مدل‌سازی هیبریدی شبکه عصبی- الگوریتم ژنتیک برای جداسازی پارافین‌های خطی و شاخه‌ای به‌وسیله فرایند جذب به‌منظور ارتقای عدد اکتان بنزین

نیلوفر فتوره‌چی[1*]، زهرا مشایخی[2]، سعید صادقپور گلویک[3]، مجید معصومی[3]

۱. ایران، تهران، پژوهشگاه صنعت نفت، پژوهشکده توسعه فناوری‌های فراورش و انتقال گاز، کدپستی ۱۱۱۳۳۷۵۸۴۱.

۲. ایران، تهران، پژوهشگاه صنعت نفت، پژوهشکده محیط‌زیست و بیوتکنولوژی، کدپستی ۱۱۱۳۳۷۵۸۴۱.

۳- ایران، تهران، پژوهشگاه صنعت نفت، پژوهشکده توسعه فناوری‌های پالایش و فراورش نفت، کدپستی ۱۱۱۳۳۷۵۸۴۱.

نویسندهٔ مسئول ایمیل: fatourehchin@ripi.ir

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۰۷/۱۹ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۱۰/۳۰

چکیده

پس از شناخت تأثیرات سمی و سرطان‌زایی ترکیبات آلی سرب، تولید ترکیبات مانند متیل ترشری بوتیل اتر، به‌عنوان افزودنی برای بنزین‌های هیدروکربنی معمولی، مطرح گردید؛ در نتیجه، توسعه فرایندی جدید برای تولید بنزین با اکتان بالا از ترکیبات پیچیده مقطرهای سبک نفتی، به اجرا درآمد. این روش، مبتنی بر جداسازی آلکان‌های خطی و شاخه‌ای C_5-C_8 براساس خواص جذبی آنها، طول زنجیره و تعداد شاخه‌ها می‌باشد. در این پژوهش، مدل شبکه عصبی هیبریدی برمبنای داده‌های تجربی موجود در بانک اطلاعاتی، به‌عنوان مدلی جایگزین برای پیش‌بینی میزان جداسازی پارافین‌های خطی و شاخه‌ای توسط فرایند جذب استفاده شده است. دمای جذب، زمان جذب، عدد اکتان و چگالی هیدروکربن‌ها به‌عنوان چهار پارامتر ورودی و همچنین نسبت غلظت پارافین خطی به کل، به‌عنوان پارامتر خروجی شبکه عصبی در نظر گرفته شد. پایگاه داده آزمایشگاهی، مدل شبکه عصبی را با موفقیت تعلیم داد و سپس به کمک داده‌های تست، بررسی کرد. نتایج مدل‌سازی برای داده‌های تست، نشان از موفقیت‌آمیز بودن مدل شبکه‌های عصبی در پیش‌بینی میزان جداسازی پارافین‌های خطی از غیرخطی دارد؛ از این رو مدل شبکه عصبی مصنوعی توسعه داده شده می‌تواند برای تعیین مطمئن C/C_0 در فرایند جذب به کار رود. طبق نتایج به‌دست‌آمده برای داده تست، کمترین خطای میانگین مربعات، برابر با ۰/۰۵۱۸ به‌دست آمد که این میزان، رضایت‌بخش است. داده‌های مدل‌سازی با داده‌های تجربی مقایسه گردید و ضریب رگرسیون برابر ۰/۹۹ حاکی از تطابق خوب نتایج تجربی و مدل‌سازی می‌باشد.

کلمات کلیدی: بنزین، عدد اکتان، الگوریتم ژنتیک، شبکه عصبی.

۱. مقدمه

به‌طوری‌که می‌دانید روند تغییرات تکنولوژیکی تولید سوخت در راستای جلوگیری از آلودگی‌های زیست‌محیطی در آب و خاک و هوا می‌باشد. پس از شناخت تأثیرات سمی و سرطان‌زایی ترکیبات آلی سرب، تولید ترکیبات غیرسمی و غیرسرطان‌زا به‌عنوان افزاینده عدد اکتان بنزین مورد توجه قرار گرفت و به علت عدد اکتان پایین مخلوط‌های هیدروکربن‌ها، تولید ترکیبات اکسیژن‌دار مانند متیل ترشری بوتیل اتر، به‌عنوان افزودنی برای بنزین‌های هیدروکربنی معمولی، مطرح گردید. به‌طور خاص در مورد بنزین، کیفیت احتراق توسط عدد اکتان (ON) اندازه‌گیری می‌شود. هرگاه عدد اکتان، بالا باشد؛ احتراق به جای آن که حالت ضربه‌ای داشته باشد در قالب انفجارهایی ملایم و بدون ضربه رخ

می‌دهد و عملکرد موتور، بهبود می‌یابد.

علاوه‌بر مسائل مذکور، آلودگی‌های زیست‌محیطی ناشی از مصرف هیدروکربن‌ها یا ترکیبات اکسیژن‌دار آنها به‌عنوان سوخت است؛ زیرا این‌گونه ترکیبات، به هر نحوی که وارد محیط زیست گردند به علت فشار بخار نسبی و انحلال نسبی در آب قادرند در آب و خاک و هوا وارد شوند و آلودگی را ایجاد کنند. علاوه‌بر آن، از سوختن آن‌ها گازهای آلوده‌کننده و خطرناک؛ نظیر اکسیدهای کربن و اکسیدهای گوگرد و ازت تولید می‌شود که علاوه‌بر تخریب لایه اوزون، افزایش درجه حرارت جو کره زمین و در نهایت، نابودی زندگی را در این کره خاکی موجب می‌گردند؛ لذا به‌کارگیری هرگونه اسکلت هیدروکربنی یا مشتقات آنها ما را با این خطرات مواجه می‌سازد.

