

بررسی تجربی و مدل‌سازی شبکه عصبی برای پیش‌بینی ضریب شکست الکل‌های خالص و مخلوط دوتایی

فاطمه کرد^۱، کامیار موقرنژاد^{۲*}

چکیده	اطلاعات مقاله
در این پژوهش، ضریب شکست نمونه‌های خالص الکل‌های نوع اول و مخلوط‌های دوتایی آن‌ها به دو روش تجربی و مدل‌سازی مورد بررسی قرار گرفت. در روش تجربی از دستگاه رفرکتومتر برای اندازه‌گیری ضریب شکست استفاده شد و در روش مدل‌سازی، با به‌کارگیری شبکه عصبی مصنوعی پرسپترون چندلایه مدل‌سازی شد. به همین منظور ورودی‌های شبکه مربوط به مواد خالص، دما، جرم مولکولی و گروه‌های عاملی CH_3 ، CH_2 و OH و برای مخلوط‌ها کسر مولی، جرم مولکولی جزء اول، جرم مولکولی جزء دوم و گروه‌های عاملی CH_3 ، CH_2 و OH و ضریب شکست به‌عنوان تنها خروجی شبکه در نظر گرفته شده است. در طراحی شبکه عصبی، ۷۰٪ داده‌ها تحت عنوان تابع آموزش، ۱۵٪ به‌عنوان تابع اعتبارسنجی و ۱۵٪ به‌عنوان تابع آزمایش در نظر گرفته شده است. در این مدل‌سازی، نمونه‌های خالص در نوروں ۱۰ با میانگین درصد خطای نسبی مطلق ۰/۰۸۴۵۷ و نمونه‌های مخلوط در نوروں ۱۲ با میانگین درصد خطای نسبی مطلق ۰/۰۷۱۲۱ بهینه شده است. با مقایسه روش آزمایشگاهی و مدل‌سازی در نمودارهای عملکرد، انطباق خوبی بین دو روش وجود دارد که نشان‌دهنده کیفیت مدل ارائه شده است.	دریافت مقاله: ۱۳۹۷/۰۲/۱۵ پذیرش مقاله: ۱۳۹۷/۰۳/۲۳
	واژگان کلیدی: ضریب شکست، الکل نوع اول، شبکه عصبی مصنوعی پرسپترون.

۱- مقدمه

پارامتر اطلاعات خوبی در اختیار ما قرار می‌دهد. روش‌های اندازه‌گیری ضریب شکست مواد پلیمری و مخلوط‌های مایع نسبت به دیگر خواص فیزیکی - شیمیایی مواد، ساده‌تر بوده، به همین دلیل توجه زیادی را به خود جلب کرده است [۱].

ضریب شکست، نسبت سرعت نور در خلأ به سرعت آن در محیط ماده مورد نظر است. کمتر پیش می‌آید که دو جسم با طول موج و دمای معین، ضریب شکست یکسانی داشته باشند؛ بنابراین ضریب شکست می‌تواند به تأیید هویت یک ترکیب و تعیین خلوص آن کمک قابل توجهی کند. غالباً ضریب شکست برای ترکیبات آلی به کار می‌رود. ضرایب شکست ترکیبات خالص و مخلوط آن‌ها خاصیتی بصری محسوب می‌شود که برای کنترل کیفیت در صنایع

مطالعه خواص فیزیکی مخلوط‌های مایع، برای فهم ترمودینامیکی سیستم‌های دوتایی و استفاده در صنعت مهندسی شیمی، دارای اهمیت است. ضریب شکست، یک خاصیت فیزیکی بنیادی و پایه‌ای است و همچنین یک خاصیت مهم نوری. در طی مطالعات مختلف، داده‌های بسیاری برای برخی خواص، مانند ضریب شکست، جرم حجمی و کشش سطحی جمع‌آوری شده که تخمین نظری یا اندازه‌گیری مقادیرشان به پیش‌بینی خواص مخلوط‌ها کمک زیادی می‌کند.

معمولاً ضریب شکست برای ارزیابی خلوص مواد یا تخمین غلظت در مخلوط‌های دوجزئی استفاده می‌شود و همچنین زمانی که رفتار مولکول‌ها در محلول، حائز اهمیت باشد، این

