

استفاده از شبکه عصبی ANFIS و MLP

در پیش‌بینی استخراج ترکیب‌های آروماتیکی از ترکیب‌های آلیفاتیکی توسط مایع‌های یونی

محمد جواد ابراهیم‌خانی، حسین قنادزاده گیلانی⁺*

گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

چکیده: یکی از فرایندهای اصلی در صنایع پالایشی صنعت نفت، استخراج هیدروکربن‌های آروماتیکی از هیدروکربن‌های آلیفاتیکی است. بر این اساس پیش‌بینی دقیق رفتار فازی این سامانه‌ها می‌تواند باعث بهبود استخراج مایع - مایع شود. در این مطالعه، رفتار ترمودینامیکی فازی سامانه سه‌جزئی هیدروکربن‌های آلیفاتیکی و آروماتیکی به همراه مایع‌های یونی توسط سامانه استنتاجی فازی - عصبی تطبیقی (ANFIS) و شبکه عصبی پرسپترون چند لایه (MLP) پیش‌بینی شد. ورودی‌های مدل در مدل‌سازی سامانه استخراج مایع - مایع، نسبت مولی ترکیب‌های آلیفاتیکی، آروماتیکی و مایع‌های یونی در خوراک و هم‌چنین جرم مولکولی آن‌ها و دمای سامانه استخراج در نظر گرفته شد و همچنین خروجی مدل نیز نسبت مولی ترکیب‌های آلیفاتیکی و آروماتیکی در فاز غنی از آلکان و نسبت مولی ترکیب‌های آروماتیکی و مایع‌های یونی در فاز غنی از مایع‌های یونی در نظر گرفته شد. پارامترهای طراحی این شبکه‌های عصبی از جمله تعداد نرون و شعاع خوشه‌چینی شبکه‌های ANFIS و MLP به منظور بهتر شدن دقت پیش‌بینی آن‌ها، با روش بهینه‌سازی تکاملی الگوریتم ژنتیک (GA) بهینه شدند. مقایسه دقت پیش‌بینی شبکه‌های ANFIS و MLP با داده‌های آزمایش بر اساس پارامترهای آماری dR^2 و RMSD برای مدل ANFIS به ترتیب ۰/۹۹۹۶، ۰/۱۹۰ و ۰/۱۲۹ و برای مدل شبکه عصبی MLP به ترتیب ۰/۹۹۹۶، ۰/۲۰۴ و ۰/۱۲۷ به دست آمد. همچنین مقایسه‌ای بین دقت پیش‌بینی شبکه‌های ANFIS و MLP با مدل ترمودینامیکی NRTL برای دو سامانه گوناگون استخراج مایع - مایع انجام شد، میانگین RMSD آن‌ها برای دو سامانه استخراج به ترتیب ۰/۰۰۹۳، ۰/۰۱۱۰ و ۰/۰۱۱۳ به دست آمد. نتیجه‌های پارامترهای آماری نشان دهنده این است که این شبکه‌ها در پیش‌بینی رفتار ترمودینامیکی تعادل مایع - مایع با دقت به نسبت مناسبی دارند و روش مؤثری هستند.

واژه‌های کلیدی: استخراج مایع - مایع، سامانه استنتاجی فازی - عصبی تطبیقی (ANFIS)، شبکه عصبی پرسپترون چند لایه (MLP)، الگوریتم ژنتیک (GA) و مایع‌های یونی.

KEYWORDS: Liquid-liquid extraction, Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System (ANFIS), Multi-Layer Perceptron (MLP) neural network, Genetic Algorithm (GA), Ionic liquids.

مقدمه

بررسی فرایندهای جداسازی اجزای مخلوطهای چندجزئی همواره از مهم‌ترین موضوع‌های مورد توجه پژوهشگران در صنایع شیمیایی و مهندسی شیمی است. به ندرت می‌توان یک فرایند شیمیایی را یافت که نیاز به خالص‌سازی اولیه مواد خام و یا جداسازی پایانی فرآورده‌ها از فرآورده‌های جانبی واکنش نداشته باشد [۱]. اساس روش‌های جداسازی به ویژگی‌های مواد استوار است، به این منظور می‌توان به روش‌هایی مانند تقطیر جزء به جزء، تبخیر، تبلور، جذب سطحی و استخراج با حلال اشاره کرد. فرایندهای جداسازی مانند تقطیر و تبخیر در دسته روش‌های مستقیم جداسازی هستند و اگر چه فرآورده‌های به‌دست آمده از این فرایندها از درجه خلوص بالایی برخوردارند، ولی در بسیاری از موردها اجزای مخلوط، ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی همانندی دارند و تشکیل مخلوط‌های هم‌جوش (آزوتروپ) می‌دهند؛ در این صورت استخراج و جداسازی آن‌ها با این روش‌های جداسازی مستقیم امکان‌پذیر و یا به صرفه نیست. بنابراین استفاده از روش استخراج مایع - مایع برای جداسازی چنین سامانه‌هایی، در پروژه‌های صنعتی و در مهندسی شیمی بسیار دارای اهمیت است [۲].

جداسازی هیدروکربن‌های آروماتیک از هیدروکربن‌های آلیفاتیک، یکی از مشکل‌های اصلی در صنایع پالایشی صنعت نفت است. به دلیل این که این ترکیب‌ها دارای نقطه‌های جوش نزدیک به هم هستند

و ترکیب آن‌ها تشکیل مخلوط‌های آزوتروپ می‌دهد [۳]. استخراج مایع - مایع دارای هزینه کم‌تر و از نقطه نظر زیست‌محیطی روشی مناسب است [۴-۶]. در گذشته از حلال‌های آلی برای استخراج مایع - مایع در این فرایندها استفاده می‌شد. ولی این حلال‌ها دارای چندین مشکل مانند فراریت، آتش‌زا بودن و سمی بودن هستند. مایع‌های یونی، به دلیل امتزاج‌پذیری با ترکیب‌های آلی و غیرآلی قطبی، می‌توانند در این فرایندها به کار گرفته شوند. همچنین، مایع‌های یونی از نظر ملاحظات زیست‌محیطی به دلیل غیرفرار بودن، غیرقابل آتش‌زا بودن و پایداری شیمیایی و گرمایی بالا جایگزین مناسبی برای آن حلال‌های سنتی هستند [۷]. در سال‌های اخیر، کاربرد استفاده از مایع‌های یونی، به عنوان حلال در استخراج مایع - مایع هیدروکربن‌های آروماتیک از هیدروکربن‌های آلیفاتیک به صورت تدریجی افزایش یافته و مقاله‌های زیادی دارای داده‌های تجربی در این ارتباط منتشر شده است [۸-۱۵].

برای پیش‌بینی رفتار سامانه تعادلی مایع - مایع می‌توان از مدل‌های تعادلی ترمودینامیکی شامل مدل‌های مارگولس، ویلسون، NRTL و UNIQUAC استفاده کرد. همچنین باید دانست که این مدل‌های ترمودینامیکی بدون تنظیم پارامترهای برهم‌کنش مدل‌ها، دقیق و قابل اعتماد نیستند مگر این که پارامترهای برهم‌کنش^۱ مدل‌ها با استفاده از داده‌های تجربی هر سامانه تعادلی مایع - مایع با روش‌های محاسباتی به‌دست آیند [۱۹-۱۶].

در سال‌های اخیر، همچنین از روش‌های نوین مدل‌های هوشمند برای پیش‌بینی رفتار فازی تعادل مایع - مایع استفاده شده است. یکی از این روش‌ها، شبکه عصبی هوشمند^۲ (ANN) است. شبکه عصبی برای چندین مدل پیچیده و غیرخطی از جمله تعادل بخار - مایع و تعادل مایع - مایع با موفقیت به کار گرفته شده است [۲۵-۲۰]. شبکه عصبی، یک شبکه ساختاری به صورت لایه و نرون^۳ (گره) است که می‌تواند تابع مربوط به یک مدل را با داشتن داده‌های تجربی کافی با دقت مناسبی تخمین بزند [۲۷، ۲۶]. یکی از مشکل‌های شبکه عصبی این است که پارامترهای مشخصه آن در یک شبکه ساختاری پنهان است، شبکه عصبی GMDH^۴ به صورت یک مدل ریاضی قابل دیدن با ساختاری ساده‌تر و با دقت بالاتر نسبت به مدل‌های فیزیکی توسعه داده شده است [۲۸]. GMDH، شبکه عصبی از نوع شبکه پیش‌رو^۵ بر اساس تابع انتقال چندجمله‌ای است که ضریب‌های آن با روش رگرسیون محاسبه می‌شوند [۲۹]. به تازگی مقاله‌هایی برای تخمین رفتار فازی LLE و VLE با استفاده از شبکه عصبی GMDH به چاپ رسیده است [۳۳-۳۰]. حکیم و همکاران در سال ۲۰۱۵ میلادی به پیش‌بینی رفتار فازی LLE برای سامانه سه‌جزئی با ترکیب‌های آلیفاتیک، آروماتیک و مایع‌های یونی با استفاده از شبکه‌های عصبی MLP و GMDH پرداخته‌اند. آن‌ها نشان داده‌اند که شبکه عصبی MLP از نوع پس‌انتشار^۶ نسبت به مدل GMDH دارای پیش‌بینی دقیق‌تری است [۳۴]. همچنین شاه‌حمیدی و همکاران در سال ۲۰۱۷ میلادی به پیش‌بینی رفتار فازی LLE برای سامانه سه‌جزئی با ترکیب‌های آلکان، بنزن و مایع‌های یونی با سه روش هوشمند شبکه عصبی MLP، SVM^۷ و LSSVM^۸ پرداخته‌اند، آن‌ها در این کار پارامترهای قابل تنظیم SVM و LSSVM را با سه روش بهینه‌سازی تکاملی GA، PSO^۹ و SCE^{۱۰} به‌دست آورده‌اند [۳۵].

