

مدل سازی سیستم های تعادلی بخار - مایع و مایع - مایع با استفاده از مدل های ترمودینامیکی، ساختارهای فازی و شبکه های عصبی نوع GMDH

حسین قنادزاده^{۱*}، الهیار داغبندان^۲، محمد اکبری زاده^۳ و میثم آزادپان^۳

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت مقاله: ۱۳۹۵/۰۹/۱۷	
پذیرش مقاله: ۱۳۹۶/۱۰/۰۹	
واژگان کلیدی:	
تعادل های بخار-مایع،	بررسی تعادل های سیستم های بخار-مایع و مایع-مایع، نقشی مهم در طراحی، بهینه سازی و کنترل فرایندهای جداسازی دارد. در این تحقیق، تعادل های فازی بخار-مایع سامانه های دوتایی (۱-پروپانول با آب و اتیل استات)، همچنین تعادل های فازی مایع-مایع سامانه های سه تایی (آب، اتیلن گلیکول، ۱-هپتانول) و (آب، اتیلن گلیکول، ۲-اتیل ۱-هگزانول) با استفاده از مدل های ترمودینامیکی NRTL و UNIQUAC مورد مطالعه قرار گرفتند. همچنین از سیستم استنتاج فازی-عصبی تطبیقی (ANFIS) و مدل شبکه عصبی نوع GMDH برای مدل سازی سیستم های مورد نظر استفاده شد. نمودارهای تعادلی بخار-مایع، دما برحسب جزء مولی برای سیستم های دوتایی و نمودار تعادل های مایع-مایع برای سیستم های سه جزئی با استفاده از مدل های ترمودینامیکی در دماهای مختلف رسم گردید. دقت مدل های ترمودینامیکی و شبکه های عصبی و فازی برای سیستم های مورد نظر بررسی و با داده های تجربی مقایسه شد. مقایسه نتایج نشان داد که در تعادلات بخار-مایع و مایع-مایع، مدل ترمودینامیکی NRTL تطابق خوبی با داده های تجربی دارد، ولی کمترین خطا مربوط به استفاده از مدل آماری ANFIS است.
مدل ترمودینامیکی NRTL، مدل ترمودینامیکی UNIQUAC، شبکه عصبی نوع GMDH، سیستم فازی ANFIS.	

۱- مقدمه

یکی از موضوعات مورد علاقه بسیاری از محققان، تحقیق بر روی تعادل های بخار-مایع و مایع-مایع است. یکی از وظایف مهندس شیمی در فرایند تولید مواد شیمیایی، تخمین پارامترهای برهم کنشی مدل های ترمودینامیکی (ضرایب فعالیت) برای کاربرد در تعادلات فازی است؛ زیرا این مدل ها اساس ساخت، طراحی، کنترل و بهینه سازی فرایندهای جداسازی هستند [۱]. برای طراحی فرایندهای جداسازی، داشتن داده های آزمایشگاهی بسیار ضروری است که برای توسعه، نیازمند مدل های ترمودینامیکی با دقت بالا هستند. مشکلات زیادی برای تخمین صحیح پارامترهای مدل های ترمودینامیکی وجود دارد. با استفاده از تکنیک های عددی

می توان بر بسیاری از این مشکلات غلبه کرد [۲]. روش های عمومی تخمین داده های تعادلی بخار-مایع و مایع-مایع استفاده از معادلات حالت است. استفاده از این مدل ها مستلزم داشتن پارامترهای برخورد مربوط به این مدل هاست. با استفاده از روش های بهینه سازی می توان پارامترهای مدل های ترمودینامیکی را تخمین زد و از آن ها در محاسبات مربوط به تعادلات بخار-مایع و مایع-مایع استفاده کرد [۳ و ۴]. عموماً برای بهینه سازی، از الگوریتم های تکاملی استفاده می کنند که شامل روش های جست و جوی تصادفی تطبیقی، الگوریتم تکامل، الگوریتم خوشه ای و الگوریتم ژنتیک است. الگوریتم ژنتیک، اولین بار توسط هالند ارائه شد و در دهه اخیر بسیار مورد استفاده

* پست الکترونیک نویسنده مسئول: hggilani@guilan.ac.ir

۱. استاد، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه گیلان

۲. استادیار، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه گیلان

۳. دانشجوی دکتری، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه گیلان

(ANFIS) و مدل شبکه عصبی نوع GMDH برای مدل‌سازی سیستم‌های مورد نظر استفاده گردید. در نهایت، نتایج حاصل از مدل‌های ارائه شده، با نتایج تجربی مقایسه شدند. به منظور اطمینان از صحت روش‌های پیشنهادی، دقت و صحت مدل‌های ارائه شده نسبت به رفتار داده‌های تجربی توسط ضریب همبستگی، مجذور میانگین مربعات خطا، میانگین مربعات خطا و انحراف مجذور میانگین مربعات بیان شد که بیانگر خطای مدل‌های ارائه شده نسبت به نتایج تجربی است.

۲- مواد و روش‌ها

۲-۱- تعادلات فازی بخار-مایع

برای سیستم‌های دوجزئی در شرایط تعادلی بخار-مایع، فوگاسیته فازهای بخار و مایع با هم برابرند.

$$f_i^v = f_i^l \quad (1)$$

$$Y_i \phi_i^v P^t = X_i \gamma_i^l f_i \quad (2)$$

$$f_i = \phi_i^{sat} P_i^{sat} \exp\left(\frac{V_i^l(P^t - P_i^{sat})}{RT}\right) \quad (3)$$

معادله بالا بر اساس ترم ضریب فوگاسیته به صورت زیر بازنویسی می‌شود:

$$Y_i P^t = X_i \gamma_i^l P_i^{sat} \quad (4)$$

پارامترهای معادلات ۱ الی ۴ به شرح زیر است:

f_i^v : فوگاسیته اجزا در فاز بخار

f_i^l : فوگاسیته اجزا در فاز مایع

Y_i : جزء مولی اجزا در فاز بخار

X_i : جزء مولی اجزا در فاز مایع

ϕ_i^v : ضریب فوگاسیته اجزا در فاز بخار

P^t : فشار کل سیستم

γ_i^l : ضریب فعالیت اجزا در فاز مایع

ϕ_i^{sat} : ضریب فوگاسیته اشباع اجزا در فاز مایع

P_i^{sat} : فشار اشباع اجزا در فاز مایع

V_i^l : حجم مولی اجزا در حالت خالص

R : ثابت جهانی گازها

T : دمای سیستم

n : تعداد مول‌های سیستم

۲-۲- تعادلات فازی مایع-مایع

در تعادلات مایع-مایع، فازهای آبی و آلی در تعادل با

قرار گرفته است [۱۶و۱۷]. این الگوریتم، یک روش بهینه‌سازی مستقیم است و از آن برای حل مسائل پیچیده و گوناگون در مهندسی شیمی استفاده می‌شود. از کاربردهای این روش می‌توان به بهینه‌سازی چندهدفی برای راکتورهای کاتالیستی بستر سیال، بهینه‌سازی راکتورهای پلیمری و تخمین خواص ترمودینامیکی سیستم‌ها اشاره کرد [۱۷و۱۸]. این الگوریتم با یک جمعیت اولیه که به صورت اتفاقی انتخاب می‌شود، شروع به کار می‌کند و نیاز به حدس اولیه ندارد؛ ولی با داشتن محدوده پارامترها می‌توان از ایجاد نقاط بهینه محلی جلوگیری کرد. توضیحات بیشتر راجع به این روش توسط بیسلی ارائه شده است [۱۹]. استفاده از نقاط بهینه محلی به جای نقاط بهینه کلی، منجر به ایجاد خطا در محاسبات می‌گردد و در مورد تعادلات بخار-مایع ممکن است باعث ایجاد آژوتروپ شود [۱۰]. مدل کردن فرایند با استفاده از مدل‌های ترمودینامیکی بر اساس حداقل کردن اختلاف بین داده‌های تجربی و داده‌های حاصل از مدل است. با توجه به اینکه مدل‌های ترمودینامیکی غیرخطی هستند، تابع هدف باید به گونه‌ای انتخاب شود که با حداقل خطا، پارامترهای مدل محاسبه شوند. آلوآرز و همکارانش با استفاده از الگوریتم ژنتیک و معادلات حالت، تعادلات مایع-بخار را بررسی کردند [۱۰]. مطالعات بسیاری بر روی تعادلات بخار-مایع و مایع-مایع مخلوط‌های چندجزئی با استفاده از مدل‌های ترمودینامیکی صورت گرفته است [۱۱-۱۳]. داده‌های تجربی سیستم‌های تعادلی بخار-مایع و مایع-مایع توسط مدل‌های ترمودینامیکی مانند NRTL و UNIQUAC تصحیح می‌شوند [۱۴و۱۵]. با توجه به پیچیدگی و غیرخطی بودن مدل‌های ترمودینامیکی، می‌توان از شبکه‌های عصبی برای مدل‌سازی سیستم‌ها و استفاده از آن‌ها به جای مدل‌های ترمودینامیکی اقدام کرد. قنادزاده و همکاران با استفاده از شبکه‌های عصبی، تعادلات بخار-مایع و مایع-مایع را بررسی کردند [۱۶و۱۷]. در این تحقیق، تعادلات بخار-مایع سیستم‌های دوتایی (۱- پروپانول با آب و اتیل‌استات) و سیستم‌های سه‌تایی (آب، اتیلن گلایکول، ۱-هپتانول) و (آب، اتیلن گلایکول، ۲-اتیل ۱-هگزانول) با استفاده از مدل‌های ترمودینامیکی NRTL و UNIQUAC مورد مطالعه قرار گرفتند. پارامترهای برهم‌کنشی مدل‌های ترمودینامیکی NRTL و UNIQUAC با استفاده از الگوریتم ژنتیک محاسبه شد. همچنین از سیستم استنتاج فازی-عصبی تطبیقی

$$A_{ij} = a_{ij} + b_{ij}T, A_{12} = a_{12} + b_{12}T, A_{21} = a_{21} + b_{21}T \quad (13)$$

$$\theta_i = \frac{q_i X_i}{\sum q_i X_i} \text{ و } \varphi_i = \frac{r_i X_i}{\sum r_i X_i} \quad (14)$$

$$L_j = 0.5Z(r_j - q_j) - r_j + 1 \quad (15)$$

مدل‌های ضرایب فعالیت فوق غیرخطی و کاملاً پیچیده‌اند و برای محاسبه پارامترهای آن‌ها از الگوریتم ژنتیک با توجه به توابع هدف استفاده شده است. Z عدد کثوردینانسیون بوده، عموماً برابر با ۱۰ است. r و q پارامترهای ساختاری مدل UNIQUAC مربوط به ساختمان مولکولی اجزای خالص هستند و به اندازه مولکولی و مساحت سطح خارجی آن بستگی دارند. برای تخمین پارامترهای برخورد (a_{ij} و b_{ij})، آن‌ها را به صورت تابعی از دما در نظر می‌گیریم.

