

## پیش بینی کشش سطحی مایعات یونی بر پایه ایمیدازولیوم با بکارگیری شبکه عصبی مصنوعی

مصطفی لشکر بلوکی\*

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت مقاله: ۱۳۹۷/۱۰/۲۲ پذیرش مقاله: ۱۳۹۸/۰۲/۱۴	<p>امروزه با پیشرفت تکنولوژی برای حل مسائلی که روابط دقیق ریاضی بین ورودی و خروجی برقرار نمی باشد از شبکه های عصبی مصنوعی استفاده می شود. در این پژوهش برای پیش بینی کشش سطحی مایعات یونی بر پایه ایمیدازولیوم دو شبکه عصبی پرسپترون چند لایه شامل شبکه عصبی مصنوعی پیشرو (FFANN) و شبکه عصبی آبخاری (CANN) پیشنهاد شد. برای بررسی صحت مدل ها، از ۱۲۵۱ داده آزمایشگاهی گردآوری شده از مقالات مختلف شامل کشش سطحی ۴۰ مایع یونی در محدوده وسیع دمایی (از ۲۶۳/۶۱ الی ۵۳۳/۲ کلوین) استفاده شده است. نتایج نشان داد که مدل شبکه پرسپترون چند لایه CANN متشکل از چیدمانی با سه ورودی شامل جرم های مولکولی بخش های آنیونی و کاتیونی مایع یونی و دما و یک لایه مخفی حاوی ۸ نرون با تابع فعال سازی تانژانت هیپربولیک که با استفاده از الگوریتم آموزشی لوبنبرگ-مارکوارت آموزش دیده بهترین دقت در پیش بینی کشش سطحی مایعات یونی داشته است. آنالیز خطا های داده های تست با درصد متوسط قدر مطلق خطاهای نسبی (%AARD) ۱/۰۷، بیانگر کارایی مدل غیرخطی CANN در برقراری ارتباط مابین ورودی های شبکه و کشش سطحی می باشد. علاوه بر آن مقایسه دقت مدل پیشنهادی با مدل های موجود از جمله قانون حالات متناظر، پاراچور، الگوریتم مدیریت داده ها به روش گروهی (GMDH) و مدل حداقل مربعات ماشین بردار پشتیبان (LSSVM) بیانگر برتری مدل پیشنهادی بوده است.</p>
واژگان کلیدی: کشش سطحی، مایعات یونی، مدل سازی، شبکه عصبی، جرم مولکولی، دما.	

## ۱-مقدمه

علمی که به مطالعه پدیده های شیمیایی-فیزیکی در سطح مشترک بین دو فاز می پردازد، علم سطح نامیده می شود. در این علم، کشش سطحی (نیروی جاذبه بین مولکولی سیال در سطح بر واحد طول) که یک خاصیت ترموفیزیکی مهم و وابسته به ساختار مولکول ها، انرژی پتانسیل و برخوردهای بین مولکولی می باشد، از اهمیت ویژه ای برخوردار است. کشش سطحی در صنایع گوناگون از جمله شوینده های سنتزی، چسب و داروسازی کاربرد دارد [۱]. در کنار نقش موثر صنایع شیمیایی در زندگی روزمره انسان،

استفاده از حلال های شیمیایی اثرات زیان آوری بر پیکره محیط زیست یا سلامتی انسان ها وارد کرده است. لذا در ده های اخیر برای کاهش خطرات ناشی از این حلال ها، سعی شده است از مایعات یونی به عنوان حلال سبز استفاده شود. مایعات یونی به علت دارا بودن فشار بخار ناچیز می توانند جایگزین مناسبی برای حلال های معمول مورد استفاده در صنایع گوناگون باشند. از سویی دیگر، پیش بینی کشش سطحی مایعات یونی در طراحی تجهیزات شیمیایی از جمله فرآیندهای جداسازی شامل عملیات انتقال جرم همچون تقطیر، استخراج، جذب و واکنش های شیمیایی از

\* پست الکترونیک نویسنده مسئول: m.lashkarbolooki@nit.ac.ir

استادیار، دانشکده مهندسی شیمی، آزمایشگاه ازدیادبرداشت نفت و فرآوری گاز، دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل، بابل، ایران

ضروری است. اگرچه تلاش های گسترده برای یافتن تابعیت کشتش سطحی مایعات یونی و پیش بینی آن در درجه حرارت مختلف انجام شده است، اما هیچ یک از آنها دارای کاربرد صریح و آسان و به اندازه کافی دقیق نیستند. بنابراین، انتخاب مدل که قادر باشد در عین سادگی ساختار و با استفاده از حداقل پارامترهای ورودی کشتش بین سطحی مایعات یونی را با دقت پیش بینی کند، امری ضروری است. لذا در این پژوهش کشتش سطحی مایع یونی بر پایه ای ایمیدازولیوم با استفاده از دو مدل شبکه عصبی و فقط با سه پارامتر ورودی در دسترس شامل جرم های مولکولی بخش آنیونی و کاتیونی و دما مورد بررسی قرار گرفته است. علاوه بر این، نقش آنیون و کاتیون مایعات یونی بر کشتش سطحی مورد بحث قرار می گیرد و در انتها، دقت بهترین مدل بدست آمده از این پژوهش با مدل های قانون حالات متناظر، پاراچور، الگوریتم مدیریت داده ها به روش گروهی (GMDH<sup>۲</sup>) و مدل حداقل مربعات ماشین بردار پشتیبان (LSSVM<sup>۳</sup>) مقایسه می شود.

## ۲- پیش بینی کشتش سطحی مایعات یونی

### ۲-۱- جمع آوری داده های آزمایشگاهی

برای بررسی دقت مدل پیشنهادی، کشتش سطحی ۴۰ مایع یونی برپایه ای ایمیدازولیوم (تشکیل شده از گروه های آنیونی لیست شده در جدول ۱ و گروه های کاتیونی لیست شده در جدول ۲) در فشار اتمسفری و دماهای مختلف از مقالات مختلف گردآوری شده است [۱۷-۳۶]. در مجموع ۱۲۵۱ داده کشتش سطحی در محدوده دمایی ۲۶۳/۶ الی ۵۳۳/۲ کلین گردآوری شد. در پیوست (جدول پ ۱) مشخصات مایعات یونی مورد استفاده در این پژوهش آورده شده است.

به طور کلی، برای ایجاد یک شبکه مناسب داده های آزمایشگاهی به دو دسته داده های آموزش و داده های تست تقسیم می شوند [۱۵]. در این پژوهش، ۷۰ درصد داده ها به صورت تصادفی به عنوان داده های آموزش انتخاب شده اند و ۳۰ درصد مابقی به عنوان داده های ارزیابی و آزمون مورد استفاده قرار گرفته اند.

### ۲-۲- ساختار شبکه عصبی پیشنهادی

ایده ای اصلی ایجاد شبکه عصبی مصنوعی تا حدودی

اهمیت ویژه ای برخوردار می باشد [۲]. برای پیش بینی کشتش سطحی، روش های گوناگونی از جمله روابط تجربی [۳]، مدل پاراچور [۴]، تئوری گرادیان دانسیته [۵]، شبیه سازی دینامیک مولکولی [۶]، قانون حالات متناظر [۷]، الگوریتم مدیریت داده ها به روش گروهی (GMDH) [۸]، مدل های بر پایه سهم گروه های متناظر [۹] استفاده شده است. برای نمونه، وو<sup>۱</sup> و همکاران [۹] با روش سهم گروه های متناظر کشتش سطحی مایعات یونی در محدوده دمایی ۲۶۸/۲۹-۵۳۳/۲۰ کلین را با متوسط درصد خطای ۴/۹۵٪ پیش بینی کردند. موسی زاده و فرامرزی [۷] از روش های حالت های متناظر و با در نظر گرفتن نقطه ذوب به عنوان یک پارامتر ورودی کشتش سطحی مایعات یونی را پیش بینی کردند در حالیکه نقطه ذوب اکثر مایعات یونی اندازه گیری نشده و یا به آسانی در دسترس نمی باشند.

در سال های اخیر، پیشرفت تکنولوژی و دسترسی آسان به کامپیوترهای شخصی موجب شد تا ایده استفاده از شبکه عصبی مصنوعی برای شبیه سازی و پیش بینی خواص ترمودینامیکی به شدت افزایش یابد [۱۰]. در این مدلها سعی می شود با آموزش شبکه پردازشگر، به ویژگی های ذاتی میان متغیرها پی برده شود [۱۱]. به علت این ویژگی متمایز، از شبکه های عصبی مصنوعی به طور گسترده در حل مسائل مهندسی استفاده شده است [۱۲-۱۴].

