بهینه شده مربوط به سری پیش‌بینی و تائید در این قسمت و قسمت (۳-۳-۶-ب) در شکل (۳-۲۱) نشان می‌دهد که افزایش تعداد کربن به عنوان یک توصیف‌کننده به شبکه‌ی عصبی موجدک جامع اثر مثبت قابل توجهی در پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی جدول (۳-۲) در محدوده‌ی دما و فشار موجود ندارد. زیرا تعداد کربن در توصیف‌کننده‌های روش سهم گروه به صورت غیرمستقیم لحاظ شده است.

جدول (۳-۲۹): متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی دانسیته‌ی هم‌زمان کتون‌ها در محدوده‌ی دما (ΔT) و فشار

داده شده (Δp) برای شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف‌کننده برای سری پیش‌بینی و تأیید.

تعداد کربن		دانسیته (kgm^{-3})		$\left(\frac{ \Delta \rho }{\rho_{\text{exp}}} \right)^a \times \frac{\rho_{\text{cal}}}{\rho_{\text{exp}}^{av}} \times 100$	
سیال	نرون ورودی	ΔT (K)	Δp (MPa)	سری پیش‌بینی	سری تأیید
۲- پروپانون	۴	۲۷۸-۳۲۳	۲/۵۰۰-۳۸۸/۲	۰/۴۸(۲/۰۶)	۰/۶۳(۱/۹۷)
۲- بوتانون	۵	۲۷۸-۳۳۸	۲/۳۲-۳۷۵/۵۴	۰/۸۵(۱/۷۷)	۰/۸۷(۱/۶۲)
۲- پنتانون	۵	۲۷۸-۳۳۸	۲/۵۴۷-۳۷۵/۵	۰/۴۲(۱/۹۷)	۰/۴۰(۱/۹۷)
۳- پنتانون	۵	۲۷۸-۳۲۳	۲/۵۵-۳۸۱/۰۶	۱/۰۸(۱/۸۱)	۰/۹۱(۱/۶۰)
۲- هگزانون	۵	۲۷۸-۳۳۸	۲/۵۴۷-۳۶۹/۶	۰/۳۳(۱/۴۴)	۰/۲۹(۱/۱۵)
۴- متیل ۲- پنتانون	۶	۲۷۸-۳۳۸	۲/۵۴۷-۳۸۰/۵	۰/۵۴(۲/۰۰)	۰/۴۶(۱/۷۴)

^a ماکزیمم درصد خطای نسبی در پیرانتز گزارش شده است.

مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۸۱۱/۰۸ ۸۳۰/۲۷	۸۱۵/۲۴ ۸۳۰/۱۱	تعداد کریں ۳	$\frac{(\rho_{exp} - \rho_{cal})}{\rho_{exp}} \times 100$
۸۷۰/۷۷	۸۶۷/۹۹	۳	۰/۳۲
۹۰۹/۹۶	۹۰۸/۰۰	۳	۰/۲۱
۸۰۰/۳۰	۸۰۵/۶۹	۳	-۰/۶۷
۸۲۱/۲۸	۸۲۱/۱۲	۳	۰/۰۲
۸۸۵/۸۴	۸۸۳/۵۹	۳	۰/۲۵
۹۵۷/۲۴	۹۳۷/۵۱	۳	۲/۰۶
۷۸۹/۴۱	۷۹۵/۹۲	۳	-۰/۸۲
۸۰۶/۹۶	۸۰۸/۰۶	۳	-۰/۱۴
۸۷۹/۴۳	۸۷۶/۸۷	۳	۰/۲۹
۹۰۷/۴۲	۹۰۶/۳۹	۳	۰/۱۱
۷۷۲/۹۷	۷۸۰/۸۴	۳	-۱/۰۱
۸۲۰/۳۱	۸۱۵/۸۵	۳	۰/۵۴
۸۶۸/۸۹	۸۶۵/۱۹	۳	۰/۴۳
۹۰۶/۷۷	۹۰۶/۵۳	۳	۰/۰۲
۷۶۲/۵۰	۷۷۰/۵۳	۳	-۱/۰۵
۷۸۲/۸۶	۷۸۳/۱۴	۳	-۰/۰۳
۸۳۷/۸۴	۸۳۰/۶۸	۳	۰/۸۵
۸۸۴/۰۶	۸۸۱/۲۴	۳	۰/۳۲
۸۲۴/۶۱	۸۲۱/۱۴	۴	۰/۴۲
۸۴۹/۰۱	۸۴۱/۱۵	۴	۰/۹۳
۸۸۰/۶۳	۸۷۱/۹۴	۴	۰/۹۹
۹۲۵/۸۴	۹۱۷/۳۳	۴	۰/۹۲
۸۱۴/۵۶	۸۱۱/۷۳	۴	۰/۳۵
۸۳۹/۸۰	۸۳۲/۰۷	۴	۰/۹۲
۸۷۳/۵۷	۸۶۴/۷۱	۴	۱/۰۱
۹۲۰/۰۰	۹۱۲/۶۹	۴	۰/۷۹
۸۰۸/۶۳	۸۰۵/۱۰	۴	۰/۴۴
۸۳۱/۲۴	۸۲۳/۰۳	۴	۰/۹۹
۸۷۵/۳۶	۸۶۶/۳۵	۴	۱/۰۳

جدول (۳-۳۰): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری

پیش‌بینی برای تمام کتون‌های موجود در جدول (۳-۲)

مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
$\frac{\rho_{exp} - \rho_{cal}}{\rho_{exp}} \times 100$ ۹۱۳/۲۵ (kgm ⁻³) ۷۸۸/۸۰	۹۰۷/۳۱ ۷۸۷/۰۵	۴ تعداد کربن ۴	
۸۱۸/۰۲	۸۰۸/۶۹	۴	۱/۱۴
۸۵۴/۹۶	۸۴۳/۷۶	۴	۱/۳۰
۹۰۳/۹۶	۸۹۸/۸۷	۴	۰/۵۶
۷۷۸/۴۳	۷۷۶/۸۴	۴	۰/۲۰
۸۰۹/۹۹	۷۹۹/۴۶	۴	۱/۳۰
۸۴۸/۳۰	۸۳۵/۴	۴	۱/۵۲
۸۹۸/۹۰	۸۹۲/۶۵	۴	۰/۶۹
۷۶۲/۳۷	۷۶۰/۹۵	۴	۰/۱۹
۷۹۵/۸۰	۷۸۳/۶۲	۴	۱/۵۳
۸۳۵/۸۰	۸۲۰/۹۸	۴	۱/۷۷
۸۸۸/۰۸	۸۸۲/۷۴	۴	۰/۶۰
۸۲۴/۳۴	۸۲۵/۸۶	۵	-۰/۱۸
۸۴۵/۹۲	۸۴۴/۲۳	۵	۰/۲۰
۹۰۵/۴۷	۹۰۵/۴۹	۵	-۰/۰۰۱
۹۴۹/۳۶	۹۳۶/۹۰	۵	۱/۳۱
۸۲۱/۰۹	۸۲۱/۱۶	۵	-۰/۰۰۸
۸۶۰/۶۴	۸۵۷/۷۲	۵	۰/۳۴
۹۱۶/۴۶	۹۱۶/۴۷	۵	۰/۰۰۲
۹۵۶/۳۴	۹۳۷/۵	۵	۱/۹۷
۸۰۵/۷۲	۸۰۶/۹۲	۵	-۰/۱۵
۸۳۰/۹۵	۸۲۷/۳۷	۵	۰/۴۳
۸۹۴/۰۸	۸۹۳/۷۵	۵	۰/۰۴
۹۳۲/۵۷	۹۳۰/۰۳	۵	۰/۲۷
۷۹۱/۵۸	۷۹۲/۰۷	۵	-۰/۰۶
۸۱۹/۱۰	۸۱۳/۴۹	۵	۰/۶۸
۸۸۵/۳۷	۸۸۳/۸۳	۵	۰/۱۷
۹۲۵/۴۶	۹۲۵/۴۳	۵	۰/۰۰۴
۷۹۱/۹۲	۷۸۸/۲۳	۵	۰/۴۶
۸۳۶/۵۷	۸۲۷/۲۱	۵	۱/۱۲
۸۹۷/۸۱	۸۹۷/۳۸	۵	۰/۰۵

ادامه‌ی جدول (۳-۳۰):

ادامه‌ی جدول (۳-۳۰):

مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
دانسیته (kgm ⁻³) ۹۳۳/۸۲	۹۳۱/۶۰	تعداد کربن	$\frac{(\rho_{exp} - \rho_{ref})}{\rho_{ref}} \times 100$
۷۷۷/۴۱	۷۷۲/۶۰	۵	$\rho_{exp}/۶۲$
۸۲۵/۰۶	۸۱۳/۳۶	۵	۱/۴۲
۸۸۸/۴۷	۸۸۷/۷۰	۵	۰/۰۹
۹۲۵/۳۷	۹۲۶/۹۸	۵	-۰/۱۷
۸۳۸/۳۹	۸۳۰/۵۹	۵	۰/۹۳
۸۵۴/۷۳	۸۴۵/۱۵	۵	۱/۱۲
۸۷۵/۰۴	۸۶۵/۳۷	۵	۱/۱۰
۹۱۴/۷۴	۹۰۷/۳۵	۵	۰/۸۱
۸۳۰/۳۷	۸۲۲/۰۳	۵	۱/۰۰
۸۵۱/۹۷	۸۴۱/۶۹	۵	۱/۲۱
۹۰۱/۴۷	۸۹۳/۸۰	۵	۰/۸۵
۹۱۵/۱۷	۹۰۸/۲۱	۵	۰/۷۶
۸۴۴/۴۳	۸۳۳/۱۱	۵	۱/۳۴
۸۷۰/۵۰	۸۵۹/۷	۵	۱/۲۴
۹۰۹/۰۲	۹۰۲/۴۰	۵	۰/۷۳
۹۲۷/۹۹	۹۲۱/۲۵	۵	۰/۷۳
۸۰۸/۳۷	۷۹۸/۲۶	۵	۱/۲۵
۸۳۹/۸۰	۸۲۶/۲۱	۵	۱/۶۲
۸۹۱/۳۲	۸۸۳/۰۴	۵	۰/۹۳
۹۳۱/۶۵	۹۲۵/۲۶	۵	۰/۶۸
۷۹۹/۳۳	۷۸۸/۴۱	۵	۱/۳۷
۸۲۱/۲۴	۸۰۶/۳۴	۵	۱/۸۱
۸۷۵/۲۶	۸۶۳/۸۴	۵	۱/۳۰
۹۳۹/۹۲	۹۳۱/۸۴	۵	۰/۸۶
۸۲۸/۵۱	۸۲۹/۹۷	6	-۰/۱۸
۸۴۴/۲۸	۸۴۳/۴۹	۶	۰/۰۹
۸۶۹/۸۳	۸۶۸/۶۶	۶	۰/۱۳
۹۰۲/۶۷	۹۰۳/۶۰	۶	-۰/۱۰
۸۱۹/۷۳	۸۲۰/۷۳	۶	-۰/۱۲
۸۴۲/۷۶	۸۴۰/۴۵	۶	۰/۲۷
۸۷۲/۶۰	۸۷۰/۹۲	۶	-۰/۱۹

ادامه‌ی جدول (۳-۳۰):

مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۹۰۹/۴۶ ۸۱۸/۱۹ (kgm ⁻³)	۹۱۰/۶۶ ۸۱۷/۰۶ دانسیته	۶ تعداد کپن	$\frac{(\rho_{exp} - \rho_{cal})}{\rho_{exp}} \times 100$
۸۴۶/۲۵	۸۴۲/۸۲	۶	۰/۴۱
۸۹۵/۴۵	۸۹۶/۵۳	۶	-۰/۱۲
۹۳۳/۰۳	۹۳۱/۴۰	۶	۰/۱۷
۷۹۷/۷۱	۷۹۶/۵۵	۶	۰/۱۴
۸۲۳/۱۲	۸۱۷/۲۳	۶	۰/۷۱
۸۸۶/۸۹	۸۸۶/۷۱	۶	۰/۰۲
۹۲۵/۱۵	۹۲۶/۵۷	۶	-۰/۱۵
۷۸۹/۹۰	۷۸۶/۴۶	۶	۰/۴۳
۸۱۸/۳۰	۸۰۹/۱۷	۶	۱/۱۱
۸۸۲/۴۰	۸۷۹/۶۳	۶	۰/۳۱
۹۲۱/۸۷	۹۲۳/۲۲	۶	-۰/۱۵
۷۸۹/۴۷	۷۸۰/۷۳	۶	۱/۱۰
۸۲۹/۵۲	۸۱۷/۵	۶	۱/۴۴
۸۹۸/۷۲	۹۰۰/۵۱	۶	-۰/۲۰
۹۲۶/۷۲	۹۲۸/۷۱	۶	-۰/۲۱
۸۲۵/۱۲	۸۲۳/۳۵	۶	۰/۲۱
۸۶۱/۷۰	۸۵۸/۶۴	۶	۰/۳۵
۹۱۵/۳۵	۹۱۶/۸۱	۶	-۰/۱۶
۹۴۸/۵۱	۹۳۷/۳۴	۶	۱/۱۸
۸۰۹/۳۳	۸۰۸/۰۹	۶	۰/۱۵
۸۴۴/۴۶	۸۳۹/۴۰	۶	۰/۶۰
۸۹۳/۶۵	۸۹۴/۳۱	۶	-۰/۰۷
۹۳۰/۸۴	۹۳۰/۳۵	۶	۰/۰۵
۸۰۰/۴۹	۷۹۸/۲۹	۶	۰/۲۷
۸۲۵/۷۳	۸۱۹/۱۲	۶	۰/۸۰
۸۸۸/۱۸	۸۸۷/۸۲	۶	۰/۰۴
۹۲۶/۲۰	۹۲۷/۴۲	۶	-۰/۱۳
۷۹۶/۰۰	۷۸۹/۶۴	۶	۰/۸۰
۸۳۸/۲۲	۸۲۸/۴۸	۶	۱/۱۶
۸۹۶/۸۲	۸۹۸/۲۰	۶	-۰/۱۵

ادامه‌ی جدول (۳-۳۰):

مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
$\frac{931}{86}$ $\frac{787}{68}$	$\frac{931}{93}$ $\frac{779}{13}$	$\frac{6}{6}$ تعداد کرین	$\frac{(\rho_{exp} - \rho_{cdt}) \cdot \gamma}{\rho_{exp} \cdot 1/0.8} \times 100$
$\frac{831}{63}$ $\frac{891}{75}$ $\frac{927}{79}$ $\frac{774}{41}$ $\frac{821}{16}$ $\frac{883}{49}$ $\frac{920}{35}$	$\frac{819}{0.2}$ $\frac{891}{60}$ $\frac{929}{43}$ $\frac{763}{35}$ $\frac{804}{71}$ $\frac{881}{59}$ $\frac{924}{43}$	$\frac{6}{6}$ $\frac{6}{6}$ $\frac{6}{6}$ $\frac{6}{6}$ $\frac{6}{6}$ $\frac{6}{6}$ $\frac{6}{6}$	$\frac{1}{52}$ $\frac{0}{0.2}$ $\frac{-0}{18}$ $\frac{1}{42}$ $\frac{2}{0}$ $\frac{0}{21}$ $\frac{-0}{44}$

جدول (۳-۳): مقایسه‌ی پاسخ شبکه بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف‌کننده با مقادیر تجربی دانسیته در سری تأیید برای تمام کتون‌های موجود در جدول (۲-۳)

مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۸۱۹/۲۳	۸۴۳/۴۱ (kgm ⁻³)	تعداد گرین	$\frac{(\rho_{exp} - \rho_{cal})}{\rho_{exp}} \times 100$
۸۵۰/۳۱	۸۴۸/۶۸	۳	-۰/۱۹
۸۹۲/۳۵	۸۹۰/۳۴	۳	۰/۲۲
۹۴۸/۶۸	۹۳۸/۰۲	۳	۱/۱۲
۸۱۲/۸۱	۸۱۶/۶۶	۳	-۰/۴۷
۸۶۲/۴۱	۸۵۹/۳۷	۳	۰/۳۵
۹۰۵/۰۸	۹۰۳/۲۷	۳	۰/۲۰
۹۶۰/۴۸	۹۴۱/۵۸	۳	۱/۹۷
۸۰۱/۱۸	۸۰۴/۷۴	۳	-۰/۴۴
۸۴۳/۳۱	۸۴۰/۳۷	۳	۰/۳۵
۹۳۸/۶۹	۹۳۳/۰۵	۳	۰/۶۰
۹۵۵/۹۷	۹۴۰/۹۳	۳	۱/۵۷
۷۹۷/۵۵	۷۹۹/۵۲	۳	-۰/۲۵
۹۳۵/۵۱	۹۳۱/۷۸	۳	۰/۴۰
۹۴۳/۵۶	۹۳۶/۷۷	۳	۰/۷۲
۹۴۸/۶۹	۹۳۹/۱۶	۳	۱/۰۰
۷۷۳/۴۱	۷۷۹/۷۴	۳	-۰/۸۲
۸۱۳/۵۱	۸۰۸/۶۱	۳	۰/۶۰
۸۶۲/۳۹	۸۵۶/۶۹	۳	۰/۶۶
۹۱۸/۶۳	۹۱۷/۶۲	۳	۰/۱۱
۸۳۲/۳۱	۸۲۹/۰۲	۴	۰/۳۹
۸۶۰/۶۸	۸۵۳/۱۸	۴	۰/۸۷
۸۹۸/۲۷	۸۹۰/۴۵	۴	۰/۸۷
۹۰۵/۴۱	۸۹۷/۷۵	۴	۰/۸۴
۸۲۲/۴۱	۸۱۹/۷۹	۴	۰/۳۲
۸۵۲/۰۸	۸۴۴/۵۷	۴	۰/۸۸
۸۹۰/۷۷	۸۸۲/۹۵	۴	۰/۸۸
۹۳۲/۳۸	۹۲۴/۲۰	۴	۰/۸۸
۸۱۶/۷۳	۸۱۳/۳۶	۴	۰/۴۱
۸۴۳/۷۸	۸۳۵/۷۵	۴	۰/۹۵
۸۹۲/۱۶	۸۸۴/۷۲	۴	۰/۸۳

ادامه‌ی جدول (۳-۳۱):

	مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
	$\frac{925/93}{80.6/53}$ دانسیته (kgm^{-3})	919/58 798/99	4 تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
	838/05	828/01	4	1/20
	844/28	833/86	4	1/23
	882/09	873/81	4	0/94
	792/88	789/11	4	0/47
	830/71	819/20	4	1/38
	867/53	856/59	4	1/26
	912/69	907/23	4	0/60
	773/59	770/78	4	0/36
	784/36	777/10	4	0/92
	817/91	804/63	4	1/62
	846/55	833/26	4	1/60
	831/27	833/49	5	-0/27
	867/11	866/10	5	0/12
	921/64	921/23	5	0/04
	960/70	941/80	5	1/97
	815/06	818/93	5	-0/47
	840/31	839/19	5	0/13
	899/69	899/86	5	-0/02
	944/53	938/09	5	0/68
	813/90	815/46	5	-0/19
	853/88	850/69	5	0/37
	911/15	911/81	5	-0/07
	945/22	938/72	5	0/69
	800/36	800/87	5	-0/06
	842/97	837/65	5	0/63
	902/43	903/02	5	-0/06
	938/49	935/76	5	0/29
	782/60	784/89	5	-0/29
	811/93	805/97	5	0/73
	880/12	876/29	5	0/43

ادامه جدول (3-31):

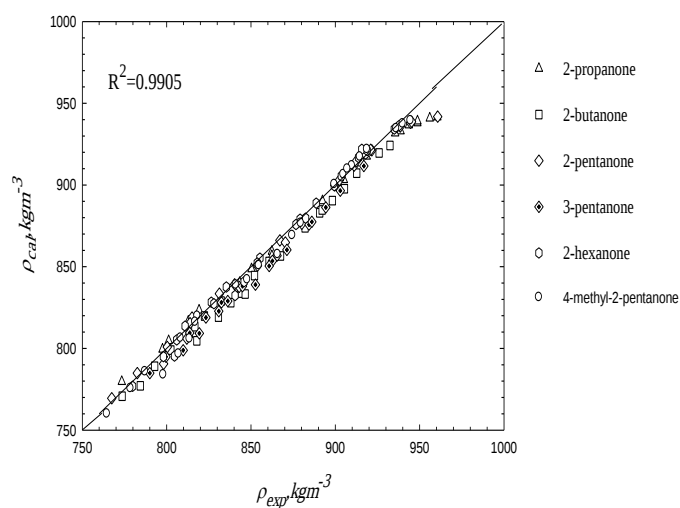
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۹۲۰/۹۹ (kgm ⁻³) دانسیته	۹۲۱/۵۴	تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{gl}})}{\rho_{\text{exp}}} \times 100$
۷۶۷/۴۶	۷۶۹/۵۴	۵	۰/۳۷
۷۹۸/۲۰	۷۹۰/۶۰	۵	۰/۹۵
۸۷۰/۴۰	۸۶۴/۸۷	۵	۰/۶۳
۹۱۲/۲۰	۹۱۴/۳۳	۵	-۰/۲۳
۸۳۲/۵۰	۸۲۸/۱۴	۵	۰/۵۲
۸۴۴/۹۷	۸۳۸/۱۲	۵	۰/۸۱
۸۶۵/۴۴	۸۵۶/۸۰	۵	۰/۹۹
۸۸۴/۳۸	۸۷۵/۷۸	۵	۰/۹۷
۸۲۳/۲۸	۸۱۸/۹۳	۵	۰/۵۳
۸۳۶/۲۲	۸۲۸/۹۸	۵	۰/۸۷
۸۶۲/۷۳	۸۵۳/۵۲	۵	۱/۰۶
۸۸۶/۰۷	۸۷۷/۴۴	۵	۰/۹۷
۸۱۳/۷۰	۸۰۹/۵۱	۵	۰/۵۱
۸۳۰/۹۱	۸۲۲/۷۹	۵	۰/۹۸
۸۶۰/۷۸	۸۵۰/۴۲	۵	۱/۲۰
۸۹۴/۳۵	۸۸۶/۲۸	۵	۰/۹۰
۷۹۹/۵۹	۷۹۴/۸۸	۵	۰/۵۹
۸۱۹/۳۷	۸۰۹/۲۷	۵	۱/۲۳
۸۷۱/۲۹	۸۶۰/۲۹	۵	۱/۲۶
۹۱۶/۹۲	۹۱۱/۵۹	۵	۰/۵۸
۷۸۹/۹۹	۷۸۴/۸۸	۵	۰/۶۴
۸۰۹/۸۰	۷۹۸/۸۸	۵	۱/۳۵
۸۵۲/۶۳	۸۳۹/۰۱	۵	۱/۶۰
۹۰۲/۹۴	۸۹۶/۴۹	۵	۰/۷۱
۸۳۵/۳۹	۸۳۷/۵۹	۶	-۰/۲۶
۸۵۵/۳۱	۸۵۵/۲۳	۶	۰/۰۰۹
۸۷۹/۱۰	۸۷۹/۱۰	۶	.
۹۱۷/۹۴	۹۱۹/۰۶	۶	-۰/۱۲
۸۲۶/۴۶	۸۲۸/۲۵	۶	-۰/۲۲
۸۵۳/۷۰	۸۵۲/۲۹	۶	۰/۱۶
۸۸۸/۶۶	۸۸۸/۹۱	۶	-۰/۰۳

ادامه‌ی جدول (۳-۳۱):