در سه دهه گذشته، بحث بر سر تولید سوختی است که کمتر آلودگی ایجاد کند و اقتصادی‌تر باشد؛ برای مثال، استفاده از ترکیبات اکسیژن‌دار؛ نظیر اترها، الکل‌ها، استرها و ...، از مزایای برتری هنگام سوختن برخوردارند و انتخاب هریک از آنها تابع ویژگی‌های برتر (فراریت کمتر، انحلال در آب کمتر و ...) یا عدد اکتان بالاتر، سهولت دسترسی و حمل‌ونقل و اقتصاد تولید آن می‌باشد، ضمن اینکه تأثیرات سمی و سرطان‌زایی ندارد و آلودگی‌های زیست‌محیطی کمتری را دامن زند. از میان استرهای مطرح شده ETBE و از میان الکل‌ها، اتانول از ویژگی‌های نسبی برتری برخوردارند و از میان هیدروکربن‌ها ایزواکتان مشخصات برتری را نشان می‌دهد. اتانول چه مستقیم و چه به‌صورت مخلوط با بنزین‌های معمولی تا ۴۵٪ وزنی در حال حاضر نیز در برخی کشورها استفاده می‌شود.

خارج از منابع سوخت هیدروکربنی، سوخت دیگری به نام هیدروژن که به هیچ‌وجه آلودگی زیست‌محیطی، سمی و سرطان‌زایی ندارد نیز در دنیا مطرح می‌باشد یا پژوهش در راستای استفاده از پیل‌های اتمی و ... نیز در دنیا مورد بررسی است. آنچه مهم است هیدورژن علاوه بر تولید انرژی در سطح بالاتر، محصول احتراق آن آب می‌باشد که نه‌تنها هیچ‌گونه آلودگی زیست‌محیطی ندارد بلکه به رفع آلودگی‌های زیست‌محیطی کمک می‌کند؛ منتهی به‌کارگیری این تکنولوژی هنوز در سطح گسترده، اقتصادی محسوب نمی‌گردد.

در ۲۰ سال گذشته برای بالا بردن عدد اکتان، به‌جای سرب در بنزین، متیل ترشری بوتیل اتر استفاده شده است. با این وجود، اخیراً به دلیل نگرانی درباره آلوده شدن منابع آب آشامیدنی، بحث‌های بسیاری پیرامون استفاده از این ماده صورت گرفته است که منجر به فراخوان برای محدود کردن استفاده از آن شده است [۱-۳].

فرایند هم‌پارش، ترکیبی از ایزومرها (آلکان‌های خطی، آلکان-های یک شاخه نظیر متیل و اتیل و آلکان‌های چند شاخه) تولید می‌کند که معمولاً نیاز به جداسازی و بازسازی مؤلفه‌های ایزومرنشده دارد؛ از این رو پیدا کردن مواد با چنین توانایی جذبی که بتوان با آنها آلکان‌های با تعداد شاخه زیاد را به‌صورت منتخب از ترکیب جدا کرد و خود این مواد نیز قابلیت بازسازی ذاتی و استفاده مجدد داشته باشند، بسیار مطلوب می‌باشد. این غربال‌های مولکولی کربنی با پایه PVDC به دلیل توانایی جذب خوب و غربال‌گری مولکولی بین آلکان‌های خطی و شاخه‌ای، برای افزایش عدد اکتان به روش جداسازی، امیدوارکننده به نظر می‌رسند [۴]؛ در نتیجه، توسعه فرایندی جدید برای تولید بنزین با اکتان بالا از ترکیبات پیچیده مقطرهای سبک نفتی به اجرا درآمد. این روش، مبتنی بر جداسازی آلکان‌های خطی و شاخه‌ای C_5-C_8 براساس خواص جذبی آن‌ها، طول زنجیره و تعداد شاخه‌ها می‌باشد. طبق یک قاعده، چندشاخه بودن آلکان‌ها با بالا بودن اعداد اکتان، رابطه دارد.

به دلیل پیچیدگی این شرایط کاری متعدد، این نیاز احساس می‌شود که مدل‌هایی ریاضی برحسب آزمایش توسعه داده شوند تا جهت‌گیری بهینه‌ای در مورد این فرایندهای پیچیده داشته باشیم؛ از این رو مدل‌هایی تجربی برمبنای آموزش شبکه عصبی مصنوعی با داده‌های آزمایشگاهی حقیقی، به‌عنوان مدلی جایگزین برای جداسازی پارافین‌های خطی و شاخه‌ای، توسط فرایند جذب، پیشنهاد شدند. شبکه‌های عصبی مصنوعی عموماً به‌عنوان ابزاری مناسب برای شبیه‌سازی دینامیکی شناخته می‌شوند و به‌عنوان ابزارهای محاسباتی کاربردی که مدل‌های پیچیده فیزیکی و ریاضی برای پایش فرایند صنعتی در نظر نمی‌گیرند پیشنهاد داده شده‌اند.

در این مطالعه، با استفاده از روش‌های هوش مصنوعی مانند ترکیب شبکه عصبی مصنوعی با الگوریتم ژنتیک، به توسعه یک مدل ریاضی برای پیش‌بینی منحنی‌های پیشروی هیدروکربن‌ها در جدایش پارافین‌های شاخه‌ای و خطی توسط فرایند جذب پرداخته می‌شود. C/C_0 پارامتری

است که قرار است توسط شبکه عصبی ترکیبی با الگوریتم ژنتیک مورد پیش‌بینی قرار گیرد. در واقع C/C_0 نسبت غلظت پارافین خطی به غلظت اولیه کل می‌باشد. دمای تجربی (T)، زمان جذب (t)، عدد اکتان (ON) و چگالی (ρ) هیدروکربن‌ها به‌عنوان متغیرهای ورودی شبکه عصبی در این مدل‌سازی، لحاظ خواهند شد.

۲. مدل‌سازی

فرایند جذب، چسبندگی مولکول‌های یک مخلوط در حالت گازی یا مایع به یک سطح جامد است. این فرایند باعث تشکیل یک لایه نازک از ماده جذب‌شده روی سطح ماده جاذب می‌شود. در این پژوهش از نتایج آزمایشگاهی به‌دست‌آمده از کار لاردو و همکارانش استفاده شده است. ماده جاذب استفاده‌شده، یک غربال مولکولی کربنی (CMS) است که به دلیل داشتن ساختار متخلخل یکنواخت و ویژگی جذب گزینشی مناسب، برای سال‌ها مورد توجه صنعت بوده است [۵-۶].

