

تعیین گروه‌های عاملی مؤثر بر شاخص گرانروی روغن موتورها به وسیله‌ی روش FT-IR و برازش خطی چند متغیره بر پایه‌ی الگوریتم ژنتیک

سمانه احسانی، احمد مانی ورنوسفادرانی*⁺، یدالله یمینی

دانشکده علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

چکیده: روغن موتورها ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی بسیاری دارند که از آن‌ها می‌توان به گرانروی، شاخص گرانروی، نقطه‌ی اشتعال، نقطه‌ی ریزش و غیره اشاره کرد. گرانروی یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های روغن بوده و عامل بسیار مهمی در روغن‌های صنعتی به حساب می‌آید، زیرا تمام ویژگی‌های طراحی شده برای روغن‌های صنعتی به گرانروی آن‌ها ارجاع داده می‌شود. تغییر گرانروی با دما با شاخص گرانروی اندازه‌گیری و بیان می‌شود و برای تشخیص نوع روغن، از این شاخص استفاده می‌شود. هر چه این شاخص گرانروی بزرگ‌تر باشد نشان دهنده این است که گرانروی روغن نسبت به تغییرهای دما تغییر کم‌تری دارد. در نتیجه با توجه به اهمیت این شاخص در روغن‌های روان کننده، و با توجه به این که شاخص گرانروی در روغن موتورها تابعی از ترکیب شیمیایی روغن است، در این پژوهش، با استفاده از یک فناوری طیف سنجی ساده مثل فرسرخ تبدیل فوریه (FT-IR)، آنالیز روغن موتورها صورت گرفت، سپس به وسیله‌ی روش انتخاب متغیر الگوریتم ژنتیک، GA، عدد موج‌های مهم و تأثیرگذار بر شاخص گرانروی روغن موتورها مشخص شد و معلوم شد ترکیب‌های دارنده‌ی گروه‌های عاملی آلکیل هالید، آلکن، نیترو، اسید، آلکان، آلکین و الکل بر شاخص گرانروی روغن موتورها تأثیرگذار هستند. مدل سازی شاخص گرانروی روغن موتورها به کمک روش برازش خطی چند متغیره (MLR) صورت گرفت. از روش‌های پیش پردازش گوناگونی مانند روش متمرکز کردن به میانگین و مقیاس گذاری پیش از روش‌های MLR و GA-MLR نیز استفاده شد. نتیجه‌های به دست آمده از مدل سازی با پارامترهای گوناگونی مانند ضریب برازش (R^2) و ریشه‌ی دوم متوسط خطاها (RMSE) سنجیده شد. مقدارهای R^2 و RMSE به دست آمده با استفاده از GA-MLR، به ترتیب ۰/۹۹۸ و ۰/۹۵۴ به دست آمدند.

واژه‌های کلیدی: روغن موتور؛ شاخص گرانروی؛ طیف سنجی فرسرخ تبدیل فوریه؛ الگوریتم ژنتیک؛ برازش خطی چند متغیره.

KEYWORDS: Engine oils; Viscosity Index; FT-IR; Genetic algorithm (GA); Multivariate Linear Regression (MLR).

مقدمه

نشأت گرفته از نفت شامل روغن‌ها، توسط ساختارهای شیمیایی و ویژگی‌های فیزیکی‌شان تعریف می‌شوند، و به طور گسترده

نفت یا به اصطلاح روغن‌های معدنی مخلوطی از هیدروکربن‌ها می‌باشد که منابع آن اغلب در اعماق زمین وجود دارد. هیدروکربن‌های

*E-mail: a.mani@modares.ac.ir

*عهده دار مکاتبات

بخش نظری

روش برازش خطی چند متغیره (MLR) (۲)

MLR اولین روش از کالیبراسیون چند متغیره است که برای ساختن مدل مورد استفاده قرار می‌گیرد. در روش MLR یک ارتباط خطی بین ویژگی‌های نمونه (ماتریس X) و هدف که می‌تواند فعالیت یا یک ویژگی باشد (ماتریس Y) برقرار می‌شود. شکل عمومی مدل MLR به صورت معادله‌ی (۱) می‌باشد.

$$Y = b_0 + b_1 x_1 + b_2 x_2 + \dots + b_k x_k + E \quad (1)$$

$\{x_1, \dots, x_k\}_{i=1}^k$ ، متغیرهای مستقل هستند. b_1 تا b_k ضریب‌های مدل MLR برای متغیرهای x_1 تا x_k می‌باشند و b_0 ثابت مدل یا عرض از مبدأ مدل می‌باشد. E باقیمانده‌ی ماتریس Y است که در مدل پوشش داده نشده است. برای یک دسته از نمونه‌ها می‌توان معادله را به صورت معادله‌ی (۲) نوشت.