(۱) Interaction

(۳) Neuron

(۵) Feed-forward

(۷) Support vector machine

(۹) Particle swarm optimization

(۲) Artificial Neural Network

(۴) Group method of data handling

(۶) Back propagation

(۸) Least square support vector machine

(۱۰) Shuffled complex evolution

تقسیم کرد. سامانه استنتاج فازی مدل TSK یا از نوع سوگنو در سال ۱۹۸۵ میلادی مطرح شد [۳۹].

سامانه استنتاجی فازی - عصبی تطبیقی (ANFIS)، یک نوع شبکه عصبی هوشمند بر مبنای سامانه استنتاجی فازی TSK است. این شبکه تطبیقی توسط جنگ^{۱۰} در سال ۱۹۹۳ میلادی پیشنهاد شد [۴۰] و با مجموعه داده‌های ورودی و خروجی تولید سامانه استنتاجی فازی می‌کند. پارامترهای تابع عضویت FIS یا از طریق الگوریتم پس‌انتشار به تنهایی و یا از ترکیب الگوریتم پس‌انتشار و روش حداقل مربعات^{۱۱} تنظیم می‌شود. ساختار ANFIS یک سامانه با دو ورودی (x_1 و x_2)، دو جدول قانون‌های FIS بر مبنای TSK و یک خروجی (y) بر اساس رابط‌های زیر قابل بیان است [۴۱]:

قانون ۱: اگر (x_1 باشد A_1) و (x_2 باشد B_1) آنگاه

$$f_1 = p_1x_1 + q_1x_2 + r_1$$

قانون ۲: اگر (x_1 باشد A_2) و (x_2 باشد B_2) آنگاه

$$f_2 = p_2x_1 + q_2x_2 + r_2$$

که A و B مجموعه‌های فازی، p ، q و r پارامترهای نتیجه مدل به‌دست آمده در فرایند آموزش است. ساختار طراحی ANFIS در شکل ۱ نشان داده شده است. که در آن ۵ لایه با رابطه زیر وجود دارد:

لایه ۱: اولین لایه، لایه ورودی شامل گره‌های تطبیقی است و هر گره i به‌صورت یک گره مربعی با تابع گره زیر انجام می‌شود:

$$O_{1,i} = \mu_{A_i}(x_1), \text{ for } i = 1, 2 \quad (2)$$

$$O_{1,i} = \mu_{B_{i-2}}(x_2), \text{ for } i = 1, 2 \quad (3)$$

که در آن μ_{A_i} و $\mu_{B_{i-2}}$ به ترتیب تابع‌های عضویت زبانی A و B است. لایه ۲: هر گره در این لایه، گره مربعی ثابت که به‌صورت دایره و با پرچسب Π نشان داده شده که برابر حاصل ضرب سیگنال‌های ورودی و تولید سیگنال خروجی با رابطه زیر است:

$$O_{2,i} = w_i = \mu_{A_i}(x_1) \times \mu_{B_i}(x_2), \text{ for } i = 1, 2 \quad (4)$$

در این کار، پیش‌بینی رفتار تعادلی مایع - مایع سامانه سه‌جزئی هیدروکربن‌های آلیفاتیک و آروماتیک به همراه مایع‌های با استفاده از سامانه استنتاجی فازی - عصبی تطبیقی^۱ (ANFIS) و شبکه عصبی پرسپترون چند لایه (MLP) به‌کارگیری خواهد شد. داده‌های آزمایشگاهی برای ایجاد این شبکه‌ها، با استفاده از ۲۰۵ خط رابط^۲ در ۱۹ شرایط گوناگون از مقاله‌ها اخذ شده است [۳۶، ۱۳-۱۰]. همچنین، این شبکه‌ها دارای برخی پارامترهای قابل تنظیم هستند. برای بهبود قدرت پیش‌بینی و دقت مدل‌ها، با استفاده از الگوریتم‌های ترکیبی، بهینه‌سازی تکاملی الگوریتم ژنتیک (GA) با این مدل‌ها، استفاده شده است. همچنین برای مقایسه دقت این دو مدل هوشمند از تابع‌های آماری ضریب تعیین^۳ (R^2)، ریشه میانگین مربع انحراف (RSMD) و میانگین مطلق انحراف (MAD) استفاده شده است.

سامانه استنتاجی فازی - عصبی تطبیقی (ANFIS)

نظریه منطق فازی که به‌صورت بسطی از منطق بولین (دیدگاه صفر و یک) است، در سال ۱۹۷۳ توسط لطفی‌زاده مطرح شد [۳۷]. سامانه استنتاج فازی یا به‌صورت مخفف FIS، فرایندی است که در آن نگاشتی از داده‌های ورودی با خروجی مدل با استفاده از نظریه مجموعه فازی صورت می‌پذیرد. نظریه مجموعه فازی، روشی برای توصیف عدم قطعیت و هر چیزی بر اساس درجه بین ۰ و ۱ است. بنابراین یک موضوع می‌تواند دارای چند بسط از عضو یک مجموعه باشد. به معمول مجموعه فازی و تابع عضویت به‌صورت رابطه زیر بیان می‌شود.

$$\mu_A(X) = z \quad (1)$$

که در آن عضویت X در مجموعه فازی A برابر z است [۳۷]. تابع عضویت یک مجموعه فازی، منحنی است که داده‌های ورودی را به درجه متناسب آن بین ۰ و ۱ مرتبط می‌کند. تابع‌های عضویت بسیاری بر اساس تابع‌های پایه‌ای گوناگون شامل خطی تکه‌ای^۴، سیگموئید^۵، توزیع گوسی و چندجمله‌ای مربعی و مکعبی و غیره وجود دارد.

روش‌های مدل‌سازی با منطق فازی را می‌توان به سه دسته زبانی^۶ (نوع ممدانی^۷) [۳۸]، معادله رابطه‌ای^۸ و تاکاگی - سوگنو - کانگ^۹ (TSK)

(۱) Adaptive neuro-fuzzy inference system

(۳) Coefficient of Determination

(۵) Sigmoid

(۷) Mamdani

(۹) Takagi-Sugeno-Kang

(۱۱) Least squares

(۲) Tie line

(۴) Piecewise linear

(۶) Linguistic

(۸) Relational equation

(۱۰) Jang

ساختار شبکه عصبی از یک لایه ورودی، یک یا چند لایه پنهان و یک لایه خروجی تشکیل شده است. هر لایه شامل تعدادی نرون (گره) می‌باشد که به صورت کامل با نرون‌های لایه‌های مجاور در ارتباط وزنی هستند و وظیفه پردازش اطلاعات را دارند. تعداد نرون‌های لایه ورودی با تعداد عامل‌های اولیه و تعداد نرون‌های لایه خروجی با تعداد پارامترهای نهایی مورد نظر برابر است و تعداد نرون‌های لایه‌های پنهان بر اساس طراحی ساختار شبکه است. این نرون‌ها به یکدیگر متصل شده و بسته به این که این اتصالات چگونه باشد، شبکه‌ها و مدل‌های گوناگونی به وجود می‌آیند. یک مدل نرون شامل مجموع سیگنال ورودی با ضرایب‌های وزنی به همراه بایاس^۱ تحت یک تابع انتقال است. اگر $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ ورودی‌ها و $w_1, w_2, w_3, \dots, w_n$ ضرایب وزنی، b بایاس و y خروجی نرون باشد. مدل ریاضی آن با رابطه زیر قابل بیان است:

$$y = f \left(\sum_{i=1}^n w_i x_i + b \right) \quad (۸)$$

که در آن $f(x)$ تابع انتقال است [۴۲]. تابع انتقال را می‌توان به صورت خطی یا به صورت غیرخطی در نظر گرفت. ولی به طور عموم از تابع انتقال غیرخطی به خاطر یادگیری و انطباق بهتر روی مدل‌های غیرخطی استفاده می‌شود. در میان ساختارهای گوناگون شبکه‌عصبی، الگوریتم یادگیری پس‌انتشار یکی از ساده‌ترین روش‌های یادگیری و دارای الگوریتم کار بردی تر و با قابلیت پیش‌بینی و طبقه‌بندی می‌باشد. در طول فرایند آموزش شبکه، وزن‌ها و بایاس‌ها برای کمینه کردن تفاضل بین مقادیرهای خروجی شبکه عصبی داده‌های تجربی تنظیم می‌شوند. تابع خطا بر اساس رابطه زیر تعریف می‌شود.

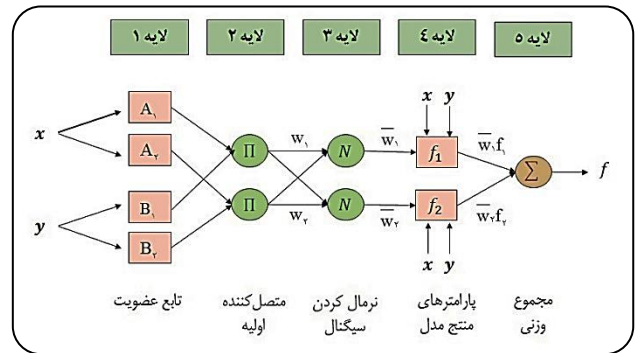
$$E = \sum_p E(\omega) = \sum_p \sum_i (t_i^p - o_i^{p,1})^2 \quad (۹)$$

که در آن p ، تعداد مجموعه داده مورد استفاده در آموزش و t_i^p خروجی تجربی i ام در مجموعه داده p ام و $o_i^{p,1}$ خروجی نرون i ام از لایه ۱ با مجموعه داده p ام است. در الگوریتم پس‌انتشار، وزن‌ها و بایاس‌ها با رابطه زیر تغییر می‌یابند.

$$w_{i,j}^{l-1,l}(k+1) = w_{i,j}^{l-1,l}(k) - \lambda \frac{\partial E}{\partial w_{i,j}^{l-1,l}} \quad (۱۰)$$

$$b_j^l(k+1) = b_j^l(k) - \lambda \frac{\partial E}{\partial b_j^l} \quad (۱۱)$$

که در آن λ یادگیری، k عدد تکرار، w ضریب وزنی و b بایاس است [۴۳].