۲-۴- شبکه عصبی نوع GMDH

شبکه‌های عصبی GMDH جلوه‌ای از الگوریتم GMDH است که به فرم و ساختار شبکه‌ای بیان شده است. شبکه عصبی GMDH، شبکه‌ای خود سامان‌ده و یک‌سویه بوده که از چند لایه و هر لایه نیز از چندین نرون تشکیل یافته است و تمامی نرون‌ها از ساختاری مشابه برخوردارند. وزن‌ها (w) بر اساس روش حل معادلات متعامد (SNE) به‌عنوان مقادیر مشخص و ثابت در داخل هر نرون جایگذاری می‌شود. ویژگی بارزی که در این نوع از شبکه‌ها مشاهده می‌گردد، حاکی از آن است که نرون‌های مرحله قبلی یا لایه قبلی، عامل یا مولد تولید نرون‌های جدید هستند. از میان نرون‌های تولیدشده لزوماً باید تعدادی از آن‌ها حذف شوند تا بدین‌وسیله از واگرایی شبکه جلوگیری به عمل آید. اصطلاحاً به این‌گونه نرون‌ها، نرون مرده گفته می‌شود. یکی از مسائل مهمی که در شبکه‌های عصبی مصنوعی چندلایه مطرح می‌شود، طراحی ساختار شبکه است. در این طراحی باید تعداد لایه‌ها و نیز ساختار درونی، از قبیل تعداد وزن‌ها و مقادیر اولیه آن‌ها و همچنین تابع تحریک هر نرون به صورت مناسب انتخاب شود تا یک نگاهت مناسب و ایدئال میان داده‌های ورودی و خروجی برقرار گردد. یکی از اهداف شبکه‌های عصبی GMDH جلوگیری از رشد واگرایی شبکه و نیز مرتبط کردن شکل و ساختار شبکه به

همدیگر قرار دارند و فوگاسیته فازها با هم برابر است.

$$f_i^{11} = f_i^{12} \quad (5)$$

$$X_i^{11} \gamma_i^{11} P^t = X_i^{12} \gamma_i^{12} P_t \quad (6)$$

$$K_i^{112} = \frac{X_i^{11}}{X_i^{12}} = \frac{\gamma_i^{12}}{\gamma_i^{11}} \quad (7)$$

۲-۳- مدل‌های ترمودینامیکی

ضرایب فعالیت توسط مدل‌های ترمودینامیکی زیر محاسبه می‌شوند [۱۴ و ۱۵].

۲-۳-۱- مدل NRTL

$$\begin{aligned} \ln \gamma_i &= \frac{\sum_j X_j \tau_{ji} G_{ji}}{\sum_k X_k G_{ki}} + \sum_j \left[\frac{X_j G_{ij}}{\sum_k X_k G_{kj}} [\tau_{ij} \right. \\ &\left. - \frac{\sum_m X_m \tau_{mj} G_{mj}}{\sum_k X_k G_{kj}}] \right] \end{aligned} \quad (8)$$

$$G_{ij} = \exp(-\tau_{ij} \alpha_{ij}), \tau_{ij} = \frac{A_{ij}}{RT} \quad (9)$$

$$A_{ij} = a_{ij} + b_{ij}T \quad (10)$$

در معادلات ۸ الی ۱۰ مدل NRTL شرح داده شده و پارامتر α_{ij} معرف نظم در مخلوط است. a_{ij} و b_{ij} پارامترهای برهم‌کنش مولکولی مدل هستند که با استفاده از الگوریتم ژنتیک با توجه به توابع هدف در سیستم‌های دوجزئی و سه‌جزئی محاسبه می‌شوند.

۲-۳-۲- مدل UNIQUAC

$$\begin{aligned} \ln \gamma_i &= \ln \left(\frac{\varphi_i}{X_i} \right) + 0.5Zq_i \ln \left(\frac{\theta_i}{\varphi_i} \right) \\ &+ L_i - \left(\frac{\theta_i}{\varphi_i} \right) \sum_{j=1}^n L_j X_j \\ &+ q_i \left(1 \right. \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} &\left. - \ln \sum_{j=1}^n \theta_j \tau_{ij} \right) \\ &- q_i \sum_{j=1}^n \frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_{k=1}^n \theta_k \tau_{kj}} \end{aligned} \quad (12)$$

$$\tau_{ij} = \exp \left(-\frac{A_{ij}}{RT} \right)$$

هالند در تحقق طبیعت و سیستم مصنوعی معرفی شد و سپس توسط همکاران و دانشجویانش در دانشگاه میشیگان گسترش یافت. هدف از بهینه‌سازی، تنظیم یک سری پارامترهای سیستم است به نحوی که رفتار آن حداقل یا حداکثر شود. پارامترهای اندازه جمعیت اولیه، تعداد تولید نسل، احتمال تقاطع، احتمال جهش و نحوه انتخاب در الگوریتم ژنتیک، از اهمیت بیشتری برخوردارند. مهم‌ترین مزیت این الگوریتم، عدم نیاز به وجود مشتق و شرایط مرزی و تنها معیار مورد استفاده در آن، تابع هدف است و می‌توان آن را برای حل انواع مسائل غیرخطی و پیچیده و دارای نقاط بیشینه و کمینه محلی اعمال کرد [۹].

۶-۲- توابع هدف

در مسائل مربوط به بهینه‌سازی و تخمین پارامترهای مدل‌های ترمودینامیکی، از توابع هدف مختلف استفاده می‌شود که بیشتر مربوط به مینیمم کردن انرژی آزاد اضافی گیبس است. تابع هدف مورد استفاده در بررسی تعادلات بخار-مایع، حداقل کردن اختلاف بین داده‌های آزمایشگاهی و داده‌های حاصل از مدل‌های ترمودینامیکی است. این اختلاف مربوط به فشار کل فاز بخار و انرژی آزاد اضافی گیبس فاز مایع و جزء مولی فاز بخار است. تابع هدف مربوط به انرژی آزاد اضافی گیبس

$$\frac{G^E}{RT} = \sum_{i=1}^n X_i \ln \gamma_i, \quad (16)$$

$$\Delta G^E = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n abs((G_{i,exp}^E - G_{model}^E)) \quad (17)$$

تابع هدف مربوط به فشار کل فاز بخار

$$P^t = \sum_{i=1}^n X_i \gamma_i P_i^{sat}, \sum_{i=1}^n Y_i = 1, \varphi_i = 1, \quad (18)$$

$$\Delta P^t = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n abs((P_{i,exp}^t - P_{model}^t)) \quad (19)$$

تابع هدف مربوط به جز مولی فاز بخار

$$Y_i = \frac{X_i \gamma_i P_i^{sat}}{P^t}, \varphi_i = 1 \quad (20)$$

یک یا چند پارامتر عددی است، به گونه‌ای که با تغییر این پارامتر ساختار شبکه نیز تغییر کند. [۲۰، ۱۷ و ۲۱].

۲-۵- سیستم استنتاجی عصبی-فازی تطبیقی (ANFIS)

نظریه مجموعه فازی در سال ۱۹۶۵ توسط لطفی عسگرزاده در دانشگاه برکلی امریکا عرضه شد [۲۲]. نظریه مجموعه‌های فازی، نظریه‌ای است برای اقدام در شرایط عدم اطمینان. این نظریه قادر است بسیاری از مفاهیم و متغیرها و سیستم‌هایی را که غیردقیق و مبهم هستند، صورت‌بندی ریاضی ببخشد و زمینه را برای استدلال، استنتاج، کنترل و تصمیم‌گیری در شرایط عدم اطمینان فراهم آورد. سیستم استنتاج عصبی-فازی تطبیقی از الگوریتم‌های یادگیری شبکه عصبی و منطق فازی به منظور طراحی نگاشت غیرخطی بین فضای ورودی و خروجی استفاده می‌کند و همچنین با توجه به توانایی در ترکیب قدرت زبانی یک سیستم فازی با قدرت عددی یک شبکه عصبی در مدل‌سازی فرایند مذکور بسیار قدرتمند است. این سیستم اولین بار در سال ۱۹۹۳ توسط جانگ و همکارانش ارائه شد [۲۳]. در مجموع، ANFIS از ساختاری پنج‌لایه با تعدادی متغیر ورودی تشکیل شده که هر ورودی دو یا چند تابع عضویت دارد. در لایه اول (ورودی) میزان تعلق هر ورودی به بازه‌های مختلف فازی توسط کاربر مشخص می‌شود. با ضرب مقادیر ورودی به هر گره در یکدیگر، وزن قانون‌ها در لایه دوم به دست می‌آید. در لایه سوم، عمل محاسبه وزن نسبی قوانین انجام می‌گیرد. لایه چهارم، لایه قوانین است که از انجام عملیات بر روی سیگنال‌های ورودی به این لایه حاصل می‌شود. لایه آخر، خروجی شبکه (F) بوده که هدف آن حداقل کردن اختلاف خروجی به دست آمده از شبکه و خروجی واقعی است [۲۴].