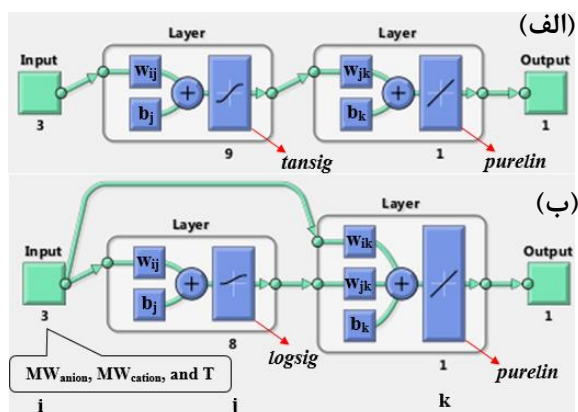
از آنجائیکه ارتباط مابین خواص فیزیکی و ترمودینامیکی سیستم های شامل مایعات یونی غیرخطی است لذا شبکه های عصبی مصنوعی جایگزین مناسبی برای مدل سازی خواص ترمودینامیکی فوق الذکر می باشد. مدل سازی بر اساس شبکه عصبی که حاوی یک الگوریتم موثر برای تخمین هر نوع تابعیت با تعداد محدود از داده های گسسته است، بر اساس یادگیری ارتباط مابین بردار ورودی و خروجی استوار می باشد [۱۵]. برای نمونه، آتسروز و همکاران [۱۶] برای پیش بینی کشتش سطحی مایعات یونی از شبکه عصبی مصنوعی استفاده کرده اند. عیب اصلی مدل آنها، تعداد زیاد متغیرهای ورودی شامل وزن مولکولی مایع یونی، ضریب تراکم پذیری بحرانی، فشار کاهش یافته، دمای کاهش یافته و ضریب بی مرکزی می باشد. اما، بهبود و پیشرفت در الگوریتم های ریاضی و تخمین دقیق این مقادیر، برای طراحی آسان فرآیندها، بسیار مطلوب و

<sup>3</sup> Least square support vector machine

<sup>1</sup> Wu

<sup>2</sup> Group method of data handling

سیستم بی نظیر، به ارتباط های فراوان موجود میان عناصر آن بر می گردد [۱۶]. در مدل شبکه عصبی مصنوعی یک ساختار ریاضی با یک سری پارامترها قابل تنظیم در نظر گرفته شده است. در این ساختار، پارامترها مدل توسط یک الگوریتم یادگیری تنظیم و بهینه می شوند تا بتواند رفتار مناسبی را از خود نشان دهد [۳۷]. یکی از پایه‌ای‌ترین ساختار پیشنهادی که عملکرد انتقالی مغز انسان را شبیه سازی می کند، مدل پرسپترون چند لایه<sup>۱</sup> می باشد. در این نوع شبکه عصبی، هر یک از سلول های عصبی موسوم به نرون<sup>۲</sup> پس از دریافت ورودی، پردازشی روی آن انجام می دهند و نتیجه را به یک سلول دیگر انتقال می دهند و تا حصول نتیجه ی مطلوب، این رفتار ادامه می یابد [۳۸]. به عبارت دیگر، هر شبکه عصبی مصنوعی با مشخصه هایی نظیر نحوه ارتباط بین نرون ها و تعیین وزن ها، روش آموزش شبکه و نوع تابع فعالیت هر نرون از شبکه های دیگر متمایز می شود [۱۱]. ساختار شبکه عصبی شامل تعداد لایه ها، تعداد نرون در هر لایه، نوع توابع انتقال (f) و الگوریتم آموزشی در پیش بینی هر خاصیت غیر خطی از اهمیت ویژه ای برخوردار است اما مهمترین عامل در انتخاب بهترین ساختار برای پیش بینی یک خاصیت ترموفیزیکی انتخاب ورودی های مناسب برای شبکه می باشد. ساختارهای شبکه عصبی مورد بررسی برای پیش بینی کشش سطحی مایعات یونی با ساختار پرسپترون چند لایه شامل شبکه عصبی پیشرو (FFANN<sup>۳</sup>) و شبکه عصبی آبخاری (CANN<sup>۴</sup>) به ترتیب در شکل ۱ الف و ب آورده شده است.



شکل ۱- توپولوژی و ساختار شبکه های پیشنهادی الف) شبکه FFANN و ب) CANN

الهام گرفته از مغز انسان و شیوه کارکرد سیستم عصبی مغز انسان برای پردازش داده ها و به منظور یادگیری و حل گستره وسیعی از مسائل علمی، مهندسی و کاربردی می باشد.

جدول ۱- جرم مولکولی و فرمول شیمیایی آنیون ها در مایعات یونی مورد بررسی

نام	فرمول شیمیایی	جرم مولکولی
dicyanamide	C <sub>2</sub> N <sub>3</sub>	۶۶
tris(pentafluoroethyl) trifluorophosphate	C <sub>6</sub> F <sub>18</sub> P	۴۴۵
trifluoromethanesulfonate	CF <sub>3</sub> O <sub>3</sub> S	۱۴۹
hexafluorophosphate	PF <sub>6</sub>	۱۴۵
tetrafluoroborate	BF <sub>4</sub>	۸۷
bis(trifluoromethylsulfonyl) imide	C <sub>2</sub> F <sub>6</sub> S <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	۲۸۰
iodide	I	۱۲۷
chloride	Cl	۳۴٫۷

جدول ۲- جرم مولکولی و فرمول شیمیایی کاتیون ها در مایعات یونی مورد بررسی

نام	فرمول شیمیایی	جرم مولکولی
1-ethyl-3-methylimidazolium	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> N <sub>2</sub>	۱۱۱
1-(2-aminoethyl)-3-methyl-1H-imidazolium	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> F <sub>6</sub> N <sub>3</sub> P	۱۲۶
1-propyl-3-methylimidazolium	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> N <sub>2</sub>	۱۲۵
3-(3-aminopropyl)-1-methyl-1H-imidazolium	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> N <sub>3</sub>	۱۴۰
1-butyl-3-methylimidazolium	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> N <sub>2</sub>	۱۳۹
1-methyl-3-pentyl-imidazolium	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> N <sub>2</sub>	۱۵۳
1-hexyl-3-methylimidazolium	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> N <sub>2</sub>	۱۶۷
1-heptyl-3-methylimidazolium	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> N <sub>2</sub>	۱۸۱
1-octyl-3-methylimidazolium	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> N <sub>2</sub>	۱۹۵
1-nonyl-3-methylimidazolium	C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> N <sub>2</sub>	۲۰۹
1-decyl-3-methylimidazolium	C <sub>14</sub> H <sub>27</sub> N <sub>2</sub>	۲۲۳

در راستای شبیه سازی رفتار محاسباتی مغز انسان، امکان پیاده سازی الگوریتم های محاسباتی توسط کامپیوترها با ایجاد یک ساختار ریاضی فراهم شده است. پیچیدگی این

<sup>۳</sup> Feed-forward artificial neural network

<sup>۴</sup> Cascade artificial neural network

<sup>۱</sup> Multi-layer perceptron

<sup>۲</sup> Neuron

به علت سرعت بالای همگرایی الگوریتم لوبنرگ-مارکوارت، از این الگوریتم آموزشی برای بهینه سازی وزن های سیناپسی و بایاس ها استفاده شده است. این الگوریتم از نوع آموزش همراه با نظارت و پس انتشار می باشد به طوری که وزن ها و بایاس های ارتباطی بین آنها بر اساس کاهش اختلاف میان خروجی شبکه (داده های پیش بینی شده) و خروجی مطلوب (داده های آزمایشگاهی) تنظیم می گردد.

### ۲-۳- آنالیز خطاها

برای بررسی دقت مدل، درصد خطای نسبی ( $RD\%$ )<sup>۴</sup>، درصد متوسط قدرمطلق خطاهای نسبی ( $AARD\%$ )<sup>۴</sup>، میانگین مربعات خطا ( $MSE$ )<sup>۵</sup> و ضریب همبستگی<sup>۶</sup> ( $R^2$ ) (به ترتیب روابط ۴-۷) محاسبه شد.  $RD\%$ ،  $AARD\%$  و  $MSE$  هرچه به صفر نزدیک تر باشد بیانگر دقت بالاتر مدل می باشد در حالیکه  $R^2$  بیان کننده میزان همبستگی بین نتایج کشش سطحی پیش بینی شده ( $\sigma^{cal}$ ) و داده های تجربی ( $\sigma^{exp}$ ) می باشد و هر چه این مقدار به عدد ۱ نزدیک تر باشد نشان دهنده نزدیکی بیشتر مقادیر پیش بینی شده به مقادیر تجربی است.

$$RD\% = \frac{(\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{cal}) \times 100}{\sigma_i^{exp}} \quad (۴)$$

$$AARD\% = \frac{100}{N} \sum_i \left( \left| \frac{(\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{cal})}{\sigma_i^{exp}} \right| \right) \quad (۵)$$

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_i (\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{cal})^2 \quad (۶)$$

$$R^2 = \frac{\sum_i^N (\sigma_i^{exp} - \bar{\sigma})^2 - \sum_i^N (\sigma_i^{exp} - \sigma_i^{cal})^2}{\sum_i^N (\sigma_i^{exp} - \bar{\sigma})^2} \quad (۷)$$

در روابط فوق،  $\bar{\sigma}$  کشش سطحی متوسط تجربی و  $N$  تعداد داده های تجربی می باشد.