$$Y = BX + E \quad (2)$$

مقدار هر یک از ضریب‌های مدل، میزان اهمیت متغیرهای مستقل را بیان کرده و علامت آن‌ها بیان می‌کند که متغیرهای مستقل به طور مثبت و یا منفی به متغیرهای وابسته، مربوط هستند. روش کم‌ترین مربع‌ها برای تخمین ماتریس ضریب‌های B به صورت معادله‌ی (۳) تعریف می‌شود [۱۴، ۱۵].

$$B = \text{inv}(X^T X) X^T Y \quad (3)$$

اگر هم خطی چند گانه بین متغیرهای توصیف کننده وجود داشته باشد، میزان نبود قطعیت در ضریب‌های برازش افزایش می‌یابد و یک تغییر کوچک در داده‌ها تأثیر زیادی بر ارزیابی مدل خواهد گذاشت. در چنین حالتی از روش‌های انتخاب متغیر مانند الگوریتم ژنتیک، می‌توان استفاده نمود تا متغیرهای مناسب با هم بستگی چند گانه‌ی کم‌تری را نسبت به هم انتخاب نموده و فرایند مدل سازی را با آن‌ها انجام دهد [۱۶].

الگوریتم ژنتیک

الگوریتم ژنتیک یکی از روش‌های انتخاب متغیر توسط الگوریتم‌های هوشمند مصنوعی می‌باشد، که اولین بار توسط هالند [۱۷] در سال ۱۹۷۵ میلادی معرفی شد. الگوریتم ژنتیک روشی برای حل مسائل بهینه سازی می‌باشد که از طبیعت الهام گرفته است. در واقع الگوریتم ژنتیک جزء

به عنوان روان کننده در صنعت مورد استفاده قرار می‌گیرند [۴ - ۱]. روغن کاری اجزای متحرک از زمان اختراع چرخ شناخته شد [۵]. تا پیش از سال ۱۸۵۶ میلادی روغن مورد نیاز برای روانکاری چرخ ارابه‌ها از منابع روغن‌های حیوانی و گیاهی به دست می‌آمد، ولی مورد‌های استفاده از آن‌ها به دلیل آن که مقاومت پایینی داشتند و خیلی زود فاسد می‌شدند کم‌کم محدود شد. با پیشرفت صنعت نفت روغن‌های نفتی تولید شده، جایگزین روغن‌های چرب شدند و سریع‌تری خود را نسبت به انواع دیگر روغن ثابت نمودند. همواره نیاز به روغن در کشورهای صنعتی بسیار بالا بوده است. روغن موتور‌ها به عنوان یکی از انواع مهم روغن‌های نفتی هستند که درون موتور‌ها، گیربکس (جعبه دنده) و سامانه‌های هیدرولیکی پر می‌شوند تا از گرمای بالا و آسیب بین سطوح جامد در تماس باهم جلوگیری کنند [۶] و به تنهایی ۵۶٪ از نیاز کل را در جهان شامل می‌شوند. در نتیجه با توجه به پیشرفت علم روانکاری و گستره وسیعی از روان کننده‌ها، پرداختن به این شاخه از فناوری و مطالعه‌ی ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی آن‌ها از قبیل شاخص گرانروی نقش مهمی را در روغن بازی می‌کند تا از برخورد و سایش بین اجزای ماشین جلوگیری شود [۸، ۷]. اسپکتروسکوپی FT-IR، یک روش سریع برای آنالیز روغن‌های روان کننده به حساب می‌آید، و به هیچ حلال و واکنشگر سمی‌ای نیاز ندارد. در سال‌های اخیر پژوهش‌ها به سمت آن رفته است، که از اسپکتروسکوپی FT-IR به همراه الگوریتم‌های کمومتریکس، کیفیت روغن‌های روان کننده را کنترل کنند [۹]. در همین راستا بررسی‌هایی بر روی روغن موتور‌ها به کمک روش‌های کموتری و FT-IR صورت گرفته است که از بین آن‌ها می‌توان به بررسی ویژگی‌های آنتی اکسیدانی ساختارهای سولفور در روان کننده‌ها و شبیه سازی عمر آن‌ها به کمک بهبود طیف‌های فرسوخ به‌وسیله‌ی روش‌های کمومتریکس [۱۰]، کاربرد کمومتریکس و FT-IR برای تشخیص شاخص گرانروی و عدد بازی روغن موتور‌ها [۱۱]، تشخیص عدد اسیدی کل روغن‌های معدنی استفاده شده در موتورهای هواپیمایی به وسیله‌ی FT-IR و مدل‌های برازشی [۱۲]، پیش‌بینی محتوای HVO^(۱) در مخلوط دیزل HVO با استفاده از روش‌های FT-IR و کمومتریکس [۱۳]، اشاره نمود. ولی تاکنون مطالعاتی در رابطه با بررسی گروه‌های عاملی تأثیرگذار بر روی شاخص گرانروی روغن موتور‌ها به کمک این فناوری‌ها و مدل‌سازی شاخص گرانروی آن‌ها ثبت نشده است. این مسئله باعث شد که در این پژوهش به مطالعه‌ی این اثر پرداخته شود.