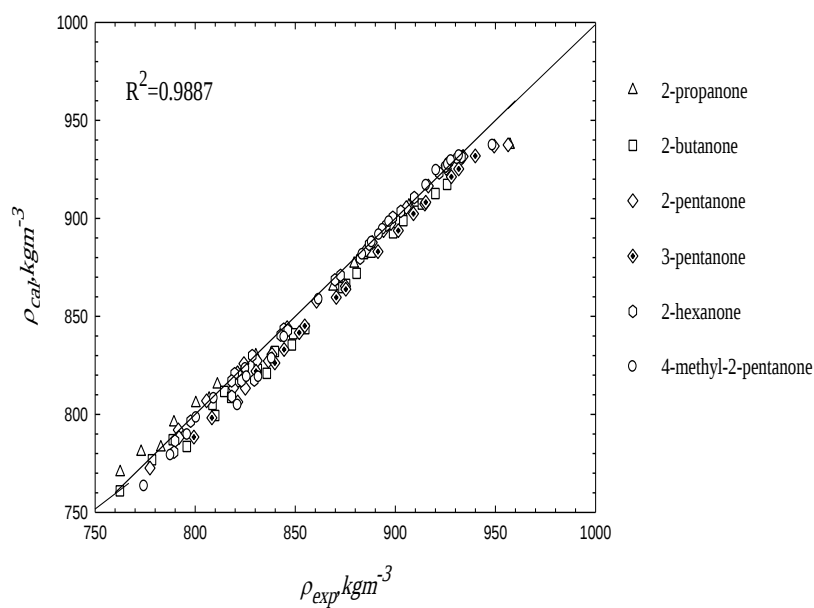
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۹۱۵/۷۰	۹۲۱/۸۱	۶	-۰/۶۷
۸۱۰/۹۵(kgm ⁻³) دانسیته	۸۱۳/۶۹	تعداد کربن	$\frac{(\rho_{\text{exp}} - \rho_{\text{cal}})}{\rho_{\text{cal}}} \times 100$
۸۲۸/۰۱	۸۲۷/۳۶	۶	$\rho_{\text{exp}} / \rho_{\text{cal}}$
۸۷۶/۶۷	۸۷۵/۸۲	۶	۰/۰۹
۹۱۸/۹۰	۹۲۱/۰۶	۶	-۰/۲۳
۸۰۵/۹۷	۸۰۵/۱۹	۶	۰/۰۹
۸۴۵/۹۴	۸۴۰/۸۳	۶	۰/۶۰
۹۰۳/۵۵	۹۰۵/۴۶	۶	-۰/۲۱
۹۳۷/۸۴	۹۳۶/۳۹	۶	۰/۱۵
۷۹۸/۱۰	۷۹۴/۹۶	۶	۰/۳۹
۸۴۰/۵۵	۸۳۲/۳۹	۶	۰/۹۷
۸۹۹/۳۸	۸۹۹/۵۳	۶	-۰/۰۲
۹۳۴/۹۴	۹۳۴/۱۸	۶	۰/۰۸
۷۷۹/۸۰	۷۷۶/۸۲	۶	۰/۳۸
۸۰۴/۶۵	۷۹۵/۳۲	۶	۱/۱۵
۸۸۲/۳۵	۸۷۹/۷۶	۶	۰/۲۹
۹۱۳/۷۵	۹۱۶/۷۷	۶	۰/۳۳
۸۱۸/۱۵	۸۱۹/۹۱	۶	-۰/۲۱
۸۴۰/۹۶	۸۳۸/۹۸	۶	۰/۲۳
۸۹۹/۳۸	۹۰۰/۴۶	۶	-۰/۱۲
۹۳۶/۰۸	۹۳۴/۶۱	۶	۰/۱۶
۸۱۶/۸۸	۸۱۶/۲۲	۶	۰/۸,۰
۸۵۴/۵۸	۸۵۰/۸۶	۶	۰/۴۳
۹۰۹/۸۰	۹۱۱/۹۲	۶	-۰/۲۳
۹۴۴/۴۸	۹۳۹/۴۶	۶	۰/۵۳
۸۰۸/۲۱	۸۰۶/۴۷	۶	۰/۲۱
۸۴۷/۷۰	۸۴۲/۱۹	۶	۰/۶۵
۹۰۴/۷۳	۹۰۶/۵۶	۶	-۰/۲۰
۹۳۹/۸۶	۹۳۷/۵۶	۶	۰/۲۴
۷۸۷/۱۱	۷۸۵/۹۲	۶	۰/۱۵
۸۱۳/۵۵	۸۰۵/۹۷	۶	۰/۹۳
۸۷۹/۴۸	۸۷۶/۷۷	۶	۰/۳۱

ادامه‌ی جدول (۳-۳۱):

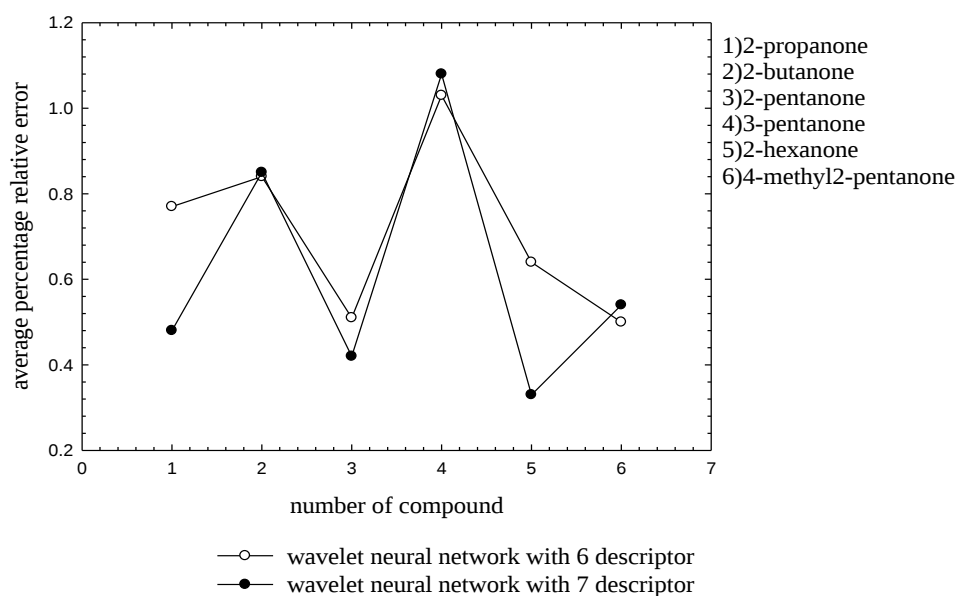
مقدار تجربی	پاسخ شبکه		
۹۱۸/۷۳	۹۲۱/۹۱	۶	-۰/۳۴
۷۷۸/۴۸	۷۷۵/۶۸	۶	۰/۳۶
۸۰۶/۹۹	۷۹۶/۷۵	۶	۱/۲۷
۸۷۴/۴۱	۸۶۹/۲۹	۶	۰/۵۸
۹۱۴/۵۲	۹۱۷/۳۶	۶	-۰/۳۱
۷۶۴/۵۰	۷۶۰/۱۴	۶	۰/۵۷
۷۹۷/۹۴	۷۸۴/۰۶	۶	۱/۷۴
۸۶۵/۷۵	۸۵۷/۶۲	۶	۰/۹۴
۹۰۷/۰۴	۹۰۹/۹۳	۶	-۰/۳۲



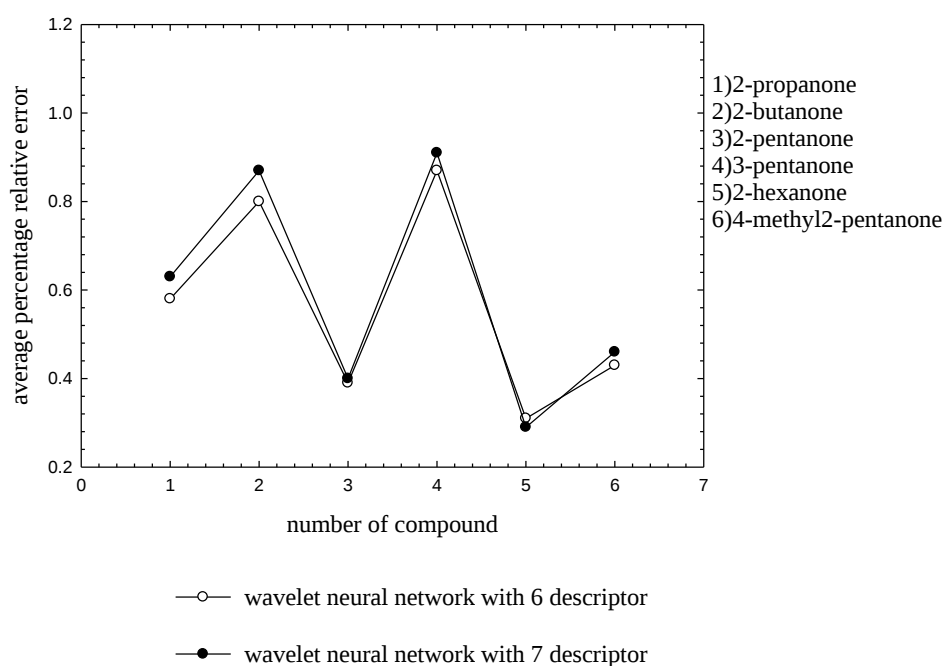
شکل (۳-۱۹): نمودار برگشت سری پیش‌بینی برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده هم‌زمان توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای همه‌ی کتون‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).



