

## مدل سازی و پیش بینی نقطه اشتعال ترکیبات هیدروکربنی با استفاده از شبکه عصبی

حمیدرضا میرشاهولد<sup>۱</sup>، رامین قاسمی اصل<sup>۲\*</sup>، ناهید رئوفی<sup>۳</sup> و مهرداد ملک‌زاده دیرین<sup>۴</sup>

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت مقاله: ۱۳۹۹/۰۴/۱۴	نقطه اشتعال، یکی از مهم‌ترین خواص احتراقی ترکیبات شیمیایی است. در این مقاله مدلی برپایه شبکه‌های عصبی به منظور پیش‌بینی نقطه اشتعال ترکیبات هیدروکربنی خالص اشباع <sup>۱</sup> از خانواده‌های گوناگون با دقت بالا ارائه می‌شود. بر این اساس، تعداد اتم‌های هیدروژن و کربن، دمای بحرانی، دمای جوش نرمال، ضریب بی‌مرکزی و آنتالپی تشکیل به عنوان متغیرهای ورودی مدل انتخاب شده‌اند. با بررسی شبکه‌های عصبی گوناگون، بهترین نتایج برای یک شبکه عصبی پیش‌رونده با چهار نورون در لایه میانی، تابع انتقال لوگ سیگموئید و الگوریتم آموزش پس انتشار خطا لونبرگ-مارکارت مشاهده شده است. با استفاده از مدل به دست آمده، میزان خطای مطلق نسبی متوسط ۰/۹۷، ۰/۹۶، ۰/۹۶ و ۱ درصد به ترتیب برای داده‌های آموزش، ارزیابی و آزمون مدل و نتایج کلی مدل، حاصل گردید. در این مدل‌سازی ۳۹۳ ترکیب مورد بررسی قرار گرفته شده است.
پذیرش مقاله: ۱۳۹۹/۰۸/۱۱	
<b>واژگان کلیدی:</b> نقطه اشتعال، مدل‌های پیش‌بینی‌کننده، شبکه‌های عصبی، QSPR، مدل‌های مبتنی بر تسهیم گروه‌ها.	

### مقدمه

اهمیت بسیار زیادی برخوردار است. در تحقیق حاضر، توسعه مدلی برای پیش‌بینی نقطه اشتعال (FP) به‌عنوان یکی از مهم‌ترین خواص احتراقی ترکیبات شیمیایی به منظور ارزیابی خطرها و طراحی فرایندهای ذاتاً ایمن مورد بررسی قرار می‌گیرد. طبق تعریف، نقطه اشتعال، پایین‌ترین دمای است که در آن بخارات یک مایع می‌تواند در مجاورت هوا و حضور شعله مشتعل شود. ترکیباتی با نقطه اشتعال پایین‌تر، در دماهای پایین‌تری مشتعل شده، به‌علاوه پس از اشتعال، سرعت گسترش شعله بر روی آن‌ها سریع‌تر است. این به‌معنای احتمال خطر آتش‌سوزی بیشتر و ملاحظات بیشتر در ذخیره‌سازی و انتقال آن ترکیبات و همچنین طراحی صنایع فرایندی است [۱-۳].

به‌دلیل اهمیت این موضوع، تاکنون مدل‌های متعددی برای

توسعه مدل‌های پیش‌بینی‌کننده دقیق و آسان همواره از زمینه‌های تحقیقاتی فعال در بسیاری از شاخه‌های علمی در سالیان اخیر بوده است. در زمینه صنایع فرایندی، با در نظر گرفتن تعداد بی‌شمار ترکیباتی که یک یا تعدادی از خواص آن‌ها مورد اندازه‌گیری قرار نگرفته است، توسعه مدل‌های پیش‌بینی‌کننده آن خواص بسیار مورد توجه بوده، موجب صرفه‌جویی چشمگیر در وقت و هزینه می‌شود. علاوه بر این، اندازه‌گیری برخی از خواص در بسیاری از موارد توسط روش‌های شیمیایی اساساً امکان‌پذیر نیست، از جمله در مواردی که تجهیزات مناسب به‌دلیل محدودیت‌های فناوری در دسترس نبوده یا اندازه‌گیری آن خواص با خطرهای بالایی همراه باشد. در این گونه موارد، مدل‌های پیش‌بینی‌کننده خواص به‌عنوان تنها گزینه در دسترس از