شبکه عصبی (ANN) یک پردازنده توزیع‌شده موازی انبوه است که گرایشی طبیعی برای یادگیری دانش آزمایشگاهی دارد و لذا کاربردهای مهندسی فراوانی دارد.

شبکه‌های عصبی مصنوعی می‌توانند برای حل مسائل غیرخطی و چندمتغیره مرتبط با پدیده‌های پیچیده فیزیکی و شیمیایی که حل آنها توسط روش‌های متداول، سخت است یا نیاز به شرایط آزمایشگاهی هزینه‌بر دارند، تعلیم ببینند. شبکه‌های عصبی مصنوعی، از اجزای ساده‌ای تشکیل شده‌اند که به‌صورت موازی با یکدیگر عمل می‌کنند [۷-۸]. این اجزا از سیستم‌های عصبی بیولوژیکی، ملهم شده‌اند. مشابه طبیعت، یک تابع شبکه‌ای عمدتاً توسط ارتباطات بین نرون‌ها مشخص می‌شود. یک ساختار کلی شبکه عصبی مصنوعی با تعداد K ورودی در شکل (۱) نشان داده شده است. به هر ورودی (Ini) یک ضریب وزنی مناسب (Wi) اختصاص یافته است. مجموع وزن‌دار ورودی‌ها و بایاس b ورودی ns را برای تابع تبدیلی که خروجی را تولید می‌کند، فراهم می‌کند. ضرایبی که متناظر با لایه پنهان هستند به دو دسته ماتریس‌های وزنی Wi و بایاس‌ها b1 تقسیم می‌شوند.

نرون‌های لایه پنهان ممکن است از توابع تبدیل مشتق‌پذیر برای تولید خروجی خود استفاده کنند. در این پژوهش، به‌ترتیب از یک تابع تبدیل سیگموئید تانژانت هایپربولیک (TANSIG) و یک تابع تبدیل خطی (PURELIN) برای f و g استفاده شده است.

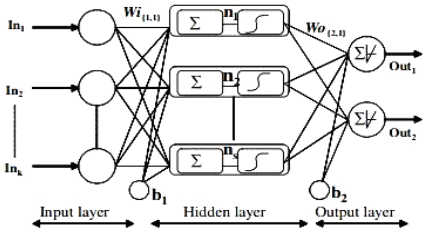


Fig. 3. The neural network computational model. k = input variables number; In = input variable; Out = output variables; thick lines = weights and biases.

شکل ۱. مدل محاسباتی شبکه عصبی. K: تعداد متغیرهای ورودی، nI: متغیر ورودی، OUT: متغیرهای خروجی، خطوط ضخیم وزن‌ها و بایاس‌ها

هدف از به‌کارگیری شبکه عصبی، برآورده کردن یکی از خواسته‌های زیر در علوم و مهندسی است: ۱- تحلیل ۲- تصمیم‌گیری ۳- تخمین ۴- پیش‌بینی ۵- طراحی و ساخت.

شایان ذکر است که در این پژوهش، بیشتر بر مقوله تخمین و پیش‌بینی، تأکید خواهد شد. برای مثال، یکی از مواردی که از شبکه‌های عصبی استفاده می‌شود تخمین یا پیش‌بینی یک پارامتر خروجی ارزشمند در مطالعات آزمایشگاهی است (آنچه در این پژوهش به دنبال آن هستیم). در اغلب موارد، پارامتر خروجی، از چندین پارامتر ورودی، متأثر است.

شبکه‌های عصبی مصنوعی، به‌عنوان گونه‌ای از مدل‌های مبتنی بر هوش محاسباتی، از ساختار موازی محاسبات عصبی در مغز انسان الهام گرفته شده‌اند. ساختار کلی مدل شبکه عصبی مصنوعی توسط یک الگوریتم یا توسط اپراتور تعیین می‌شود. پارامترهای شبکه توسط الگوریتم‌های یادگیری و داده‌های تجربی به‌نحوی تنظیم می‌شوند که خطای خروجی را به حداقل برسانند. ساختار شبکه‌های عصبی امروزی، از لایه‌های نرونی تشکیل شده است. در چنین ساختاری، نرون‌ها علاوه بر آنکه در لایه خود به شکل محدودی به یکدیگر اتصال داده شده‌اند، از طریق اتصال بین لایه‌ها نیز به نرون‌های طبقات مجاور، ارتباط داده می‌شوند. مدل‌های داده‌محور مانند شبکه عصبی، براساس شرایط ورودی و خروجی سیستم‌ها یا به نوعی شرایط اولیه و نهایی، متغیر مدنظر را تخمین می‌زنند.

مقایسه بین نتایج آزمایشگاهی و نتایج مدل‌سازی با اعمال پارامترهای تست آماری نظیر خطای میانگین مربعات (MSE)، میانگین خطای مطلق (MAE) و ضریب تعیین

(R^2) انجام گرفته است. تعریف موارد فوق، بدین صورت است:

$$MSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{n}(p_{sim,i} - p_{\exp,i})^2}{n}} \quad (۱)$$

$$MAE = \sum_{i=1}^{n}\frac{(p_{sim,i} - p_{\exp,i})}{n} \quad (۲)$$

$$\overline{p_{\exp}} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}(p_{\exp,i}) \quad (۳)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}(p_{sim,i} - p_{\exp,i})^2}{\sum_{i=1}^{n}(p_{sim,i} - \overline{p_{\exp}})^2} \quad (۴)$$

در روابط فوق، $P_{sim,i}$ مقداری است که توسط شبکه عصبی تخمین زده می‌شود و $P_{exp,i}$ مقدار آزمایشگاهی متغیر C/C_0 است.