### ۳- نتایج و بحث

در شکل (۲) خطاهای پیش بینی مدل (برای داده های تست) با بکارگیری توابع انتقال  $tansig$  و  $logsig$  در لایه میانی بر حسب تعداد نرون های لایه میانی برای دو شبکه مورد بررسی مقایسه شده است. همان طور که مشاهده می شود، اختلاف قابل توجهی در خطاهای مدل های مورد بررسی با توابع انتقال  $tansig$  و  $logsig$  مشاهده نمی شود. بنابراین،

همان طور که نشان داده شده است مجموعه ای از نرون های مصنوعی مرتبط با یکدیگر ساختار شبکه عصبی را تشکیل داده اند و هر دو شبکه مورد بررسی از نوع پیشرو بوده به طوری که ارتباط بین نرونها رو به جلو و بدون ارتباط بازگشتی می باشد. تنها تفاوت این دو شبکه ارتباط مابین ورودی های شبکه و لایه خارجی در شبکه CANN می باشد در حالیکه در FANN این ارتباط وجود ندارد. هر دو شبکه عصبی انتخابی دارای یک لایه ورودی (i)، یک لایه مخفی (j) و یک لایه خروجی (k) می باشد به طوری که لایه ورودی اطلاعات ورودی شبکه دریافت کرده و پس از انجام پردازش اطلاعات در لایه مخفی اطلاعات پردازش شده با داده های خروجی کشش سطحی تجربی مقایسه شده تا با بهینه سازی و تنظیم وزن های سیناپسی<sup>۱</sup> ( $W$ ) و بایاس ها<sup>۲</sup> (b)، کمترین خطا به دست آید. در مرحله آموزش با استفاده از داده های ورودی و خروجی، وزن ها و بایاس های ارتباطی بین آنها تنظیم می گردد و بدین طریق پایداری شبکه مورد ارزیابی قرار می گیرد. هر دو شبکه مورد بررسی دارای سه متغیر ورودی شامل جرم مولکولی بخش آنیون ( $MW_{anion}$ )، جرم مولکولی بخش کاتیون ( $MW_{cation}$ ) و دما (T) و یک متغیر خروجی (کشش سطحی مایعات یونی) تشکیل شده است. برای پیش بینی کشش سطحی در دمای مختلف، انتخاب دما به عنوان یکی از متغیرهای ورودی ضروری می باشد. در تعیین شبکه عصبی مطلوب، نوع توابع انتقال مطلوب نیز باید به صورت سعی و خطا تعیین گردند [۳۸]. توابع انتقال خطی ( $purelin$ )، سیگموئید تک قطبی ( $logsig$ ) و سیگموئید هایپربولیک تانژانتی ( $tansig$ ) که به ترتیب تابعیت آنها با ورودی X به صورت روابط زیر می باشد، به صورت گسترده مورد استفاده قرار گرفته اند.

$$f(x) = x \quad (۱)$$

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (۲)$$

$$f(x) = \frac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}} \quad (۳)$$

در این پژوهش، تابع انتقال خطی برای خروجی استفاده شده است و عملکرد به کارگیری دو تابع سیگموئیدی در لایه میانی با هم مقایسه شده است. لازم به ذکر است که

<sup>۴</sup> Total absolute average relative deviation

<sup>۵</sup> Mean square error

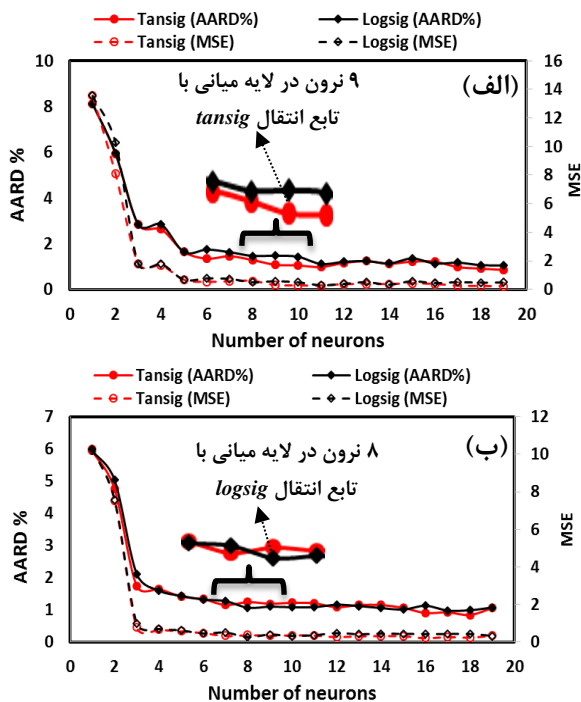
<sup>۶</sup> Relation coefficient

<sup>۱</sup> Weights

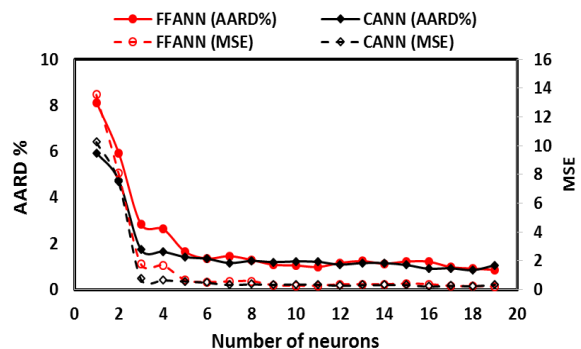
<sup>۲</sup> Biases

<sup>۳</sup> Relative deviation

در شکل (۴ الف و ب) آورده شده است. همانطور که مشاهده می شود، برای هر دو مدل تطابق بین مقادیر کشش سطحی آزمایشگاهی و پیش بینی شده قابل قبول می باشد.



شکل ۲- مقایسه خطاهای پیش بینی مدل با تابع انتقال *tansig* و *logsig* برای داده‌های تست بر حسب تعداد نرون های لایه میانی برای الف) شبکه FFANN و ب) شبکه CANN



شکل ۳- مقایسه خطاهای شبکه FFANN و CANN با تابع انتقال *tansig* برای داده های تست

فراوانی دقت داده ها نیز (شکل ۵) برای هر دو مدل در حد قابل قبول بوده و مدل ها توانسته اند بیشتر داده های آزمایشگاهی را در محدوده خطای  $\pm 2\%$  پیش بینی کنند. برای شبکه FFANN، AARD%، MSE و  $R^2$  برای داده های آموزش به ترتیب برابر است با ۰/۲۴، ۰/۹۸ و ۰/۹۹۶۶ و برای داده های تست برابر است با ۰/۲۹، ۱/۰۸

برای هر دو شبکه‌ی FFANN و CANN نوع تابع انتقال تاثیر زیادی بر دقت شبکه نداشته است. در حالیکه با افزایش تعداد نرون های لایه میانی، خطاهای پیش بینی مدل کاهش یافته است. بنابراین، افزایش تعداد نرون های لایه میانی به مراتب تاثیر بالاتری نسبت به نوع تابع انتقال داشته است. به طور کلی، قدرت عمده شبکه های عصبی از تعداد نرونها در لایه پنهان ناشی می شود. اگر تعداد نرون ها بیش از حد لزوم باشد ممکن است شبکه قدرت تعمیم خود را از دست دهد. به عبارتی اگر تعداد نرون های لایه میانی از حد لازم بیشتر باشد، این امکان وجود دارد که شبکه شروع به حفظ کردن داده ها کرده به طوری که دقت مدل در مرحله آموزش افزایش یافته ولی ممکن است مدل برای داده های آزمون ضعیف عمل نموده و قابلیت تعمیم پذیری نداشته باشد و یا دقت مدل برای داده های تست بدون تغییر باقی بماند. علاوه بر آن، ارتباط موجود بین ورودی ها و خروجی ها با تعداد نرون های لایه میانی کم به درستی فرا گرفته نمی شود [۳۸]. برای غلبه بر این نقص، تعداد نرون ها به نحوی انتخاب می شوند که با حداقل تعداد پارامترها (معادل با حداقل تعداد نرون ها) دقت پیش بینی داده های تست مینیمم و در حد قابل قبول بوده باشد. این نوع بهینه سازی تعداد نرون برای لایه میانی، رویکرد سازنده<sup>۱</sup> نامیده می شود [۳۷]. بنابراین، باتوجه به شکل (۲) الف برای شبکه FFANN، تعداد ۹ نرون در لایه میانی با تابع انتقال *tansig* به عنوان بهترین ساختار این شبکه تعیین شد. همان طور که مشاهده می شود خطای داده های تست این شبکه مینیمم و بهینه می باشد به طوری که با ادامه آموزش شبکه با تعداد نرون های بالاتر، دقت داده های تست بدون تغییر باقیمانده است. به طور مشابه، با توجه به شکل (۲) ب) برای شبکه CANN، تعداد ۸ نرون در لایه میانی با تابع انتقال *logsig* به عنوان بهترین ساختار این شبکه تعیین شد.