شکل ۱- ساختار مدل ANFIS با دو ورودی، یک خروجی و دو جدول قوانین [۴۱].

لایه ۳: هر گره در این لایه به صورت گره ثابت، به صورت مربع و با برجسب N نشان داده شده است و خروجی گره i ام این لایه به صورت کسری از قدرت i امین قانون به مجموع همه قدرت‌های قانون‌ها است:

$$O_{3,i} = \bar{w}_i = \frac{w_i}{w_1 + w_2} \quad (۵)$$

لایه ۴: هر گره در این لایه به صورت گره مربعی تطبیقی با رابطه زیر است:

$$O_{4,i} = \bar{w}_i f_i = \bar{w}_i (p_i x_1 + q_i x_2 + r_i), \quad \text{for } i = 1, 2 \quad (۶)$$

که p_i, q_i, r_i پارامترهای نتیجه بهبود یافته در طول آموزش مدل است.

لایه ۵: آخرین لایه، لایه مجموع وزنی است، به صورت تک گره ثابت و با برجسب \sum است که خروجی آن برابر است با مجموع همه سیگنال‌های ورودی با رابطه زیر است:

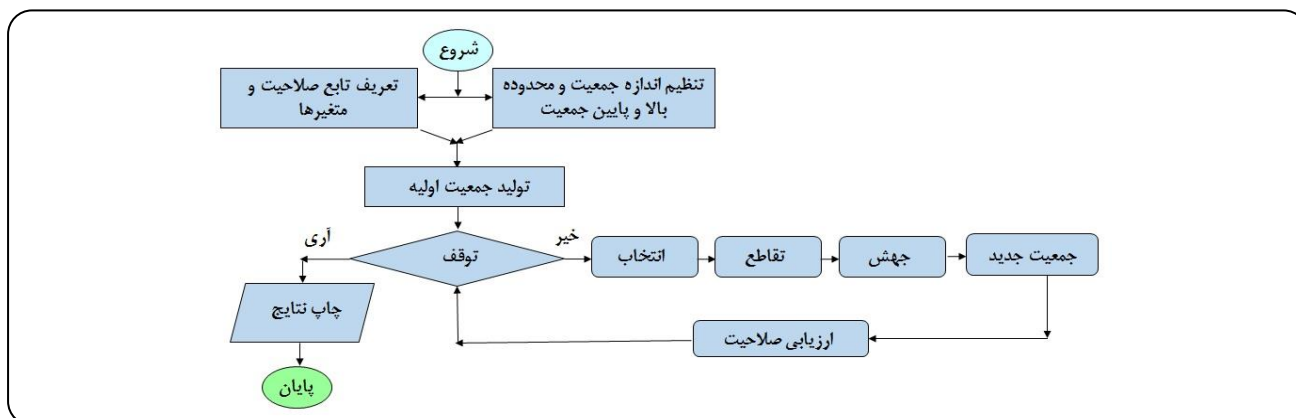
$$O_{5,i} = \sum_i \bar{w}_i f_i = \frac{\sum_i w_i f_i}{\sum_i w_i} \quad (۷)$$

شبکه عصبی پرسپترون چند لایه (MLP)

شبکه عصبی مصنوعی، جزء آن دسته از سامانه‌ها است که بر اساس یک الگوریتم ریاضی با الهام از سامانه اعصاب موجودهای زنده با پردازش روی داده‌های تجربی، دانش یا قانون نهفته در ورای داده‌ها را به ساختار شبکه منتقل می‌کند. پس از آن می‌تواند پاسخگوی مجموعه داده‌های نوین بر اساس دانش به دست آمده باشد و توانایی این را دارد که بین رابطه‌های پیچیده و غیر خطی داده‌ها ارتباط خوبی برقرار کند. حوزه کاربرد این شبکه‌ها آن چنان گسترده است که از کاربردهای طبقه‌بندی گرفته تا کاربردهایی مانند درون‌یابی، تخمین، آشکارسازی و غیره را شامل می‌شود شاید مهم‌ترین برتری این شبکه‌ها، توانایی وافر آن‌ها در کنار آسانی استفاده از آن‌ها باشد [۴۲].

(۱) Bias

(۲) Learning Rate



شکل ۲- نمودار طرز کار الگوریتم ژنتیک [۴۴].

الگوریتم ژنتیک

الگوریتم ژنتیک یکی از پایه‌ای‌ترین روش‌های بهینه‌سازی فرا ابتکاری است که برای بهینه‌سازی محاسبات پیچیده مهندسی مورد استفاده قرار گرفته است. الگوریتم ژنتیک نوع خاصی از الگوریتم‌های تکاملی است که از فناوری‌های زیست‌شناسی وراثت و جهش استفاده می‌کند، که توسط جان هنری هولند^۱ و شاگردانش در دانشگاه میشیگان ارائه شد. در هر مرحله، الگوریتم ژنتیک افراد^۲ را از جمعیت آن به صورت تصادفی به عنوان والدین فرزندان برای نسل بعدی، با عملگرهای ژنتیک شامل انتخاب^۳، تقاطع^۴ و جهش^۵ با کشف در همه ناحیه‌های فضای جستجو انتخاب می‌کند. روش کار الگوریتم ژنتیک به صورت خلاصه در شکل ۲ آمده است. در مرحله اول، یک جمعیت اولیه به صورت تصادفی تولید می‌شود. هر کدام از افراد برای صلاحیت برازندگی^۶ در مرحله بعدی محاسبه می‌شوند. بهترین افراد در مرحله انتخاب، انتخاب می‌شوند. افراد با برازندگی بیشتر، دارای احتمال بالاتری برای زاد و ولد دارند. زاد و ولد با ترکیب این افراد انتخاب شده، در مرحله تقاطع صورت می‌پذیرد. در مرحله جهش، تغییرهای تصادفی بر روی برخی از افراد صورت می‌پذیرد. هدف از عملگر جهش این است که از همگرا شدن الگوریتم به کمینه محلی جلوگیری نموده و جواب‌های با امکان نوین در جمعیت وارد کند. الگوریتم تا پیدا کردن کمینه تابع برازندگی، با ارضای ضابطه توقف ادامه پیدا می‌کند. به طور معمول بیش‌ترین ضابطه توقف مورد استفاده در این الگوریتم، رسیدن تعداد تولید نسل به بیشینه مقدار لحاظ شده، است [۴۴].

تابع‌های آماری

برای مقایسه و نمایش دقت بین داده‌های تجربی و داده‌های محاسباتی با روش‌های گوناگون، می‌توان از تابع‌های آماری مانند ضریب تعیین (R^2)، ریشه میانگین مربع انحراف (RMSD) و میانگین قدرمطلق انحراف (MAD) که در زیر آمده است استفاده کرد.

$$R^2 = 1 - \left[\frac{\sum_{i=1}^M (t_i - o_i)^2}{\sum_{i=1}^M (t_i)^2} \right] \quad (12)$$

$$RMSD = \sqrt{\left[\frac{\sum_{i=1}^M (t_i - o_i)^2}{M} \right]} \quad (13)$$

$$MAD = \frac{\sum_{i=1}^M |t_i - o_i|}{M} \quad (14)$$

که در آن t_i ، o_i و M به ترتیب مقادیر داده‌های تجربی، داده‌های محاسبه شده و تعداد کل داده‌هاست.

نتیجه‌ها و بحث

در این مطالعه از دو شبکه عصبی ANFIS با تابع عضویت گوسی و شبکه عصبی MLP از نوع شبکه پس‌انتشار رو به جلو، به منظور پیش‌بینی رفتار تعادلی مایع - مایع سامانه سه‌جزئی استخراج هیدروکربن‌های آلیفاتیک از آروماتیک توسط حلال مایع‌های یونی استفاده شده است. داده‌های آزمایشگاهی برای ایجاد شبکه‌های عصبی ANFIS و

(۱) John Henry Holland

(۳) Selection

(۵) Mutation

(۲) Individual

(۴) Crossover

(۶) Fitness

جدول ۱- سامانه‌های سه‌جزئی گوناگون آلیفاتیک، آروماتیک و مایع‌های یونی به کار رفته در این مطالعه