(۱) Hydro treated vegetable oil

(۲) Multivariate Linear Regression

نرم افزار آماری

در این پژوهش از نرم افزار متلب (R2011a) ۷.۱۲.۰.۶۳۵ برای اجرای کدهای کالیبراسیون چند متغیره استفاده شد. محاسبه‌ها بر روی رایانه با سامانه عامل ویندوز هفت، Core i5 با ۸ گیگا بایت حافظه صورت گرفت. توابع متلب برای الگوریتم GA-MLR، توسط نویسندگان نوشته و تنظیم شدند و به عنوان آرگمان ورودی به محیط الگوریتم ژنتیک فرستاده شدند.

نتیجه‌ها و بحث

از داده‌های حاصل از تکنیک FT-IR، جهت به دست آوردن متغیرهای مستقل و فرایند مدل سازی استفاده شد. نخست از روش برازش خطی چند متغیره به عنوان یک فرایند مقدماتی، برای مربوط ساختن متغیرهای مستقل یا به عبارتی سیگنال‌های دستگاهی به شاخص گرانیروی روغن موتورها (متغیرهای وابسته) استفاده شد. در این مطالعه از مجموعه داده‌های جمع آوری شده به منظور برازش مدل‌های خطی چندگانه استفاده شد. نتیجه‌های به دست آمده از آموزش^(۳) مدل‌های MLR در این مرحله شامل R^2_{train} و $RMSE_{train}$ میزان توانایی مدل را برای توصیف شاخص گرانیروی بیان می‌نماید. سرانجام به منظور ارزیابی مدل‌های MLR در این مطالعه از روش اعتبارسنجی متقاطع تک حذفی (LOO-CV)^(۴) استفاده شد. نتیجه‌های روش ارزیابی متقاطع تک حذفی شامل R^2_{LOO} و $RMSE_{LOO}$ میزان توانایی مدل‌های MLR را برای پیش بینی شاخص گرانیروی روغن موتورها مورد مطالعه نشان می‌دهد. در روش ارزیابی متقاطع تک حذفی در هر مرحله همه‌ی اطلاعات مربوط به یک نمونه شامل هر سه طیف FT-IR تکرار شده (مربوط به یک نمونه روغن) از داده‌ها کنار گذاشته شده و با استفاده از اطلاعات سایر نمونه‌ها مدل MLR ساخته شد. سرانجام از مدل ساخته شده برای پیش بینی شاخص گرانیروی نمونه‌ی بیرون گذاشته شده استفاده شد. این فرایند به نحوی تکرار شد که هر هفت نمونه روغن یک بار از داده‌ها بیرون گذاشته شده و پیش بینی شدند.

در ابتدا داده‌های خام توسط فناوری برازش خطی چند متغیره مورد ارزیابی قرار گرفتند، در ادامه از روش‌های پیش پردازش مانند روش‌های متمرکز کردن به میانگین^(۵) و مقیاس گذاری^(۶) به منظور تراز کردن عددی داده‌ها استفاده شد.

روش‌های کاتوره‌ای بوده، و از نظریه‌ی داروین برگرفته شده است. یک روش ریاضیاتی بر اساس این نظریه توسعه داده شده که می‌تواند منجر به حل یک مسئله شود. الگوریتم ژنتیک پشت سر هم جمعیتی از راه‌حل‌های منفرد مسئله را تغییر می‌دهد که از این تغییرهای با عنوان تکامل یاد می‌شود. در هر گام از این تکامل، دو عضو از جمعیت (کروموزوم) را به طور تصادفی به عنوان والدین انتخاب کرده و فرزند آن‌ها را به عنوان نسل بعدی در نظر می‌گیرد. به این ترتیب جمعیت به سمت یک راه حل بهینه تکامل می‌یابد [۱۸].

الگوریتم ژنتیک با عمل تلفیق و توسط عملگرهای ادغام^(۱) و جهش صورت می‌گیرد تا سرانجام ژن‌هایی را ایجاد کند که تولید صفت‌هایی می‌کنند که این صفت‌ها با سامانه جدید سازگارتر هستند. یا به عبارتی تولید اعضایی می‌کند که با آن اعضا، مقدار تابع برازشی که مد نظر هست، مناسب‌تر می‌باشد. این اعضا همان کروموزوم‌های مد نظر در مبنای دو بوده که پس از عمل تلفیق توسط عملگرهای ادغام و جهش ایجاد کروموزوم‌های نوینی می‌کنند [۱۹]. الگوریتم ژنتیک یک روش انتخاب متغیر مناسب برای روش برازش خطی چند متغیره به حساب می‌آید. با این حال خطر بیش برازش در الگوریتم ژنتیک با تعداد متغیرهای زیاد افزایش می‌یابد [۲۰].