در شکل (۳) خطاهای شبکه FFANN و CANN با تابع انتقال *tansig* برای داده های تست بر حسب تعداد نرون در لایه میانی رسم شده است. همان طور که مشاهده می شود با افزایش تعداد نرون ها در لایه میانی تفاوت معنی داری در دقت دو مدل دیده نمی شود. دقت مدل های بهینه برای دو شبکه FFANN و CANN

<sup>1</sup> Constructive approach

مقایسه دقت دو مدل مورد بررسی نشان می‌دهد که مدل CANN با ۸ نرون در لایه میانی و با ۴۴ پارامتر قابل تنظیم از دقت بالاتری در مقایسه با مدل FFANN با ۹ نرون در لایه میانی و با ۴۶ پارامتر قابل تنظیم دارد. بنابراین، شبکه CANN با ۸ نرون در لایه میانی با تابع انتقال *logsig* با دقت نسبی بالاتر و با تعداد پارامترهای قابل تنظیم کمتر به عنوان شبکه بهینه انتخاب شده است.

همانطور که بیان شد در شبکه عصبی آبخاری ارتباط بین ورودی و خروجی از طریق پارامترهای قابل تنظیم شامل وزن سیناپسی ( $w$ )، بایاس ( $b$ ) و انتخاب نوع تابع فعالیت لایه پنهان ( $f^1$ ) و تابع فعالیت لایه خروجی ( $f^2$ ) صورت می‌گیرد. بنابراین با استفاده از وزن و بایاس های گزارش شده در جدول ۳ و توابع انتقال *logsig* و *pureline* (روابط ۱ و ۲) به ترتیب معادل  $f^1$  و  $f^2$  و بر اساس مورفولوژی شکل (۱ ب) و رابطه زیر می‌توان کشش سطحی ( $\sigma_i$ ) را محاسبه کرد.

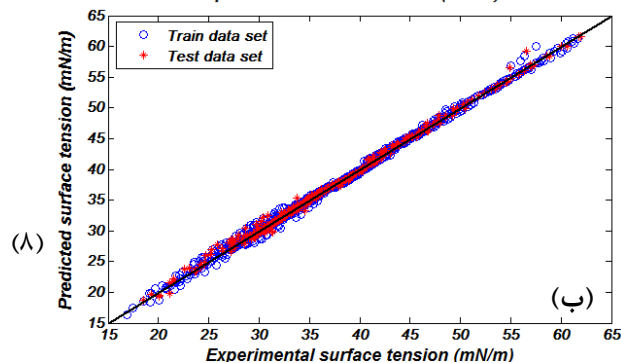
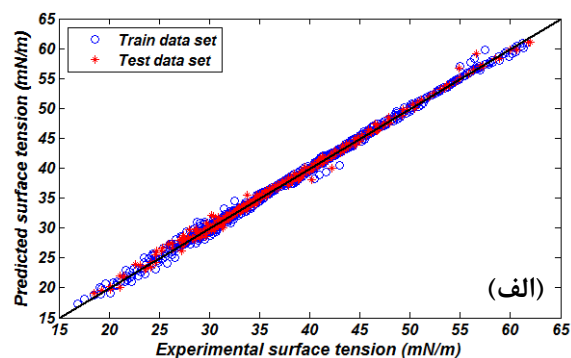
$$\sigma_i = f^2 \left( \sum_{j=1}^{m=8} \left( w_{jk} f^1 \left( \sum_{i=1}^{n=3} w_{ij} x_i + b_j \right) + b_k \right) \right)$$

که در آن  $x_i$  داده های ورودی،  $m$  تعداد نرون در لایه میانی و  $n$  تعداد ورودی های شبکه می باشند.

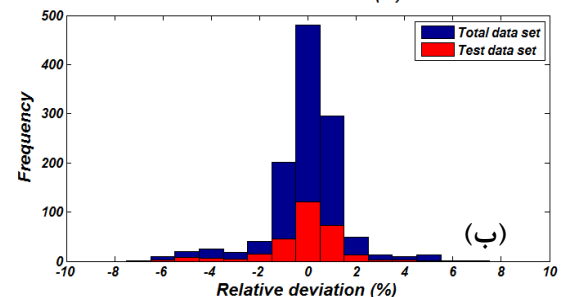
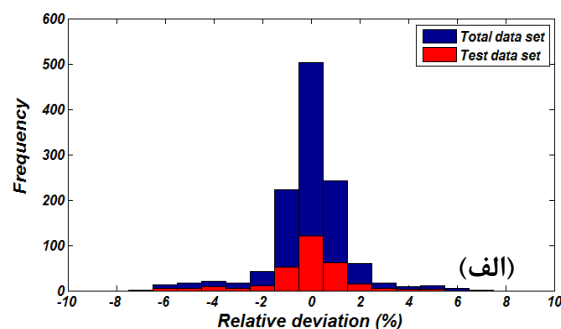
مقادیر تجربی نشان می دهد که هر دو گروه آنیون و کاتیون مایع یونی بر روی کشش سطحی تأثیر می گذارند [۳۹]. برای خانواده ایمیدازولیوم افزایش در طول زنجیره آلکیل کاتیونی باعث کاهش مقادیر کشش سطحی می شود. برای نمونه، ارزیابی دقت مدل برای پیش بینی کشش سطحی مایعات یونی با آنیون یکسان  $BF_4$  و کاتیون های مختلف در شکل (۶) آورده شده است. به طور کلی، افزایش دما و بی‌نظمی منجر به تضعیف نیروهای بین مولکولی در سطح مشترک شده و در نتیجه کشش سطحی مواد کاهش می‌یابد. همان طور که مشاهده می شود کشش سطحی مایع یونی مانند ترکیبات آلی با افزایش دما به صورت خطی کاهش می یابد و مدل پیشنهادی با دقت بالا این وابستگی را پیش بینی می کند.

علاوه بر این مشاهده می‌شود برای مایعات یونی دارای گروه آنیون یکسان با افزایش گروه متیلن ( $CH_2$ ) و زنجیره کربنی بخش کاتیونی (معادل با افزایش جرم مولکولی بخش کاتیونی) کشش سطحی کاهش می یابد. این موضوع بیانگر

و ۰/۹۹۶۱ در حالیکه این خطاها برای شبکه CANN برای داده های آموزش به ترتیب برابر است با ۰/۹۸، ۰/۲۳ و ۰/۹۹۶۸ برای داده های تست برابر است با ۱/۰۷، ۰/۲۷ و ۰/۹۹۶۴. آنالیز خطای داده های تست هر دو مدل نشان دهنده شبیه سازی مناسب و قابل قبول هر دو مدل می‌باشد.



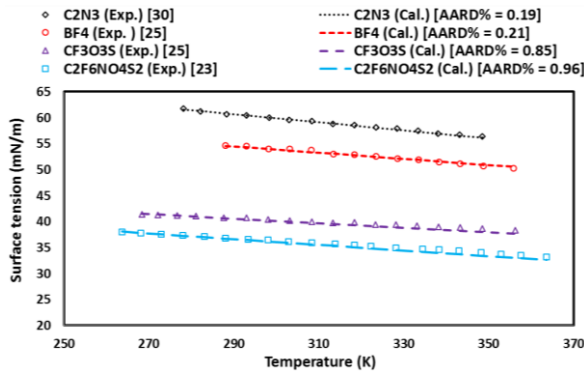
شکل ۴- ارزیابی صحت بهترین مدل های بدست آمده (الف) شبکه FFANN با ۹ نرون در لایه میانی و (ب) شبکه CANN با ۸ نرون در لایه میانی



شکل ۵- نمودار فراوانی بر حسب درصد انحراف نسبی برای (الف) مدل بهینه FFANN و (ب) مدل بهینه CANN



می‌شود که با افزایش جرم مولکولی گروه آنیونی مقادیر کشش سطحی کاهش می‌یابد. این موضوع نیز بیانگر رابطه بین کشش سطحی و جرم مولکولی بخش آنیونی مایع یونی می‌باشد. این وابستگی نیز توسط مدل پیشنهادی به خوبی پیش بینی می‌شود و موید انتخاب درست متغیرهای ورودی به شبکه می‌باشد.

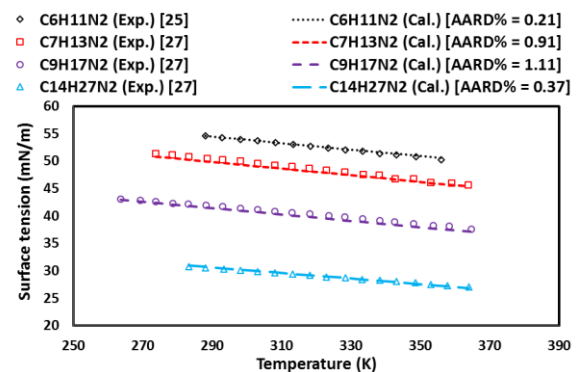


شکل ۷- ارزیابی دقت مدل برای پیش بینی کشش سطحی مایعات یونی با کاتیون یکسان  $C_6H_{11}N_2$  و آنیون های مختلف ۱-۳- مقایسه دقت مدل پیشنهادی با مدل های موجود پس از ارزیابی دقت مدل و ساختار پیشنهادی با داده های تست و انتخاب مدل برتر، دقت مدل پیشنهادی با مدل های موجود برای پیش بینی کشش سطحی چند مایع یونی مقایسه شده است. در جدول ۴ دقت مدل پیشنهادی در پیش بینی کشش سطحی مایعات یونی با مدل های قانون حالات متناظر، پاراچور، الگوریتم مدیریت داده ها به روش گروهی (GMDH) و مدل حداقل مربعات ماشین بردار پشتیبان (LSSVM) مقایسه شده است. از بین چهار مدل موجود دقت مدل های GMDH و LSSVM از مدل های قانون حالات متناظر و پاراچور بالاتر بوده است.