\* پست الکترونیک نویسنده مسئول: ramini2@ghasemiasl.ir

۱. دانشجوی دکتری، دانشکده فنی و مهندسی، واحد تهران غرب، دانشگاه آزاد

اسلامی، تهران، ایران

۲. استادیار، دانشکده فنی و مهندسی، واحد تهران غرب، دانشگاه آزاد اسلامی،

تهران، ایران

۳. استادیار، دانشکده مهندسی شیمی، واحد تهران جنوب، دانشگاه آزاد

اسلامی، تهران، ایران

۴. استادیار، دانشکده فنی و مهندسی، واحد تهران غرب، دانشگاه آزاد

اسلامی، تهران، ایران

<sup>3</sup> Flash Point

بینی نقطه اشتعال با استفاده از مدل‌های تجربی به مراتب ساده‌تر و در بیشتر موارد از دقت بالاتری برخوردار است. در اغلب موارد مدل‌های تجربی پیش‌بینی‌کننده نقطه اشتعال از خواص مرتبط با تعادل مایع بخار از جمله دمای جوش نرمال ( $T_c$ )، دمای بحرانی ( $T_c$ )، فشار بحرانی ( $P_c$ )، آنتالپی تبخیر ( $\Delta H_v$ )، و ضریب بی‌مرکزی ( $\omega$ ) استفاده کرده که دلیل آن، ارتباط مستقیم فرآیند و خواص تعادلی مایع بخار ترکیبات با نقطه اشتعال است [۵ و ۶].

پاتیل [۷] و هشیه [۸] رابطه‌ای درجه دو بین نقطه جوش نرمال و نقطه اشتعال را به صورت زیر پیشنهاد کردند:

$$FP = a + b NBP + c NBP^2 \quad (1)$$

که در آن،  $a$ ،  $b$  و  $c$  ضرایب ثابت هستند.

ریاضی و دوبرت رابطه غیرخطی زیر را بین نقطه جوش نرمال و نقطه اشتعال به منظور پیش‌بینی نقطه اشتعال پیشنهاد کردند [۹]:

$$\frac{1}{FP} = (-1.4568 \times 10^{-2}) + \left( \frac{2.84947}{NBP} \right) + (1.903 \times 10^{-3} \ln(NBP)) \quad (2)$$

کاتیوره و نودت، علاوه بر نقطه جوش نرمال، از تعداد اتم‌های کربن ( $n$ ) و آنتالپی تبخیر نیز در مدل تجربی غیرخطی پیش‌بینی نقطه اشتعال به صورت زیر استفاده کردند [۵ و ۶]:

$$FP = 1.477 \times NBP^{0.79686} \times \Delta H_v^{0.16845} \times n^{0.05948} \quad (3)$$

قراقیزی و همکاران با استفاده از دمای جوش نرمال، ضریب بی‌مرکزی، دما و فشار بحرانی، رابطه غیرخطی زیر را برای پیش‌بینی نقطه اشتعال ارائه کردند [۵ و ۶]:

$$FP = (0.7327 \times NBP) + (0.53 \times \frac{\omega T_c}{NBP} \times A) + 5.4226 \quad (4)$$

که در آن،

$$A = P_c + \frac{M_w}{\omega P_c} + \frac{5.1848}{\omega} + \frac{2.7283 NBP}{\omega P_c} + \frac{1.5132 NBP}{P_c} \quad (5)$$

پیش‌بینی نقطه اشتعال ترکیبات خالص، بررسی و ارائه شده است. به‌طور کلی، مدل‌های موجود پیش‌بینی‌کننده نقطه اشتعال در سه دسته کلی طبقه‌بندی می‌شوند: مدل‌های مبتنی بر روش تسهیم گروه‌ها (GCM)<sup>۱</sup>، مدل‌های مبتنی بر روش QSPR<sup>۲</sup> و مدل‌های تجربی [۴].

بر اساس روش تسهیم گروه‌ها، خواص شیمیایی ترکیبات شیمیایی به صورت تابعی خطی یا غیرخطی از گروه‌های عاملی سازنده آن ترکیبات پیش‌بینی می‌شود. در دقیق‌ترین مدل‌های مبتنی بر روش تسهیم گروه‌ها، وابستگی غیرخطی بین گروه‌های عاملی سازنده و نقطه اشتعال توسط شبکه‌های عصبی مدل‌سازی می‌شود [۱-۳]. با وجود دارا بودن مزیت‌های متعدد از جمله سادگی و دقت بالا، یکی از معایب روش تسهیم مولکولی، عدم تمایز بین خواص ایزومرهای است که توسط گروه‌های عاملی یکسان تعیین می‌شوند، ولی در بسیاری از موارد، مقدار خواص فیزیکی یا شیمیایی آن‌ها متفاوت است. برای رفع این مشکل، در تحقیقات پیشین، استفاده از دمای نرمال جوش در کنار گروه‌های عاملی به‌عنوان پارامترهای ورودی مدل پیشنهاد شده که علاوه بر رفع محدودیت فوق، موجب بهبود چشمگیر نتایج نیز گردید [۵ و ۶].