۳. نتایج

پایگاه داده که لاردو و همکارانش گردآوری کرده‌اند شامل مقادیر مختلف C/C_0 است که از جداسازی پارافین‌های خطی و شاخه‌ای توسط فرایند جذب به‌دست آمده است[۹]. مجموعه داده آزمایشگاهی به‌ازای پارامترهای مختلف فرایند به‌دست آمده است: دمای جذب (۱۷۵، ۲۰۰، ۲۲۵۰، ۳۰۰ و ۳۲۵)، زمان جذب (۸/۸۱-۴/۳۴ دقیقه)، عدد اکتان هیدروکربن‌ها در نمونه‌های نفتای موردمطالعه (۱۰۰-۵۳) و چگالی هیدروکربن‌ها (۷۱۹-۶۴۹ گرم بر لیتر). بنابراین، یک پایگاه داده با ۳۰۰ نمونه در دسترس بوده است. این تعداد داده برای تعلیم و تست مدل شبکه عصبی کافی بودند. خلاصه‌ای از پارامترهای کاری در جدول (۱) نشان داده شده‌اند.

جدول ۱. حدود تغییر متغیرهای ورودی و خروجی شبکه عصبی

متغیر	محدوده تغییر	واحد
متغیر ورودی		
دما	۱۷۵، ۲۰۰، ۲۲۵، ۳۰۰ و ۳۲۵	°C
زمان	۴/۸۱-۳۴/۸	دقیقه
عدد اکتان	۱۰۰-۵۳	بدون بعد
چگالی	۷۱۹-۶۴۹	g/L
متغیر خروجی		
C/C_0	۱۰-۰/۹۱	بدون بعد

مجموعه داده‌ها به‌صورت تصادفی به زیرمجموعه‌های تعلیم (۷۰٪)، صحت‌سنجی و تست (۳۰٪) تقسیم شدند. به دلیل آنکه تابع فعال‌سازی که در لایه پنهان استفاده شده سیگموئید است؛ تمام نمونه‌ها باید در بازه ۱-۰ نرمالایز شوند؛ از این رو تمام مجموعه داده‌های ورودی $X_{i,Real}$ (از مجموعه‌های تعلیم، صحت‌سنجی و تست) به مقدار نرمالایز شده جدید $X_{i,Norm}$ مطابق زیر مقیاس شدند.

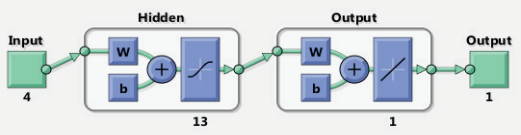
$$X_{i,Norm} = 0.8 \times (\frac{X_{i,Real} - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}}) + 0.1 \quad (۵)$$

ساختارهای شبکه عصبی مصنوعی متفاوتی به‌منظور پیش‌بینی مطمئن C/C_0 در جداسازی پارافین‌های خطی و غیرخطی در فرایند جذب، توسعه یافتند. مدل شبکه عصبی مصنوعی توسط یک لایه ورودی با چهار متغیر دمای آزمایشگاهی، زمان‌های جذب، عدد اکتان و چگالی، یک لایه پنهان و یک لایه خروجی با یک متغیر C/C_0 با ساختارهای متفاوت (تعداد نرون‌های مختلف در لایه پنهان) ارزیابی گردید و نتایج آن در جدول (۲) خلاصه شد. همان‌طور که از داده‌های آماری مشخص است بهترین ساختار، ساختار با ۱۳ نرون در لایه پنهان است که کمترین خطا در پیش‌بینی را دارد. نتایج عددی به‌دست‌آمده از مدل شبکه عصبی مصنوعی به‌صورت آماری با داده‌های آزمایشگاهی مقایسه شده است.

پارامتر پرکاربرد MSE مقدار اختلاف‌ها بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط یک مدل و مقادیری که در واقعیت مشاهده شده‌اند را نشان می‌دهد. پارامتر MAE میانگین خطاهای مطلق محاسبه شده است که با استفاده از آن می‌توان پیش‌بینی‌های تخمینی یک متغیر را از مقدار حقیقی‌اش متمایز کرد. پارامتر R^2 بیانگر شدت تناسب خطی تغییرپذیری در یک مجموعه داده است و اغلب به‌صورت عددی بین ۰ و ۱ مشاهده می‌شود و مقدار R^2 نزدیک به ۱ نشان‌دهنده آن است که یک خط رگرسیون، به‌خوبی، آن داده‌ها را برازش می‌کند. جدول (۲) براساس تعاریف آماری بیان شده در بالا تشکیل شده است.

در این جدول، معماری و ساختار شبکه عصبی، تابع انتقال بین لایه‌ها، تعداد تکرار الگوریتم آموزش شبکه عصبی، مجموع مربعات خطا، میانگین خطای مطلق، ضریب رگرسیون و بهترین معادله خط رگرسیون عبوری ارائه شده است.

بهترین ساختار به‌دست‌آمده از کار مدل‌سازی ساختار ۱-۱۳-۴ می‌باشد. این ساختار به دلیل کمترین خطای پیش‌بینی، به‌عنوان ساختار بهینه انتخاب شد. بنابراین در ادامه، نتایج مربوط به خروجی شبکه عصبی فقط برای این ساختار، رسم خواهد شد.



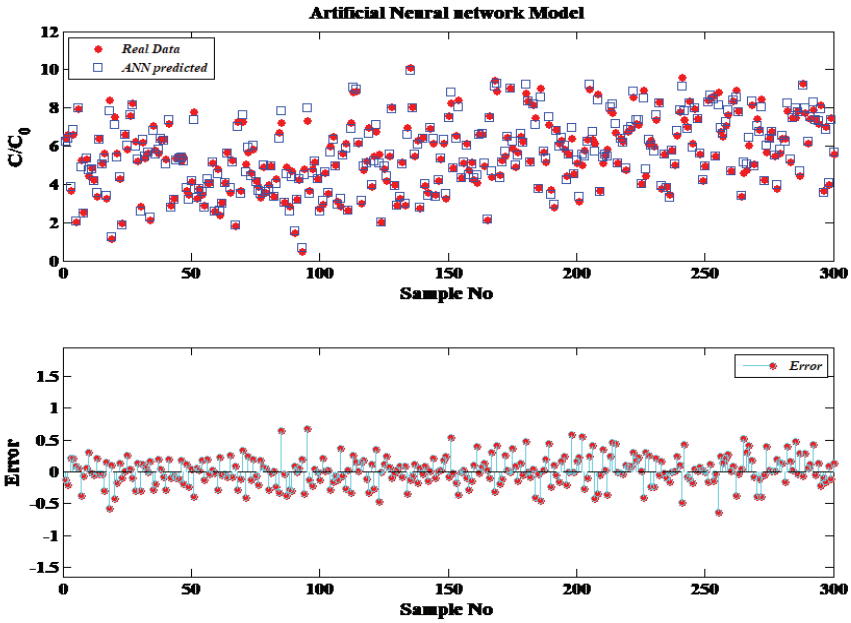
شکل ۲. ساختار ۱-۱۳-۴ به‌عنوان ساختار بهینه