برای تمامی مایعات یونی لیست شده در جدول ۴، دقت مدل CANN پیشنهادی از قانون حالات متناظر، پاراچور و GMDH بالاتر است. مقایسه دقت مدل CANN و LSSVM نشان می‌دهد که هر دو مدل با دقت قابل قبول می‌توانند کشش سطحی مایعات یونی را پیش بینی کنند. اما باید به این نکته توجه کرد که برای پیش بینی کشش سطحی مایع یونی با روش GMDH علاوه بر دانسیته، ضریب بی مرکزی، دما و دمای جوش مایع یونی، نیاز به خواص بحرانی نظیر دمای بحرانی، فشار بحرانی و ضریب تراکم پذیری بحرانی می‌باشد [۸]. برای روش LSSVM

رابطه بین کشش سطحی و جرم مولکولی بخش کاتیونی مایع یونی می‌باشد و مدل پیشنهادی این وابستگی را به خوبی پیش بینی می‌کند.

به طور کلی، افزایش تعامل و برخورد بین نیروهای بین مولکولی موجب افزایش کشش سطحی می‌شود. به علت افزایش نیروهای بین مولکولی با اندازه مولکول ها، کشش سطحی اکثر ترکیبات آلی با افزایش اندازه (معادل با افزایش جرم مولکولی) افزایش می‌یابد اما مایعات یونی از این روند تبعیت نمی‌کنند [۳۹]. مایعات یونی مولکول های پیچیده‌ای هستند که در تعامل بین مولکول های آن نیروهای کولمبیک<sup>۱</sup>، پیوندهای هیدروژنی و نیروهای ون دروالس<sup>۲</sup> تاثیرگذار می‌باشند اما پیوندهای هیدروژنی مهمترین نیرو در مایعات یونی به شمار می‌آید [۴۰]. اگر چه با افزایش جرم مولکولی بخش کاتیونی مایع یونی منجر به افزایش نیروهای ون دروالس می‌شود، اما باعث پراکندگی شارژ یون و کاهش استحکام پیوند هیدروژنی می‌گردد و سبب می‌گردد کشش سطحی با افزایش سایز مولکول کاهش یابد. به بیان دیگر، با افزایش طول زنجیره‌ی آلکیلی و کاهش استحکام پیوند هیدروژنی و نیروهای بین مولکولی در مایعات یونی، تمایل به جذب سطحی شدن افزایش و کشش سطحی کاهش می‌یابد [۴۱].



شکل ۶- ارزیابی دقت مدل برای پیش بینی کشش سطحی مایعات یونی با آنیون یکسان  $BF_4$  و کاتیون های مختلف

نتایج آزمایشگاهی نشان می‌دهد که ماهیت پراکندگی شارژ آنیونی مایع یونی با افزایش اندازه آنیون افزایش می‌یابد. در نتیجه با کاهش پیوند هیدروژنی ناشی از پراکندگی شارژ آنیونی، کشش سطحی کاهش می‌یابد [۴۱]. برای نمونه از مقایسه بین مایعات یونی گوناگون با گروه کاتیونی یکسان  $C_6H_{11}N_2$  و با گروه های آنیونی متفاوت (شکل ۷) مشاهده

<sup>2</sup> Van der Waals

<sup>1</sup> Coulombic

با مدل های GMDH و LSSVM احتیاج به استفاده از مدل های دیگر برای پیش بینی خواص بحرانی آنها می باشد که نقص بزرگی به حساب می آید. در صورتی که مدل پیشنهادی این پژوهش علاوه بر دما تنها نیازمند دو پارامتر در دسترس یعنی جرم های مولکولی بخش آنیونی و کاتیونی مایع یونی می باشد.

نیز علاوه بر وزن مولکولی و ضریب بی مرکزی مایع یونی، داده های بحرانی فوق الذکر باید در دسترس باشد [۱۶]. اما بسیاری از مایعات یونی قبل از رسیدن به حالت بحرانی خود تجزیه می شوند. بنابراین اندازه گیری آزمایشگاهی ویژگی های بحرانی بسیاری از مایعات یونی امکان پذیر نمی باشد. لذا برای پیش بینی کشتش سطحی این گونه مواد

جدول ۳- وزن ها و بایاس های بهینه برای مدل برگزیده (مدل CANN با ۸ نرون در لایه میانی)

بایاس ها		وزن ها			
b <sub>k</sub>	b <sub>j</sub>	W <sub>jk</sub>	W <sub>ij</sub>		
			دما	جرم مولکولی کاتیون	جرم مولکولی آنیون
۱۲/۴۷۱	۲۵/۳۰۲	۶۱/۸۶۸	۰/۰۰۱	۰/۰۳۰	-۰/۱۹۸
	۱/۲۹۹	-۵۹/۲۲	۰/۰۰۱	۰/۰۳۶	-۰/۰۴۱
	۱۴۱/۵۲۳	۱۵/۳۳۴	-۰/۰۰۶	-۰/۰۸۳	-۰/۷۱۲
	-۱/۱۷۰	۲/۳۰۰	-۰/۱۱۰	۲/۰۴۳	-۰/۹۹۴
	۵۹/۰۱۶	-۱۱/۵۲۷	۰/۰۰۰	-۰/۲۴۵	۰/۰۳۷
	-۹۱/۶۳۹	-۵/۰۸۵	۰/۰۰۴	۰/۰۹۱	۰/۸۹۴
	۱۷/۲۶۳	۷۹۶/۴۸۷	۰/۰۰۱	-۰/۰۷۶	۰/۰۵۳
	۱۲/۴۷۱	-۳۵۷/۴۲	۱/۳۰۲	-۰/۰۶۱	-۰/۰۸۱
			-۰/۰۵۴*	-۰/۱۰۴*	-۰/۰۰۷*

\* W<sub>ik</sub>

جدول ۴- مقایسه درصد متوسط قدرمطلق خطاهای نسبی (AARD%) مدل پیشنهادی با مدل های موجود

این پژوهش	مدل های از قبل ارائه شده					مایع یونی
	منابع	LSSVM	GMDH	پاراچور	قانون حالات متناظر	
۰/۹۶	[۴۳, ۴۲, ۱۸]	۱/۴۹	۲/۷۳	۹/۲۲	۱۴/۷۱	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> F <sub>6</sub> S <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
۲/۹۱	[۴۳, ۱۸]	۳/۷۶	۲/۹۸	۵/۶۴	۱۳/۴۶	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> F <sub>6</sub> S <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
۲/۶۴	[۴۲, ۱۸]	۲/۵۱	۳/۱۹	۵/۷۲	۲۵/۷۶	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> F <sub>6</sub> S <sub>2</sub> O <sub>4</sub>
۰/۱۷	[۳۱]	۰/۰۹	۱/۲۱	۱۰/۵۸	۲۰/۴۶	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> ClN <sub>2</sub>
۰/۸۱	[۲۵]	۰/۱۰	۴/۷۸	۴/۶۲	۱۰/۸۹	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> F <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S
۰/۸۲	[۲۵]	۰/۱۳	۸/۳۷	۴/۲۱	۵/۵۳	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> F <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S
۰/۰۰	[۴۴, ۲۵]	۰/۲۵	۲/۷۰	۲۰/۲	۲۴/۷۹	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>
۰/۲۲	[۴۵]	۰/۲۶	۳/۹۹	۱۳/۳۶	۲۲/۶۳	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>
۱/۲۲	[۴۵]	۰/۶۴	۳/۳۹	۳/۴۶	۱۶/۰۵	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>
۰/۲۳	[۴۶, ۲۵]	۱/۰۶	۲/۸۲	۲۲/۰۷	۱۲/۴۳	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>
۲/۲۳	[۲۲]	۲/۱۴	۵/۰۵	۱۷/۳۱	۱۰/۴۱	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>
۰/۵۸	[۴۷]	۰/۴۸	۵/۵۶	۱۱/۷۲	۹/۶۷	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> F <sub>6</sub> N <sub>2</sub> P
۰/۲۵	[۳۱]	۰/۲۲	۵/۱۵	۱۶/۸۲	۸/۷۳	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> F <sub>6</sub> N <sub>2</sub> P

عصبی آبخاری (CANN) با یک لایه میانی برای پیش بینی کشتش سطحی مایعات یونی بر پایه ایمیدازولیوم پیشنهاد شده است. برای انتخاب ساختار مناسب شبکه، عملکرد

#### ۴- نتیجه گیری

در این مقاله دو مدل بر اساس شبکه عصبی مصنوعی به نام های شبکه عصبی مصنوعی پیشرو (FFANN) و شبکه



یونی مورد بررسی، دقت مدل CANN پیشنهادی از قانون حالات متناظر، پاراچور و GMDH بالاتر بوده است در حالیکه مقایسه مدل CANN و LSSVM نشان داد که هر دو مدل با دقت قابل قبول می توانند کشش سطحی مایعات را پیش بینی کنند. با وجود این، شبکه پیشنهادی نه تنها دارای ساختار ساده تر و تعداد پارامترهای ورودی کمتر می باشد بلکه عدم نیاز به دما و فشار بحرانی که برای بسیاری از مایعات یونی در دسترس نمی باشد از مزایای روش پیشنهادی نسبت به روش LSSVM می باشد. به طور خلاصه، با توجه به دقت و سادگی ساختار شبکه پیشنهاد شده، استفاده از این روش به عنوان ابزار قدرتمند برای پیش بینی کشش سطحی مایعات یونی پیشنهاد می شود.