شماره	نام سامانه	دما (K)	خط رابط	مرجع
۱	Dodecane (۱) + Propylbenzene (۲) + mmim (CH ₃ SO ₄) (۳)	۳۱۳	۱۱	[۱۰]
۲	Dodecane (۱) + Propylbenzene (۲) + mmim (CH ₃ SO ₄) (۳)	۳۳۳	۱۱	[۱۰]
۳	Dodecane (۱) + Propylbenzene (۲) + emim (CH ₃ SO ₄) (۳)	۳۱۳	۱۱	[۱۰]
۴	Dodecane (۱) + Propylbenzene (۲) + emim (CH ₃ SO ₄) (۳)	۳۳۳	۱۱	[۱۰]
۵	Tetradecane (۱) + Propylbenzene (۲) + mmim (CH ₃ SO ₄) (۳)	۳۱۳	۱۱	[۱۰]
۶	Tetradecane (۱) + Propylbenzene (۲) + mmim (CH ₃ SO ₄) (۳)	۳۳۳	۱۱	[۱۰]
۷	Heptane (۱) + Toluene (۲) + [mmim][CH ₃ SO ₄] (۳)	۳۱۳/۲	۱۲	[۱۲]
۸	Heptane (۱) + Toluene (۲) + [emim][HSO ₄] (۳)	۳۱۳/۲	۱۱	[۱۲]
۹	Heptane (۱) + Toluene (۲) + [emim][CH ₃ SO ₄] (۳)	۳۱۳/۲	۱۲	[۱۲]
۱۰	Heptane (۱) + Toluene (۲) + [emim][C ₂ H ₅ SO ₄] (۳)	۳۱۳/۲	۱۲	[۱۲]
۱۱	Hexane (۱) + Ethyl benzene (۲) + [Omim][SCN] (۳)	۲۹۸/۲	۱۰	[۱۳]
۱۲	Heptane (۱) + Ethyl benzene (۲) + [Omim][SCN] (۳)	۲۹۸/۲	۹	[۱۳]
۱۳	Octane (۱) + Ethyl benzene (۲) + [Omim][SCN] (۳)	۲۹۸/۲	۱۰	[۱۳]
۱۴	Hexane (۱) + p-Xylene (۲) + [Omim][SCN] (۳)	۲۹۸/۲	۹	[۱۳]
۱۵	Heptane (۱) + p-Xylene (۲) + [Omim][SCN] (۳)	۲۹۸/۲	۸	[۱۳]
۱۶	Octane (۱) + p-Xylene (۲) + [Omim][SCN] (۳)	۲۹۸/۲	۱۰	[۱۳]
۱۷	Heptane (۱) + Toluene (۲) + [edmim][Tf ₂ N] (۳)	۳۱۳/۲	۱۲	[۳۶]
۱۸	Heptane (۱) + Toluene (۲) + [pdmim][Tf ₂ N] (۳)	۳۱۳/۲	۱۲	[۳۶]
۱۹	Heptane (۱) + Toluene (۲) + [bdmim][Tf ₂ N] (۳)	۳۱۳/۲	۱۲	[۳۶]

برای جلوگیری از وجود مقادیر بزرگ بایاس با متغیرهای ورودی و خروجی واقعی و همچنین کاهش زمان یادگیری، داده‌های تجربی شبکه‌ها از ۰/۱ تا ۰/۹ با استفاده از معادله‌ای که در زیر آمده است، نرمال شدند.

$$x_i^{norm} = 0/8 \frac{x_i - x_i^{min}}{x_i^{max} - x_i^{min}} + 0/1 \quad (15)$$

که در آن x_i ، x_i^{norm} ، x_i^{min} و x_i^{max} به ترتیب داده‌های آزمایشگاهی، داده‌های نرمال شده، کمینه و بیشینه داده‌ها هستند.

در این پژوهش، با استفاده از داده‌های آموزش، شبکه‌های ANFIS و MLP ساخته می‌شود و برای سنجش دقت این شبکه‌ها از داده‌های آزمایش و برای بیان دقت آن‌ها از پارامترهای آماری استفاده می‌شود. پس از آن، شبکه‌های ANFIS و MLP برای مدل‌سازی تعادل مایع - مایع با داده‌های آموزش ساخته شدند. شایان ذکر است که ANFIS دارای پارامترهای قابل تنظیم مانند شعاع خوشه‌چینی و پارامترهای مشخصه الگوریتم خوشه‌چینی و غیره MLP دارای پارامتر قابل تنظیم تعداد نرون لایه پنهان است که در این کار برای بالا بردن دقت پیش‌بینی مدل‌سازی، پارامترهای آن‌ها با الگوریتم ژنتیک که یکی از روش‌های پایه‌ای بهینه‌سازی تکاملی است، بهینه شده است.

MLP از مقاله‌های [۳۸-۱۲، ۱۰] اخذ شده است که شامل ۲۰۵ خط رابط با ۱۹ حالت گوناگون است. با توجه به جداول (۱) تا (۳) که در زیر آمده است، مجموعه داده‌های سامانه سه‌جزئی تعادل مایع - مایع شامل ۵ ترکیب هیدروکربن آلیفاتیک، ۴ ترکیب هیدروکربن آروماتیک و ۷ نوع از مایع‌های یونی گوناگون است.

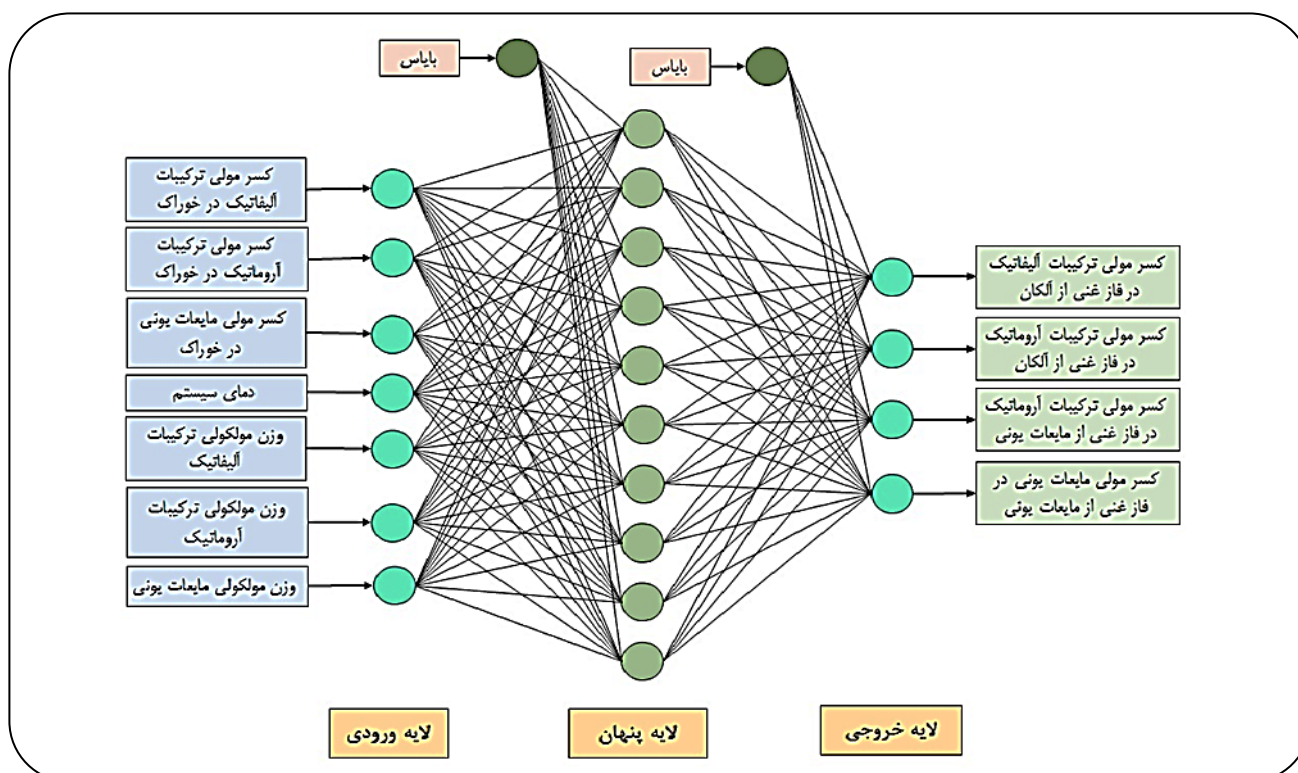
مجموعه داده‌های جمع‌آوری شده به صورت تصادفی برای شبکه ANFIS به دو دسته (۷۰٪ داده‌ها برای آموزش و ۳۰٪ داده‌ها برای آزمایش) و برای شبکه عصبی MLP به دو دسته (۷۰٪ داده‌ها برای آموزش، ۱۵٪ داده‌ها برای اعتبارسنجی و ۱۵٪ باقی‌مانده برای آزمایش) تقسیم شدند. داده‌های آموزش برای ایجاد شبکه و داده‌های آزمایش برای سنجش دقت شبکه‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد. هفت متغیر مستقل که شامل نسبت مولی ترکیب‌های آلیفاتیک، آروماتیک و مایع‌های یونی در خوراک، دمای سامانه تعادل مایع - مایع و جرم مولکولی ترکیب‌های آلیفاتیک، آروماتیک و مایع‌های یونی در نظر گرفته شده است. همچنین، کسر مولی ترکیب‌های آلیفاتیک و آروماتیک در فاز غنی از آلکان و کسر مولی ترکیب‌های آروماتیک و مایع‌های یونی در فاز غنی از مایع‌های یونی به عنوان خروجی مدل در نظر گرفته شده است که در شکل ۳ آمده است.