بخش تجربی

مواد شیمیایی

در این پژوهش هفت نمونه از روغن موتورهای بهران شامل توان ۴۰، تکناز ۲۰W-۵۰، سوپر پیشتاز ۴۰W-۱۰، سوپر پیشتاز ۵۰W-۲۰، رخس ۵۰W-۲۰ و پیشتاز ۵۰W-۲۰، که دارای شاخص‌های گرانیروی به ترتیب ۸۵، ۱۲۰، ۱۲۵، ۱۶۰ می‌باشند، از شرکت نفت بهران خریداری شدند.

دستگاهوری

۵۰ میکرو لیتر از هر کدام از روغن موتورها برداشته شد و به پودر ساییده شده‌ی پتاسیم برمید جهت ساخت قرص افزوده شد. برای آنالیز نمونه‌های روغن موتور از دستگاه FT-IR مدل نیکولت^(۲) در بازه‌ی عدد موجی 4000 تا 400 cm^{-1} استفاده شد. آنالیز روغن موتورها سه مرتبه توسط دستگاه تکرار شد.

(۱) Cross-over

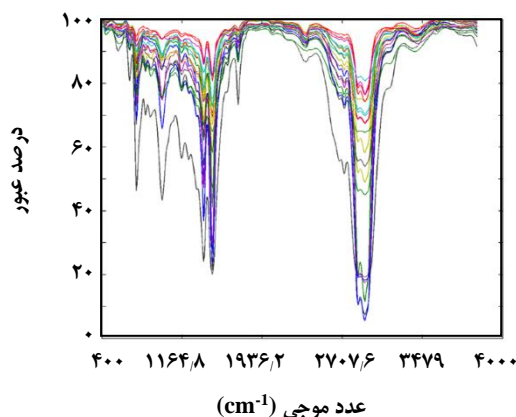
(۲) Nicolet

(۳) Training

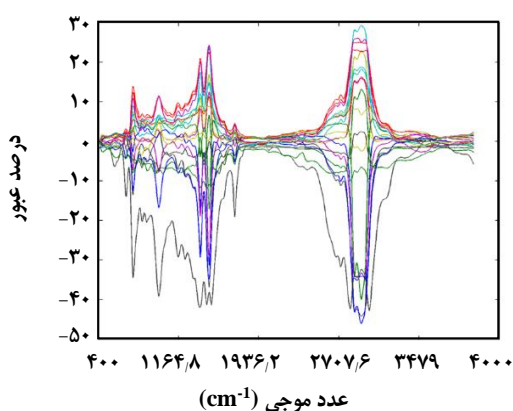
(۴) Leave One Out Cross Validation (LOO-CV)

(۵) Mean Centering

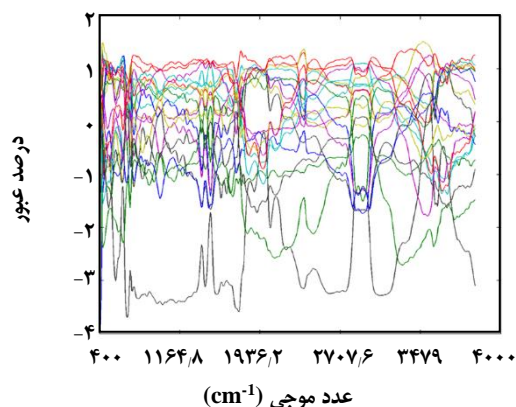
(۶) Auto Scaling



شکل ۱- نمایی از طیف داده‌های خام هفت نمونه از روغن موتورهای شرکت نفت بهران پس از سه مرتبه تکرار با دستگاه FT-IR.



شکل ۲- نمایی از طیف داده‌های به دست آمده از روش متمرکز کردن به میانگین هفت نمونه از روغن موتورهای شرکت نفت بهران پس از سه مرتبه تکرار با دستگاه FT-IR.



شکل ۳- نمایی از طیف داده‌های به دست آمده از روش مقیاس گذاری هفت نمونه از روغن موتورهای شرکت نفت بهران پس از سه مرتبه تکرار با دستگاه FT-IR دو بعد.

شکل‌های ۱، ۲ و ۳ طیف‌های FT-IR روغن موتورها را به ترتیب برای داده‌های خام، داده‌های حاصل از روش متمرکز کردن به میانگین و داده‌های به دست آمده از روش مقیاس گذاری در دو بعد نشان می‌دهند.