۶-۲- الگوریتم ژنتیک

در میان روش‌های مختلف بهینه‌سازی با الهام از طبیعت، الگوریتم ژنتیک از تکامل یافته‌ترین آن‌ها به شمار می‌رود. این الگوریتم، زیرمجموعه‌ای از الگوریتم‌های موسوم به تکاملی است که با استفاده از ایده‌های برگرفته شده از انتخاب طبیعی در طبیعت، به بهینه‌سازی فرایند مورد نظر می‌پردازد. الگوریتم ژنتیک به عنوان یک روش جست‌وجوی مؤثر در بهینه‌سازی، اولین بار در سال ۱۹۷۵ توسط جان

$$\mu_A^{(j)} = \exp\left(-\left(x_i - c_j\right)^2 / 2\sigma_j^2\right) \quad (24)$$

$$TE = \sum_{i=1}^n (Y_{j,exp} - Y_{j,training})^2 / \sum_{i=1}^n (Y_{j,exp})^2 \quad (25)$$

$$PE = \sum_{i=1}^n (Y_{j,exp} - Y_{j,Testing})^2 / \sum_{i=1}^n (Y_{j,exp})^2 \quad (26)$$

در جدول ۱ پارامترهای ساختاری سیستم استنتاج عصبی-فازی تطبیقی (ANFIS) آمده است.

جدول ۱- پارامترهای ساختاری سیستم استنتاج عصبی-فازی تطبیقی (ANFIS)

جمعیت اولیه	تعداد تکرار	جهش
۱۲۰	۳۵۰	۰/۰۹
تقاطع	تعداد توابع عضویت	توابع قواعد فازی
۰/۹۸	۲ و ۳	۱۶ و ۸۱

۳-۲- طراحی و بهینه سازی شبکه عصبی GMDH
الگوریتم GMDH، بر اساس تجزیه سری توابع ولترا به چند جمله ای های دو متغیره درجه دوم پایه ریزی شده است. در این تجزیه، سری ولترا (معادله ۲۷) به مجموعه ای از معادلات بازگشتی زنجیره ای تبدیل می شود، به گونه ای که مجدداً با جایگذاری جبری هریک از روابط بازگشتی در یکدیگر، سری ولترا برقرار شود (معادلات ۲۸ و ۲۹). الگوریتم این گونه شبکه ها به گونه ای بسته می شود که مدل در زمان کمتری به هم گرایایی برسد [۱۸].

$$G(x_i, x_j) = a_0 + a_1 x_i + a_2 x_j + a_3 x_i^2 + a_4 x_j^2 + a_5 x_i x_j \quad (27)$$

$$A = \begin{bmatrix} 1 & x_{1p} & x_{1q} & x_{1p}^2 & x_{1q}^2 & x_{1p}x_{1q} \\ 1 & x_{2p} & x_{2q} & x_{2p}^2 & x_{2q}^2 & x_{2p}x_{2q} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 1 & x_{Mp} & x_{Mq} & x_{Mp}^2 & x_{Mq}^2 & x_{Mp}x_{Mq} \end{bmatrix} \quad (28)$$

$$a = (A^T A)^{-1} A^T Y \quad (29)$$

در جدول ۲ پارامترهای ساختاری شبکه عصبی نوع GMDH آمده است.

جدول ۲- پارامترهای ساختاری شبکه عصبی نوع GMDH

جمعیت اولیه	تعداد تکرار	جهش
۱۲۰	۳۵۰	۰/۰۹
تقاطع	تعداد لایه ها	توابع هدف
۰/۹۸	۳	۲

$$\Delta Y = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \text{abs}(Y_{i,exp} - Y_{i,model}) \quad (21)$$

در تعادلات مایع-مایع نیز اختلاف پتانسیل شیمیایی فازها به عنوان تابع هدف استفاده شد.

$$f_1 = \sum_{n=1}^N X_i^{l_1} \gamma_i^{l_1} - \sum_{n=1}^N X_i^{l_2} \gamma_i^{l_2} \quad (22)$$

$$f_2 = \sum_{n=1}^N \frac{X_i^{l_1}}{X_i^{l_2}} - \sum_{n=1}^N \frac{\gamma_i^{l_2}}{\gamma_i^{l_1}} \quad (23)$$

۳- نتایج و بحث

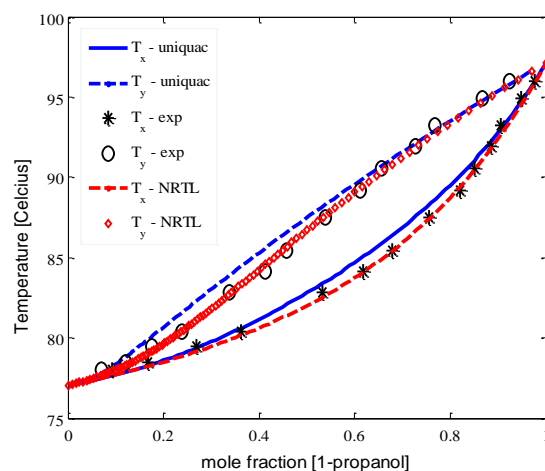
تعادلات بخار-مایع سیستم های دوتایی (۱- پروپانول با آب و اتیل استات) و سیستم های سه تایی (آب، اتیلن گلیکول، ۲- اتیل ۱- هگزانول) و (آب، اتیلن گلیکول، ۱- هپتانول) بررسی و پارامترهای برهم کنشی مدل های ترمودینامیکی NRTL و UNIQUAC با استفاده از الگوریتم ژنتیک محاسبه شدند. همچنین از مدل های سیستم استنتاج عصبی-فازی تطبیقی (ANFIS) و شبکه های عصبی نوع GMDH برای مدل سازی و پیش بینی دما در سیستم های دوتایی و جزء مولی اجزا در سیستم های سه تایی استفاده شد. نتایج حاصل از مدل سازی با داده های آزمایشگاهی مقایسه و خطای مدل ها محاسبه گردید. همچنین نمودارهای تعادلی توزیع دما بر حسب جزء مولی فاز مایع و بخار برای فرایند فشار ثابت برای سیستم های دوجزئی رسم شد.

۳-۱- طراحی و بهینه سازی سیستم ANFIS

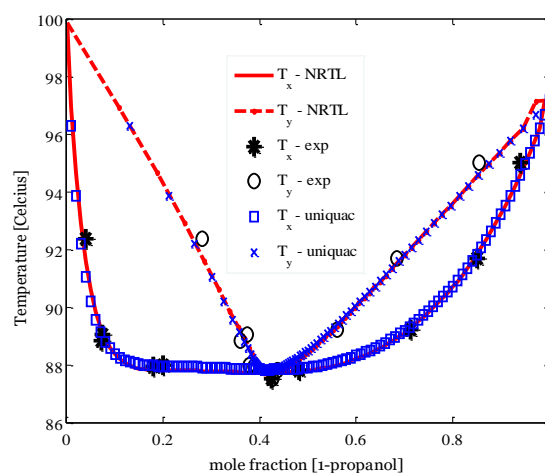
در این بخش، از مدل سیستم استنتاج فازی-عصبی تطبیقی سوگانو مرتبه اول برای پیش بینی میزان دما در تعادلات بخار-مایع و جزء مولی در تعادلات مایع-مایع استفاده می شود [۱۹]. برای متغیرهای ورودی از تابع گاوسین استفاده شد (معادله ۲۴). از الگوریتم ژنتیک و روش SNE برای طراحی و بهینه کردن پارامترهای غیرخطی ورودی (σ_i و c_i) و پارامترهای خطی خروجی (a_i) با در نظر گرفتن دو تابع هدف خطای آموزشی و خطای آزمایشی (معادلات ۲۵ و ۲۶) برای پیش بینی دما در سیستم های دوجزئی و جزء مولی در سیستم های سه جزئی استفاده شد [۱۷].

۳-۳- تعادلات بخار-مایع

در بررسی تعادلات بخار-مایع سیستم های دوتایی ۱- پروپانول با آب و اتیل استات، داده های تجربی با مدل های ترمودینامیکی NRTL و UNIQUAC مدل سازی شد. پارامترهای مدل های ترمودینامیکی با استفاده از الگوریتم ژنتیک محاسبه گردید. نتایج به صورت جداول و شکل های جداگانه آمده است. در شکل (۱)، تعادل بخار مایع سیستم ۱- پروپانول با اتیل استات و در شکل (۲)، تعادل بخار-مایع سیستم ۱- پروپانول- آب در فشار یک اتمسفر رسم شده است.



شکل ۱- تعادل بخار مایع سیستم ۱- پروپانول با اتیل استات



شکل ۲- تعادل بخار مایع سیستم ۱- پروپانول با آب

سیستم ۱- پروپانول با اتیل استات غیرایدهال، ولی فاقد آزوتروپ است. در این سیستم برای جداسازی می توان از تقطیر استفاده کرد. مدل های ترمودینامیکی ارائه شده به خوبی می توانند تعادلات بخار-مایع این سیستم را پیش بینی کنند. در جدول ۳، پارامترهای برهم کنش سیستم ۱- پروپانول- اتیل استات در فشار یک اتمسفر آمده

است.

جدول ۳- پارامترهای برهم کنش ۱- پروپانول- اتیل استات (۲) در فشار یک اتمسفر

مدل های ترمودینامیکی	پارامترهای برهم کنش ۱- پروپانول- اتیل استات	
	$A_{12}(\text{cal mol}^{-1})$	$A_{21}(\text{cal mol}^{-1})$
NRTL	-۸/۵۲	۴۷۵/۵۴
UNIQUAC	-۳۱/۹۵	۲۹/۹۶۶

سیستم ۱- پروپانول- آب غیرایدهال و دارای آزوتروپ است. با تغییر دما و فشار نقطه آزوتروپ سیستم حذف نمی شود و فقط جزء مولی آن تغییر می کند. در این سیستم برای جداسازی اجزا، از روش هایی همچون استخراج با حلال و تقطیر آزوتروپی می توان استفاده کرد. جدول ۴، مقادیر پارامترهای برهم کنش سیستم ۱- پروپانول با آب را در فشار یک اتمسفر نشان می دهد.