درشکل(۳) نمودار نسبت غلظت برای ۳۰۰ داده‌های تجربی و داده‌های مدل‌سازی شده به کمک شبکه عصبی -الگوریتم ژنتیک رسم شده است. در این پژوهش، از الگوریتم ژنتیک برای بهینه کردن مقادیر ماتریس وزن بین لایه‌ها و بایاس‌ها استفاده شده است. به عبارت دیگر، تابع هدف، مسئله بهینه‌سازی مقدار MSE (مجموع مربعات خطا) می‌باشد. از الگوریتم ژنتیک برای به‌حداقل‌رساندن مقدار مجموع مربعات خطا استفاده شده است. (خطا= اختلاف مقادیر مدل و نتایج تجربی).

خروجی الگوریتم ژنتیک در اختیار شبکه عصبی قرار داده می‌شود تا مقادیر نهایی ماتریس وزن و بایاس مشخص شود. همان‌طور که مشاهده می‌کنید نتایج مدل‌سازی، تطابق خوبی با نتایج تجربی نشان می‌دهد، همچنین خطای مطلق نتایج تجربی و شبکه عصبی به‌صورت نمودار ساقه‌ای در ادامه آمده است. همان‌طور که مشاهده می‌کنید شبکه عصبی، به‌خوبی قادر به پیش‌بینی مقادیر آزمایشگاهی است.

جدول ۲. تست‌های انجام شده با شبکه‌های عصبی مصنوعی با ساختارهای مختلف

ساختار	تابع انتقال	تکرار	MSE	MAE	R^2	بهترین معادله خط
۴-۰۵-۱	سیگموئید	۱۶	۰/۰۵۷۸	۰/۱۹۲۰	۰/۹۹۲	$Y = 0.981X + 0.094$
۴-۰۷-۱	سیگموئید	۲۱	۰/۰۵۶۰	۰/۱۹۹۷	۰/۹۹۲	$Y = 0.978X + 0.139$
۴-۰۹-۱	سیگموئید	۲۵	۰/۰۵۴۲	۰/۱۸۹۶	۰/۹۹۲	$Y = 0.966X + 0.188$
۴-۱۱-۱	سیگموئید	۱۳	۰/۰۵۶۰	۰/۱۹۱۰	۰/۹۹۲	$Y = 0.992X + 0.075$
۴-۱۳-۱	سیگموئید	۱۱	۰/۰۴۹۹	۰/۱۷۲۶	۰/۹۹۳	$Y = 0.991X + 0.067$
۴-۱۵-۱	سیگموئید	۱۱	۰/۰۵۳۲	۰/۱۸۹۱	۰/۹۹۲	$Y = 0.984X + 0.092$



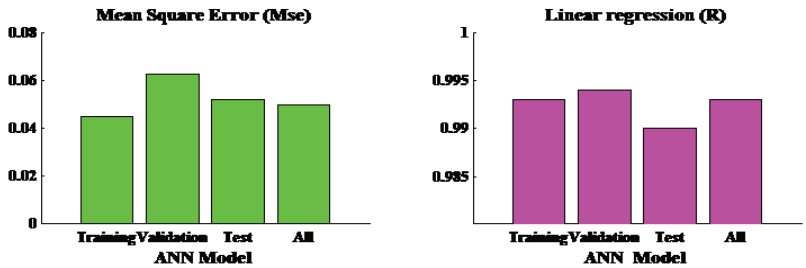
شکل ۳. مقایسه آماری بین C/C_0 شبیه‌سازی شده (شبکه عصبی مصنوعی) و آزمایشگاهی به‌همراه خطای آن

جدول ۲. پارامترهای وزن و بایاس به‌دست‌آمده برای شبکه عصبی توسعه‌یافته با ساختار ۱-۱۳-۴