مدل‌های مبتنی بر روش QSPR مشابه مدل‌های مبتنی بر روش تسهیم مولکولی است که در این روش علاوه بر گروه‌های عاملی، پارامترهای گسترده‌تری با استفاده از ساختار سه‌بعدی ترکیبات شیمیایی و توزیع بارهای جزئی در ترکیبات محاسبه شده که شاخصه‌های مولکولی نامیده می‌شوند و به‌عنوان پارامترهای ورودی مدل مورد استفاده قرار می‌گیرند. همانند روش تسهیم گروه‌ها، در دقیق‌ترین مدل‌های مبتنی بر روش QSPR، رابطه بین شاخصه‌های مولکولی و نقطه اشتعال توسط شبکه‌های عصبی مدل‌سازی می‌شود [۵ و ۶]. سومین دسته مدل‌های پیش‌بینی‌کننده نقطه اشتعال، مدل‌های تجربی است که نقطه اشتعال را با استفاده از سایر خواصی که اندازه‌گیری آن‌ها با سهولت یا هزینه کمتری انجام می‌پذیرد یا در دسترس‌تر هستند، پیش‌بینی می‌کند. مزیت عمده مدل‌های تجربی، عدم وابستگی به ساختار شیمیایی است که امکان اندازه‌گیری خواص ترکیبات ناشناخته را فراهم می‌سازند. همچنین پیش

<sup>4</sup> Critical pressure

<sup>5</sup> Vaporization Enthalpy

<sup>6</sup> Acentric factor

<sup>1</sup> Group Contribution Method

<sup>2</sup> Quantitative Structure Property Relationship

<sup>3</sup> Normal Boiling Point

یک تابع خطی در لایه خروجی برای نگاشت نتایج است. به دلیل پراکندگی داده‌های تابع فعال‌ساز لایه میانی باید غیرخطی باشد. در میان توابع غیرخطی، تابع لوگ سیگموئید<sup>۲</sup> و تانژانت سیگموئید<sup>۳</sup> به‌عنوان توابع فعال‌ساز غیرخطی انتخاب شد و مورد بررسی قرار گرفت.

برای توسعه مدل‌های شبکه عصبی، کل داده‌ها به سه قسمت تقسیم شد. ۷۵ درصد داده‌ها به‌منظور آموزش شبکه عصبی<sup>۴</sup> و تعیین مقادیر ضرایب، ۱۳ درصد داده‌ها برای ارزیابی دقت نتایج<sup>۵</sup> و ۱۲ درصد داده‌ها به‌منظور آزمون دقت مدل توسعه‌یافته (Test) مورد استفاده قرار گرفت. برای حصول اطمینان، نتایج داده‌های تست، برای ۲۰ داده تصادفی به تعداد ۲۰ مرتبه انجام شد [۱۰].

عملکرد مدل‌های بررسی‌شده توسط پارامترهای متوسط میزان مطلق خطا (AAD)، متوسط میزان مطلق خطای نسبی (AARE%) و ضریب همبستگی (R) محاسبه و استخراج شد که به‌صورت روابط ۶ تا ۸ تعریف می‌شوند [۱۱]:

$$AAD = \frac{1}{N} \sum (|y_i^{exp} - y_i^{pred}|) \quad (6)$$

$$AARE\% = \frac{1}{N} \sum \left( \left| \frac{y_i^{exp} - y_i^{pred}}{y_i^{exp}} \right| \right) \times 100 \quad (7)$$

$$R = \frac{N \sum y_i^{exp} y_i^{pred} - \sum y_i^{exp} \sum y_i^{pred}}{\sqrt{N \sum (y_i^{exp})^2 - (\sum y_i^{exp})^2} \sqrt{N \sum (y_i^{pred})^2 - (\sum y_i^{pred})^2}} \quad (8)$$

در روابط ۶ تا ۸،  $y_i^{exp}$  و  $y_i^{pred}$  به ترتیب مقدار آزمایشگاهی و پیش‌بینی‌شده نقطه اشتعال برای هر ترکیب هستند. تمامی مدل‌های بررسی‌شده، در نرم‌افزار متلب طراحی و مطالعه شد.

#### نحوه انتخاب بهترین الگوریتم آموزش و تابع فعال‌ساز

برای انتخاب، تمام الگوریتم‌های آموزش مطابق جدول ۱ شماره‌گذاری گردید و هر الگوریتم بر روی ۲۰ داده تصادفی بررسی و در هر مرحله دو تابع فعال‌ساز تانژانت سیگموئید و لوگ سیگموئید در شبکه قرار داده شد و ۲۰ مرتبه مقادیر اولیه برای شبکه صورت گرفت. این مراحل برای هر ۱۲ نرون داخل لایه مخفی انجام شد. در هر مرحله میزان خطای نسبی در مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی معتبر مورد بررسی قرار گرفت.

در تحقیق حاضر، یک مدل تجربی برای پیش‌بینی نقطه اشتعال با استفاده از تعداد اتم‌های کربن ( $n_C$ ) و هیدروژن ( $n_H$ )، دمای بحرانی، دمای جوش نرمال، آنتالپی تشکیل گاز ایدئال و ضریب بی‌مرکزی به‌عنوان پارامترهای ورودی مدل و شبکه‌های عصبی به‌منظور تعیین وابستگی نقطه اشتعال به پارامترهای فوق، ارائه می‌شود. همان‌طور که بیان شد، به‌استثنای تعداد اتم‌های کربن و آنتالپی تشکیل ترکیبات در حالت گاز ایدئال، سایر پارامترها در مدل‌های پیشین مورد استفاده قرار گرفته‌اند. در بین داده‌های موجود در پایگاه DIPPR 801، آنتالپی تشکیل در پژوهش‌های بسیاری مورد توجه قرار گرفته است [۵ و ۶].