جدول ۴- پارامترهای برهم کنش سیستم ۱- پروپانول (۱) با آب (۲) در فشار یک اتمسفر

مدل های ترمودینامیکی	پارامترهای برهم کنش ۱- پروپانول- آب	
	$A_{12}(\text{cal mol}^{-1})$	$A_{21}(\text{cal mol}^{-1})$
NRTL	-۳۰/۰۶	۱۵۵/۱۳
UNIQUAC	-۵۵/۵۸	۹۳/۴۳

۳-۳-۱- بررسی تعادلات بخار-مایع با استفاده از

سیستم ANFIS و شبکه های عصبی نوع GMDH داده های تجربی مورد استفاده برای ایجاد مدل به منظور پیش بینی دما در سیستم های دوتایی گردآوری شدند (۱۸) و (۱۹). برای بررسی تعادلات بخار-مایع از متغیرهای جزء مولی فاز بخار، جزء مولی فاز مایع و ضریب فعالیت اجزا به عنوان متغیرهای ورودی و از دما به عنوان متغیر خروجی استفاده شد.

در ابتدا برای ایجاد مدل از هفتاد درصد داده ها، سپس از بقیه آن ها برای تست کردن مدل های ارائه شده استفاده شد. مقادیر پارامترهای توابع عضویت گوسی به کار رفته در مدل ANFIS، در جدول ۵ آمده است.

مدل ریاضی و مقادیر پارامترهای سری ولترا در مدل GMDH در جدول ۶ آورده شده است. نتایج حاصل از مدل های ANFIS و GMDH بر حسب خروجی واقعی برای سیستم های دو جزئی در شکل های (۳) و (۴) نشان داده شده است.

جدول ۵- پارامترهای توابع عضویت گوسی مدل دوهدفی ANFIS برای سیستم‌های دوجزئی بخار-مایع

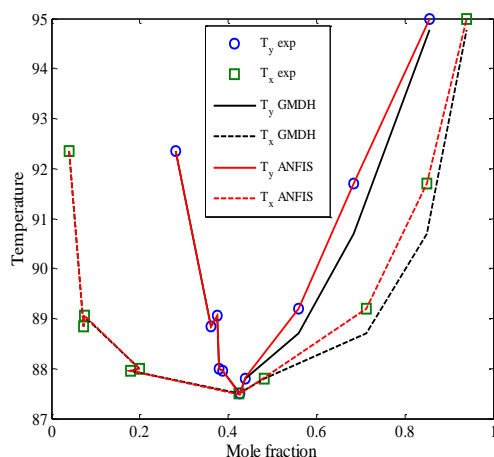
سیستم	ورودی	تابع عضویت گاوسین ۱		تابع عضویت گاوسین ۲	
		C	σ	C	σ
۱- پروپانول - آب	ضریب فعالیت جزء ۱	۲/۶۵۴	۰/۴۸۴	۲/۲۷۰	۰/۵۱۳
	ضریب فعالیت جزء ۲	۴/۶۸۰	۳/۴۳۹	۱/۷۱۳	۱/۶۰۳
	جزء مولی در فاز مایع	۰/۸۰۹	۰/۴۷۲	۰/۲۸۱	۰/۲۶۳
	جزء مولی در فاز بخار	۰/۴۶۸	۰/۴۹۶	۰/۲۱۱	۰/۶۷۶
۱- پروپانول - اتیل استات	ضریب فعالیت جزء ۱	۱/۰۱۴۹	۰/۲۰۷	۱/۸۱۷	۰/۳۷۴
	ضریب فعالیت جزء ۲	۱/۵۸۲	۰/۲۳۲	۱/۰۲۹	۰/۳۳۹
	جزء مولی در فاز مایع	۰/۵۱۷	۰/۷۲۵	۰/۰۷۰	۰/۲۹۲
	جزء مولی در فاز بخار	۰/۲۷۵	۰/۳۰۹	۰/۶۸۲	۰/۴۴۸

جدول ۶- مدل ریاضی ارائه شده برای محاسبه دمای تعادلی بخار-مایع سیستم‌های دوجزئی

الف. محاسبه دمای تعادلی سیستم ۱- پروپانول (۱) - آب (۲) در فشار یک اتمسفر						
a	1	2	3	4	5	6
۱	111/4813356	19/36223496	-156/4358813	24/97232044	508/5167176	-211/9768388
۲	233/333621	-5/442474567	-699/4446712	0/027504656	832/2804751	14/37388577
۳	114/5008622	-12/35051993	-139/6729868	1/007005629	123/5337257	41/55380389
۴	842/9878181	-1685/835447	2877/668228	945/8631881	2890/579074	-3272/258855
۵	169/11901	-471/8283007	122/3397654	700/332444	68/61082823	-397/7791689
۶	0/098792113	1/000652511	0/221505583	-5/33447E-06	0/629753399	-0/008652011
۷	0/01111147	0/499858097	0/499908008	-0/002475563	0/002494714	-0/000017927
۸	-0/021217013	-0/284288447	1/282891127	-0/000155838	-0/003309345	0/0034838
۹	0/277416372	0/437950914	0/555577766	0/414557439	0/407675284	-0/822187102
۱۰	0/011110949	0/49986318	0/499904389	-0/002944625	0/003003612	-5/77792E-05
۱۱	0/011133075	0/499498151	0/499832179	0/0032107	-0/003208134	4/12803E-06
۱۲	0/011110337	0/499865784	0/499886131	-0/001914705	0/0019158	2/9028E-07
$Y_1(i) =$	$a(1,1)+a(1,2)*X_1(i)+a(1,3)*X_3(i)+a(1,4)*(X_1(i))^2+a(1,5)*(X_3(i))^2+a(1,6)*(X_1(i))*(X_3(i))$					
$Y_2(i) =$	$a(2,1)+a(2,2)*X_2(i)+a(2,3)*X_3(i)+a(2,4)*(X_2(i))^2+a(2,5)*(X_3(i))^2+a(2,6)*(X_2(i))*(X_3(i))$					
$Y_3(i) =$	$a(3,1)+a(3,2)*X_2(i)+a(3,3)*X_4(i)+a(3,4)*(X_2(i))^2+a(3,5)*(X_4(i))^2+a(3,6)*(X_2(i))*(X_4(i))$					
$Y_4(i) =$	$a(4,1)+a(4,2)*X_1(i)+a(4,3)*X_4(i)+a(4,4)*(X_1(i))^2+a(4,5)*(X_4(i))^2+a(4,6)*(X_1(i))*(X_4(i))$					
$Y_5(i) =$	$a(5,1)+a(5,2)*X_3(i)+a(5,3)*X_4(i)+a(5,4)*(X_3(i))^2+a(5,5)*(X_4(i))^2+a(5,6)*(X_3(i))*(X_4(i))$					
$Y_6(i) =$	$a(6,1)+a(6,2)*Y_1(i)+a(6,3)*X_3(i)+a(6,4)*(Y_1(i))^2+a(6,5)*(X_3(i))^2+a(6,6)*(Y_1(i))*(X_3(i))$					
$Y_7(i) =$	$a(7,1)+a(7,2)*Y_2(i)+a(7,3)*Y_3(i)+a(7,4)*(Y_2(i))^2+a(7,5)*(Y_3(i))^2+a(7,6)*(Y_2(i))*(Y_3(i))$					
$Y_8(i) =$	$a(8,1)+a(8,2)*Y_4(i)+a(8,3)*Y_3(i)+a(8,4)*(Y_4(i))^2+a(8,5)*(Y_3(i))^2+a(8,6)*(Y_4(i))*(Y_3(i))$					
$Y_9(i) =$	$a(9,1)+a(9,2)*Y_3(i)+a(9,3)*Y_5(i)+a(9,4)*(Y_3(i))^2+a(9,5)*(Y_5(i))^2+a(9,6)*(Y_3(i))*(Y_5(i))$					
$Y_{10}(i) =$	$a(10,1)+a(10,2)*Y_6(i)+a(10,3)*Y_7(i)+a(10,4)*(Y_6(i))^2+a(10,5)*(Y_7(i))^2+a(10,6)*(Y_6(i))*(Y_7(i))$					
$Y_{11}(i) =$	$a(11,1)+a(11,2)*Y_8(i)+a(11,3)*Y_9(i)+a(11,4)*(Y_8(i))^2+a(11,5)*(Y_9(i))^2+a(11,6)*(Y_8(i))*(Y_9(i))$					
$T(i) =$	$a(12,1)+a(12,2)*Y_{10}(i)+a(12,3)*Y_{11}(i)+a(12,4)*(Y_{10}(i))^2+a(12,5)*(Y_{11}(i))^2+a(12,6)*(Y_{10}(i))*(Y_{11}(i))$					