نتیجه‌های فناوری برازش خطی چند متغیره شامل ضریب برازش (R^2_{train})، ضریب برازش برای روش اعتبارسنجی متقاطع تک حذفی (R^2_{LOO})، ریشه‌ی دوم مربع خطاها برای سری برسنجی ($RMSE_{train}$) و ریشه‌ی دوم مربع خطاها برای سری اعتبارسنجی متقاطع تک حذفی ($RMSE_{LOO}$) برای داده‌های خام، داده‌های به دست آمده از روش متمرکز کردن به میانگین و داده‌های به دست آمده از روش مقیاس گذاری به طور خلاصه در جدول ۱ درج شده‌اند.

همان‌گونه که از نتیجه‌های جدول هم پیدا است، مدل سازی داده‌ها به روش برازش خطی چند متغیره مناسب نیست. مقدارهای R^2 و $RMSE$ برای سری برسنجی به ترتیب برابر 0.303 و $411/421$ هستند که نشان می‌دهد مدل دارای هم‌خطی چندگانه^(۱) و بدون قدرت پیش بینی و مدل سازی مناسب می‌باشد. همچنین استفاده از فناوری‌های پیش پردازش مثل روش متمرکز کردن به میانگین و روش مقیاس گذاری نیز بهبودی در مدل سازی داده‌ها با روش برازش خطی چند متغیره ایجاد ننموده‌اند. برای رفع این مشکل در این پژوهش از روش انتخاب متغیر الگوریتم ژنتیک استفاده شد تا بهترین متغیرها با قدرت پیش بینی مناسب انتخاب شوند. بدین منظور نخست تابع هدف با عنوان GA-MLR با تعداد متغیر ۹ به عنوان ورودی به محیط ژنتیک الگوریتم داده شد. پارامترهای الگوریتم ژنتیک برای این تابع ورودی بهینه شدند و سرانجام تعداد جمعیت کروموزوم‌ها ۱۰۰، عملگر ادغام متقاطع دو نقطه‌ای، نرخ انتخاب ۲۰ درصد، تابع جهش گاوسی با نرخ جهش ۰/۱ درصد و بیش‌ترین تعداد ۱۰۰ نسل در نظر گرفته شدند. معیار متوقف شدن برنامه GA-MLR، ثابت بودن میزان تابع هدف برای ۵۰ نسل پشت سر هم می‌باشد. تابع هدف برای بهینه سازی در این مطالعه مقدار $(1-R^2)$ برای مدل‌های خطی چندگانه در نظر گرفته شد.

به کمک روش الگوریتم ژنتیک، متغیرها یا به عبارتی عدد موج‌های مؤثر بر شاخص گرانیروی روغن موتورها به دست آمد و مشخص شد که عددهای موجی 1358 ، 956 ، 863 ، 524 cm^{-1} ، 3865 ، 3302 ، 3039 ، 2723 ، 1504 بر شاخص گرانیروی روغن موتورها مؤثر هستند. گروه‌های عاملی مرتبط با این عدد موج‌ها در جدول ۲ نشان داده شده است.

(۱) Multicollinearity

جدول ۱ - نتیجه‌های ارزیابی آماری داده‌های به دست آمده از آنالیز روغن موتورها توسط فناوری برازش چند متغیره برای داده‌های خام، داده‌های به دست آمده از روش متمرکز کردن به میانگین و داده‌های به دست آمده از روش مقیاس گذاری.

داده های مقیاس گذاری شده		داده های متمرکز شده به میانگین		داده های خام	
RMSE _{train}	R ² _{train}	RMSE _{train}	R ² _{train}	RMSE _{train}	R ² _{train} *
۹۳۴/۲۷۴	۰/۲۴۳	۴۰۲/۸	۰/۰۶۴	۴۱۱/۴۲۱	۰/۰۳۰۳
RMSE _{LOO}	R ² _{LOO}	RMSE _{LOO}	R ² _{LOO}	RMSE _{LOO}	R ² _{LOO} **
۸۴۵/۱۶۹	۰/۱۸۴	۱۰۵۰/۸	۰/۰۰۶	۲۰۳۳۳	۰/۰۹۷

جدول ۲- گروه‌های عاملی مؤثر بر شاخص گرانیروی روغن موتورها.

اثر میانگین نسبی	شدت	عدد موج (cm ⁻¹)	نوع ارتعاش	نوع گروه عاملی
۱۲/۴	ضعیف	۵۲۴	کششی	آکیل هالید C-Br
۳/۲	ضعیف	۸۶۳	خمشی	آلکن =C-H
۶/۱	قوی	۹۵۶	خمشی	آلکن =C-H
۸/۸	قوی	۱۳۵۸	کششی	نیتر و R-N=O
۱۰/۳	قوی	۱۵۰۴	کششی	نیتر و R-N=O
۳۰/۲	قوی و پهن	۲۷۲۳	کششی	اسیدی O-H
۵/۸	قوی	۳۰۳۹	کششی	آلکان C-H
۴/۵	قوی و تیز	۳۳۰۲	کششی	آلکین C≡C-H
۱۸/۷	قوی و پهن	۳۸۶۵	کششی	الکل O-H