#### روش کار

##### داده‌های مورد استفاده

در پیش‌بینی توسط شبکه عصبی، یکی از مهم‌ترین عوامل، ورودی‌های شبکه عصبی است. بر این اساس، ورودی‌های این شبکه عصبی که شامل داده‌های آزمایشگاهی برای نقطه اشتعال، دمای جوش نرمال، دمای بحرانی، آنتالپی تشکیل گاز ایدئال و ضریب بی‌مرکزی هستند، از پایگاه داده‌های DIPPR 801 استخراج شده‌اند. بر روی این داده‌ها هیچ‌گونه نرمال‌سازی انجام نشده است. با در نظر گرفتن خطای گزارش‌شده قابل‌انتظار برای خواص موردبررسی در پایگاه داده‌های استفاده‌شده و به‌منظور بالا بردن دقت نتایج، تنها ترکیباتی که خواص مورد بررسی برای آن‌ها با خطای کمتر از ۳ درصد گزارش شده بود، مورد مطالعه قرار گرفت. این عمل موجب کاهش تعداد ترکیبات از ۲۱۶۰ به ۳۹۳ ترکیب شد. فهرست ترکیبات مورد استفاده، در جدول پیوست ارائه شده است.

##### شبکه عصبی

شبکه عصبی به‌عنوان یکی از مهم‌ترین ابزار پیش‌بینی‌کننده است که در این مقاله، نوع پیش‌خور<sup>۱</sup> مورد استفاده قرار گرفته است.

رابطه بین پارامترهای ورودی مدل و نقطه اشتعال توسط شبکه‌های عصبی پیش‌خور با یک لایه میانی تعیین شد. برای لایه میانی، تعداد متفاوتی از نرون‌ها بین ۱-۱۲، مورد بررسی قرار گرفت.

این شبکه عصبی دارای یک تابع فعال‌ساز در لایه میانی و

<sup>4</sup> Training

<sup>5</sup> Validation

<sup>1</sup> feed-forward artificial neural networks

<sup>2</sup> log sigmoid function

<sup>3</sup> tangent sigmoid function

### آنالیز آماری شبکه‌های عصبی

در آنالیز داده‌های شبکه عصبی باید از روش‌های آماری استفاده کرد. این روش‌ها عبارت‌اند از آزمون تی<sup>۶</sup>، تحلیل واریانس (انووا)<sup>۷</sup> و آزمون توکی که نتایج این آنالیزها در قالب نمودارهایی ارائه شده است.

### ۳- نتایج و بحث روی نتایج

#### ۳-۱- الگوریتم آموزش

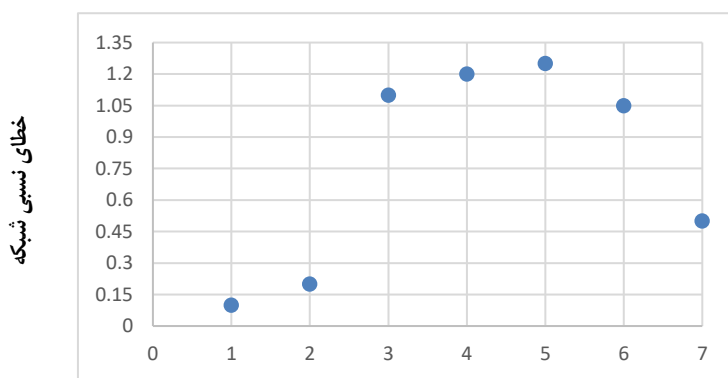
با بررسی هفت الگوریتم آموزش روی داده‌های شبکه عصبی، الگوریتم آموزش لوبنبرگ مارگارت به‌عنوان بهترین الگوریتم آموزش در نظر گرفته شد که نتایج خطای نسبی هر الگوریتم آموزش در شکل (۱) آورده شده است.

جدول ۱- الگوریتم‌های آموزش استفاده‌شده در پژوهش

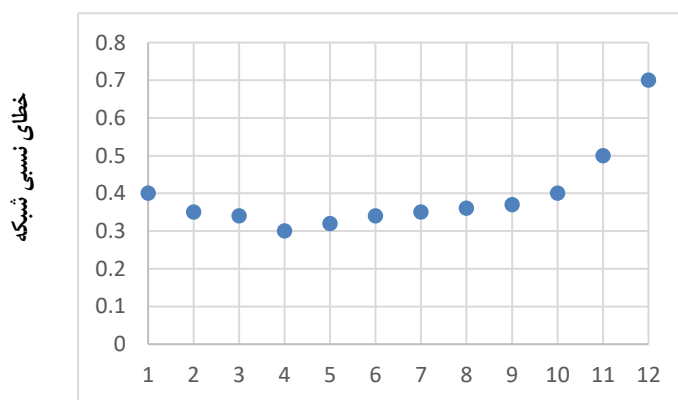
شماره الگوریتم	نام الگوریتم
۱	لوبنبرگ مارگارت با پس‌انتشار <sup>۱</sup>
۲	پس‌انتشار نیوتن بی اف جی اس <sup>۲</sup>
۳	گرادیان نزولی با انتشار ممنتوم <sup>۳</sup>
۴	گرادیان مزدوج مقیاس یافته <sup>۴</sup>
۵	ارتجاعی با پس‌انتشار <sup>۵</sup>
۶	گرادیان نزولی با پس‌انتشار <sup>۶</sup>
۷	گرادیان مزدوج با به‌روزرسانی <sup>۷</sup>