#### تقدیر و تشکر

این تحقیق با استفاده از گرنت اعطایی دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل با شماره ۳۹۳۰۵۵/۹۷/BNUT انجام شده است. علاوه بر آن، بدین وسیله به پاس زحمات مهندس علیرضا عزتی در گردآوری داده های تجربی، از ایشان تقدیر می شود.

توابع انتقال سیگموئید تک قطبی (*logsig*) و سیگموئید هایپربولیک تانژانتی (*tansig*) در لایه میانی مورد بررسی قرار گرفته است در حالیکه از الگوریتم آموزشی لوبنرگ-مارکوارت با پارامتر ورودی یکسان و تابع انتقال خطی (*purelin*) برای لایه خروجی استفاده شده بود. نتایج بیانگر آن بوده است که نوع تابع انتقال تاثیر زیادی بر دقت شبکه ندارد در حالیکه تعداد نرون های لایه میانی به مراتب تاثیر بالاتری در دقت مدل داشته است.

با بهینه سازی تعداد نرون برای لایه میانی و مقایسه دقت دو ساختار، شبکه CANN با ۸ نرون با تابع انتقال *logsig* با دقت نسبی بالاتر ( $AARD\% = 1/07$ ) و با تعداد پارامترهای قابل تنظیم کمتر به عنوان شبکه بهینه انتخاب شد. نتایج نشان داد که با افزایش دما و جرم مولکولی بخش آنیونی و کاتیونی مایع یونی، کشش سطحی مایعات یونی کاهش می یابد و شبکه پیشنهادی با سه پارامتر ورودی شامل دما و جرم مولکولی بخش آنیونی و کاتیونی می تواند این رفتار را با دقت بالا پیش بینی کند.

علاوه بر آن، دقت مدل بهینه از این پژوهش با مدل های قانون حالات متناظر، پاراچور، الگوریتم مدیریت داده ها به روش گروهی (GMDH) و مدل حداقل مربعات ماشین بردار پشتیبان (LSSVM) مقایسه شد. برای تمامی مایعات

#### مراجع

- [1] H.Y. Erbil, Solid and liquid interfaces, Blackwell Publishing, Oxford, 2006.
- [2] M. Lashkarbolooki, "Artificial neural network modeling for prediction of binary surface tension containing ionic liquid", Separation Science and Technology, Vol. 52, No. 8, 2017, pp. 1454-1467.
- [3] S. Sastri and K. Rao, "A simple method to predict surface tension of organic liquids", The Chemical Engineering Journal and the Biochemical Engineering Journal, Vol. 59, No. 2, 1995, pp. 181-186.
- [4] T.A. Knotts, W.V. Wilding, J.L. Oscarson and R.L. Rowley, "Use of the DIPPR database for development of QSPR correlations: Surface tension", Journal of Chemical & Engineering Data, Vol. 46, No. 5, 2001, pp. 1007-1012.
- [5] J.W. Cahn and J.E. Hilliard, "Free energy of a nonuniform system. I. Interfacial free energy", The Journal of chemical physics, Vol. 28, No. 2, 1958, pp. 258-267.
- [6] C. Miqueu, J.M. Míguez, M.M. Pineiro, T. Lafitte and B. Mendiboure, "Simultaneous application of the gradient theory and Monte Carlo molecular simulation for the investigation of methane/water interfacial properties", The Journal of Physical Chemistry B, Vol. 115, No. 31, 2011, pp. 9618-9625.
- [7] M. Mousazadeh and E. Faramarzi, "Corresponding states theory for the prediction of surface tension of ionic liquids", Ionics, Vol. 17, No. 3, 2011, pp. 217-222.
- [8] S. Atashrouz, E. Amini and G. Pazuki, "Modeling of surface tension for ionic liquids using group method of data handling", Ionics, Vol. 21, No. 6, 2015, pp. 1595-1603.
- [9] K.-J. Wu, C.-X. Zhao and C.-H. He, "A simple corresponding-states group-contribution method for estimating surface tension of ionic liquids", Fluid Phase Equilibria, Vol. 328, 2012, pp. 42-48.

[۱۰] حسین قنادزاده گیلانی، الهیار داغبندان، محمد اکبری زاده و میثم آزادیان، "مدل سازی سیستم های تعادلی بخار- مایع و مایع - مایع با استفاده از مدل های ترمودینامیکی، ساختارهای فازی و شبکه های عصبی نوع GMDH"، مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۶، شماره ۵۵، زمستان ۱۳۹۷، صفحه ۲-۲.

[۱۱] علی حیدری، داوود توکلی و پویان فخاریان "تقریب مقادیر ویژه ورق با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی"، مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۱، شماره ۳۵، زمستان ۱۳۹۲، صفحه ۴۹-۶۲.

[۱۲] مرضیه حسن آبادی، عبدالحسین حداد و حسین نادریور، "استفاده از شبکه های عصبی مصنوعی در تخمین ظرفیت باربری شالوده های سطحی واقع بر بسترهای چند لایه چسبنده"، مدل سازی در مهندسی، دوره ۹، شماره ۲۴، بهار ۱۳۹۰، صفحه ۶۵-۸۳.

[۱۳] علیرضا مرتضایی و علی خیرالدین، "مدل سازی و تخمین طول مفصل پلاستیک ستون های بتن آرمه به کمک شبکه های عصبی مصنوعی"، مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۰، شماره ۲۹، تابستان ۱۳۹۱، صفحه ۱-۱۷.

[۱۴] عیسی خواجه‌وندی، نیما امجدی و محمد حسین ولایتی، "پیش‌بینی وضعیت بهره‌برداری سیستم قدرت با در نظر گرفتن حد راکتیو ژنراتورها و حد دینامیکی پایداری ولتاژ با استفاده از شبکه عصبی"، مدل سازی در مهندسی، دوره ۱۵، شماره ۵۱، زمستان ۱۳۹۶، صفحه ۳۴۱-۳۵۰.

[15] M. Lashkarbolooki and M. Bayat, "Prediction of surface tension of liquid normal alkanes, 1-alkenes and cycloalkane using neural network", Chemical Engineering Research and Design, Vol. 137, 2018, pp. 154-163.

[16] S. Atashrouz, H. Mirshekar and A. Mohaddespour, "A robust modeling approach to predict the surface tension of ionic liquids", Journal of Molecular Liquids, Vol. 236, 2017, pp. 344-357.

[17] M. Součková, J. Klomfar and J. Pátek, "Surface tension and 0.1 MPa densities of imidazolium-, pyridinium-, pyrrolidinium-, and piperidinium-based tris (pentafluoroethyl) trifluorophosphate ionic liquids", Fluid Phase Equilibria, Vol. 333, 2012, pp. 38-46.

[18] M. Tariq, A.P. Serro, J.L. Mata, B. Saramago, J.M. Esperança, J.N.C. Lopes and L.P.N. Rebelo, "High-temperature surface tension and density measurements of 1-alkyl-3-methylimidazolium bistriflamide ionic liquids", Fluid Phase Equilibria, Vol. 294, No. 1-2, 2010, pp. ۱۳۱-۱۳۸.

[19] J. Klomfar, M. Součková and J. Pátek, "Surface tension measurements with validated accuracy for four 1-alkyl-3-methylimidazolium based ionic liquids", The Journal of Chemical Thermodynamics, Vol. 42, No. 3, 2010, pp. 323-329.

[20] P.J. Carvalho, C.M. Neves and J.A. Coutinho, "Surface tensions of bis (trifluoromethylsulfonyl) imide anion-based ionic liquids", Journal of Chemical & Engineering Data, Vol. 55, No. 9, 2010, pp. 3807-3812.

[21] P.J. Carvalho, M.G. Freire, I.M. Marrucho, A.J. Queimada and J.A. Coutinho, "Surface tensions for the 1-alkyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethylsulfonyl) imide ionic liquids", Vol. 53, No. 6, 2008, pp 1346-1350.

[22] M.H. Ghatee and A.R. Zolghadr, "Surface tension measurements of imidazolium-based ionic liquids at liquid-vapor equilibrium", Fluid Phase Equilibria, Vol. 263, No. 2, 2008, pp. 168-175.

[23] M. Součková, J. Klomfar and J. Pátek, "Temperature dependence of the surface tension and 0.1 MPa density for 1-C n-3-methylimidazolium tris (pentafluoroethyl) trifluorophosphate with n= 2, 4, and 6", The Journal of Chemical Thermodynamics, Vol. 48, 2012, pp. 267-275.