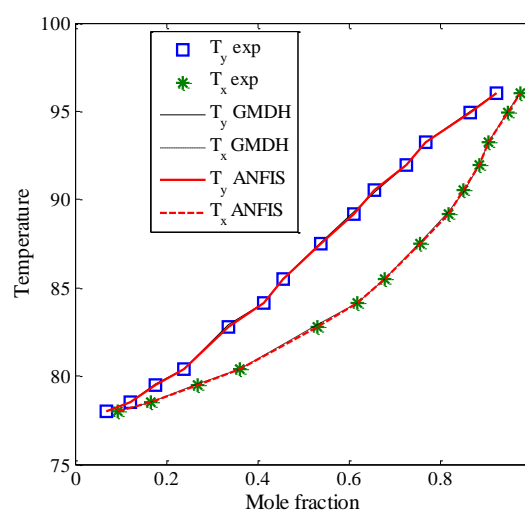
ب. محاسبه دمای تعادلی سیستم ۱- پروپانول (۱) - اتیل استات (۲) در فشار یک اتمسفر						
a	1	2	3	4	5	6
۱	112/4598265	-33/5697279	-27/44030235	-2/175097028	5/355960783	41/38651645
۲	-20/3898832	157/1725413	111/0429651	8/657100827	16/57492911	-179/6510447
۳	43/0458516	45/35112246	78/61967655	-14/71982668	-6/439858447	-48/57852965
۴	75/97632407	0/537461499	-88/91402247	-0/006727473	-3/34774266	1/286079466
۵	-1/712376721	0/540407851	0/502513324	0/016749674	0/022569546	-0/039588925
۶	67/89671337	-0/39872693	8/509351941	0/009097483	4/756538183	-0/320044152
۷	3/061729705	-10/65611004	11/58421321	0/632732327	0/510333532	-1/142629342
۸	-1/159718852	-22/22927565	23/24749037	-22/0887565	-22/34000634	44/42872547
۹	0/838824953	1/68373279	-0/704016799	0/723147369	0/743731397	-1/466762407
$Y_1(i) =$	$a(1,1) + a(1,2) * X_1(i) + a(1,3) * X_4(i) + a(1,4) * (X_1(i))^2 + a(1,5) * (X_4(i))^2 + a(1,6) * (X_1(i)) * (X_4(i))$					
$Y_2(i) =$	$a(2,1) + a(2,2) * X_1(i) + a(2,3) * X_2(i) + a(2,4) * (X_1(i))^2 + a(2,5) * (X_2(i))^2 + a(2,6) * (X_1(i)) * (X_2(i))$					
$Y_3(i) =$	$a(3,1) + a(3,2) * X_2(i) + a(3,3) * X_3(i) + a(3,4) * (X_2(i))^2 + a(3,5) * (X_3(i))^2 + a(3,6) * (X_2(i)) * (X_3(i))$					
$Y_4(i) =$	$a(4,1) + a(4,2) * Y_1(i) + a(4,3) * X_4(i) + a(4,4) * (Y_1(i))^2 + a(4,5) * (X_4(i))^2 + a(4,6) * (Y_1(i)) * (X_4(i))$					
$Y_5(i) =$	$a(5,1) + a(5,2) * Y_2(i) + a(5,3) * Y_3(i) + a(5,4) * (Y_2(i))^2 + a(5,5) * (Y_3(i))^2 + a(5,6) * (Y_2(i)) * (Y_3(i))$					
$Y_6(i) =$	$a(6,1) + a(6,2) * Y_1(i) + a(6,3) * X_2(i) + a(6,4) * (Y_1(i))^2 + a(6,5) * (X_2(i))^2 + a(6,6) * (Y_1(i)) * (X_2(i))$					
$Y_7(i) =$	$a(7,1) + a(7,2) * Y_1(i) + a(7,3) * Y_4(i) + a(7,4) * (Y_1(i))^2 + a(7,5) * (Y_4(i))^2 + a(7,6) * (Y_1(i)) * (Y_4(i))$					
$Y_8(i) =$	$a(8,1) + a(8,2) * Y_5(i) + a(8,3) * Y_6(i) + a(8,4) * (Y_5(i))^2 + a(8,5) * (Y_6(i))^2 + a(8,6) * (Y_5(i)) * (Y_6(i))$					
$T(i) =$	$a(9,1) + a(9,2) * Y_7(i) + a(9,3) * Y_8(i) + a(9,4) * (Y_7(i))^2 + a(9,5) * (Y_8(i))^2 + a(9,6) * (Y_7(i)) * (Y_8(i))$					

UNIQUAC با استفاده از الگوریتم ژنتیک محاسبه شد.



شکل ۴- خروجی واقعی برحسب خروجی مدل شده با استفاده از مدل های ANFIS و GMDH برای سیستم ۱- پروپانول (۱) - اتیل استات (۲)

شکل های (۵)، (۶) و (۷) به بررسی تعادلات مایع-مایع سیستم سه تایی آب، اتیلن گلیکول، ۱-هپتانول و مقایسه مدل های ترمودینامیکی NRTL و UNIQUAC و همچنین مدل های سیستم استنتاج عصبی-فازی تطبیقی (ANFIS) و شبکه های عصبی نوع GMDH در دماهای ۲۵، ۳۵ و ۴۵ درجه سانتی گراد می پردازد. نتایج حاصل از



شکل ۳- خروجی واقعی برحسب خروجی مدل شده با استفاده از مدل های ANFIS و GMDH برای سیستم ۱- پروپانول (۱) - اتیل استات (۲)

۴-۳- تعادلات مایع-مایع

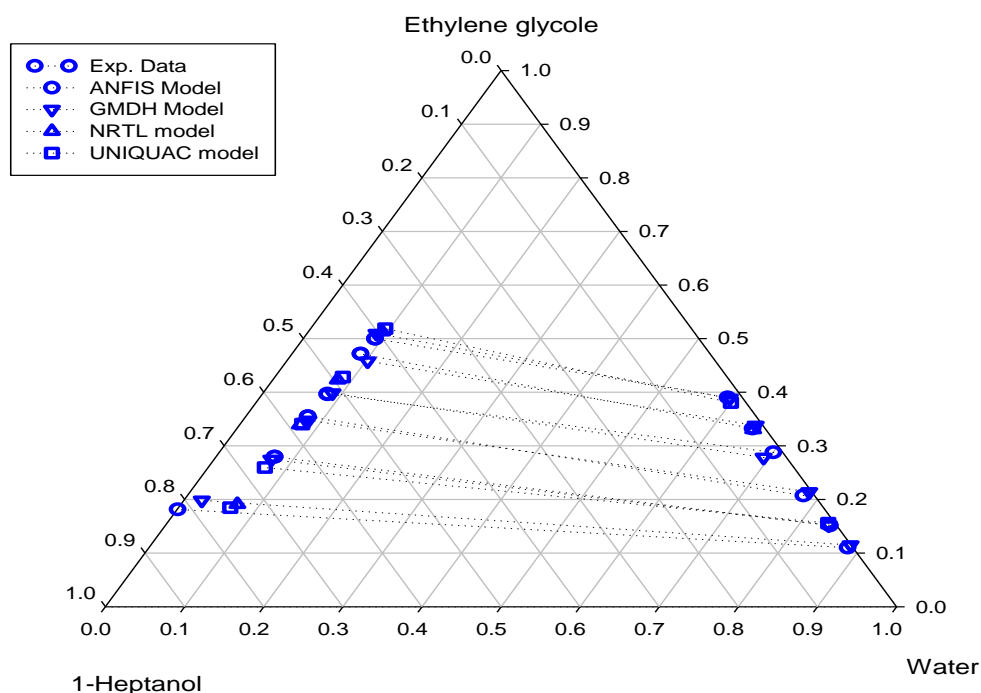
در بررسی تعادلات مایع-مایع سیستم های سه تایی (آب، اتیلن گلیکول، ۱-هپتانول) و (آب، اتیلن گلیکول، ۲-اتیل ۱-هگزانول) با استفاده از مدل های ترمودینامیکی NRTL و UNIQUAC مورد مطالعه قرار گرفتند. پارامترهای برهم کنشی مدل های ترمودینامیکی NRTL و

رسم گردید. در جداول ۷ و ۸ پارامترهای برهم کنش مدل‌های ترمودینامیکی NRTL و UNIQUAC در دماهای مختلف آمده است.

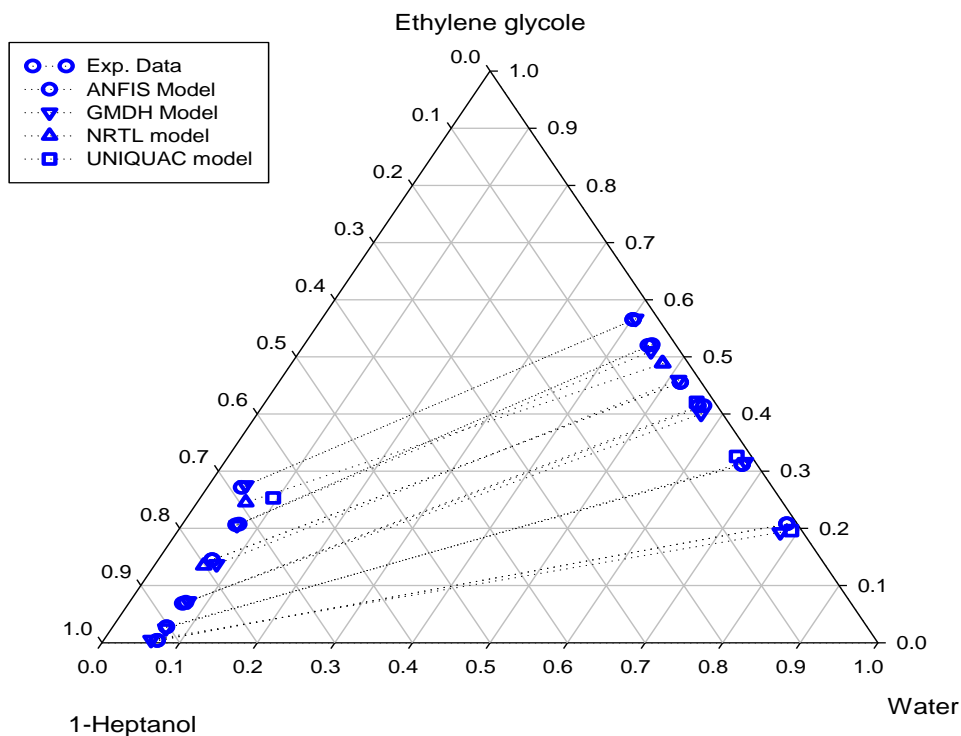
بررسی سیستم سه تایی آب، اتیلن گلیکول، ۲-اتیل ۱-هگزانول با مدل‌های ارائه شده در شکل‌های (۸)، (۹) و (۱۰)

جدول ۷- پارامترهای برهم کنش سیستم (آب، اتیلن گلیکول، ۱-هپتانول) در دماهای ۲۵، ۳۵ و ۴۵ درجه سانتی گراد