#### مقداردهی اولیه و شروع شبکه<sup>۸</sup>

مقداردهی اولیه شبکه هیچ تأثیری در نتایج نداشته، به‌صورت کاملاً تصادفی انجام می‌شود. برای هر شبکه ۲۰ مرتبه مقداردهی تصادفی جهت شروع در نظر گرفته شد.



شکل ۱- بررسی الگوریتم‌های آموزش و خطای نسبی در شبکه



شکل ۲- بررسی عامل تعداد نوروں و خطای نسبی

<sup>6</sup> Gradient descent backpropagation

<sup>7</sup> Conjugate gradient backpropagation with update

<sup>8</sup> initialization

<sup>9</sup> t exam

<sup>10</sup> ANOVA

<sup>1</sup> Levenberg-Marquardt backpropagation

<sup>2</sup> BFGS quasi-Newton backpropagation

<sup>3</sup> Gradient descent with momentum backpropagation

<sup>4</sup> Scaled conjugate gradient backpropagation

<sup>5</sup> Resilient backpropagation

### ۳-۲- تعداد نورون‌های لایه مخفی

با بررسی شبکه و در نظر گرفتن تعداد نورون‌های لایه مخفی از ۱ تا ۱۲ نورون و استخراج خطای نسبی برای تعداد نورون‌های متفاوت، در نهایت شبکه عصبی با ۴ نورون انتخاب شد.

نمودار تأثیر تعداد نورون‌های لایه مخفی بر حسب خطای نسبی، در شکل (۲) رسم شده است [۱۲].

در این بخش تعداد نورون‌ها به دلیل پراکندگی داده‌های موجود از یک نورون شروع شده، به تدریج تعداد آن‌ها



توابع فعال‌ساز استفاده‌شده در شبکه عصبی

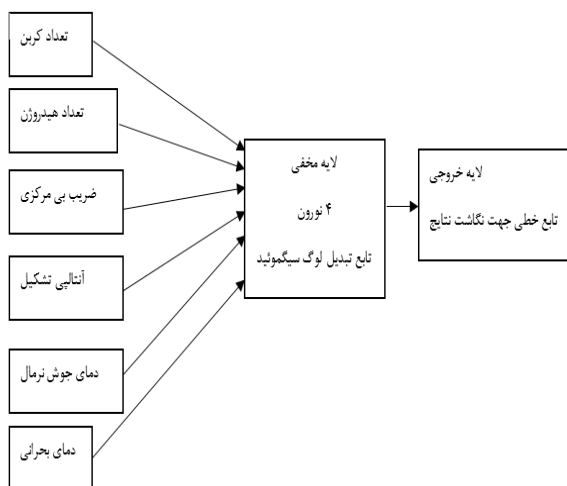
شکل ۳- بررسی توابع فعال‌ساز و میزان خطای نسبی (۱. تابع تانژانت سیگموئید، ۲. تابع لوگ سیگموئید)

افزایش یافت. طبق مراجع [۱۰] انتظار می‌رود تعداد نورون‌های لایه میانی  $\frac{2}{3}$  تعداد ورودی‌های شبکه باشد که در این تحقیق نیز این مطلب مورد تأیید قرار گرفت.

### ۳-۳- تابع فعال‌ساز

با بررسی دو تابع فعال‌ساز لوگ سیگموئید و تانژانت سیگموئید و استخراج خطای نسبی این دو تابع، تابع لوگ سیگموئید به‌عنوان تابع بهینه انتخاب شد. نمودار خطای نسبی این دو تابع در شکل (۳) نشان داده شده است.

که مشاهده می‌شود، مدل به‌دست‌آمده در تحقیق حاضر، از دقت بسیار بالاتری نسبت به سایر نتایج ارائه‌شده برخوردار است.