شکل (۳-۲۰): نمودار برگشت سری تائید برای دانسیته‌ی پیش‌بینی شده هم‌زمان توسط شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف‌کننده برحسب مقادیر تجربی برای همه‌ی کتون‌ها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود برای آن‌ها در جدول (۳-۲).



(الف)



(ب)

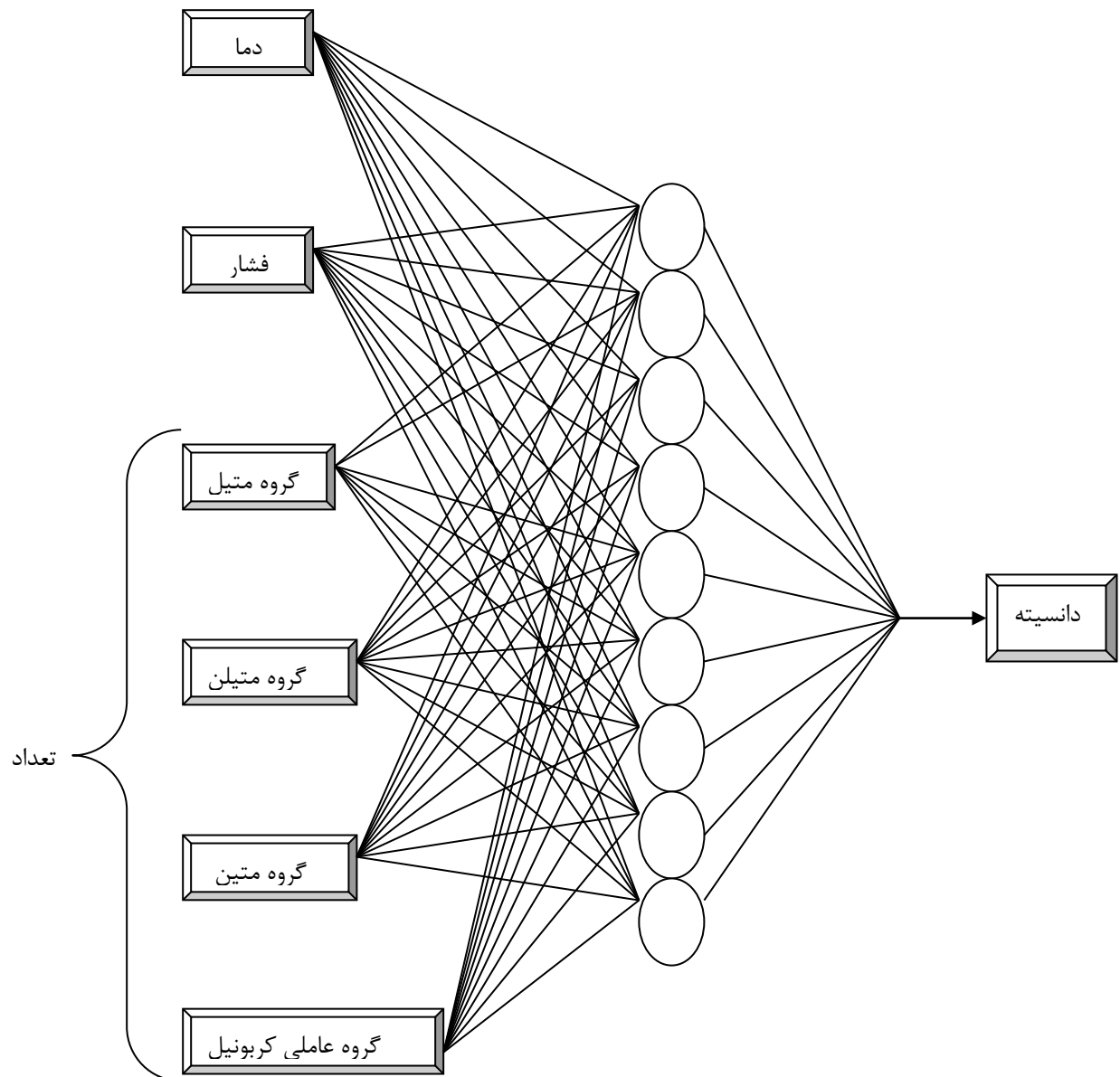
شکل (۳-۲۱): نمودار مقایسه‌ی متوسط درصد خطای نسبی در پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته توسط شبکه‌ی بهینه شده

با استفاده از ۶ توصیف‌کننده با شبکه‌ی بهینه شده با استفاده از ۷ توصیف‌کننده برحسب شماره‌ی ترکیب مربوط به

سری الف) پیش‌بینی ب) تأیید. شماره‌ی ترکیب در سمت راست نمودار درج شده است.

۳-۳-۸- معماری شبکه‌ی عصبی موجک جامع نهایی

با توجه به توضیحات ذکر شده در قسمت‌های قبلی شبکه‌ی عصبی موجک جامع که بتواند دانسیته‌ی همه‌ی کتون‌های مورد بررسی جدول (۳-۲) در محدوده‌ی دما و فشار موجود را پیش‌بینی کند دارای ۶ توصیف‌کننده است که شامل دما، فشار و تعداد گروه متیل، متیلن، متین و گروه عاملی کربونیل می‌باشد. شکل (۳-۲۲) ساختار شبکه‌ی عصبی موجک جامع نهایی را نشان می‌دهد.



شکل (۳-۲۲): ساختار شبکه‌ی عصبی موجک جامع نهایی

۳-۳-۹- مقایسه‌ی نتایج حاصل از شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای

پیش‌بینی دانسیته کتون‌ها با معادله‌ی حالت MLIR

در این قسمت مقایسه‌ای بین پاسخ حاصل از شبکه‌ی عصبی موجک جامع با معادله‌ی حالت MLIR در پیش‌بینی دانسیته صورت گرفته است که نتایج حاصل از آن در جدول (۳-۳۲) گزارش شده است. نتایج موجود در جدول نشان می‌دهد که معادله‌ی حالت MLIR با ارائه‌ی روشی پیچیده‌تر که نیاز به محاسبات طولانی دارد دانسیته کتون‌ها را پیش‌بینی می‌کند. در حالی که شبکه‌ی عصبی موجک جامع بهینه شده فقط با استفاده از ۶ توصیف‌کننده و به سرعت می‌تواند دانسیته را برای کتون‌ها برحسب دما و فشار پیش‌بینی کند.

جدول (۳-۳۲): مقایسه‌ی نتایج حاصل از سری تائید شبکه‌ی عصبی موجک جامع با ۶ توصیف‌کننده برای پیش‌بینی

دانسیته کتون‌ها با معادله‌ی حالت MLIR

سیال	$T(K)$	$\Delta p(MPa)$	$\left(\frac{ \Delta\rho }{\rho}\right)_{av}^a \times 100$	
			MLIR	سری تائید شبکه‌ی عصبی موجک جامع
۲- پروپانون	۲۹۸/۱۵	۲/۵۵-۳۸۹/۸۲	۰/۳۴(۰/۵۸)	۰/۶۸(۱/۵۱)
۲- بوتانون	۲۹۸/۱۵	۲/۶۹-۲۸۱/۶۶	۰/۱۴(۰/۲۴)	۰/۶۸(۰/۹۳)
۲- پنتانون	۲۹۸/۱۵	۲/۵۵-۳۷۳/۷۸	۰/۱۸(۰/۳۳)	۰/۳۲(۰/۶۱)
۳- پنتانون	۲۹۸/۱۵	۲/۷۳-۲۸۰/۱۸	۰/۱۶(۰/۲۴)	۰/۸۵(۱/۱۵)
۲- هگزانون	۲۹۸/۱۴	۲/۵۵-۳۲۳/۴۲	۰/۲۰(۰/۳۹)	۰/۱۹(۰/۲۸)

^a ماکزیمم درصد خطای نسبی در پیرانتز گزارش شده است.

۴-۱- بحث و نتیجه‌گیری

شبکه‌های عصبی شبیه به مغز انسان اطلاعاتی را پردازش می‌کنند، این شبکه‌ها از تعداد زیادی سلول‌های عصبی به نام نرون‌ها تشکیل شده با پردازشی بسیار بزرگ و به هم پیوسته که در حل موازی مسائل ویژه کاربرد دارند.