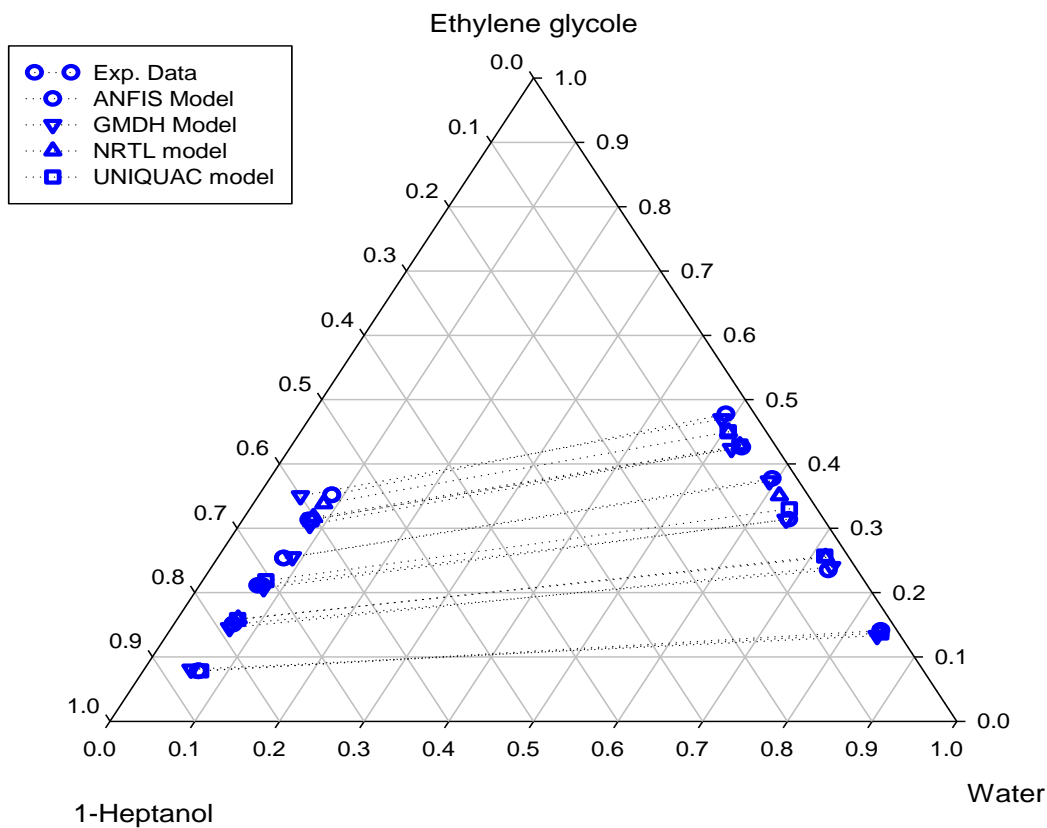
پارامترهای برهم کنش مدل UNIQUAC در دمای ۲۵ درجه سانتی گراد				پارامترهای برهم کنش مدل NRTL در دمای ۲۵ درجه سانتی گراد			
۱-هپتانول	اتیلن گلیکول	آب	۱-هپتانول	۱-هپتانول	اتیلن گلیکول	آب	۱-هپتانول
-۲۰۱/۲۰	۱۶۳/۱۳	۰	آب	۲۸۷/۰۸	۱۹۲۰/۸۸	۰	آب
۸۵/۸۷	۰	-۱۰۰۰۰	اتیلن گلیکول	۴۴۳/۸۸	۰	۲۲۰/۵۰	اتیلن گلیکول
۰	-۸۹/۴۵	-۱۸۷/۹۲	۱-هپتانول	۰	-۵۷۵/۳۲	۲۳۳/۰۳	۱-هپتانول
پارامترهای برهم کنش مدل UNIQUAC در دمای ۳۵ درجه سانتی گراد				پارامترهای برهم کنش مدل NRTL در دمای ۳۵ درجه سانتی گراد			
۱-هپتانول	اتیلن گلیکول	آب	۱-هپتانول	۱-هپتانول	اتیلن گلیکول	آب	۱-هپتانول
-۶۹۴/۵۱	-۱۲۸۲/۶۸	۰	آب	۱۵۷/۱۱	۲۰۲۸/۷۷	۰	آب
-۴۰۴/۴۲	۰	۶۵۲/۹۴	اتیلن گلیکول	۵۶/۹۳۸	۰	-۵۷/۳۶	اتیلن گلیکول
۰	-۱۱۲۴/۵۵	-۲۳۱/۵۳	۱-هپتانول	۰	۵۰۷۱/۴۰	۲۴۸۰/۹۲	۱-هپتانول
پارامترهای برهم کنش مدل UNIQUAC در دمای ۴۵ درجه سانتی گراد				پارامترهای برهم کنش مدل NRTL در دمای ۴۵ درجه سانتی گراد			
۱-هپتانول	اتیلن گلیکول	آب	۱-هپتانول	۱-هپتانول	اتیلن گلیکول	آب	۱-هپتانول
-۱۲۱/۱۹	-۹۲۹/۷۴	۰	آب	-۱۸۶۵/۲۹	۱۶۷۱/۳۵	۰	آب
-۴۰۴/۴۲	۰	-۵۴۰/۲۹	اتیلن گلیکول	۸۴۳/۴۹	۰	۲۴۰/۳۳	اتیلن گلیکول
۰	-۱۱۲۴/۵۵	-۲۳۱/۵۳	۱-هپتانول	۰	-۲۵۷۲/۵۹	-۱۱۶/۴۷	۱-هپتانول



شکل ۵- داده‌های تعادلی سیستم آب، اتیلن گلیکول، ۱-هپتانول در دمای ۲۵ درجه سلسیوس



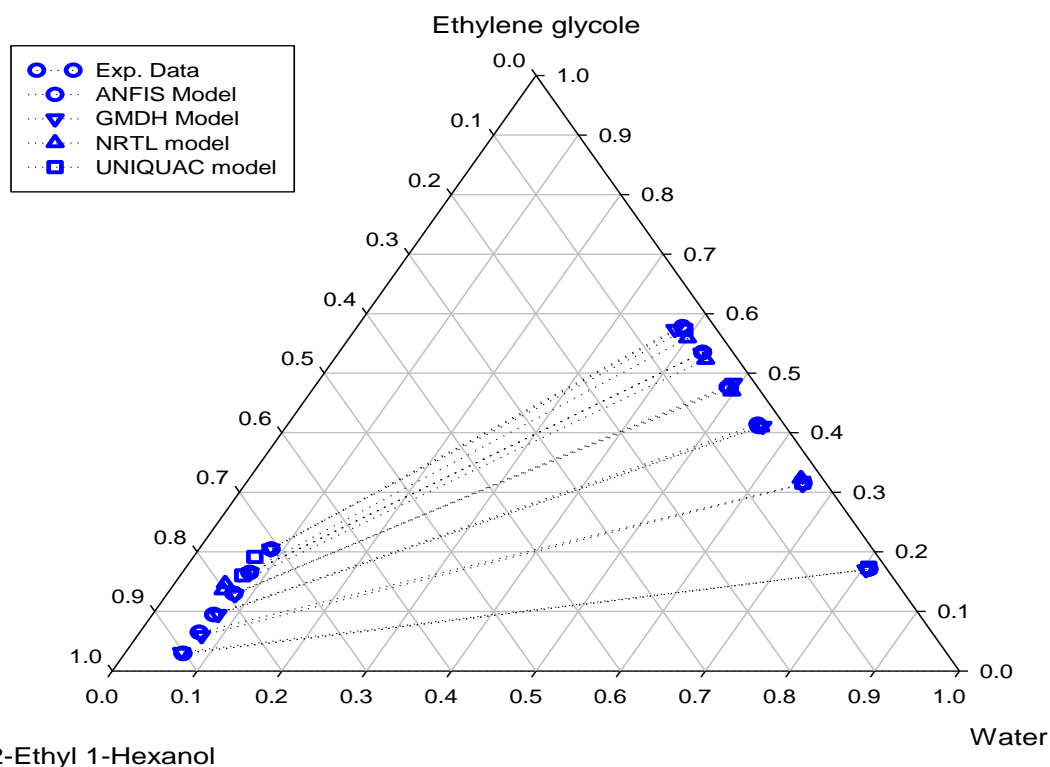
شکل ۶- داده های تعادلی سیستم آب، اتیلن گلیکول، ۱-هپتانول در دمای ۳۵ درجه سلسیوس



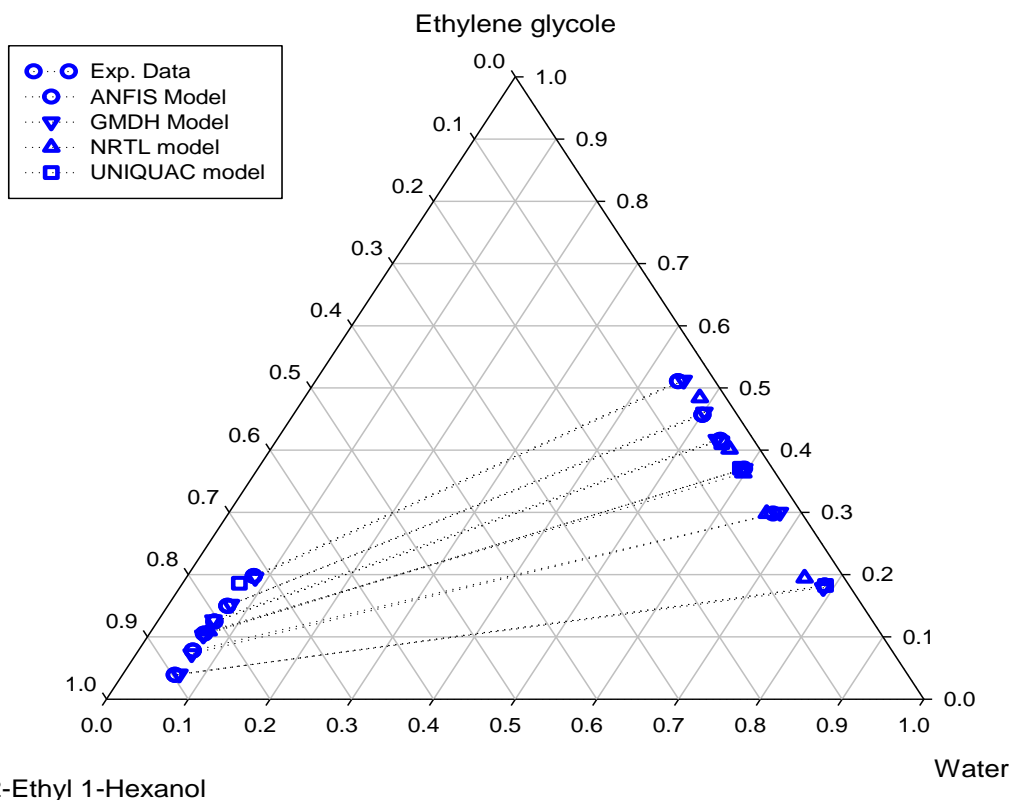
شکل ۷- داده های تعادلی سیستم آب، اتیلن گلیکول، ۱-هپتانول در دمای ۴۵ درجه سلسیوس