الگوریتم ژنتیک به ترتیب برای سری آموزش ۰/۹۹۸ و ۰/۹۵۴ به دست آمد، که نشان از توان بالا و قدرت مدل بود. برای به دست آوردن نتیجه‌های بهتر از روش‌های پیش پردازش مانند متمرکز کردن به میانگین و مقیاس گذاری قبل از اجرای روش الگوریتم ژنتیک نیز استفاده شد. هر چند استفاده از روش متمرکز کردن به میانگین نتیجه‌های آماری رضایت بخشی را در برداشت، با این حال امکان دیدن تغییرهای کوچک با استفاده از این روش پیش پردازش وجود نداشت، در نتیجه از روش پیش پردازش مقیاس گذاری استفاده شد. با استفاده از روش مقیاس گذاری پیش از اجرای مدل الگوریتم ژنتیک نه تنها نتیجه‌های آماری مناسبی به دست آمد، بلکه تغییرهای کوچک نیز قابل مشاهده بود. مقدار تابع برازش یا به عبارتی (1-R²) با استفاده از روش مقیاس گذاری به همراه روش‌های الگوریتم ژنتیک ۰/۱۷۰۹۶۷ (R²=۰/۹۸۳) و مقدار RMSE برابر با ۳/۱۷۸ به دست آمد. کلیه نتیجه‌های به دست آمده از این سه روش در جدول ۳ درج شده‌اند. نتیجه‌ها نشان داد که

با استفاده از معادله‌ی (۴) می توان میزان اثر هر متغیر را در مدل‌های خطی چندگانه به دست آورد:

$$\text{اثر میانگین نسبی} = \frac{\sum_{i=1}^n D_{ij} \times a_j}{\sum_{j=1}^l \sum_{i=1}^n D_{ij} \times a_j} \quad (4)$$

در این رابطه D، RME و a، به ترتیب نشان دهنده ی مقدار عددی متغیرهای مستقل (میزان عبور در یک عدد موجی خاص)، اثر میانگین نسبی و ضریب متغیر مورد نظر در مدل MLR می‌باشند. با استفاده از رابطه ی فوق میزان RME برای عدد های موجی انتخاب شده، محاسبه شد و در جدول ۲ نشان داده شده است. همان گونه که در این جدول دیده می‌شود گروه های عاملی، اسیدی، الکلی و آکیل هالید بیشترین تأثیر نسبی را بر روی شاخص گرانیروی روغن موتور های مورد مطالعه از خود نشان می‌دهند.

نتیجه‌های به دست آمده از روش الگوریتم ژنتیک بسیار رضایت بخش بودند. مقدارهای R² و RMSE به دست آمده از روش

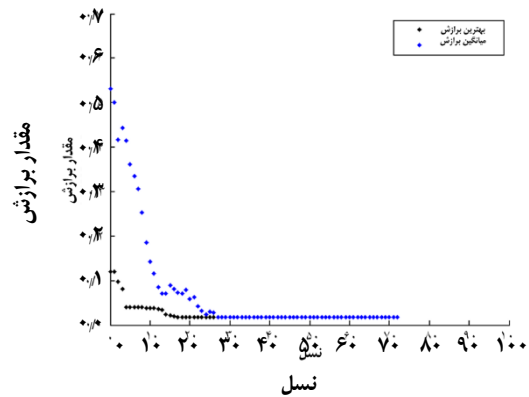
جدول ۳- نتیجه‌های آماری به دست آمده به وسیله‌ی الگوریتم GA-MLR برای داده‌های خام، داده‌های به دست آمده از روش متمرکز کردن به میانگین و داده‌های به دست آمده از روش مقیاس گذاری.

داده‌های خام		داده‌های متمرکز شده به میانگین		داده‌های مقیاس گذاری شده	
R^2_{train}	RMSE _{train}	R^2_{train}	RMSE _{train}	R^2_{train}	RMSE _{train}
۰/۹۹۸	۰/۹۵۴	۰/۹۹۳	۱/۹۸۳	۰/۹۹۴	۱/۷۹۵
R^2_{LOO}	RMSE _{LOO}	R^2_{LOO}	RMSE _{LOO}	R^2_{LOO}	RMSE _{LOO}
۰/۹۴۹	۵/۵۶۹	۰/۹۴۶	۵/۷۰۴	۰/۹۸۳	۳/۱۷۸

با توجه به جدول مقادیرهای اعتبارسنجی متقاطع تک حذفی برای R^2_{LOO} و RMSE_{LOO} برای داده‌های خام به ترتیب برابر ۰/۹۴۹ و ۵/۵۶۹ به دست آمدند که نشان از قدرت پیش‌بینی و توان بالای مدل GA-MLR است. با استفاده از روش پیش‌پردازی مانند روش مقیاس‌گذاری، مقادیرهای R^2 و RMSE برای فرایند ارزیابی تک حذفی به ترتیب ۰/۹۸۳ و ۳/۱۷۸ به دست آمد، که قدرت پیش‌بینی بهتری برای روش مدل‌سازی الگوریتم ژنتیک فراهم آورد.