درفصل سوم از مدل شبکه‌ی عصبی موجک که نوع جدیدی از شبکه‌های عصبی مصنوعی می‌باشد، برای پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌ها استفاده کردیم. برای ساخت مدل ابتدا داده‌های دانسیته را برای کتون‌های ۳ الی ۶ کربنی شامل ۲- پروپانون، ۲- بوتانول، ۲- پنتانول، ۳- پنتانول، ۲- هگزانول و ۴- متیل ۲- پنتانول در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار گردآوری نمودیم که نام این ترکیبات به همراه محدوده‌ی دما و فشار، تعداد نقاط مورد استفاده از هر ترکیب در سری آموزش، پیش‌بینی و تأیید به همراه مرجع مورد استفاده برای هر ترکیب در جدول (۳-۲) آمده است. در مرحله‌ی بعد باید توصیف‌کننده‌هایی را انتخاب می‌کردیم که بتواند دانسیته را به ساختار مولکولی مرتبط کند. دو متغیر دما و فشار را به عنوان اولین توصیف‌کننده‌ها به کار گرفتیم، زیرا دانسیته هر ترکیب به دما و فشار وابسته است. برای انتخاب سایر توصیف‌کننده‌ها از ایده‌ی جدید مفهوم سهم گروه‌ها استفاده کردیم، بر این اساس ۴ گروه عاملی سازنده‌ی کتون‌ها شامل گروه متیل، متیلن، متین و گروه عاملی کربونیل را معرفی نمودیم. سپس تعداد هر یک از این گروه‌های عاملی در ترکیبات فوق را به عنوان یک توصیف‌کننده به کار بردیم، به این ترتیب ۴ توصیف‌کننده دیگر بر مبنای مفهوم سهم گروه‌ها برای هریک از کتون‌های مورد بررسی انتخاب شدند. در جدول (۳-۳) توصیف‌کننده‌های مورد استفاده برای هر ترکیب در طراحی هر شبکه ارائه شده است، سپس مدل شبکه‌ی عصبی موجک را با استفاده از ۴ توصیف‌کننده (۴ نرون ورودی) برای ۲- پروپانول، ۵ توصیف‌کننده (۵ نرون ورودی) ۲- بوتانول، ۲- پنتانول، ۳- پنتانول، ۲- هگزانول و ۶ توصیف‌کننده برای ۴- متیل ۲- پنتانول و یک خروجی برای پیش‌بینی دانسیته‌ی آن‌ها به صورت جداگانه طراحی کردیم. پس از انتقال توصیف

کننده‌های کتون‌ها به شبکه و آموزش شبکه طبق دستورالعمل بخش (۳-۳-۴) با برنامه‌ای رایانه‌ای که در محیط برنامه نویسی MATLAB جهت به کارگیری شبکه‌ی عصبی موجک نوشته بودیم. پارامترهای ممنتم، سرعت آموزش و تعداد نرون‌های لایه‌ی مخفی به صورت هم‌زمان و همچنین تعداد دور آموزش را بهینه‌سازی کردیم که مقدار بهینه‌ی پارامترهای شبکه‌های عصبی موجک طراحی شده برای هر کتون در جدول (۳-۴) گزارش شده است. در شکل‌های (۳-۱) و (۳-۲) نیز بخشی از این محاسبات برای ۲- بوتانون نشان داده شده است. سپس برای ارزیابی کارایی شبکه‌های بهینه شده برای هر ترکیب از این پارامترهای بهینه شده برای پیش‌بینی دانسته در دو سری پیش‌بینی و تأیید در دما و فشارهای مربوط به آن‌ها استفاده کردیم که نتایج آن در جدول (۳-۵) گزارش شده است. نتایج موجود در جدول نشان می‌دهد که دانسیته‌ی هر دسته از این ترکیبات (در محدوده-ی دما و فشار موجود در جدول (۳-۲) برای آن‌ها) با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۱/۳٪ پیش‌بینی شده است که این موضوع نشان دهنده‌ی کارایی مطلوب شبکه‌های عصبی موجک بهینه شده است. همچنین مقادیر دانسیته‌های محاسبه‌شده با استفاده از مدل بهینه شده برای این دو سری به همراه مقادیر تجربی و درصد خطای نسبی ناشی از اختلاف این دو مقدار برای هریک از کتون‌ها در جداول (۳-۶) تا (۳-۱۷) گزارش شده است. نتایج به‌دست آمده نشان داد که با انتخاب ۴ توصیف-کننده بر مبنای روش سهم گروه‌ها همراه دو ویژگی دما و فشار شبکه‌ی عصبی موجک می‌تواند ارتباط خوبی بین ساختار مولکولی و دانسیته‌ی این ترکیبات برقرار کند. مربع ضریب همبستگی به-دست آمده از نمودارهای برگشت سری پیش‌بینی و تأیید ترسیم شده برای هر دسته از این ترکیبات نزدیک به یک است که این امر بر توافق دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط شبکه نسبت به مقادیر تجربی دلالت دارد (شکل‌های (۳-۳) تا (۳-۱۴) را ملاحظه فرمایید). پس از آن که ایده‌ی به کارگیری روش سهم گروه‌ها در انتخاب توصیف‌کننده‌ها نتایج مطلوبی را ایجاد نمود. ایده‌ی ارائه یک شبکه‌ی عصبی موجک جامع را مورد بررسی قرار دادیم. هدف از این کار ارائه‌ی یک شبکه‌ی عصبی موجک جامع بود، به طوری که بتواند برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی تمام کتون‌های ذکر شده در جدول

(۲-۳) در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار موجود در این جدول کارایی داشته باشد. برای رسیدن به این هدف ابتدا شبکه‌ی عصبی موجک را با ۵ نرون ورودی و یک نرون خروجی جهت پیش‌بینی هم-زمان دانسیته‌ی ۲- بوتانون و ۲- پنتانون طراحی و بهینه‌سازی کردیم (جدول (۳-۱۸) را ملاحظه کنید). در مرحله‌ی بعد برای ارزیابی عملکرد شبکه‌ی بهینه شده از این شبکه جهت پیش‌بینی دانسیته‌ی دو کتون به طور هم‌زمان برای دو سری پیش‌بینی و تأیید استفاده کردیم. نتایج به دست آمده در جدول (۳-۱۹) نشان می‌دهد که شبکه‌ی بهینه شده می‌تواند دانسیته را با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۰/۶۰٪ پیش‌بینی کند. همچنین مقادیر دانسیته‌ی محاسبه شده، تجربی و درصد خطای نسبی برای این کتون‌ها در جداول (۳-۲۰) و (۳-۲۱) گردآوری شده است. (شکل‌های (۳-۱۵) و (۳-۱۶) را ملاحظه کنید) پس از به دست آوردن نتیجه‌ی مطلوب از مدل بهینه شده برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی ۲- بوتانون و ۲- پنتانون اطلاعات کتون‌های دیگر را مرحله‌به‌مرحله به داده‌های ورودی اضافه کردیم تا این که سرانجام توانستیم یک شبکه‌ی عصبی موجک جامع برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی همه‌ی کتون‌های مورد بررسی برسیم. برای این منظور، دو متغیر دما و فشار را در کنار ۴ توصیف‌کننده بر مبنای روش سهم گروه که به صورت یک کد ۴ رقمی منحصر به فرد برای هر مولکول بیان می‌شد (جدول (۳-۲۲)) به عنوان ورودی شبکه و یک نرون برای پیش‌بینی دانسیته در خروجی شبکه در نظر گرفتیم. سپس شبکه را با ۶ نرون ورودی و یک خروجی طراحی و بهینه‌سازی کردیم که مقدار بهینه‌ی پارامترهای شبکه در جدول (۳-۲۳) گزارش شده است. سپس دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی برای دو سری پیش‌بینی و تأیید را توسط این شبکه‌ی بهینه شده با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۰/۱۰۵٪ و ماکزیمم درصد خطای نسبی ۰/۱۰۹۵٪ پیش‌بینی نمودیم که نتایج آن در جدول (۳-۲۴) موجود است. برای ارزیابی کارایی شبکه‌ی عصبی موجک جامع بهینه شده داده‌های یکی از کتون‌ها را به صورت تصادفی از شبکه‌ی عصبی موجک جامع حذف کرده (مثلاً ۲- هگزانون)، سپس با ۵ کتون دیگر یک شبکه‌ی عصبی موجک طراحی و بهینه‌سازی شد. در مرحله بعد داده‌های دانسیته ۲- هگزانون به صورت تصادفی به این شبکه‌ی بهینه