جدول ۸- پارامترهای برهم کنش سیستم آب، اتیلن گلیکول، ۲-اتیل ۱-هگزانول در دماهای ۲۵، ۳۵ و ۴۵ درجه سانتی گراد

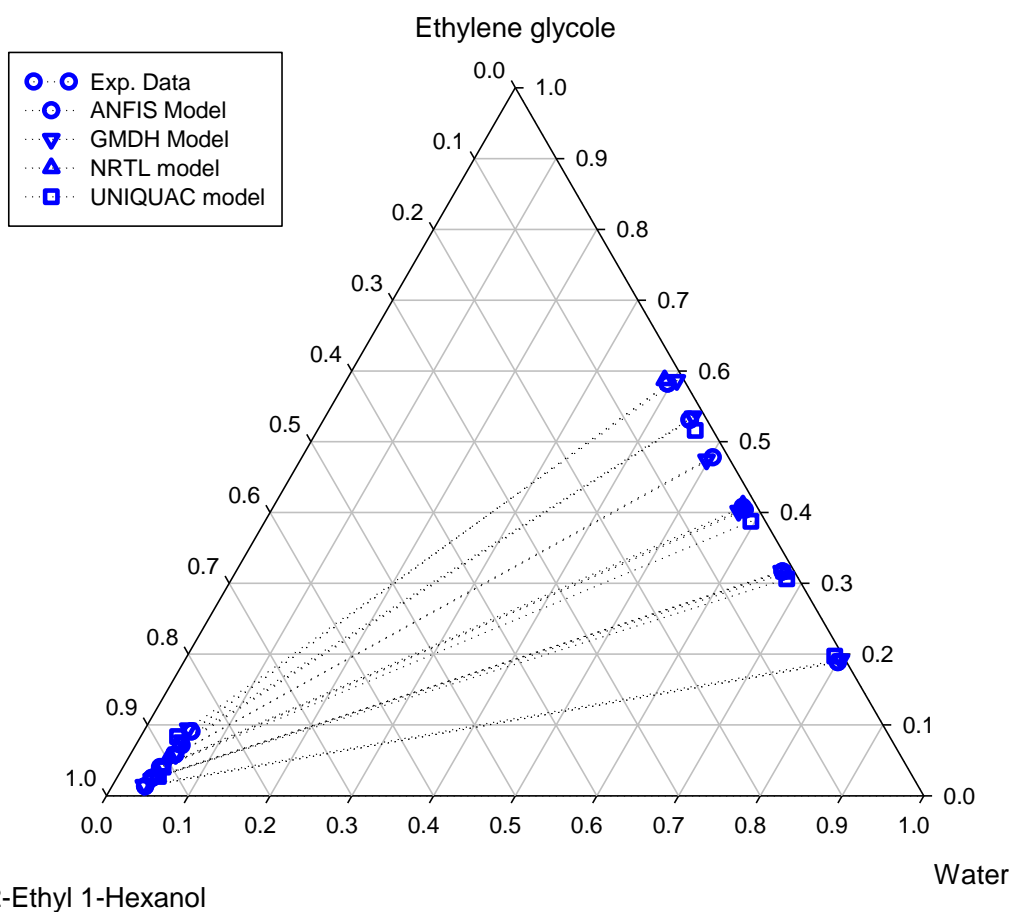
پارامترهای برهم کنش مدل NRTL در دمای ۲۵ درجه سانتی گراد				پارامترهای برهم کنش مدل UNIQUAC در دمای ۲۵ درجه سانتی گراد			
آب	اتیلن گلیکول	۲-اتیل ۱-هگزانول	آب	اتیلن گلیکول	۲-اتیل ۱-هگزانول	آب	اتیلن گلیکول
۰	۷۴۸/۱۵	۱۷۰۸/۴۹	۰	۲۱۱/۸۴	-۱۰۴/۳۰	۰	۳۰۵/۶۴
۲-اتیل ۱-هگزانول	-۲۰۳/۷۶	۰	۱۰۰۰۰	۰	۰	۴۰/۸۸	۰
۲-اتیل ۱-هگزانول	۴۱۵۴/۲۳	۸۹۱/۷۶	۰	-۱۸۶/۳۸	-۴۵۴۶/۳۵	-۱۸۶/۳۸	-۴۵۴۶/۳۵
پارامترهای برهم کنش مدل NRTL در دمای ۳۵ درجه سانتی گراد				پارامترهای برهم کنش مدل UNIQUAC در دمای ۳۵ درجه سانتی گراد			
آب	اتیلن گلیکول	۲-اتیل ۱-هگزانول	آب	اتیلن گلیکول	۲-اتیل ۱-هگزانول	آب	اتیلن گلیکول
۰	۱۰۰۰۰	۱۶۴۸/۵۲	۰	۸۴۹/۷۰	-۵۵/۶۱	۰	۸۲۶/۲۱
۲-اتیل ۱-هگزانول	۸۷۵۴/۲۰	۰	۷۰۵۸/۲۴	۰	۰	-۱۸۳/۴۸	۰
۲-اتیل ۱-هگزانول	-۲۱۹/۰۱	۱۰۰۰۰	۰	-۲۶۴/۸۰	-۵۳۸۵/۳۳	-۲۶۴/۸۰	-۵۳۸۵/۳۳
پارامترهای برهم کنش مدل NRTL در دمای ۴۵ درجه سانتی گراد				پارامترهای برهم کنش مدل UNIQUAC در دمای ۴۵ درجه سانتی گراد			
آب	اتیلن گلیکول	۲-اتیل ۱-هگزانول	آب	اتیلن گلیکول	۲-اتیل ۱-هگزانول	آب	اتیلن گلیکول
۰	۱۵۴۰/۲۲	۱۸۴۲/۳۰	۰	-۲۲۱/۱۲	-۱۶۹/۰۶	۰	۵۵/۸۵
۲-اتیل ۱-هگزانول	۱۲۱۱/۲۳	۰	۲۷۲۳/۵۹	۰	۰	۲۹۵/۶۳	۰
۲-اتیل ۱-هگزانول	۳۰۲/۰۲	۱۱۲۵/۳۷	۰	-۲۱۳/۱۴	-۵۹۰/۹۴	-۲۱۳/۱۴	-۵۹۰/۹۴



شکل ۸- داده‌های تعادلی سیستم آب، اتیلن گلیکول، ۲-اتیل ۱-هگزانول در دمای ۲۵ درجه سلسیوس



شکل ۹- داده‌های تعادلی سیستم آب، اتیلن گلیکول، ۲-اتیل ۱-هگزانول در دمای ۳۵ درجه سلسیوس



شکل ۱۰- داده‌های تعادلی سیستم آب، اتیلن گلیکول، ۲-اتیل ۱-هگزانول در دمای ۴۵ درجه سلسیوس

مدل ANFIS عملکرد بهتری نسبت به سایر مدل‌ها از خود نشان داد.

$$RMSE = \left[\frac{\sum_{i=1}^n (Y_{i,exp} - Y_{i,model})^2}{n} \right]^{0.5} \quad (30)$$

$$R^2 = 1 - \left[\frac{\sum_{i=1}^n (Y_{i,exp} - Y_{i,model})^2}{\sum_{i=1}^n (Y_{i,exp})^2} \right] \quad (31)$$

$$MSE = \left[\frac{\sum_{i=1}^n (Y_{i,exp} - Y_{i,model})^2}{n} \right] \quad (32)$$

$$RMSD = 100 * \left[\frac{\sum_{i=1}^n (Y_{i,exp} - Y_{i,model})^2}{n} \right]^{0.5} \quad (33)$$

برای محاسبه خطا از روابط مجذور میانگین مربعات خطا (معادله ۳۰)، ضریب همبستگی (معادله ۳۱)، میانگین مربعات خطا (معادله ۳۲) و انحراف مجذور میانگین مربعات (معادله ۳۳) استفاده شد.

در نهایت، مقادیر خطای مدل‌های ارائه شده که برای بررسی تعادلات مایع-مایع و بخار-مایع استفاده شدند، با استفاده از روابط ۳۰ الی ۳۳ محاسبه گردید. مقادیر خطای حاصل از مدل‌های ارائه شده، در جدول ۹ گزارش شده‌اند.

نتایج، حاکی از آن است که مدل‌های ارائه شده، کارایی لازم را به منظور پیش‌بینی دما در سیستم‌های دوجزئی بخار-مایع و جزء مولی در سیستم‌های سه‌جزئی مایع-مایع، دارد.