نتیجه‌گیری

روغن موتور یکی از انواع روغن‌های روان‌کننده و یکی از مهم‌ترین فراورده‌های صنعت پتروشیمی به حساب می‌آید. انواع روغن پایه‌ها و افزودنی‌ها، اجزاء اصلی روغن موتورها را تشکیل می‌دهند. روغن موتورها شاخص گرانروی گوناگونی دارند که مطابق با استانداردهای جهانی محاسبه می‌شوند. شاخص گرانروی، یک ویژگی مهم برای روغن موتورها به حساب می‌آید. شاخص گرانروی یک ارزش عددی برای نشان دادن تغییرهای گرانروی یک روغن با تغییر درجه‌ی حرارت است. هر چه عدد شاخص گرانروی بزرگ‌تر باشد، بیانگر این است که گرانروی روغن نسبت به تغییرهای درجه‌ی حرارت، تغییر کم‌تری دارد. در این پژوهش هفت نمونه از روغن موتورهای شرکت نفت بهران برای مطالعه انتخاب شدند. جهت آنالیز روغن موتورها از روش اسپکتروسکوپی FT-IR استفاده شد. از روش برازش خطی چند متغیره بر پایه‌ی الگوریتم ژنتیک برای مدل‌سازی شاخص گرانروی روغن موتورها استفاده شد. به وسیله‌ی روش الگوریتم ژنتیک عددهای موجی مؤثر بر شاخص گرانروی روغن موتورها به دست آمد، و مشخص شد گروه‌های عاملی مانند آلکیل هالید، آلکن، نیترو، اسید، آلکان، آلکین و الکل، بر شاخص گرانروی



شکل ۴- مقدار تابع برازش در طی نسل‌های گوناگون توسط روش انتخاب متغیر الگوریتم ژنتیک برای داده‌های به دست آمده از روش مقیاس‌گذاری.

استفاده از روش برازش خطی چند متغیره بر پایه‌ی الگوریتم ژنتیک به همراه روش پیش‌پردازی مقیاس‌گذاری، یک روش مناسب برای انتخاب بهترین متغیرهای مستقل می‌باشد. شکل ۴ مقدار تابع برازش را در نسل‌های گوناگون، با استفاده از این روش نشان می‌دهد. همان‌گونه که در شکل ۴ دیده می‌شود، مقادیرهای بهترین برازش در هر نسل (که با نقاط مشکی رنگ نشان داده شده‌اند) پس از حدود ۲۰ نسل به بهترین مقدار خود رسیده است. همچنین میانگین مقادیرهای برازش که با استفاده از نقطه‌های آبی رنگ نشان داده شده است بعد از حدود ۲۵ نسل به مقدار بهترین مقدار برازش، همگرا شده است. همچنین، شرایط توقف الگوریتم چنان تنظیم شده است که پس از گذشت حدود ۷۰ نسل و موفق نبودن الگوریتم در یافتن کروموزوم‌های بهتر، کار بهینه‌سازی به پایان رسیده و بهترین کروموزوم به عنوان پاسخ پایانی گزارش می‌شود. به منظور ارزیابی تکنیک GA-MLR نیز از روش اعتبارسنجی متقاطع تک حذفی استفاده شد. مقادیرهای ارزیابی آماری این روش‌ها نیز در جدول ۳ درج شده‌اند.

به عنوان یک روش مکمل در صنعت می‌تواند جایگزین مناسبی برای سایر روش‌های اندازه‌گیری، به دلیل سرعت، دقت و هزینه مناسب خود باشند.

روغن موتورها مؤثر هستند. در نتیجه نتیجه‌های به دست آمده از آزمون‌های انجام شده در این پژوهش، نشان داد که به کارگیری روش‌های کالیبراسیون چند متغیره، به طور دلخواهی قادر است شاخص گرانروی را مدل کند. بر اساس نتیجه‌های به دست آمده در این پژوهش به طور کلی می‌توان گفت که استفاده از کمومتریکس

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۴/۱۸ ؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۷/۲