[24] H.F. Almeida, P.J. Carvalho, K.A. Kurnia, J.A. Lopes-da-Silva, J.A. Coutinho and M.G. Freire, "Surface tensions of ionic liquids: Non-regular trend along the number of cyano groups", Fluid phase equilibria, Vol. 409, 2016, pp. 458-465.

[25] M. Součková, J. Klomfar and J. Pátek, "Surface tension of 1-alkyl-3-methylimidazolium based ionic liquids with trifluoromethanesulfonate and tetrafluoroborate anion", Fluid Phase Equilibria, Vol. 303, No. 2, 2011, pp. 184-190.

[26] L.G. Sanchez, J.R. Espel, F. Onink, G.W. Meindersma and A.B.d. Haan, "Density, viscosity, and surface tension of synthesis grade imidazolium, pyridinium, and pyrrolidinium based room temperature ionic liquids", Journal of Chemical & Engineering Data, Vol. 54, No. 10, 2009, pp. 2803-2812.

- [27] M. Součková, J. Klomfar and J. Pátek, "Surface tension and 0.1 MPa density of 1-alkyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborates in a homologous series perspective", *The Journal of Chemical Thermodynamics*, Vol. 100, 2016, pp. 79-88.
- [28] M. Součková, J. Klomfar and J. Pátek, "Surface tension and 0.1 MPa density data for 1-C<sub>n</sub>-3-methylimidazolium iodides with n= 3, 4, and 6, validated using a parachor and group contribution model", *The Journal of Chemical Thermodynamics*, Vol. 83, 2015, pp. 52-60.
- [29] K.A. Kurnia, M.A. Mutalib, Z. Man and M.A. Bustam, "Density and Surface Tension of Ionic Liquids [H<sub>2</sub>N-C<sub>2</sub>mim][PF<sub>6</sub>] and [H<sub>2</sub>N-C<sub>3</sub>mim][PF<sub>6</sub>]", *Journal of Chemical & Engineering Data*, Vol. 57, No. 11, 2012, pp. 2923-2927.
- [30] J. Klomfar, M. Součková and J. Pátek, "Temperature dependence of the surface tension and density at 0.1 MPa for 1-ethyl- and 1-butyl-3-methylimidazolium dicyanamide", *Journal of Chemical & Engineering Data*, Vol. 56, No. 8, 2011, pp. 3454-3462.
- [31] J. Klomfar, M. Součková and J. Pátek, "Group contribution and parachor analysis of experimental data on densities and surface tension for six ionic liquids with the [PF<sub>6</sub>] anion", *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 385, 2015, pp. 62-71.
- [32] Q.-S. Liu, J. Tong, Z.-C. Tan, U. Welz-Biermann and J.-Z. Yang, "Density and surface tension of ionic liquid [C<sub>2</sub>mim][PF<sub>3</sub>(CF<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>)<sub>3</sub>] and prediction of properties [C<sub>n</sub>mim][PF<sub>3</sub>(CF<sub>2</sub>CF<sub>3</sub>)<sub>3</sub>] (n = 1,3,4,5,6)", *Journal of Chemical & Engineering Data*, Vol. 55, No. 7, 2010, pp. 2586-2589.
- [33] H.F. Almeida, A.R.R. Teles, J.A. Lopes-da-Silva, M.G. Freire and J.A. Coutinho, "Influence of the anion on the surface tension of 1-ethyl-3-methylimidazolium-based ionic liquids", *The Journal of Chemical Thermodynamics*, Vol. 54, 2012, pp. 49-54.
- [34] P. Kilaru, G.A. Baker and P. Scovazzo, "Density and surface tension measurements of imidazolium-, quaternary phosphonium-, and ammonium-based room-temperature ionic liquids: data and correlations", *Journal of Chemical & Engineering Data*, Vol. 52, No. 6, 2007, pp. 2306-2314.
- [35] M.G. Freire, P.J. Carvalho, A.M. Fernandes, I.M. Marrucho, A.J. Queimada and J.A. Coutinho, "Surface tensions of imidazolium based ionic liquids: Anion, cation, temperature and water effect", *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 314, No. 2, 2007, pp. 621-630.
- [36] J. Klomfar, M. Součková and J. Pátek, "Surface tension measurements for four 1-alkyl-3-methylimidazolium-based ionic liquids with hexafluorophosphate anion", *Journal of Chemical & Engineering Data*, Vol. 54, No. 4, 2009, pp. 1389-1394.
- [37] M. Lashkarbolooki, B. Vaferi and D. Mowla, "Using artificial neural network to predict the pressure drop in a rotating packed bed", *Separation Science and Technology*, Vol. 47, No. 16, 2012, pp. 2450-2459.
- [38] M. Lashkarbolooki, A.Z. Hezave and S. Ayatollahi, "Artificial neural network as an applicable tool to predict the binary heat capacity of mixtures containing ionic liquids", *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 324, No. 2012, pp. 102-107.
- [39] M.G. Freire, P.J. Carvalho, A.M. Fernandes, I.M. Marrucho, A.J. Queimada and J.A. Coutinho, "Surface tensions of imidazolium based ionic liquids: Anion, cation, temperature and water effect", *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 314, No. 2, 2007, pp. 621-630.
- [40] M.G. Freire, P.J. Carvalho, A.M. Fernandes, I.M. Marrucho, A.J. Queimada and J.A. Coutinho, "Surface tensions of imidazolium based ionic liquids: Anion, cation, temperature and water effect", *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 314, No. 2, 2007, pp. 621-630.
- [41] M. Deetlefs, C. Hardacre, M. Nieuwenhuyzen, A.A. Padua, O. Sheppard and A.K. Soper, "Liquid structure of the ionic liquid 1, 3-dimethylimidazolium bis ((trifluoromethyl) sulfonyl) amide", *The Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 110, No. 24, 2006, pp. 12055-12061.
- [42] A. Wandschneider, J.K. Lehmann and A. Heintz, "Surface tension and density of pure ionic liquids and some binary mixtures with 1-propanol and 1-butanol", *Journal of Chemical & Engineering Data*, Vol. 53, No. 2, 2008, pp. 596-599.
- [43] P.J. Carvalho, M.G. Freire, I.M. Marrucho, A.J. Queimada and J.A. Coutinho, "Surface tensions for the 1-alkyl-3-methylimidazolium bis (trifluoromethylsulfonyl) imide ionic liquids", *J. Chem. Eng. Data* Vol. 53, No. 6, 2008, pp. 1346-1350.

[44] M. Shamsipur, A.A.M. Beigi, M. Teymouri, S.M. Pourmortazavi and M. Irandoust, "Physical and electrochemical properties of ionic liquids 1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate, 1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate and 1-butyl-1-methylpyrrolidinium bis (trifluoromethylsulfonyl) imide", *Journal of Molecular Liquids*, Vol. 157, No. 1, 2010, pp. 43-50.

[45] W.-G. Xu, L. Li, X.-X. Ma, J. Wei, W.-B. Duan, W. Guan and J.-Z. Yang, "Density, surface tension, and refractive index of ionic liquids homologue of 1-alkyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate [C<sub>n</sub>mim][BF<sub>4</sub>](n= 2, 3, 4, 5, 6)", *Journal of Chemical & Engineering Data*, Vol. 57, No. 8, 2012, pp. 2177-2184.

[46] A. Muhammad, M.A. Mutalib, C. Wilfred, T. Murugesan and A. Shafeeq, "Thermophysical properties of 1-hexyl-3-methyl imidazolium based ionic liquids with tetrafluoroborate, hexafluorophosphate and bis (trifluoromethylsulfonyl) imide anions", *The Journal of Chemical Thermodynamics*, Vol. 40, No. 9, 2008, pp. 1433-1438.

[47] A.B. Pereiro, P. Verdía, E. Tojo and A. Rodríguez, "Physical properties of 1-butyl-3-methylimidazolium methyl sulfate as a function of temperature", *Journal of Chemical & Engineering Data*, Vol. 52, No. 2, 2007, pp. 377-380.