شکل ۴- شماییک شبکه عصبی به‌دست‌آمده

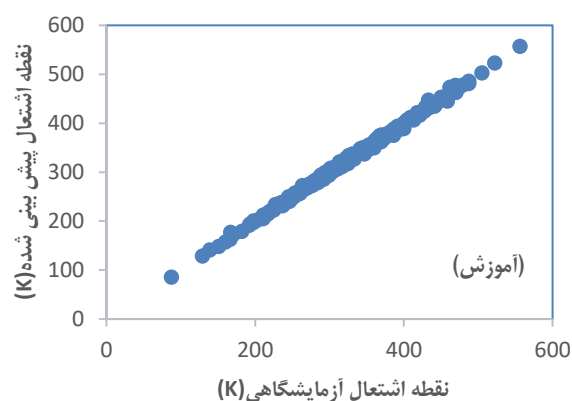
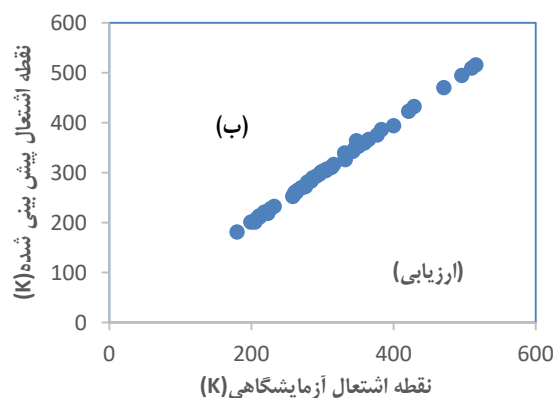
با بررسی شبکه‌های عصبی گوناگون دارای ۱ تا ۱۲ نورون در لایه میانی و بررسی دو تابع انتقال تانژانت سیگموئید (۱) و لوگ سیگموئید (۲)، دو الگوریتم آموزش لونیبرگ مارکارت و گرادیان نزولی با پس‌انتشار و بررسی روی ۲۰ داده تصادفی و تعداد ۲۰ مرتبه، ۸۰۰۰ شبکه عصبی به دست آمد که با بررسی‌های آماری، تنها ۳۹۴۷ شبکه عصبی دارای خطای کمتر از ۱/۵ درصد بود و برای مدل‌سازی انتخاب گردید. براساس نتایج به‌دست‌آمده، میزان خطای داده‌های آزمون مدل از خطای داده‌هایی که برای توسعه مدل به کار رفته کمتر است که این موضوع می‌تواند به‌عنوان دلیلی بر قابلیت اعتمادپذیری و تکرارپذیری نتایج به‌دست‌آمده تعبیر شود. شماییک شبکه عصبی به‌دست‌آمده در شکل (۴) نشان داده شده است.

داده‌های پیش‌بینی‌شده از آزمایشگاهی، در نمودارهای ۵- الف تا ۵- پ ترسیم شده‌اند.

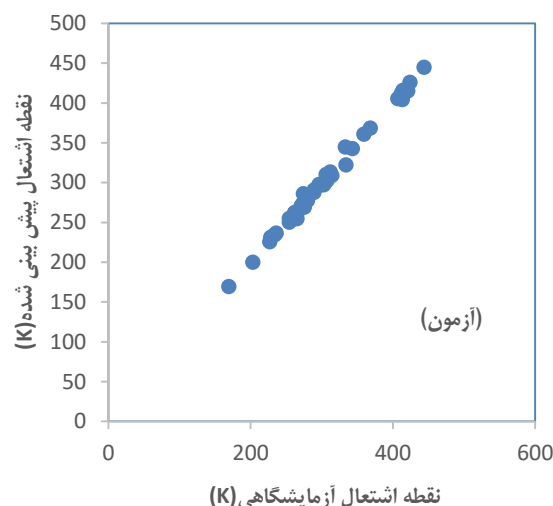
نتایج به‌دست‌آمده در تحقیق فعلی با نتایج سایر تحقیقات در جدول ۲ مقایسه شده است. بر این اساس، همان‌طور