مراجع

- [1] Souza L.M., Mitsutake H., Gontijio L., Neto W., [Quantification of Residual Automotive Lubricant Oil as an Adulterant in Brazilian S-10 Diesel Using MIR Spectroscopy and PLS](#), *Fuel*, **130**: 256-262(2014).
- [2] Kreisberger G., Himmelsbach M., Buchberger W., Klampfl C.W., [Identification and Semi-Quantitative Determination of Anti-Oxidants in Lubricants Employing Thin-Layer Chromatography Spray Mass Spectrometry](#), *Journal of Chromatography A*, **1383**: 169-174 (2015).
- [۳] گودرزینیا، ایرج، سعیدی، عبدالرضا. بازیافت روغن موتور کارکرده به روش استخراج فوق بحرانی با کربن دی اکسید. *نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران*، (۳) ۳۱: ۳۹ تا ۴۴ (۱۳۹۱).
- [۴] سعیدیان، میلاد، غضنفری، محمد حسین، مسیحی، محسن، خراط، ریاض. بررسی آزمایشگاهی اثر ویژگی‌های فیزیکی شکاف بر شکل‌گیری و توسعه انگشتی‌ها در مخازن نفت سنگین شکاف دار در شرایط تزریق امتزاجی. *نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران*، (۴) ۳۰: ۵۵ تا ۶۵ (۱۳۹۰).
- [5] Panchal T.M., Patel A., Chauhan D., Merlin T., Jigar V., [A Methodological Review on Bio-Lubricants from Vegetable Oil Based Resources](#), *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **70**: 65-70 (2017).
- [6] Amer M.H., Gaberah A.S., [Used Lubricating Oils Re-Fining by Solvent Extraction](#). *American Journal of Environmental Engineering and Science*, **1**: 44-50 (2014).
- [7] Ting C., Chen C.C., [Viscosity and Working Efficiency Analysis of Soybean Oil Based Bio-Lubricants](#), *Measurement*, **44**: 1337-1341 (2011).
- [۸] صمدی زاده، مرجانه، علیزاده، شیرین، کشاورز، شهریار. سنتز روی دی‌آلکیل دی‌تیو فسفات‌ها به عنوان ماده افزودنی به روغن موتور و بررسی ویژگی‌های آنتی‌اکسیدانی و ضدسایشی آن‌ها، *نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران*، (۴) ۳۶: ۷۱ تا ۷۶ (۱۳۹۶).
- [9] Sejkorořva M., [Application of FTIR Spectrometry Using Multivariate Analysis for prediction Fuel in Engine Oil](#), *Acta Universitatis Agriculturae Et Silviculturae Mendelianae Brunensis*, **65(3)**: 933-38 (2017).

- [10] Amat S., Braham Z., Dréau Y.L., Kister J., Dupuy N., [Simulated Aging of Lubricant Oils by Chemometric Treatment of Infrared Spectra: Potential Antioxidant Properties of Sulfur Structures](#), *Talanta*, **107**: 219-224 (2013).
- [11] Al-Ghouti M.A., Al Degs Y.S., Amer M., [Application of Chemometrics and FT-IR for Determination of Viscosity Index and Base Number of Motor Oils](#), *Talanta*, **81**: 1096-1101 (2010).
- [12] De Rivas B.L., Vivancos J.L., Mere J.O., Capuz-Rizo S.F., 2017. [Determination of the Total Acid Number \(TAN\) of Used Mineral Oils in Aviation Engines by FTIR Using Regression Models](#), *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **160**: 32-39 (2017).
- [13] Vrtiska D., Simack P., [Prediction of HVO Content in HVO/Diesel Blends Using FTIR and Chemometric Methods](#), *Fuel*, **174**: 225-234 (2016).
- [14] Yousefinejad S., Hemmateenejad B., [Chemometrics Tools in QSAR/QSPR Studies: A Historical Perspective](#), *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **149**: 177-204 (2015).
- [15] Rebechi S.R., Velez M.A., Perotti M.C., [Adulteration of Argentinean Milk Fats with Animal Fats: Detection by Fatty Acids Analysis and Multivariate Regression Techniques](#), *Food Chemistry*, **192**: 1025-1032 (2016).
- [16] Wang X., Sun Y., Wu L., Liu R., Liu L., Liu X., Xu J., [Quantitative Structure-Affinity Relationship Study of Azo Dyes for Cellulose Fibers by Multiple Linear Regression and Artificial Neural Network](#), *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, **134**: 1-9 (2014).
- [17] Holland J.H., "Adaptation in Neural and Artificial Systems: An Introductory Analysis with Applications to Biology, Control, and Artificial Intelligence", University of Michigan Press, (1975).
- [۱۸] کیا، م، [الگوریتم ژنتیک در MAT LAB](#)، انتشارات دانشگاهی کیان، ص، ۱۲۹ (۱۳۹۴).
- [19] McCall J., [Genetic Algorithms for Modelling and Optimization](#), *Computational and Applied Mathematics*, **184**: 205-222 (2005).
- [20] Li L., Ustin L., Riano D., [Retrieval of Fresh Leaf Fuel Moisture Content Using Genetic Algorithm Partial Least Squares \(GA-PLS\) Modeling](#), *IEEE Geoscience and Remote Sensing Letters*, **4**: 216-220 (2007).