شده داده شد و شبکه توانست دانسیته‌ی ۲- هگزانون را با متوسط درصد خطای نسبی ۰/۴۰٪ پیش‌بینی کند که این نیز نشان‌دهنده‌ی کارایی مطلوب شبکه‌ی عصبی موجک جامع می‌باشد. از روش Y- تصادفی نیز برای ارزیابی شبکه‌ی عصبی موجک جامع استفاده کردیم که مربع ضریب همبستگی پایین نشان‌دهنده‌ی عدم همبستگی تصادفی در مدل شبکه‌ی عصبی موجک بهینه شده می‌باشد. نتایج در جدول (۳-۲۵) گزارش شده است. مقادیر دانسیته‌ی محاسبه‌شده، تجربی و درصد خطای نسبی برای این کتون‌ها در جداول (۳-۲۶) و (۳-۲۷) گردآوری شده است. همچنین مقدار ضریب همبستگی نزدیک به یک در نمودارهای برگشت دو سری پیش‌بینی و تائید برای مقادیر دانسیته‌ی پیش‌بینی شده توسط این شبکه برحسب مقادیر تجربی برای تمام کتون‌های مورد بررسی نشان‌دهنده‌ی کارایی مطلوب این شبکه‌ی عصبی موجک جامع در پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار می‌باشد (شکل‌های (۳-۱۷) و (۳-۱۸) را ملاحظه فرمایید). در مرحله‌ی بعد اثر تعداد کربن را به عنوان یک توصیف‌کننده‌ی جدید روی شبکه‌ی عصبی موجک جامع بررسی کردیم. زیرا طبق تحقیقات پارساfer و کلانتر در محاسبه‌ی دانسیته بر مبنای سهم گروه‌ها دانسیته علاوه بر دما، فشار و سهم گروه‌های عاملی به تعداد کربن ترکیب آلی نیز وابسته بوده لذا تعداد کربن مربوط به هر کتون را به عنوان یک توصیف‌کننده‌ی جدید در ستون هفتم ماتریس ورودی اضافه نموده و شبکه‌ی عصبی موجک را با ۷ توصیف‌کننده (۷ نرون ورودی) و یک نرون خروجی طراحی و بهینه کردیم (جدول (۳-۲۸) را ملاحظه کنید). سپس برای ارزیابی شبکه‌ی بهینه شده از این شبکه برای پیش‌بینی هم‌زمان دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی برای سری‌های پیش‌بینی و تائید استفاده کردیم که نتایج موجود در جدول (۳-۲۹) نشان می‌دهد که این شبکه توانسته دانسیته‌ی همه‌ی کتون‌ها را با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۱/۱٪ و ماکزیمم درصد خطای نسبی ۲/۱٪ پیش‌بینی کند. مقادیر دانسیته‌ی محاسبه شده سری پیش‌بینی و تائید با استفاده از این شبکه به همراه مقادیر تجربی و درصد خطای نسبی برای این کتون‌ها در جداول (۳-۳۰) و (۳-۳۱) گردآوری شده است. نمودارهای برگشت رسم شده در شکل‌های (۳-۱۹) و

(۳-۲۰) را ملاحظه فرمایید. نتایج به دست آمده در جدول (۳-۲۹) در مقایسه با جدول (۳-۲۴) نشان‌دهنده‌ی این است که افزایش تعداد کربن به عنوان یک توصیف‌کننده به شبکه‌ی عصبی موجک جامع اثر مثبت قابل توجهی در پیش‌بینی دانسیته‌ی کتون‌های مورد بررسی جدول (۳-۲) ندارد. به این ترتیب شبکه‌ی عصبی موجک جامعی که بتواند دانسیته‌ی تمام کتون‌های موجود در جدول (۳-۲) را در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار با متوسط درصد خطای نسبی کمتر از ۱/۰۵٪ پیش‌بینی کند، دارای ۶ توصیف‌کننده است که این توصیف‌کننده‌ها شامل دما، فشار و تعداد ۴ گروه عاملی سازنده‌ی کتون‌های مورد بررسی می‌باشند. 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 (۳-۲) برای هر کتون) می‌توان دانسیته را پیش‌بینی نمود. از مقایسه‌ی این روش برای پیش‌بینی دانسیته با معادله‌ی حالت MLIR ارائه شده‌ی کتون‌ها این نتیجه حاصل می‌شود که این روش بدون نیاز به محاسبات پیچیده و طولانی برای هر کتون قادر به پیش‌بینی دانسیته می‌باشد.

۴-۲- آینده‌نگری

با توجه به توانایی شبکه‌ی عصبی موجک در پیش‌بینی دانسیته که در این پایان‌نامه نشان داده شد. می‌توان پیش‌بینی نمود که این روش در مورد سایر خواص انتقالی مانند ویسکوزیته، نقطه‌ی اشتعال و نقطه‌ی ریزش موادی مانند روغن‌ها و همچنین سایر خواص ترمودینامیکی نیز قابل استفاده باشد.

مراجع:

- [1] Krose B . and Smagt (1996) "An Introduction to Neural Networks" University of Amestrdam.
- [2] www.doc.ac.ic.uk/~nd/surprise-96/Journal/Vol4/Cs11/report.html.
- [۳] حبشی نژاد م، (۱۳۸۲) "پیش بینی گرانروی گازها در محدوده‌ی وسیعی از دما و فشار با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی" پایان‌نامه کارشناسی ارشد، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی اصفهان.
- [4] Jalali-Heravi.M.and Fatemi. M. H. (1998) "Prediction of flame ionization detector response factors using artifical neural network" **J.chromatoA,No.825, pp.161-169.**
- [۵] منهای م، (۱۳۸۱) "هوش محاسباتی" جلد اول چاپ دوم، دانشگاه صنعتی امیر کبیر (واحد تفرش).
- [6] www.ccwmagazine.com/issues/issue12/sepehr/Neural.ASP.
- [7] <http://rezaruhi.Persianblog.com>
- [8] Schalkoff.R .J.(1997) "Artifical Neural Networks.
- [9] www.dacs.dtic.mil/techs/neural/neural-Toc.html.
- [10] Hagan .M .T.and Demuth. B. and Beale. M. (1995) "Neural Network Design".
- [۱۱] منهای م، سیفی پور ن، (۱۳۷۷) "کاربرد هوش محاسباتی در کنترل" چاپ اول، دانشگاه صنعتی امیرکبیر.
- [12] Fauset. L. (1994) "Fundamentals of Neural NetworksArchitectures, Algorithms and applications".
- [13]<http://plato.asu.edu/topics/problems/nlolsq.html>,Jul.2004. Accessed on 4 Aug 2004.
- [14] Zhang .Q.H.and Benvensite.(1997) "Using wavelet network in nonparametric estimation" **IEEE Trans.Neural Networks**. Vol.8. pp.227-236.
- [15] Sheng .T. L.and Shu. C. C.and Function approximation using robust wavelet neural networks,Kaohslung,Taiwan,Roc.
- [16] Delyone.B. and Juditsky.A. and Benvensite. A. IEEE Trans(1995) "Neural Networks",Vol.6, pp.332.
- [17] Skoog. D.A. (2001) "Principles of instrumental analysis"saunders college Publishing.
- [18] <http://www.Xillinx.com>.
- [19] <http://www.Star.Stanford.edu/projects/sswrg/basics.html>.