جدول ۲- مقایسه نتایج به دست آمده با نتایج سایر مدل های ارائه شده در دیگر مقالات

Model	Method	No. data	AAD (K)	AARE (%)	Max. AARE (%)	R
The new model	ANN	۳۳۹	۲/۸۸۵	۰/۹۲	۵/۷۶	۰/۹۹۸۵
Alibakhshi et.al. [5]	Semi- empirical	۷۴۰	۴/۰۶۶	۱/۲۲۵	۹/۸۱	۰/۹۹۳۴
Alibakhshi et. al. [6]		۷۴۰	۴/۱۱	۱/۲۳	۹/۴۹	۰/۹۹۳۵
Albahri[1]	GCM+ANN	۳۷۵	۳/۵۵	۱/۱	۶/۶۲	۰/۹۹۶۱
Rowley et al. [13]	Correlation ( $\Delta H_v$ +NBP)	۱۰۶۲	۴/۶۵	۱/۳۲	-	-
Lazzús [2]	GCM+ANN+ PSO	۵۰۵	۶/۲	۱/۸	۸/۶	-
Catoire &Naudet [14]	Correlation ( $\Delta H_v$ +NBP)	۶۰۰	۶/۳۶	۱/۸۴	-	-
Gharagheizi et al. [15]	Correlation (NBP, $P_c$ , $T_c$ , $\omega$ , $M_w$ )	۱۴۷۱	-	۱/۹۴	۷/۵	۰/۹۹۳۵
Mathieu [16]	Correlation	۹۲	۳/۷۵	۱/۳۷	۵/۴	۰/۹۹۲۲
Pan et al. [17]	-	۹۲	۳/۷۵	۱/۳۸	۱۰/۱۸	۰/۹۹۰۷
Keshavarz and Ghanbarzadeh[18]	Correlation	۱۷۳	۶/۳۶	۲/۲۱	۱۲/۸	۰/۹۸۹۹
Mathieu and Alaime [19]	-	۴۸۸	۸/۶	-	-	-
Rowley et al. [20]	Correlation ( $\Delta H_v$ +NBP)	۱۰۶۲	۹/۶۸	۲/۸۴	-	-
Tetteh et al. [21]	QSPR+ANN	۴۰۰	۹/۵۹	-	-	-
Hukkerikar et al.[22]	GC <sup>+</sup>	۵۱۲	۱۰/۶۶	۳/۲۷	-	۰/۸۹
Mathieu[23]	QSPR	۲۳۰	۱۲	-	-	۰/۹۴۳
Keshavarz et al. [24]	Correlation	۵۴۸	۱۲/۱	-	-	-
Katritzky et al. [25]	QSPR+ANN	۷۵۸	۱۲/۶	-	-	۰/۹۸۹
Khaje and Modarres [26]	ANFIS	۹۵	۱۱/۵	۳۱/۱	۱۵۰۰	۰/۹۸۶
Khaje and Modarres [26]	GFA	۹۵	۱۳/۰۸	۲۵/۸	۹۶۶/۷۵	۰/۹۸
Chen et. al. [27]	QSPR	۲۳۰	-	-	۲۲/۹	۰/۹۶۴
Hshieh[8]	Correlation (NBP)	۴۹۴	-	-	-	۰/۹۶۶
Katritzky et al. [28]	QSPR	۲۷۱	-	-	-	۰/۹۱
Patil[7]	Correlation (NBP)	۵۹۳	-	-	۷/۵	۰/۹۰



هیدروژن، ضریب بی‌مرکزی، آنتالپی تشکیل، دمای جوش نرمال و دمای بحرانی به‌عنوان متغیرهای ورودی مدل استفاده و رابطه غیرخطی بین این متغیرها و نقطه اشتعال توسط شبکه‌های عصبی مصنوعی مطالعه گردید. مقایسه نتایج به‌دست آمده با نتایج سایر تحقیقات، نشان‌دهنده دقت بسیار بالاتر نتایج تحقیقات فعلی است. همچنین دقت بالاتر مشاهده شده برای داده‌های آزمون مدل نسبت به سایر داده‌ها که برای توسعه مدل استفاده گردید، تأییدکننده تکرارپذیری نتایج و مورد اعتماد بودن آن است. با توجه به اینکه متغیرهای ورودی مدل با سهولت بیشتری قابل پیش‌بینی یا اندازه‌گیری هستند و دسترسی به آن مقادیر برای اغلب ترکیبات میسر است، مدل ارائه شده می‌تواند به‌عنوان یک مدل کاربردی برای پیش‌بینی نقطه اشتعال مورد استفاده قرار بگیرد. از دیگر جنبه‌های نوآوری این پژوهش می‌توان به افزایش تعداد ورودی‌های شبکه عصبی که در این پژوهش از خواصی که مستقیماً با نقطه اشتعال در ارتباط نبوده، در کنار خواصی که ارتباط مستقیم با نقطه اشتعال دارند، اشاره کرد.



شکل ۵- مقایسه داده‌های آزمایشگاهی و پیش‌بینی شده برای داده‌های آموزش مدل (الف)، ارزیابی صحت مدل (ب) و آزمون

### نتیجه‌گیری

در این پژوهش یک مدل تجربی مبتنی بر شبکه‌های عصبی برای پیش‌بینی نقطه اشتعال ارائه شد. براساس مدل ارائه شده، شش پارامتر تجربی شامل تعداد اتم‌های کربن و