جدول پ ۱- مشخصات مایعات یونی مورد استفاده در این پژوهش

جرم مولکولی	بازه دمایی	فرمول شیمیایی	مخفف	نام کامل مایع یونی
۳۹۱/۳	-۵۳۲/۲ ۲۶۳/۶۱	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>3</sub> F <sub>6</sub> S <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	[EMIM] [BTI]	1-ethyl-3-methylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide
۴۰۵/۳	-۴۷۵/۷ ۲۹۳/۱۵	C <sub>9</sub> H <sub>13</sub> N <sub>3</sub> F <sub>6</sub> S <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	[PRMIM] [BTI]	1-methyl-3-propylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide
۴۱۹/۴	-۴۷۵/۲ ۲۸۴/۱	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>3</sub> F <sub>6</sub> S <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	[BMIM] [BTI]	1-butyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide
۴۳۳/۴	-۵۱۲/۹ ۲۹۳/۱۵	C <sub>11</sub> H <sub>17</sub> N <sub>3</sub> F <sub>6</sub> S <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	[PMIM] [BTI]	1-methyl-3-pentylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)imide
۴۴۷/۴	-۵۳۲/۴ ۲۸۳/۱۷	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> N <sub>3</sub> F <sub>6</sub> S <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	[HMIM] [BTI]	1-hexyl-3-methylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide
۴۷۵/۵	-۵۱۲/۶ ۲۹۳/۱۵	C <sub>14</sub> H <sub>23</sub> N <sub>3</sub> F <sub>6</sub> S <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	[C <sub>8</sub> MIM] [BTI]	1-octyl-3-methylimidazolium bis[(trifluoromethyl)sulfonyl]imide
۵۰۳/۵	-۵۳۳/۲ ۲۹۳/۱۵	C <sub>16</sub> H <sub>27</sub> N <sub>3</sub> F <sub>6</sub> S <sub>2</sub> O <sub>4</sub>	[C <sub>10</sub> MIM] [BTI]	1-decyl-3-methylimidazolium bis(trifluoromethylsulfonyl)amide
۱۹۸/۰	-۳۵۵/۹۹ ۲۸۸/۰۶	C <sub>6</sub> H <sub>11</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	[EMIM] [BF <sub>4</sub> ]	1-ethyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate
۲۱۲/۰	-۳۶۳/۸ ۲۷۳/۷۹	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	[PRMIM] [BF <sub>4</sub> ]	1-propyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate
۲۲۶/۰	-۳۵۱/۲۳ ۲۸۴/۱۷	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	[BMIM] [BF <sub>4</sub> ]	1-butyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate
۲۴۰/۰	-۳۶۴/۶ ۲۶۳/۶۴	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	[PMIM] [BF <sub>4</sub> ]	1-methyl-3-pentyl-imidazolium tetrafluoroborate
۲۵۴/۱	-۳۵۶/۱۷ ۲۶۸/۵۸	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	[HMIM] [BF <sub>4</sub> ]	1-hexyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate
۲۶۸/۱	-۳۶۴/۳۴ ۲۶۳/۷۶	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	[HPMIM] [BF <sub>4</sub> ]	1-heptyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate
۲۸۲/۱	-۳۶۱/۸۵ ۲۸۸/۱۵	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	[C <sub>8</sub> MIM] [BF <sub>4</sub> ]	1-methyl-3-octylimidazolium tetrafluoroborate
۲۹۶/۲	-۳۶۳/۵۶ ۲۶۹/۴۹	C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	[C <sub>9</sub> MIM] [BF <sub>4</sub> ]	1-nonyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate
۳۱۰/۲	-۳۶۳/۹۸ ۲۸۳/۲۱	C <sub>14</sub> H <sub>27</sub> BF <sub>4</sub> N <sub>2</sub>	[C <sub>10</sub> MIM] [BF <sub>4</sub> ]	1-decyl-3-methylimidazolium tetrafluoroborate
۲۷۰/۲	-۳۵۲/۰۸ ۳۱۸/۳۳	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> F <sub>6</sub> N <sub>2</sub> P	[PRMIM] [PF <sub>6</sub> ]	1-methyl-3-propylimidazolium hexafluorophosphate

۲۷۱/۱	-۳۵۳/۱۵ ۲۹۳/۱۵	C <sub>6</sub> H <sub>12</sub> F <sub>6</sub> N <sub>3</sub> P	[H <sub>2</sub> N-C <sub>2</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	1-(2-aminoethyl)-3-methyl-1H-imidazolium hexafluorophosphate(V)
۲۸۴/۲	-۳۵۲/۹۹ ۲۸۸-۱۴	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> F <sub>6</sub> N <sub>2</sub> P	[BMIM] [PF <sub>6</sub> ]	1-butyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate
۲۸۵/۲	-۳۵۳/۱۵ ۲۹۳/۱۵	C <sub>7</sub> H <sub>14</sub> F <sub>6</sub> N <sub>3</sub> P	[H <sub>2</sub> N-C <sub>3</sub> mim][PF <sub>6</sub> ]	3-(3-aminopropyl)-1-methyl-1H-imidazolium hexafluorophosphate(V)
۲۹۸/۲	-۳۶۲/۹۸ ۲۶۲/۸۹	C <sub>9</sub> H <sub>17</sub> F <sub>6</sub> N <sub>2</sub> P	[PMIM] [PF <sub>6</sub> ]	1-methyl-3-pentylimidazolium hexafluorophosphate
۳۱۲/۲	-۳۵۳/۶۸ ۲۸۴/۳	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> F <sub>6</sub> N <sub>2</sub> P	[HMIM] [PF <sub>6</sub> ]	1-hexyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate
۳۲۶/۳	-۳۶۴/۶۱ ۲۹۳/۲۶	C <sub>11</sub> H <sub>21</sub> F <sub>6</sub> N <sub>2</sub> P	[hpMIM] [PF <sub>6</sub> ]	1-heptyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate
۳۴۰/۳	-۳۵۳/۵۶ ۲۸۳/۹۲	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> F <sub>6</sub> N <sub>2</sub> P	[C <sub>8</sub> MIM] [PF <sub>6</sub> ]	1-octyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate
۳۵۴/۳	-۳۶۵/۲۲ ۲۸۸/۱۴	C <sub>13</sub> H <sub>25</sub> F <sub>6</sub> N <sub>2</sub> P	[C <sub>9</sub> MIM] [PF <sub>6</sub> ]	1-nonyl-3-methylimidazolium hexafluorophosphate
۱۷۴/۷	۲۹۸-۳۹۳	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> ClN <sub>2</sub>	[BMIM] [Cl]	1-butyl-3-methylimidazolium chloride
۲۰۲/۷	۲۹۸-۳۹۳	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> ClN <sub>2</sub>	[HMIM] [Cl]	1-hexyl-3-methylimidazolium chloride
۲۳۰/۸	۲۹۸-۳۹۳	C <sub>12</sub> H <sub>23</sub> ClN <sub>2</sub>	[C <sub>8</sub> MIM] [Cl]	1-methyl-3-octylimidazolium chloride
۲۵۲/۱	-۳۶۴/۷۴ ۲۹۸/۲۱	C <sub>7</sub> H <sub>13</sub> IN <sub>2</sub>	[PRMIM] [I]	1-methyl-3-propylimidazolium iodide
۲۶۶/۱	-۳۶۴/۸۲ ۲۸۸	C <sub>8</sub> H <sub>15</sub> IN <sub>2</sub>	[BMIM] [I]	1-butyl-3-methylimidazolium iodide
۲۹۴/۲	-۳۶۵/۳۴ ۲۹۲/۹۳	C <sub>10</sub> H <sub>19</sub> IN <sub>2</sub>	[HMIM] [I]	1-hexyl-3-methylimidazolium iodide
۲۶۰/۲	-۳۵۶/۲۸ ۲۶۸/۳۶	C <sub>7</sub> H <sub>11</sub> F <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	[EMIM] [TfO]	1-ethyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate
۲۸۸/۳	-۳۵۵/۸۹ ۲۹۳/۴	C <sub>9</sub> H <sub>15</sub> F <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	[BMIM] [TfO]	1-butyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate
۳۱۶/۳	-۳۵۵/۴۴ ۲۹۴/۰۳	C <sub>11</sub> H <sub>19</sub> F <sub>3</sub> N <sub>2</sub> O <sub>3</sub> S	[HMIM] [TfO]	1-hexyl-3-methylimidazolium trifluoromethanesulfonate
۵۵۶/۲	-۳۵۴/۲۷ ۲۷۲/۶۳	C <sub>12</sub> H <sub>11</sub> F <sub>18</sub> N <sub>2</sub> P	[EMIM] [TFTP]	1-ethyl-3-methylimidazolium tris(pentafluoroethyl)trifluorophosphate
۵۸۴/۲	-۳۵۴/۵۴ ۲۷۹/۱۲	C <sub>14</sub> H <sub>15</sub> F <sub>18</sub> N <sub>2</sub> P	[BMIM] [TFTP]	1-butyl-3-methylimidazolium tris(pentafluoroethyl)trifluorophosphate
۶۱۲/۳	-۳۶۰/۲۳ ۲۶۷/۱۴	C <sub>16</sub> H <sub>19</sub> F <sub>18</sub> N <sub>2</sub> P	[HMIM] [TFTP]	1-hexyl-3-methylimidazolium tris(pentafluoroethyl)trifluorophosphate
۱۷۷/۲	-۳۵۶/۴۶ ۲۷۸/۱۶	C <sub>8</sub> H <sub>11</sub> N <sub>5</sub>	[EMIM] [C <sub>2</sub> N <sub>3</sub> ]	1-ethyl-3-methylimidazolium dicyanamide
۲۰۵/۳	-۳۵۶/۴۹ ۲۸۲/۵۳	C <sub>10</sub> H <sub>15</sub> N <sub>5</sub>	[BMIM] [C <sub>2</sub> N <sub>3</sub> ]	1-butyl-3-methylimidazolium dicyanamide
۲۳۳/۳	۲۹۸-۳۴۲/۷	C <sub>12</sub> H <sub>19</sub> N <sub>5</sub>	[HMIM] [C <sub>2</sub> N <sub>3</sub> ]	1-hexyl-3-methylimidazolium dicyanamide