- [20] Zhang. X. Q. and J. Zhang. & R. Liu. M. Hu. Z. Xue H. Fan. B. (2001) "Prediction of programmed-temperature retention values of naphthalens by wavelet neural networks", **Comput. Chem. Vol. 25, pp.125-133.**
- [21] Liu. L. and Guo. Q. X. (1999) "Wavelet neural networks its application to the inclusion of β -cyclodextrine with benzene derivatives" **J.chem.inf.comput.sci, Vol.39. pp.133-138.**
- [22] Blas. F. J. (2000) "Excess thermodynamic properties of chain like Mixtures" **J. phys. chem. B.Vol.104, pp.9239-9248.**
- [23] VanKrevelen. D. W. and Hoftyzer. P. J. (1972) "Properties of polymers.correlation with chemical Structure" **.Elsevier. Amsterdam.**
- [24] Tu. C.H. and Lay. y. (1990) "A group contribution method for the prediction of organic liquid density ". **J. chin. I. ch. E. Vol.21, No.5, pp.275-281.**
- [25] Benson. S. W. and Buss. J. H. (1958) "Additivity rules for the estimation of molecular properties. Thermodynamic properties". **J. chem. phys., Vol.29. pp. 546.**
- [26] Benson. S. W. and Cruickshank. F. R. and Golden. D. M. and Haugen. G. R. O. and Neal. H. E. and Rogers. A. S. and Shaw. R. (1969) "Additivity rules for the estimation of thermochemical properties". **chem. Rev. Vol.69, pp.279-324.**
- [27] Ramesh. L. Gardas and Joao A. P. Coutinho (2008) "A group contribution method for Viscosity estimation of ionic liquids". **J. Fluid phase equilibria". Vol.266, pp.195-201.**
- [28] R. C. Ried. and J. M. Prausnitz, and T. K. Sherwood. (1987) "The Properties of Gases and Liquids". 4th ed., Mc. Graw-Hill, New York.
- [29] L. M. Egolf and P. C. Jurs. (1992) "Estimation of Autoignition Temperatures of Hydrocarbons, Alcohols and Ester from Molecular Structure".
- [30] Chan-chengchen and Horng-Jang Liaw and Yu-Yukuo. (2009) "Prediction of autoignition temperatures of organic compounds by the structural group contribution approach". **J. Hazardous Materials. Vol.162 , pp.746-762.**
- [31] T. A. Albahri. and R. S. George. (2003) "Artificial neural network investigation of structural group contribution method for prediction pure components autoignition temperature". **Ind. Eng. Chem. Res. Vol.42, pp.5708-5714.**
- [32] Joback . K. G. and Reid. R. C. (1987) "Estimation of pure component properties from group contribution method". **Chem. Eng. Commun., Vol.58, pp.233-243.**
- [33] Constantinou. L. R. (1994) "New group contribution method for estimating properties of pure compounds". **AIChEJ, Vol. 40, pp. 1697-1710.**

- [34] J. Richard Elliott.and Fateme sadat Emami.and Amir Vahid. (2008). “Finitely limited group contribution correlations for boiling temperatures”**J.Chem.Thermodynamics**.
- [35] Gunn. R. D. and Yamada. T. (1971) “A corresponding states correlation of saturated liquid volume”. **AIChEJ. Vol.17, pp.1341-1345**.
- [36] Rackett. H .G. (1970) “Equation of state for saturated liquid density”.**J. Chem. Eng. Data, Vol.15, pp.514-517**.
- [37] Spencer. C. F.and Danner. R. P. (1972) “Improved equation for prediction of saturated liquid densities”. **J. Chem. Eng. Data, Vol.17, pp.236-241**.
- [38] Rogalski. M. and Neau. E. (1990) “A group contribution method for prediction of hydrocarbons saturated liquid volumes”. **Fluid Phase Equilibria .Vol.56, pp.59-69**.
- [39] Elbro. H. S.and Fredrnslund.A.and Rasmussen. P. (1991) “Group contribution method for prediction of liquid densities as a function of temperapture for solvents,Oligomers and Polymers”.**Ind. Eng. Chem. Res, Vol.30, pp.2576-2582**.
- [40] Project 801. (2006), Evaluated Process Design Data, Public Release Documentation, Design Institute for physical properties(DIPPR), American Institute of Chemical Engineers(AIChE).
- [41] Farhad Gharagheizi. and Reza Fareghi Alamdari. and Mahmood Torabi Angaji. (2008) “A New Neural Network-Group Contribution of Method for Estimation of Flash Point Temperature of Pure Components”.**Energy Fules, Vol.22, pp.1628-1635**.
- [42] AIChE. DIPPR (1996) Public Version; DIPPRR Project 801 Pure Component Data, (<http://www.chempure.com/sient.htm>).
- [43] Tareg A.Albahri. and Reenas. George. (2003) “Artifical Neural Network investigation of the structural Group Contribution Method for Predicting Pure Components Auto Ignition Temperature”. **Ind. Eng. Chem Res,Vol. 42, pp.5708-5714**.
- [44] Jose. O. and Valderrama. Alfonso Rea.tegui and Roberto E.Rojas. (2009) “Density of Ionic Liquids Using Group Contribution and Artifical Neural Networks”.**Ind.Eng.Chem.Res**.
- [45] Basarova. P. and Svoboda.V. (1992) “group contribution method for heat of vaporization of halogenated hydrocarbons”. **Fluid PhaseEquilibria ,Vol.71, pp.225-235**.
- [46] Zhibao. L. and Shiquan. S. and Meiren. And S. and Jun. S. (1993) “Prediction of the Surface tension of organic liquid Mixtures by a group contribution method”.**J.Chem. Ind. Eng, Vol.44,No.4, pp.451-456**.

- [47] Nagvekar. M. and Dabuert. T. E. (1987) "A group Contribution method for liquid thermal conductivity". **Ind.Eng.Chem.Res.,Vol.26, pp.1362-1365.**
- [48] Reidel. L. chem. Eng. commun., (1987). **Vol.58, pp.233-243.**
- [49] Reid. A.C. and Prausnitz. J.M. and Sherwood. T. K. (1987) "The properties of Gases and liquids".MC Graw-Hill,Newyork.
- [50] پارسا فرغ، (۱۳۸۶) "ترمودینامیک آماری مبانی و کاربردها" دانشگاه صنعتی اصفهان.
- [51] MCDonlad. R. (1969). "Experimental and analytical equation of state".**J. Rev. Modern Phys, Vol.41, No.2, pp.316.**
- [52] Parsafar. G. A.and Kermanpour. F.and Nagafi. B. (1999) "Prediction of the temperature and density dependencies of the parameters of the average effective pair potential using only the LIR equation of state". **J. Phys. Chem. B, Vol.103, pp.7278-7292.**
- [53] Parsafar. G. A. and Mason. E. A. (1994) "Linear isotherms for dense fluids: extention to Mixtures". **J. Phys. Chem, Vol.98, pp.1962-1967.**
- [54]
- [55] R Malhotra. L. and A. Woolf (1991) "Thermodynamic properties of propanone (acetone) at temperatures from 278 K to 323 K and pressures up to 400 MPa". **J. Chem. Thermodynamics, Vol.23, pp.867-876.**
- [56] R. Malhotra. And L. A. Woolf (1992) "Thermodynamic properties of butan-2-one at temperatures from 278 K to 338 K and pressures from 0.1 MPa to 280 MPa ;predictions for higher ketones". **J. Chem. Thermodynamics, Vol.24, pp.1207-1217.**
- [57] R. Malhotra & L. A. Woolf (1996) "Volumetric measurements of liquid pentan-2-one, hexan-2-one, and 4-methylpentan-2-one at temperatures from 278.15 K to 338.15 K and pressures in the range from 0.1 MPa to 386 MPa". **J. Chem. Thermodyn, Vol.24, pp.1411-1421.**
- [58] R. Malhotra. and W. E.price and L. A., Woolf. (1993) "Thermodynamic properties of pentan-3-one at temperatures from 278 K to 338 K and pressures from 0.1 MPa to 380 MPa". **J. Chem. Thermodynamics., Vol.25, pp.361-366**

Abstract

In this work, a wavelet neural network (WNN) has been used to predict density of ketones over wide range of temperature and pressure. At first, WNN has been constructed using temperature and pressure variants 4 descriptors based on group contribution method namely, the number of methyl, methylene, methyne, and carbonyl functional groups. Then, a computer program was written MATLAB 6.1 (Math Works) to use wavelet neural network. After training of networks, The WNN parameters consist of the number of neurons in the hidden layer, the learning rate, the momentum and the numbers of iterations have been optimized simultaneously for each of ketones. The capability of the optimized models has been evaluated by plotting experimental values of density versus the predicted values for the prediction and validation sets. The obtained result with an average percent deviation error for density prediction lower than 1.3% reveals the capability of the WNN model. To achieve a WNN model for density prediction of all ketones, this approach was successfully applied for simultaneous prediction of 2-butanone and 2-pentanone. The result for density prediction show that an average percent deviation error lowers than 0.6%. After this, a WNN model with 6 descriptors has been constructed and optimized for density prediction of all ketones. The average percent deviation error and its maximum value for density prediction were found to be lower than 1.05% and 1.95%, respectively. The excellent prediction obtained with a correlation coefficient 0.99 reveals the capability of the WNN models.