### مراجع

- [1] T.A. Albahri, "MNLR and ANN structural group contribution methods for predicting the flash point temperature of pure compounds in the transportation fuels range", *Process Safety and Environmental Protection*, 93, 2015, pp. 182-191.
- [2] J.A. Lazzús, "Prediction of flash point temperature of organic compounds using a hybrid method of group contribution+ neural network+ particle swarm optimization", *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 18(5), 2010, pp. 817-823.
- [3] Y. Pan, J. Jiang and Z. Wang, "Prediction of the flash points of alkanes by group bond contribution method using artificial neural networks", *Frontiers of Chemical Engineering in China*, 1(4), 2007, pp. 390-394.
- [4] فاطمه کرد و کامیار موقرنژاد، «بررسی تجربی و مدل‌سازی شبکه عصبی برای پیش‌بینی ضریب شکست الکل‌های خالص و مخلوط دوتایی»، *مجله مدل‌سازی در مهندسی*، دوره ۱۷، شماره ۵۶، صفحه ۳۷۵-۳۸۷.
- [5] A. Alibakhshi, H. Mirshahvalad and S. Alibakhshi, "Prediction of flash points of pure organic compounds: Evaluation of the DIPPR database", *Process Safety and Environmental Protection*, 105, 2017, pp. 127-133.
- [6] A. Alibakhshi, H. Mirshahvalad and S. Alibakhshi, "A modified group contribution method for accurate prediction of flash points of pure organic compounds", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 54(44), 2015, pp. 11230-11235.
- [7] G. Patil, "Estimation of flash point", *Fire and Materials*, 12(3), 1988, pp. 127-131.
- [8] F.Y. Hshieh, "Correlation of closed-cup flash points with normal boiling points for silicone and general organic compounds", *Fire and materials*, 1(1), 1997, pp. 277-282.
- [9] M. Riazi and T. Daubert, "Predicting flash and pour points", *Hydrocarbon processing*, 66(9), 1987, pp. 81-83.
- [10] A. Alibakshi, "Strategies to develop robust neural network models: Prediction of flash point as a case study", *Analytica Chimica Acta*, Vol. 1026, 2018, pp. 69-76.
- [11] مصطفی لشکر بلوکی، «پیش‌بینی کشش سطحی مایعات یونی بر پایه ایمیدازولیوم با به‌کارگیری شبکه عصبی مصنوعی»، *مجله مدل‌سازی در مهندسی*، دوره ۱۷، شماره ۵۸، صفحه ۱-۱۳.

[۱۲] مسعود افرندو محمد همت اسفه، «مدل‌سازی با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی جهت پیش‌بینی هدایت حرارتی نانوسیال نانولوله کربنی چندجداره عامل‌دار- آب و ارائه رابطه تجربی جدید»، مجله مدل‌سازی در مهندسی، دوره ۱۶، شماره ۵۳، صفحه ۶۷-۷۳.

[13] J.R. Rowley, R.L. Rowley and W.V. Wilding, "Prediction of pure-component flash points for organic compounds", *Fire and Materials*, 35(6), 2011, pp. 343-351.

[14] L. Catoire and V. Naudet, "A unique equation to estimate flash points of selected pure liquids application to the correction of probably erroneous flash point values", *Journal of physical and chemical reference data*, 33(4), 2004, pp. 1083-1111.

[15] F. Gharagheizi et al., "Gene expression programming strategy for estimation of flash point temperature of non-electrolyte organic compounds", *Fluid Phase Equilibria*, 329, 2012, pp. 71-77.

[16] D. Mathieu, "Inductive modeling of physico-chemical properties: Flash point of alkanes", *Journal of hazardous materials*, 179(1), 2010, pp. 1161-1164.

[17] Y. Pan, J. Jiang and Z. Wang, "Quantitative structure–property relationship studies for predicting flash points of alkanes using group bond contribution method with back-propagation neural network", *Journal of hazardous materials*, 147(1), 2007, pp. 424-430.

[18] M.H. Keshavarz and M. Ghanbarzadeh, "Simple method for reliable predicting flash points of unsaturated hydrocarbons", *Journal of hazardous materials*, 193, 2011, pp. 335-341.

[19] D. Mathieu and T. Alaime, "Insight into the contribution of individual functional groups to the flash point of organic compounds", *Journal of hazardous materials*, 267, 2014, pp. 169-174.

[20] J. Rowley, R. Rowley and W. Wilding, "Estimation of the flash point of pure organic chemicals from structural contributions", *Process Safety Progress*, 29(4), 2010, pp. 353-358.

[21] J. Tetteh et al., "Quantitative structure–property relationships for the estimation of boiling point and flash point using a radial basis function neural network", *Journal of chemical information and computer sciences*, 39(3), 1999, pp. 491-507.

[22] A.S. Hukkerikar et al., "Estimation of environment-related properties of chemicals for design of sustainable processes: development of group-contribution+ (GC+) property models and uncertainty analysis", *Journal of chemical information and modeling*, 52(11), 2012, pp. 2823-2839.

[23] D. Mathieu, "Flash points of organosilicon compounds: how data for alkanes combined with custom additive fragments can expedite the development of predictive models", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 51(43), 2012, pp. 14309-14315.

[24] M.H. Keshavarz et al., "A simple and reliable method for prediction of flash point of alcohols based on their elemental composition and structural parameters", *Process Safety and Environmental Protection*, 102, 2016, pp. 1-8.

[25] A.R. Katritzky et al., "QSPR modeling of flash points: An update", *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 26(2), 2007, pp. 529-536.

[26] A. Khajeh and H. Modarress, "QSPR prediction of flash point of esters by means of GFA and ANFIS", *Journal of hazardous materials*, 179(1), 2010, pp. 715-720.

[27] C.-C. Chen, H.-J. Liaw and Y.-J. Tsai, "Prediction of flash point of organosilicon compounds using quantitative structure property relationship approach", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49(24), 2010, pp. 12702-12708.

[28] A.R. Katritzky et al., "QSPR analysis of flash points", *Journal of chemical information and computer sciences*, 41(6), 2001, pp. 1521-1530.