جدول ۲- نام IUPAC و اختصار و همچنین فرمول مولکولی و وزن مولکولی مایع های یونی به کار رفته در این مطالعه

نام IUPAC	نام اختصار	فرمول مولکولی	وزن مولکولی
1-Ethyl-2,3-dimethylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl) imide	[edmim][Tf2N]	$C_9H_{13}F_6N_2O_4S_2$	۴۰۵/۳۴
1-Propyl-2,3-dimethylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl) imide	[pdmim][Tf2N]	$C_{11}H_{15}F_6N_2O_4S_2$	۴۱۹/۳۷
1-Butyl-2,3-dimethylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl) imide	[bdmim][Tf2N]	$C_{13}H_{17}F_6N_2O_4S_2$	۴۳۳/۳۹
1,3-Dimethylimidazolium methylsulfate	[mmim][CH3SO4]	$C_6H_{12}N_2O_4S$	۲۰۸/۲۴
1-Ethyl-3-methylimidazolium methylsulfate	[emim][CH3SO4]	$C_7H_{14}N_2O_4S$	۲۲۲/۲۶
1-Ethyl-3-methylimidazolium hydrogensulfate	[emim][HSO4]	$C_6H_{12}N_2O_4S$	۲۰۸/۲۴
1-Methyl 3-octylimidazolium thiocyanate	[Omim][SCN]	$C_{14}H_{28}N_2S$	۲۷۵/۲۳

جدول ۳- نام IUPAC، فرمول مولکولی هیدروکربن های آلیفاتیک و آروماتیک به کار رفته در این مطالعه

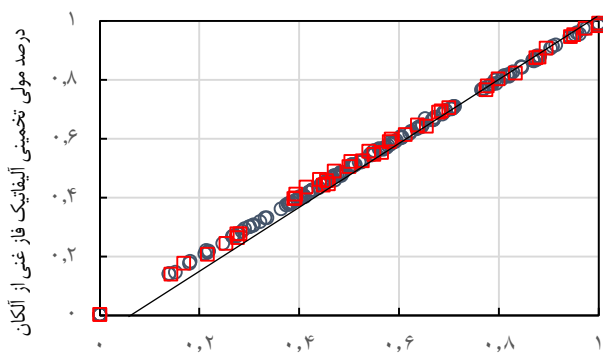
نوع ترکیب	نام IUPAC	فرمول مولکولی	وزن مولکولی
آلیفاتیک	Hexane	C_6H_{14}	۸۶/۱۸
	Heptane	C_7H_{16}	۱۰۰/۲
	n-Octane	C_8H_{18}	۱۱۴/۲۳
	Dodecane	$C_{12}H_{26}$	۱۷۰/۳۳
	Tetradecane	$C_{14}H_{30}$	۱۹۸/۳۹
آروماتیک	Toluene	C_7H_8	۹۲/۱۳
	p-Xylene	C_8H_{10}	۱۰۶/۱۶
	Ethyl benzene	C_8H_{10}	۱۰۶/۱۶
	Propyl benzene	C_9H_{12}	۱۲۰/۱۹



شکل ۳- ساختار شبکه عصبی با ۷ ورودی و ۴ خروجی و ۱ لایه پنهان.

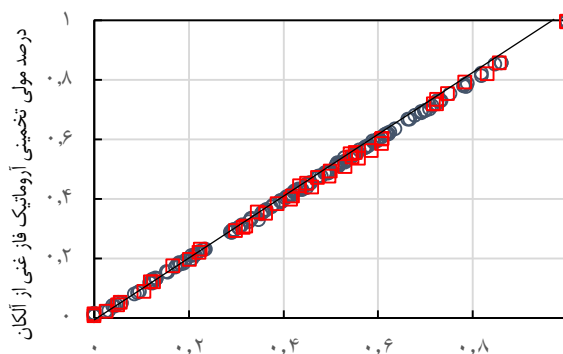
جدول ۴- مقایسه شاخص‌های آماری بین شبکه‌های ANFIS و MLP

مجموعه	شبکه عصبی ANFIS			شبکه عصبی MLP		
	R^2	RMSD	MAD	R^2	RMSD	MAD
آموزش	۰/۹۹۹۸	۰/۰۰۷۸	۰/۰۰۵۰	۰/۹۹۹۸	۰/۰۰۸۶	۰/۰۰۵۳
آزمایش	۰/۹۹۹۶	۰/۰۱۹۰	۰/۰۱۲۹	۰/۹۹۹۶	۰/۰۲۰۴	۰/۰۱۲۷
اعتبارسنجی				۰/۹۹۹۶	۰/۰۱۸۴	۰/۰۱۳۵



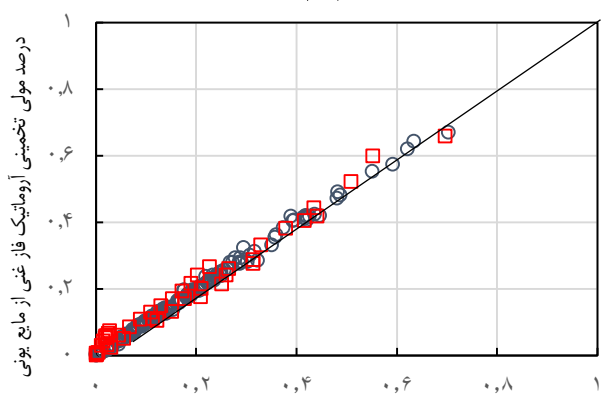
درصد مولی آزمایشگاهی آلیفاتیک فاز غنی از آلکان

(الف)



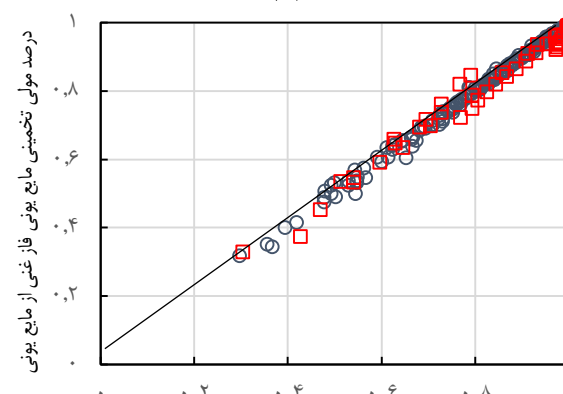
درصد مولی آزمایشگاهی آروماتیک فاز غنی از آلکان

(ب)



درصد مولی آزمایشگاهی آروماتیک فاز غنی از مایع یونی

(ج)



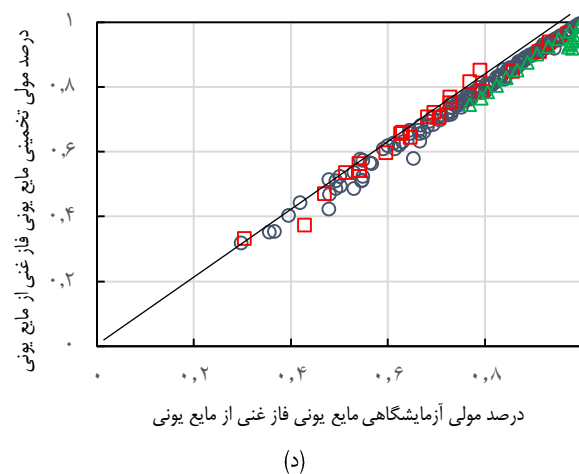
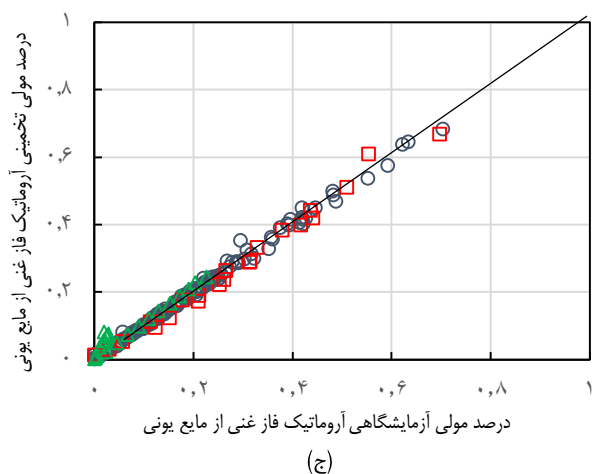
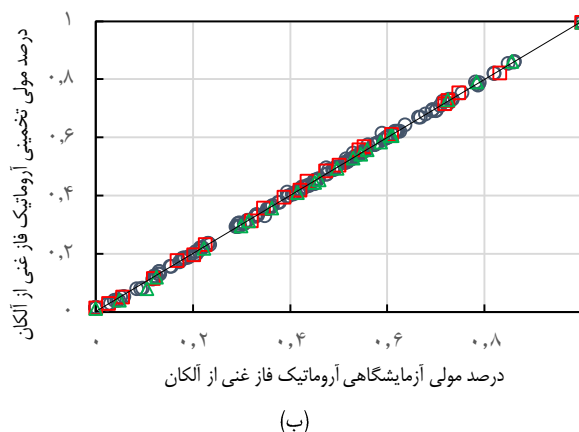
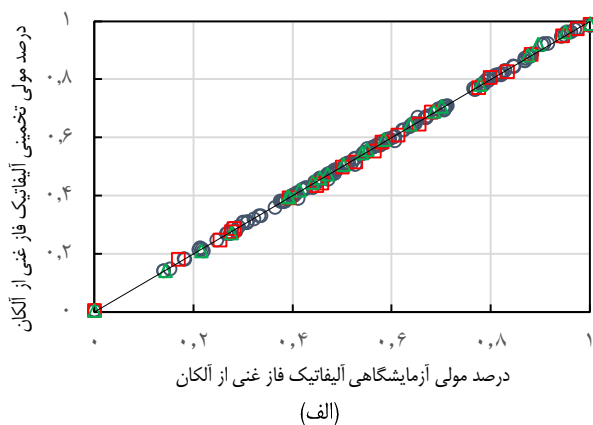
درصد مولی آزمایشگاهی مایع یونی فاز غنی از مایع یونی

(د)

شکل ۴- نمایش کسر مولی تخمین زده با واقعی با استفاده شبکه ANFIS، (الف) ترکیب آلیفاتیک در فاز غنی از آلکان (ب) ترکیب آروماتیک در فاز غنی از آلکان (ج) ترکیب آروماتیک در فاز غنی از مایع یونی (د) ترکیب مایع یونی در فاز غنی از مایع یونی که در آن نقاط با علامت (○) داده‌های آموزشی و با علامت (□) داده‌های آزمایشی است.