جدول ۹- خطای حاصل از مدل‌سازی تعادلات بخار-مایع سیستم‌های دوتایی و مایع-مایع سیستم‌های سه‌تایی

			R ²	MSE	RMSE	RMSD
سیستم‌های دوجزئی مایع	۱- پروپانول - آب	NRTL	۰/۹۸۹	۰/۲۹۰۶	۰/۰۸۴۴	۲۹/۰۶
		UNIQAC	۰/۹۷۵	۰/۲۲۷۰	۰/۴۷۶۴	۴۳/۳۲
		ANFIS	۱	۸/۳۵۵۸* ^{۵-۱۰}	۰/۰۰۹۱	۰/۹۱
	۲- اتیل استات	GMDH	۰/۹۸۲۰	۰/۱۳۲۳	۰/۳۶۳۸	۶/۴۸
		NRTL	۰/۹۹۹	۰/۰۷۶۳	۰/۲۷۶۳	۲۷/۶۳
		UNIQAC	۰/۹۹۴	۰/۲۹۷۳	۰/۵۴۵۳	۵۴/۵۳
سیستم‌های سه‌جزئی مایع	۱- میتانول	ANFIS	۱	۷/۱۸۱۷* ^{۶-۱۰}	۰/۰۰۲۷	۰/۲۷
		GMDH	۰/۹۹۹۰	۰/۰۰۴۳	۰/۰۶۵۵	۶/۵۵
		NRTL	۰/۹۳۰۰	۰/۰۰۵۷	۰/۷۵۴۰	۷/۵۴
	۲- اتیل گلیکول، آب، اتیل گلیکول، آب	UNIQAC	۰/۹۲۱۰	۰/۰۰۶۴	۰/۰۷۹۹	۷/۹۹
		ANFIS	۰/۹۹۹۰	۱/۳۲۵۹* ^{۵-۱۰}	۰/۰۰۳۶	۰/۳۷
		GMDH	۰/۹۹۸۰	۹/۱۵۸۹* ^{۵-۱۰}	۰/۰۰۹۶	۰/۹۶
۱- اتیل - اتیل گلیکول، آب، اتیل گلیکول، آب	NRTL	۰/۹۶۲۰	۰/۰۰۳۷	۰/۰۶۰۸	۶/۰۸	
	UNIQAC	۰/۹۵۸۰	۰/۰۰۴۱	۰/۰۶۳۸	۶/۳۸	
	ANFIS	۱	۱/۰۱۴۵* ^{۶-۱۰}	۰/۰۰۱۰	۰/۱	
۲- اتیل - اتیل گلیکول، آب، اتیل گلیکول، آب	GMDH	۰/۹۹۹۰	۱/۷۸۴۰* ^{۵-۱۰}	۰/۰۰۴۲	۰/۴۲	

(ANFIS) و مدل شبکه عصبی نوع GMDH نیز برای مدل‌سازی سیستم‌های دوتایی و سه‌تایی استفاده شد. این مدل‌ها نسبت به مدل‌های ترمودینامیکی عملکرد بهتری از خود نشان دادند.

با استفاده از سیستم استنتاج فازی - عصبی تطبیقی (ANFIS) و مدل شبکه عصبی نوع GMDH وابستگی تعادلات بخار-مایع و مایع-مایع به مدل‌های ترمودینامیکی

نتیجه‌گیری

مدل‌های ترمودینامیکی مورد مطالعه در این تحقیق به منظور بررسی تعادلات بخار-مایع و مایع-مایع برای سیستم‌های دوجزئی و سه‌جزئی مناسب هستند و در مجموع، مدل NRTL کارایی بهتری نسبت به مدل UNIQAC دارد.

در مطالعه اخیر، از سیستم استنتاج فازی - عصبی تطبیقی

طراحی بهینه می‌توانند نقطه مصالحه طراحی را انتخاب کنند.

مدل‌سازی رفتار سیستم‌های با استفاده ترکیبی از ANFIS و الگوریتم ژنتیک و روش حل معادلات نرمال (SNE) به صورت چندهدفی، منجر به نتایج خوبی در داده‌های آموزش دیده و همچنین در پیش‌بینی رفتار داده‌های آموزش ندیده شده است.

تقدیر و تشکر

از تمامی همکاران و بزرگان که در راستای اعتلای علمی ایران عزیز کوشش می‌کنند، تشکر و قدردانی خود را ابراز می‌دارم.

نیز از بین می‌رود.

الگوریتم ژنتیک به دلیل سادگی و دقت بسیار بالا و کمترین میزان خطا، روشی بسیار مناسب برای محاسبه پارامترهای مدل‌های ضرایب فعالیت است. نحوه انتخاب و همچنین تعداد پارامترها در تخمین آن‌ها مؤثر است و انتخاب صحیح آن‌ها، کمک شایانی به ما برای یافتن پاسخ‌های صحیح می‌کند.

استفاده از بهینه‌سازی چندهدفی در طراحی سیستم‌های ANFIS و GMDH برای سیستم‌ها و فرایندهای پیچیده، موجب به دست آوردن مجموعه نقاط طراحی بهینه غیربرتر (پاره تو) می‌شود و طراحان با در دست داشتن تمامی نقاط

مراجع

- [1] Englezos, P., Kalogerakis, N. and Bishnoi, P.R., "Simultaneous regression of binary VLE and VLLE data", Fluid phase equilibria, Vol. 61, 1990, pp. 1-15.
- [2] Bollas, G.M., Barton, P.I. and Mitsos, A., "Bilevel optimization formulation for parameter estimation in vapor-liquid (-liquid) phase equilibrium problems", Chemical Engineering Science, Vol. 64, 2009, pp. 1768-1783.
- [3] Costa, A., da Silva, F. and Pessoa, F., "Parameter estimation of thermodynamic models for high-pressure systems employing a stochastic method of global optimization", Brazilian Journal of Chemical Engineering, Vol. 17, 2000, pp. 349-354.
- [4] Steyer, F. and Sundmacher, K., "VLE and LLE data set for the system cyclohexane+ cyclohexene+ water+ cyclohexanol+ formic acid+ formic acid cyclohexyl ester", Journal of Chemical & Engineering Data, Vol. 50, 2005, pp. 1277-1282.
- [5] Holland, J.H., "Genetic algorithms", Scientific american, Vol. 267, 1992, pp. 66-72.
- [6] Holland, J.H., "Genetic algorithms and the optimal allocation of trials", SIAM Journal on Computing, Vol. 2, 1973, pp. 88-105.
- [7] Silva, C. and Biscaia, E., "Genetic algorithm development for multi-objective optimization of batch free-radical polymerization reactors", Computers & Chemical Engineering, Vol. 27, 2003, pp. 1329-1344.
- [8] R.B. Kasat and S.K. Gupta, "Multi-objective optimization of an industrial fluidized-bed catalytic cracking unit (FCCU) using genetic algorithm (GA) with the jumping genes operator", Computers & Chemical Engineering, Vol. 27, 2003, pp. 1785-1800.
- [9] D. Beasley, R. Martin, and D. Bull, "An overview of geneticalgorithms: Part 1. Fundamentals", University computing, Vol. 15, 1993, pp. 58-58.
- [10] V. Alvarez and et al., "Parameter estimation for VLE calculation by global minimization: the genetic algorithm", Brazilian Journal of Chemical Engineering, Vol. 25, 2008, pp. 409-418.
- [11] J. Wisniak, E. Fishman, and R. Shaulitch, "Phase equilibria in the systems oxolane+ octane and methyl 1, 1-dimethylethyl ether+ hex-1-ene", Journal of Chemical & Engineering Data, Vol. 43, 1998, pp. 304-306.
- [12] B. Coto, C. Pando, and J.A. Renuncio, "Prediction of phase equilibria for binary and ternary mixtures involving tert-butyl methyl ether and tert-amyl methyl ether", Industrial & engineering chemistry research, Vol. 39, 2000, pp. 767-774
- [13] H. Ghanadzadeh, and et al., "(Liquid+ liquid) equilibria for ternary mixtures of (water+ propionic acid+ organic solvent) at T= 303.2 K", The Journal of Chemical Thermodynamics, Vol. 42, 2010, pp. 267-273.

- [14] H. Renon, and J.M. Prausnitz, "Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures", *AIChE journal*, Vol. 14, 1968, pp. 135-144.
- [15] D.S. Abrams, and J.M. Prausnitz, "Statistical thermodynamics of liquid mixtures: a new expression for the excess Gibbs energy of partly or completely miscible systems", *AIChE Journal*, Vol. 21, 1975, pp. 116-128.
- [16] S. Ketabchi, and et al., "(Estimation of VLE of binary systems (tert-butanol+ 2-ethyl-1-hexanol) and (n-butanol+ 2-ethyl-1-hexanol) using GMDH-type neural network", *The Journal of Chemical Thermodynamics*, Vol. 42, 2010, pp. 1352-1355.
- [17] H. Ghanadzadeh, M. Ganji, and S. Fallahi, "Mathematical model of liquid-liquid equilibrium for a ternary system using the GMDH-type neural network and genetic algorithm", *Applied Mathematical Modelling*, Vol. 36, 2012, pp. 4096-4105.
- [18] P. Murti, and M. Van Winkle, "Vapor-liquid equilibria for binary systems of methanol, ethyl alcohol, 1-propanol, and 2-propanol with ethyl acetate and 1-propanol-water", *Industrial & Engineering Chemistry Chemical and Engineering Data Series*, Vol. 3, 1958, pp. 72-81.
- [19] H. Ghanadzadeh, and T. Taki, "liquid-liquid extraction of ethylene glycol from an aqueous solution", 17th International Symposium on Solubility phenomena and related Equilibrium processes, Geneva, Swiss, July 2016, pp. 24-29.
- [20] A. Ivakhnenko, and G. Ivakhnenko, "The review of problems solvable by algorithms of the group method of data handling (GMDH)", *Pattern Recognition And Image Analysis C.C Of RaspoznavaniyeObrazov I AnalizIzobrazhenii*, Vol. 5, 1995, pp. 527-535.
- [21] N. Nariman-Zadeh, and A. Jamali, Pareto genetic design of GMDH-type neural networks for nonlinear systems. in *Proceedings of the International Workshop on Inductive Modelling*, Czech Technical University, Prague, Czech Republic, Citeseer, 2007.
- [22] L.A. Zadeh, "Fuzzy sets", *Information and control*, Vol. 8, 1965, pp. 338-353.
- [23] J.S. Jang, "ANFIS: adaptive-network-based fuzzy inference system", *IEEE transactions on systems, man, and cybernetics*, Vol. 23, 1993, pp. 665-685.
- [24] A. Jamali, and et al., "Robust Pareto design of ANFIS networks for nonlinear systems with probabilistic uncertainties. in *Innovations in Intelligent Systems and Applications (INISTA)* ", International Symposium on. 2011, IEEE.