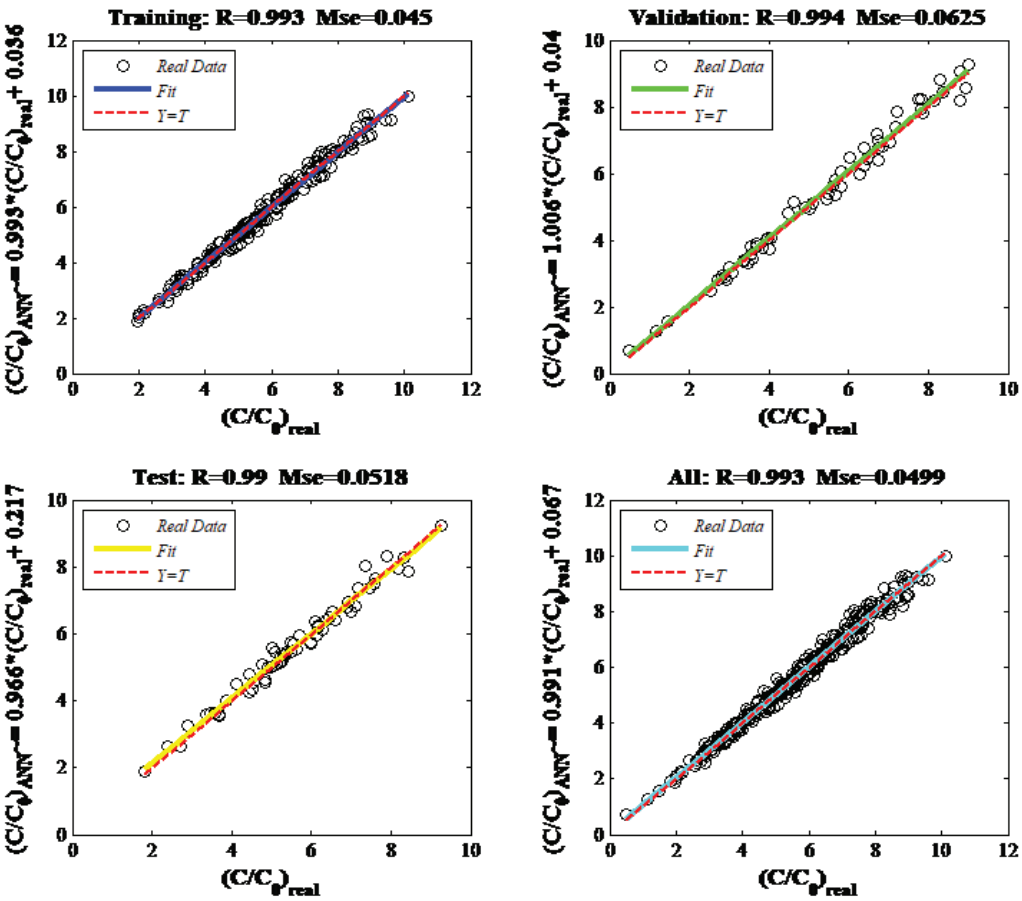
تعداد نرون	وزن					بایاس	
	لایه پنهان				لایه خروجی	b1 b2	
	دما	زمان	عدد اکتان	چگالی			
۱	۰/۴۲۷۰۹۷۹	۰/۶۸۹۵	۰/۴۳۵۶۱۲۷	۰/۷۵۶۷۶۵	۰/۲۰۵۴۷۴۴	-۱/۱۳۷۰۱	-۰/۰۳۲۴
۲	۰/۳۴۹۰۹۱۰	۲/۰۵۷۳	۰/۳۹۶۸۴۵۲	-۰/۰۱۶۳۸	-۰/۰۵۷۳۵۸۳	-۲/۲۳۰۳۰	
۳	۰/۴۳۸۰۴۱۷	-۱/۰۵۸	۲/۷۱۲۸۰۳۲	-۰/۷۰۷۲۶	۰/۰۲۲۹۶۲۳	۱/۷۳۶۰۵۶	
۴	۱/۷۴۳۵۵۸۱	-۱/۸۸۴	-۰/۰۸۰۰۷۶۹	۰/۰۹۰۹۸۳	-۰/۰۶۷۸۸۰	-۰/۶۰۸۷۷	
۵	۱/۷۷۲۴۶۹۷	۱/۶۶۹۸	-۱/۹۴۷۵۳۲۹	-۰/۲۷۴۸	۰/۰۳۰۸۹۱۰	-۰/۳۶۸۱۷	
۶	۱/۴۱۸۳۱۲۱	۱/۰۸۱۵	۳/۲۸۳۹۸۰۸	-۱/۰۶۹۱۶	۰/۰۴۹۱۷۱۵	-۱/۱۵۹۹۹	
۷	-۰/۳۴۴۱۱۷۵	-۰/۱۷۴	-۰/۳۱۶۵۶۱۶	-۰/۴۵۲۲۱	-۰/۶۸۵۲۱۷	۰/۰۵۳۱۶۳	
۸	-۰/۲۱۸۲۷۲	۰/۸۶۸۴	۰/۲۰۶۰۸۶۳	۰/۷۵۹۷۰۵	۰/۰۸۴۴۷۵۷	۰/۵۶۵۲۱۱	
۹	-۱/۱۱۸۷۹۲	۰/۳۹۳۷	۱/۲۶۰۸۵۹۸	-۱/۶۳۴۷	-۰/۰۳۵۱۸۷۲	-۲/۲۹۰۱۹	
۱۰	۰/۶۵۵۷۰۵۹	۳/۰۶۱۸	۲/۶۷۹۰۴۴۶	-۱/۲۹۹۵۷	۰/۰۳۴۳۲۰۳۲	۱/۳۳۶۸۶۷	
۱۱	۰/۳۷۵۰۰۳۵	-۲/۲۱۳	-۰/۴۹۱۵۸۸۹	-۰/۸۴۶۷۲	۰/۰۶۸۴۶۱۶۰	۲/۷۸۴۶۵۵	
۱۲	۱/۸۴۹۸۱۳۷	-۱/۸۱۶	-۱/۰۸۶۰۲۱۱	-۱/۱۷۳۰۶	-۰/۰۷۱۹۲۲۲	۲/۵۱۴۶۷۱	
۱۳	-۰/۳۸۲۲۱۱	-۰/۶۸۱	-۱/۱۵۹۱۸۹۵	-۱/۱۸۳۹۶	-۰/۱۵۷۰۵۱۱	-۱/۹۰۱۴۲	

در جدول (۳)، مقادیر بهینه نهایی وزن و بایاس مربوط به شبکه عصبی مصنوعی آورده شده است. در شکل (۴) مقدار خطا میانگین مربعات و همچنین ضریب همبستگی برای ساختار ۱-۱۳-۴ برای داده‌های آموزشی، تست، صحت‌سنجی و همچنین برای تمام داده رسم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌کنید نتایج پیش‌بینی‌شده، از ضریب همبستگی خوبی برخوردار هستند و میزان خطا برای هر سه دسته داده، اندک و قابل‌قبول می‌باشد. همان‌طور که انتظار می‌رود خطای داده‌های آموزشی، کمتر از بقیه داده‌هاست.

در شکل (۵) منحنی رگرسیون برای داده‌های آموزشی و صحت‌سنجی و تست و کل داده‌ها رسم شده است. همچنین معادله بهترین خط عبوری نیز برای هر چهار نمودار، محاسبه و روی نمودارها نشان داده شده است (محور عمودی). ضریب همبستگی برای داده‌های تست، مقدار قابل‌قبولی دارد که نشان‌دهنده پیش‌بینی صحیح شبکه عصبی می‌باشد.