شکل‌های ۴ و ۵ نشان‌دهنده این است که پیش‌بینی شبکه‌های MLP و ANFIS با داده‌های واقعی اختلاف زیادی ندارد و همچنین به روشنی قابل دیدن است، تجمع داده‌های آموزش و آزمایش به خط تجربی نشان‌دهنده دقت به نسبت مناسب دو شبکه MLP و ANFIS است. شایان ذکر است، تابع هدفی با متغیر مستقل شماره نرون لایه پنهان به منظور کمینه شدن RMSD شبکه عصبی MLP تعریف شد که با روش بهینه‌سازی تکاملی الگوریتم ژنتیک مقدار بهینه آن محاسبه شد. نتیجه‌های آن به صورت جدولی با آرایش خطاهای شبکه‌ها

سپس به مقایسه دقت پیش‌بینی دو شبکه ANFIS و MLP با توجه به نمودارها و شاخص‌های آماری پرداخته می‌شود. پارامترهای آماری R^2 ، RMSD و MAD با داده‌های آموزش، آزمایش برای شبکه ANFIS و R^2 ، RMSD و MAD با داده‌های آموزش، اعتبارسنجی و آزمایش برای شبکه MLP در جدول ۴ گزارش شده است. همان‌گونه که قابل دیدن است، RMSD داده‌های آزمایشی برای شبکه‌های ANFIS و MLP به ترتیب برابر ۰/۰۱۹۰ و ۰/۰۲۰۴ شده است. نتیجه‌های گزارش شده در جدول ۴ نشان‌دهنده دقت مناسب شبکه‌های ANFIS و MLP است.



شکل ۵- نمایش کسر مولی تخمین‌زده با واقعی با استفاده شبکه MLP، (الف) ترکیب آلوفاتیک در فاز غنی از آلکان (ب) ترکیب آروماتیک در فاز غنی از آلکان (ج) ترکیب آروماتیک در فاز غنی از مایع یونی (د) ترکیب مایع یونی در فاز غنی از مایع یونی که در آن نقطه‌های با علامت (○) داده‌های آموزشی، نقاط با علامت (□) داده‌های اعتبارسنجی و نقاط با علامت (△) داده آزمایشی است.

به‌عنوان نمونه سامانه تعادل مایع - مایع شماره ۱۱ و ۱۲ جدول ۱، برای مقایسه خط‌های رابط پیش‌بینی شده با داده‌های واقعی برای شبکه‌های ANFIS و MLP در شکل ۶ آورده شده است. چنین نمودارهایی را می‌توان برای سامانه‌های دیگر نیز رسم نمود. با توجه به نمودارهای رسم شده و شاخص‌های آماری بیان‌گر این است که می‌توان از شبکه‌های ANFIS و MLP برای پیش‌بینی رفتار تعادل مایع - مایع سامانه سه‌جزئی هیدروکربن‌های آلوفاتیک و آروماتیک و مایع‌های یونی استفاده نمود. گزینش‌گری جداسازی مایع یونی برای آروماتیک به آلوفاتیک با استفاده از رابطه زیر قابل محاسبه است.

$$S = \frac{D_2}{D_1} = \frac{(X_{Aro}^{IL} / X_{Aro}^{AIK})}{(X_{Ali}^{IL} / X_{Ali}^{AIK})} \quad (16)$$

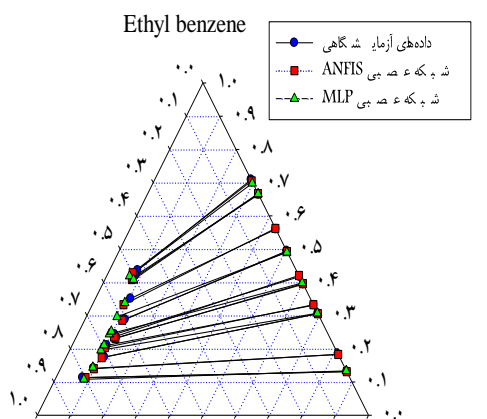
مقدارهای گزینش‌گری جداسازی هیدروکربن‌های آروماتیک از آلوفاتیک بر اساس داده‌های واقعی و پیش‌بینی شده با استفاده از

شامل تعداد کم‌تر یا بیش‌تر نورون در لایه پنهان در جدول ۵ آمده است. طبق نتیجه‌ها دیده می‌شود، مقدار بهینه تعداد نرون لایه پنهان برای این سامانه استخراج مایع - مایع، عدد ۱۰ شد.

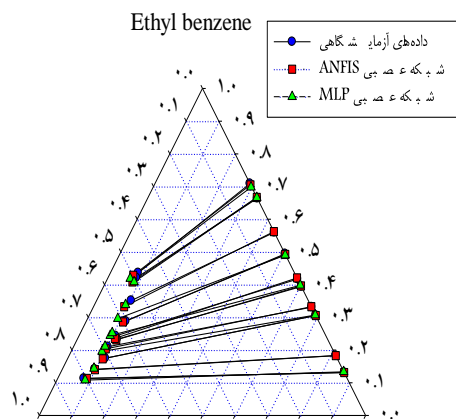
همچنین باید توجه داشت که شبکه عصبی با مشکل اورفیتینگ مواجه نشود. در این پژوهش ۲۰۵ داده آزمایشگاهی جمع‌آوری شده است که ۷۰ درصد آن را برای آموزش شبکه به صورت تصادفی انتخاب شده است. تعداد کل پارامترهای شبکه عصبی MLP شامل وزن‌ها و بایاس‌ها با ۷ ورودی و ۴ خروجی و ۱ لایه پنهان، طبق محاسبه‌ها دارای $12n_1 + 4$ پارامتر است که n_1 در رابطه تعداد نرون لایه پنهان است. تعداد داده استفاده شده برای آموزش شبکه ۱۴۴ داده است. با توجه به این که برای این که اورفیتینگ روی ندهد، باید تعداد داده آزمایشگاهی استفاده شده از تعداد پارامترها شبکه بیش‌تر باشد. در نتیجه تعداد نرون لایه پنهان نباید از ۱۱ نرون بیش‌تر شود.

جدول ۵- پارامترهای آماری دقت شبکه عصبی MLP در تعداد نرون‌های گوناگون لایه پنهان

تعداد نرون	آموزش شبکه MLP			اعتبارسنجی شبکه MLP			آزمایش شبکه MLP		
	R^2	RMSD	MAD	R^2	RMSD	MAD	R^2	RMSD	MAD
۵	۰/۹۹۹۰	۰/۰۱۸۳	۰/۰۱۳۵	۰/۹۹۹۴	۰/۰۲۳۰	۰/۰۱۸۹	۰/۹۹۸۴	۰/۰۳۹۴	۰/۰۲۷۵
۶	۰/۹۹۹۴	۰/۰۱۳۷	۰/۰۰۹۰	۰/۹۹۹۵	۰/۰۲۱۳	۰/۰۱۶۴	۰/۹۹۹۰	۰/۰۳۱۴	۰/۰۲۰۷
۷	۰/۹۹۹۶	۰/۰۱۱۷	۰/۰۰۷۵	۰/۹۹۹۶	۰/۰۲۰۵	۰/۰۱۴۸	۰/۹۹۹۳	۰/۰۲۶۸	۰/۰۱۶۳
۸	۰/۹۹۹۸	۰/۰۰۹۰	۰/۰۰۵۹	۰/۹۹۹۶	۰/۰۱۹۰	۰/۰۱۳۶	۰/۹۹۹۴	۰/۰۲۴۴	۰/۰۱۸۱
۹	۰/۹۹۹۸	۰/۰۰۸۹	۰/۰۰۵۶	۰/۹۹۹۶	۰/۰۱۹۲	۰/۰۱۳۵	۰/۹۹۹۴	۰/۰۲۴۸	۰/۰۱۸۰
۱۰	۰/۹۹۹۸	۰/۰۰۸۶	۰/۰۰۵۳	۰/۹۹۹۶	۰/۰۱۸۴	۰/۰۱۳۵	۰/۹۹۹۶	۰/۰۲۰۴	۰/۰۱۲۷
۱۱	۰/۹۹۹۷	۰/۰۰۹۸	۰/۰۰۶۶	۰/۹۹۹۵	۰/۰۲۰۹	۰/۰۱۵۴	۰/۹۹۹۵	۰/۰۲۱۷	۰/۰۱۵۹

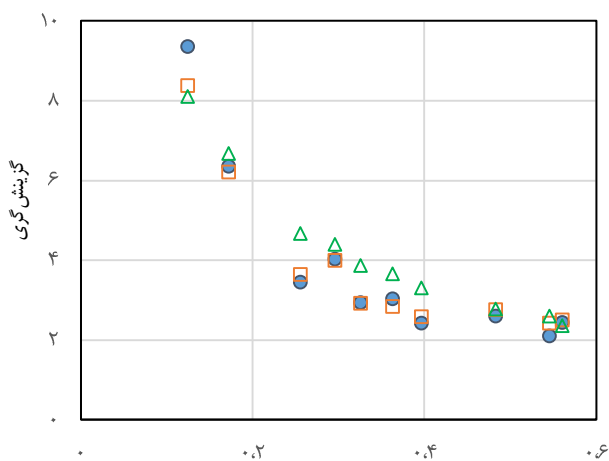


(الف)



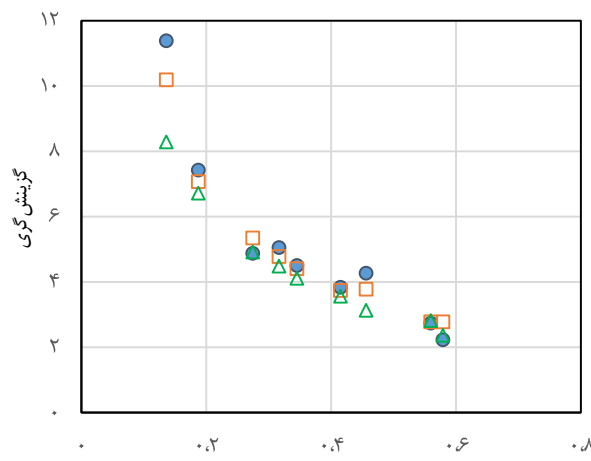
(ب)

شکل ۶- خط‌های رابط LLE داده‌های واقعی و تخمین زده توسط شبکه‌های ANFIS و MLP برای سامانه (الف) سامانه شماره ۱۱ و (ب) سامانه شماره ۱۲ از جدول (۱).



درصد مولی هگزان در خوراک

(الف)



درصد مولی هپتان در خوراک

(ب)

شکل ۷- گزینش‌گری جداسازی داده‌های واقعی و پیش‌بینی شده توسط شبکه‌های ANFIS و MLP برای سامانه (الف) سامانه شماره ۱۱ و (ب) سامانه شماره ۱۲ از جدول (۱)، داده‌ها آزمایشگاهی با نقطه‌های با علامت (●)، پیش‌بینی شده توسط شبکه ANFIS با علامت (□) و پیش‌بینی شده توسط شبکه MLP با علامت (△).

جدول ۶- مقایسه دقت در پیش‌بینی رفتار ترمودینامیکی استخراج مایع - مایع سامانه شماره ۱۱ و (شماره ۱۲ از جدول (۱) بین شبکه‌های عصبی ANFIS و MLP با مدل ترمودینامیکی NRTL با مقدار $\alpha = 0.3$.

اجزاء i-j	مدل ترمودینامیکی NRTL		شبکه عصبی ANFIS	شبکه عصبی MLP
	پارامترهای برهم‌کنشی		RMSD	RMSD
	$\Delta g_{ij} / (\text{kJ.mol}^{-1})$	$\Delta g_{ij} / (\text{kJ.mol}^{-1})$		
Ethyl benzene (1) + hexane (2) + [Omim][SCN] (3)				
۱-۲	۱۴/۳۸۷	۴/۸۷۹	۰/۰۰۹۱	۰/۰۰۸۴
۱-۳	۷/۵۸۰	۴/۴۹۵		
۲-۳	۱/۳۶۱	۷/۵۸۳		
Ethyl benzene (1) + heptane (2) + [Omim][SCN] (3)				
۱-۲	۱۵/۰۱۰	۴/۵۶۳	۰/۰۱۴۴	۰/۰۱۰۳
۱-۳	۷/۴۶۸	۴/۳۹۶		
۱-۳	۰/۳۳۱	۹/۳۶۳		
میانگین			۰/۰۱۱۷	۰/۰۰۹۳

پارامترهای آماری R^2 ، RSMD و MAD برای داده‌های آموزش، آزمایش با شبکه‌های عصبی ANFIS و برای داده‌های آموزش، آزمایش و اعتبارسنجی با شبکه‌های عصبی MLP محاسبه شدند. به‌عنوان نمونه R^2 ، RSMD و MAD مدل شبکه عصبی ANFIS با داده‌های آزمایشی به ترتیب ۰/۹۹۹۶، ۰/۰۱۹۰ و ۰/۰۱۲۹ و R^2 ، RSMD و MAD شبکه عصبی MLP با داده‌های آزمایشی به ترتیب ۰/۹۹۹۶، ۰/۰۲۰۴ و ۰/۰۱۲۷ به دست آمده‌اند. همچنین مقایسه بین دقت شبکه‌های عصبی ANFIS و MLP با مدل ترمودینامیکی NRTL انجام شد که در آن میانگین RMSD شبکه‌های عصبی ANFIS و MLP برای دو سامانه استخراج گوناگون به ترتیب ۰/۰۰۹۳، ۰/۰۱۱۰ و با مدل ترمودینامیکی NRTL ۰/۰۱۱۳ شده است. نتیجه‌های پارامترهای آماری و رسم نمودارها بیانگر این است که شبکه‌های عصبی ANFIS و MLP برای پیش‌بینی رفتار ترمودینامیکی تعادل فاز مایع - مایع دقت به نسبت مناسبی دارند و روش مؤثری در این زمینه می‌باشند.

شبکه‌های ANFIS و MLP سامانه‌های شماره ۱۱ و ۱۲ با استفاده از معادله (۱۶) در شکل ۷ نمایش داده شده است. این نمودار نشان دهنده دقت مناسب شبکه‌های ANFIS و MLP در پیش‌بینی رفتارهای فاز استخراج مایع - مایع این نوع سامانه‌ها است.

مقایسه بین دقت شبکه‌های عصبی ANFIS و MLP با مدل ترمودینامیکی NRTL با نرم‌افزار ASPEN برای سامانه تعادل مایع - مایع شماره ۱۱ و ۱۲ جدول ۱ در جدول ۶ آمده است. میانگین RMSD شبکه‌های عصبی ANFIS و MLP برای آن دو سامانه استخراج به ترتیب ۰/۰۰۹۳، ۰/۰۱۱۰ و با مدل ترمودینامیکی NRTL ۰/۰۱۱۳ شده است. نتیجه‌های بیانگر این است که این شبکه‌ها در پیش‌بینی رفتار ترمودینامیکی تعادل مایع - مایع دقت به نسبت مناسبی دارد و روش مؤثری هستند.

نتیجه‌گیری

در این مطالعه، رفتار ترمودینامیکی تعادل فاز مایع - مایع سامانه سه‌جزئی استخراج هیدروکربن‌های آروماتیک از آلیفاتیک توسط حلال مایع‌های یونی با استفاده از شبکه‌های عصبی ANFIS و MLP پیش‌بینی شد. برخی از پارامترهای قابل تنظیم شبکه ANFIS شامل شعاع خوشه‌چینی و پارامترهای مشخصه الگوریتم خوشه‌چینی و شبکه MLP شامل تعداد نرون‌های لایه پنهان با استفاده از الگوریتم ژنتیک که یکی از روش‌های پایه‌ای بهینه‌سازی تکاملی است، بهینه شدند. مقایسه دقت پیش‌بینی شبکه‌های عصبی ANFIS و MLP بر اساس ۲۰۵ خط رابط داده‌های آزمایشگاهی در شرایط گوناگون صورت پذیرفت.

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۰۹/۲۰؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۰۱/۲۶

مراجع

- [1] Ghanadzadeh H., Ghanadzadeh A., [Liquid-Liquid Equilibria in Water + Ethanol + 2-Ethyl-1-hexanol at T = \(298.2, 303.2, 308.2, and 313.2\) K](#), *J. Chem. Thermodynamics*, **35**: 1393–1401 (2003).
- [2] Ghanadzadeh H., Haghi A. K., [Liquid-Liquid Equilibrium Data for Water+Ethanol+trans-Decalin: Measurement and Predication](#), *J. Fluid Phase Equilib.*, **243**: 45–50 (2006).
- [3] Villaluenga J.G., Tabe-Mohammadi A., [A Review on the Separation of Benzene/Cyclohexane Mixtures by Pervaporation Processes](#), *J. Memb. Sci.*, **169**: 159–174 (2000).
- [4] Al-Jimaz A.S., Fandary M.S., Alkhalidi K.H.E., Al-Kandary J.A., Fahim M.A., [Extraction of Aromatics from Middle Distillate Using N-Methyl-2-Pyrrolidone: Experiment, Modeling, and Optimization](#), *J. Ind. & Eng. Chem. Res.* **46**: 5686–5696 (2007).
- [5] Mahmoudi J., Lotfollahi M.N., [\(Liquid+ Liquid\) Equilibria of \(Sulfolane+ Benzene+Nhexane\), \(N-Formylmorpholine+ Benzene+N-Hexane\), and \(Sulfolane+N-Formylmorpholine+ Benzene+N-Hexane\) at Temperatures Ranging from \(298.15 to 318.15\) K: Experimental Results and Correlation](#), *J. Chem. Thermodynamics*, **42**: 466–471 (2010).
- [6] Wlazło M., Marciniak A., [Ternary Liquid-Liquid Equilibria of Trifluorotris \(Perfluoroethyl\) Phosphate Based Ionic Liquids +Methanol + Heptane](#), *J. Fluid Phase Equilib.*, **338**: 253–256 (2013).
- [7] Marsh K.N., Boxall J.A., Lichtenhaler R., [Room Temperature Ionic Liquids and Their Mixtures— A Review](#), *J. Fluid Phase Equilib.*, **219**: 93–98 (2004).
- [8] Kamankesh A., Vossoughi M., Shamloo A., Mirkhani S., Akbari J., [Liquid-Liquid Equilibrium \(LLE\) Data for Ternary Mixtures of {Aliphatic+ P-Xylene+ \[EMpy\]\[ESO 4\]} at T= 313.15 K](#), *J. Fluid Phase Equilib.*, **332**: 48–54 (2012).
- [9] Larriba M., Navarro P., García J., Rodríguez F., [Liquid-Liquid Extraction of Toluene from Heptane Using \[Emim\]\[DCA\], \[Bmim\]\[DCA\], and \[Emim\]\[TCM\] Ionic Liquids](#), *J. Ind. & Eng. Chem. Res.*, **52**: 2714–2720 (2013).
- [10] Al-Jimaz A.S., Alkhalidi K.H., Al-Rashed M.H., Fandary M.S., AlTuwaim M.S., [Study on the Separation of Propylbenzene from Alkanes Using Two Methylsulfate-Based Ionic Liquids at \(313 and 333\) K](#), *J. Fluid Phase Equilib.* **354**: 29–37 (2013).
- [11] Larriba M., Navarro P., García J., Rodríguez F., [Selective Extraction of Toluene from N-Heptane Using \[Emim\]\[SCN\] and \[Bmim\]\[SCN\] Ionic Liquids as Solvents](#), *J. Chem. Thermodynamics*, **79**: 266–271 (2014).
- [12] García S., Larriba M., García J., Torrecilla J.S., Rodríguez F., [Alkylsulfate-Based Ionic Liquids in the Liquid-Liquid Extraction of Aromatic Hydrocarbons](#), *J. Chem. Thermodynamics*, **45**: 68–74 (2012).
- [13] Heidari M.R., Mokhtarani B., Seghatoleslami N., Sharifi A., Mirzaei M., [Liquid-Liquid Extraction of Aromatics from Their Mixtures with Alkanes Using 1-Methyl 3-Octylimidazolium Thiocyanate Ionic Liquid](#), *J. Chem. Thermodynamics*, **54**: 310–315 (2012).