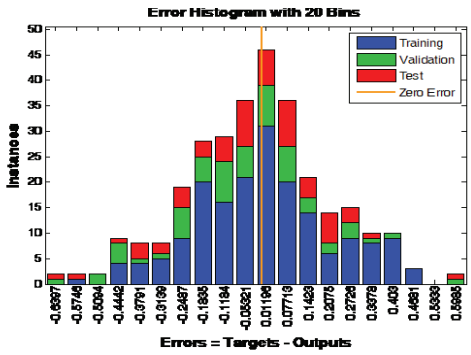


شکل ۴. نمودار میانگین مربعات خطا و همچنین ضریب همبستگی برای داده‌های آموزش، صحت‌سنجی، تست



شکل ۵. نمودار رگرسیون به همراه معادله خط بهترین منحنی عبوری از بین داده‌ها برای داده‌های آموزشی، صحت‌سنجی و تست و کل

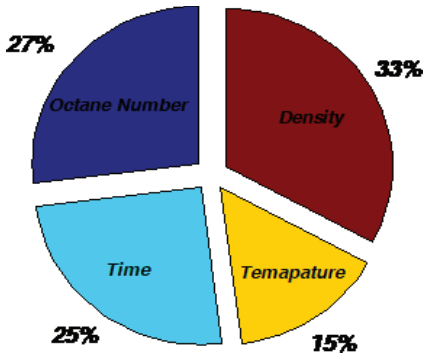
در شکل (۶)، نمودار هیستوگرام خطای داده‌ها رسم شده است. خطای پیش‌بینی بر روی ۲۰ زیر بازه مختلف توزیع شده است که در هر زیر بازه، فراوانی آن داده شده است. هر آنچه نمودار زنگوله، متقارن‌تر باشد و فراوانی داده‌ها در مرکز بیشتر باشد. شبکه عصبی با دقت بیشتری خواهیم داشت (محور نارنجی= خطای صفر) همان‌طور که مشاهده می‌کنید اکثر داده‌ها در ناحیه خطای نزدیک به صفر، توزیع شده‌اند.



شکل ۶. نمودار هیستوگرام خطای پیش‌بینی شبکه برای داده‌های آموزش، تست، صحت‌سنجی

به‌منظور ارزیابی اهمیت نسبی متغیرهای ورودی در مدل شبکه عصبی مصنوعی، معادله‌ای برمبنای تفکیک وزن‌های ارتباطی پیشنهاد گردید. شکل (۷) اهمیت نسبی متغیرهای ورودی برای مدل شبکه عصبی مصنوعی را نشان می‌دهد. تمام متغیرها تأثیر زیادی بر مقادیر C/C_0 دارند. با این وجود می‌توان مشاهده کرد که بیشترین سهم، متعلق به چگالی با اهمیت نسبی ۳۲/۵۹٪ است که به‌عنوان تأثیرگذارترین پارامتر در سیستم جذب به نظر می‌رسد. دومین پارامتر بسیار تأثیرگذار عدد اکتان هیدروکربن‌ها با سهم ۲۷/۱۲٪ است، زمان جذب دارای سهم ۲۴/۹۶٪ و در نهایت دمای جذب دارای ۱۵/۳۳٪ تأثیر است.

از نظر شیمیایی بیان این نکته ضروری به نظر می‌رسد که اندازه مولکول، نقشی اساسی در فرایند جذب هیدروکربن‌ها دارد و این، اهمیت چگالی و عدد اکتان در این تحلیل را توضیح می‌دهد؛ زیرا این دو کمیت، توصیف‌کننده شکل و اندازه مولکول‌ها هستند.



شکل ۷. آنالیز حساسیت متغیرهای ورودی

۴. بحث و نتیجه‌گیری

یک مدل شبکه عصبی جدید برای پیش‌بینی منحنی‌های پیشروی از روی متغیرهای آزمایشگاهی در یک فرایند جذب توسعه داده شده است. این مدل شبکه عصبی مصنوعی، تابعی از چهار پارامتر ورودی است و توانایی خوبی برای نتیجه‌گیری کلی از خود نشان می‌دهد. چهار پارامتر ورودی که برای تعیین غلظت در زمان t برحسب غلظت اولیه (C/C_0) استفاده شده‌اند: دمای آزمایشگاهی (T)، زمان‌های جذب(t)، عدد اکتان (ON) و چگالی (ρ) هیدروکربن‌ها هستند. مدل شبکه عصبی با موفقیت توسط پایگاه داده آزمایشگاهی تعلیم داده شد و توسط یک پایگاه داده آزمایشگاهی دیگر، بدون هیچ‌گونه جهت‌گیری و پیش‌فرض، صحت‌سنجی شد (با توجه به دامنه تعلیم مشخص شده برای شرایط کاری، صحت C/C_0 محاسبه‌شده توسط مقایسه آماری بین مقادیر اندازه‌گیری شده و پیش‌بینی شده، تأیید شد. از این رو مدل شبکه عصبی مصنوعی توسعه داده شده می‌تواند برای تعیین مطمئن C/C_0 در فرایند جذب به کار رود.

بنابراین مدل توسعه‌یافته‌شده می‌تواند برای دستبندی منحنی‌های پیشروی هیدروکربن‌های نفتا در فرایند جذب به کار رود و ممکن است قابلیت استفاده از سنسورهای هوشمند برای تعیین آنلاین کیفیت C/C_0 در آزمایشگاه را فراهم سازد. با این حال، دقت تعیین C/C_0 ذاتاً بستگی به دقت الگوهای تعلیم دارد که آن نیز بستگی به تعداد دفعات اندازه‌گیری پارامترهای آزمایشگاهی و کنترل کیفیتشان دارد. ایده اعمال شبکه عصبی مصنوعی برای تخمین زدن C/C_0 ادعا ندارد که استفاده از مدل‌های ترموشیمیایی و فیزیک و شیمیایی که به‌طور مداوم برای درک بهتر این پارامتر بنیادین فرایند جذب در حال توسعه هستند را رفع می‌کند.