- [14] García S., Larriba M., Casas A., García J., Rodríguez F., Separation of Toluene and Heptane by Liquid-Liquid Extraction Using Binary Mixtures of the Ionic Liquids 1-Butyl-4-Methylpyridinium Bis (Trifluoromethylsulfonyl) Imide and 1-Ethyl-3-Methylimidazolium Ethylsulfate, *J. Chem. Eng. Data*, **57**: 2472–2478 (2012).
- [15] de Oliveira L.H., Álvarez V.H., Aznar M., Liquid-Liquid Equilibrium in N-Methyl-2-Hydroxyethylammonium Acetate Butanoate, or Hexanoate Ionic Liquids + Dibenzothiophene + N-Dodecane Systems at 298.2K and Atmospheric Pressure, *J. Chem. Eng. Data*, **57**: 744–750 (2012).
- [16] González E.J., Calvar N., Gómez E., Domínguez Á., Application of [EMim][ESO 4] Ionic Liquid as Solvent in the Extraction of Toluene from Cycloalkanes: Study of Liquid-Liquid Equilibria at T= 298.15 K, *J. Fluid Phase Equilib.*, **303**: 174–179 (2011).
- [17] Calvar N., Domínguez I., Gómez E., Domínguez Á., Separation of Binary Mixtures Aromatic+ Aliphatic Using Ionic Liquids: Influence of the Structure of the Ionic Liquid, Aromatic and Aliphatic, *J. Chem. Eng.*, **175**: 213–221 (2011)
- [18] Fandary M.S., Alkhalidi K.H., Al-Jimaz A.S., Al-Rashed M.H., Al-Tuwaim M.S., Evaluation of [Bmim][PF 6] as an Ionic Solvent for the Extraction of Propylbenzene from Aliphatic Compounds, *J. Chem. Thermodynamics*, **54**: 322–329 (2012).
- [19] Corderi S., Calvar N., Gómez E., Domínguez A., Capacity of Ionic Liquids [EMim][NTf2] and [EMpy][NTf2] for Extraction of Toluene from Mixtures with Alkanes: Comparative Study of the Effect of the Cation, *J. Fluid Phase Equilib.*, **315**: 46–52 (2012).
- [20] Bogdan S., Gosak D., Vasic-Racki D., Mathematical Modeling of Liquid-Liquid Equilibria in Aqueous Polymer Solution Containing Neutral Proteinase and Oxytetracycline Using Artificial Neural Network, *J. Comput. Chem. Eng.*, **19**: 791–796 (1995).
- [21] Ganguly S., Prediction of VLE Data Using Radial Basis Function Network, *J. Comput. Chem. Eng.*, **27**: 1445–1454 (2003).
- [22] Mjalli F.S., Neural Network Model-Based Predictive Control of Liquid-Liquid Extraction Contactors, *J. Chem. Eng. Sci.*, **60**: 239–253 (2005).
- [23] Torrecilla J.S., Deetlefs M., Seddon K.R., Rodríguez F., Estimation of Ternary Liquid-Liquid Equilibria for Arene/Alkane/Ionic Liquid Mixtures Using Neural Networks, *J. Chem. Phys.*, **10**: 5114–5120 (2008).
- [24] Dehnavi S.M., Pazuki G., Goodarznia I., Vossoughi M., Prediction of the Selectivity Coefficient of Ionic Liquids In Liquid-Liquid Equilibrium Systems Using Artificial Neural Network and Excess Gibbs Free Energy Models, *J. Part. Sci. Technol.*, **28**: 379–391 (2010).
- [25] Özmen A., Correlation of Ternary Liquid-Liquid Equilibrium Data Using Neural Network-Based Activity Coefficient Model, *J. Neural Comput. Appl.*, **24**: 339–346 (2014).
- [26] Powell M.J.D., Mason J.C., Cox M.G., “Radial Basis Functions for Multivariable Interpolation: A Review in Algorithms for Approximation”, Clarendon Press, Oxford, UK, (1987).

- [27] Park J., Sandberg I., [Universal Approximation Using Radial Basis Function Networks](#), *J. Neural Comput.*, **3** (2): 246–257 (1991).
- [28] Ivakhnenko A.G., [Polynomial Theory of Complex Systems](#), *IEEE Trans. Syst. Man. Cybern.*, **1**: 364–378 (1971).
- [29] Farlow S.J., “[Self-Organizing Method in Modelling: GMDH-Type Algorithm](#)”, Marcel Dekker, New York, (1984).
- [30] Reyhani S.Z., Ghanadzadeh H., Puigjaner L., Recances F., [Estimation of Liquid–Liquid Equilibrium for a Quaternary System Using the GMDH Algorithm](#), *J. Ind. Eng. Chem. Res.*, **48**: 2129–2134 (2009).
- [31] Ketabchi S., Ghanadzadeh H., Ghanadzadeh A., Fallahi S., Ganji M., [Estimation of VLE of Binary Systems \(Tert-Butanol + 2-Ethyl-1 Hexanol\) and \(Nbutanol + 2-Ethyl-1-Hexanol\) Using GMDH-Type Neural Network](#), *J. Chem. Thermodynamics*, **42** (11): 1352–1355 (2010).
- [32] Ghanadzadeh H., Ganji M., Fallahi S., [Mathematical Model of Liquid–Liquid Equilibrium for a Ternary System Using the GMDH-Type Neural Network and Genetic Algorithm](#), *J. Appl. Math. Model.*, **36**: 4096–4105 (2012).
- [33] Pazuki G., Seyfi Kakhki S., [A Hybrid GMDH Neural Network to Investigate Partition Coefficients of Penicillin G Acylase in Polymer–Salt Aqueous Two-Phase Systems](#), *J. Mol. Liq.*, **188**: 131–135 (2013).
- [34] Hakim M., Behmardikalantari G., Abedini Najafabadi H., Pazuki G., Vosoughi A., Vossoughi M., [Prediction of Liquid–Liquid Equilibrium Behavior for Aliphatic + Aromatic + Ionic Liquid Using Two Different Neural Network-Based Models](#), *J. Fluid Phase Equilib.*, **394**: 140–147 (2015).
- [35] Shaahmadi F., Anbaz M. A., [The Prediction of Liquid-Liquid Equilibria for Benzene/Alkane/Ionic Liquids Mixtures Using Intelligent Models](#), *J. Mol. Liq.*, **208**: 131–135 (2017).
- [36] García S., Larriba M., García J., Torrecilla J.S., Rodríguez F., [1-Alkyl-2,3-Dimethylimidazolium Bis\(Trifluoromethylsulfonyl\)Imide Ionic Liquids for the Liquid-Liquid Extraction of Toluene from Heptane](#), *J. Chem. Eng. Data*, **56**: 3468–3474 (2011).
- [37] Melin P., Castillo O., [Hybrid Intelligent Systems for Pattern Recognition Using Soft Computing](#), *J. Fuzz. Inf. and Eng.* **4**: 345–355(2005).
- [38] Mamdani E.H., Assilian S., [An Experiment in Linguistic Synthesis with a Fuzzy Logic Controller](#), *J. Man-Machine Studies*, **7** (1): 1–13 (1975).
- [39] Sugeno M., “[Industrial Applications of Fuzzy Control](#)”, Elsevier, Amsterdam, (1985).
- [40] Jang J., [ANFIS: Adaptive Network-Based Fuzzy Inference Systems](#), *IEEE Trans. Syst. Man. Cybern.*, **23**: 665–668 (1993).
- [41] Brown M., Harris C., “[Neuro-Fuzzy Adaptive Modeling and Control](#)”, Prentice-Hall, New York, (1994).
- [42] Haykin S., “[Neural Networks: A Comprehensive Foundation](#)”, Prentice-Hall, New York, (2007).
- [43] Rojas R., “[Neural Networks: A Systematic Introduction](#)”, Springer, Berlin, (1996).
- [44] Preechakul C., Kheawhom S., [Modified Genetic Algorithm With Sampling Techniques for Chemical Engineering Optimization](#), *J. Ind. Eng. Chem.* **15**: 110-119 (2009).