فرایند یادگیری یک شبکه عصبی مصنوعی، به‌طور معمول، با تنظیم کردن وزن‌های ارتباطی بین نرون‌ها انجام می‌گیرد. شبکه‌های عصبی مصنوعی عموماً برای سوق دادن یک ورودی خاص برای پیش‌بینی یک خروجی مشخص (یا هدف خروجی) تعلیم داده می‌شوند. برای به‌حداقل‌رساندن تفاوت‌ها بین هدف خروجی (که از داده‌های آزمایشگاهی به‌دست‌آمده) و خروجی پیش‌بینی شده یا شبیه‌سازی شده (تولید شده به وسیله فرایند تنظیم وزن) الگوریتم‌های بهینه‌سازی پس انتشار استفاده شده‌اند. ما در این پژوهش، پیش از به‌کارگیری الگوریتم‌های پس‌انتشار خطا، به کمک الگوریتم ژنتیک مقادیر وزن و بایاس‌ها را تنظیم کردیم خطای میانگین مربعات (MSE) با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی و پیش‌بینی‌های شبکه محاسبه شد. این محاسبه به‌عنوان معیار بهینه‌سازی برای کفایت مدل استفاده شده است. تمام محاسبات در نرم‌افزار ریاضیاتی متلب انجام گرفتند.

برای انتخاب بهترین الگوریتم تعلیم پس‌انتشار، چندین الگوریتم پس‌انتشار، مطالعه شدند. از بین ساختارهای مختلف، ساختار ۴-۱۳-۱ به‌عنوان بهترین ساختار، انتخاب شد. بهترین پیش‌بینی با استفاده از ترکیب الگوریتم ژنتیک و لونبرگ-مارکوارت به‌دست آمد. میزان مربعات خطا و میزان میانگین خطای مطلق، ضریب رگرسیون خطی R^2 و همچنین بهترین معادله خط رگرسیون به‌ترتیب ۰/۰۴۹۹، ۰/۱۷۲۶، ۰/۹۹۳ و برای کل داده‌ها به‌دست آمد.

طبق نتایج به‌دست آمده برای داده‌های تست، مقادیر کمترین خطای میانگین مربعات (MSE)، برابر با ۰/۰۵۱۸ به‌دست آمد که این مقادیر به‌دست‌آمده برای داده‌های تست، رضایت‌بخش است. داده‌های C/C_{0Exp} آزمایشگاهی و C/C_{0ANN} شبیه‌سازی شده به‌طور رضایت‌بخش توسط مدل رگرسیون خطی مقایسه شدند و ضریب رگرسیون R^2 = ۰/۹۹۰ به‌دست آمد.

۵. مراجع

[1].Bárcia PS, Silva JAC, Rodrigues AE. (2007), “Multicomponent sorption of hexane isomers in zeolite BETA” American Institute of Chemical Engineers, 53, 1970–1981.

[2]. Laredo GC, Meneses E, Castillo J, Marroquín JO, Jiménez-Cruz FJ. (2008), “Adsorption equilibrium and kinetics of branched octane isomers on a polyvinylidene chloride-based carbon molecular sieve” Energy Fuels, 22,

2641–2648.

[3].Laredo GC, Castillo J, Marroquin JO. (2012), “Dual-site Langmuir modeling of the liquid phase adsorption of linear and branched paraffins onto a PVDC carbon molecular sieve” Fuel, 102, 404–413.

[4].Ye Y, Ahn CC, Witham C, Fultz B, Liu J, Rinzler AG, et al. (1999) Hydrogen adsorption and cohesive energy of single-walled carbon nanotubes. Applied Physics, 74, 2307.

[5].Ruthven DM. (1984) “Principles of adsorption and adsorption processes”. Wiley Interscience; USA.

[6].Speight JG. “The chemistry and technology of petroleum” (1991) Marcel Dekker Inc.; USA.

[7].Haykin S. (1999) “Neural networks”. Prentice Hall; USA.

[8].Demuth H, Beale M. (2007) “Neural network toolbox for Matlab, user’s guide” The MathWorks Inc, USA.

[9].Laredo GC, Cano JL, Castillo J, Hernández JA, Marroquín JO (2013) “Octane enhancement by the selective separation of branched and linear paraffins in naphthas using a PVDC-PVC carbon molecular sieve” Fuel, 117, 660–666.

Hybrid Neural Network-GA Modeling for Separation of Linear and Branched Paraffins by Adsorption Process for Gasoline Octane Number Improvemente

Niloofar Fatourehchi[1*], Zahra Mashayekhi[2], Said Sadeghpour[3], Majid masoumim[3]

1. Gas Transportation and Processing Technology Development Division, Research Institute of Petroleum Industry, Tehran, Iran, P.O.Box: 1485733111.

2. Environment and Biotechnology Division, Research Institute of Petroleum Industry, Tehran, Iran.

3. Petroleum Refining and Processing Technology Development Division, Research Institute of Petroleum Industry, Tehran, Iran.

Corresponding Author, Email: fatourehchin@ripi.ir

Abstract

After recognizing the toxic and carcinogenic effects of Lead organic compounds, production of compounds such as Methyl tertiary butyl ether as an additive to ordinary hydro carbonate gases was proposed. As a result, development of a new process for producing gas with high octane from complex compounds of light petroleum distillates was initiated. This method is based on separating C_5-C_8 linear and branched alkanes according to their absorption properties, chain length and the number of branches. In this study, the hybrid neural network model based on experimental data in the database has been used as an alternative model for predicting the separation rate of linear and branched paraffin through absorption process. Absorption temperature, absorption time, hydrocarbons' octane number, and hydrocarbon density are considered as four input parameters, and the ratio of linear paraffin concentration to total as the output parameter of neural network. The neural network model was successfully generalized by experimental database and then was investigated with the help of test data. The results of modeling for the test data indicated the success of neural network model in predicting the rate of linear paraffin separation from non-linear ones. Therefore, the developed neural network model can be used for determining the C/C_0 with confidence in absorption process. According the obtained results for test data, the minimum mean squared error is 0/0518, which is a satisfactory measure. The model and experimental data were compared and regression coefficient 0.990 shows good matching between modeling results and experimental results.

Keywords: *Gasoline, Octane Number, Genetic algorithm, Neural network.*