* پست الکترونیک نویسنده مسئول: movagharnjad@yahoo.com

۱. دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی

نوشیروانی بابل

۲. استاد، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی نوشیروانی بابل

شیمیایی، پتروشیمی و دارویی به کار می‌رود [۲].
 ضریب شکست با دما و طول موج، به شدت رابطه داشته، در
 حین اندازه‌گیری، این پارامترها باید ثابت نگه داشته شوند
 [۳]. ضریب شکست، خواصی نظیر جرم حجمی، کشش
 سطحی، ثابت دی‌الکتریک، دمای بحرانی، قطبش‌پذیری و
 نقطه جوش را در معادلات ترمودینامیکی به هم مرتبط
 می‌سازد [۴]. از میان روش‌های اندازه‌گیری ضریب شکست،
 استفاده از دستگاه فرکتومتر، روشی ساده و در عین حال
 دقیق است. امروزه فرکتومتری در صنعت، کاربرد زیادی
 پیدا کرده است، به طوری که از این دستگاه برای تعیین
 غلظت کربوهیدرات‌ها در نمونه‌های قندی، گوگرد در
 لاستیک، سیلیسیوم در شیشه‌های سیلیکاتی، تخمین
 درجه سیرناشدگی روغن‌های نباتی و همچنین تعیین
 درصد کربن در ترکیبات آلی و نفتی استفاده می‌شود.
 در این زمینه تحقیقات زیادی بر روی مواد مختلف انجام
 شده است.

در سال ۲۰۱۰ استری و همکارانش با استفاده از شبکه
 عصبی، ضریب شکست ۹۵ پلیمر مختلف را در دمای محیط
 (۲۹۸ درجه کلوین) پیش‌بینی کردند. آن‌ها اطلاعات داده‌ها
 را از مرجع «پیش‌بینی خواص پلیمر^۱» جمع‌آوری کردند.
 ساختار شبکه عصبی مدل‌سازی عبارت بود از ورودی‌ها
 شامل ۴ توصیفگر مولکولی، انرژی پایین‌ترین اوربیتال
 مولکولی اشغال نشده (ELUMO)، قطبیت میانگین
 مولکولی (α)، ظرفیت گرمایی در حجم ثابت (CV)،
 مثبت‌ترین بار اتمی خالص بر روی اتم‌های هیدروژن در یک
 مولکول (e) و ساختار لایه میانی به ترتیب با ۳ و ۲ نورون
 و یک نورون در لایه خروجی که از تابع انتقال سیگموئید
 استفاده کرده و برای الگوریتم آموزش، الگوریتم پس انتشار
 بر پایه شیب^۲ را به کار برده‌اند. همچنین نرخ یادگیری ۰/۷
 و مقدار تکانه برابر با ۰/۸ بوده است. ۷۳ داده به‌عنوان داده
 آموزش و ۲۲ داده به‌عنوان داده اعتبارسنجی در نظر گرفته
 شد. این شبکه توانست ضریب شکست پلیمرها را با ریشه
 میانگین مربعات خطا به ترتیب ۰/۰۲۳۰ و ۰/۰۱۷۲ برای
 داده‌های آموزش و اعتبارسنجی تخمین بزند [۵].

در سال ۲۰۱۱ الکساندریدیس و همکارانش از ترکیب شبکه
 عصبی مصنوعی تابع شعاعی^۳ و الگوریتم فازی متقارن و

نامتقارن^۴ برای پیش‌بینی ضریب شکست سیستم در فاز
 جامد (کریستال‌های نیمه‌هادی سیلیکون و ژرمانیوم) و
 سیستم مخلوط آب و اتانول استفاده کردند. در این شبکه،
 دما و طول موج به‌عنوان ورودی سیستم اول در نظر گرفته
 شده و ۱۰۸ زوج داده ورودی - خروجی استفاده شد. برای
 سیستم دوم، دما و کسر مولی آب ورودیهای شبکه بودند و
 ۴۴۶ زوج داده ورودی - خروجی استفاده شد. ۷۰٪ داده‌ها
 به‌عنوان داده آموزش و ۳۰٪ به‌عنوان داده آزمایش به کار
 گرفته شده است. عملکرد شبکه عصبی با استفاده از
 الگوریتم فازی نامتقارن نسبت به استفاده از الگوریتم فازی
 متقارن، بهتر بود و سیستم بلورهای نیمه‌هادی، ضریب
 شکست را با خطای کمتری در مقایسه با سیستم آب و
 اتانول پیش‌بینی کرد [۶].

در سال ۲۰۱۲ استوانویچ و همکارانش ضریب شکست و
 جرم حجمی استر + الکل و استر + کتون شامل دی‌متیل
 فتالات و دی‌متیل ادیپات با ۱-بوتانول، ۲-بوتانول و ۲-
 بوتانول را با آزمایش در ۸ دمای مختلف به‌وسیله دستگاه
 شکست‌سنج اندازه‌گیری کردند. در پایان این پژوهش،
 مقایسه ضریب شکست‌های به‌دست‌آمده با قوانین اختلاط
 نیوتن، استر، ایکمن، لورنتز - لورنز، آراگو - بیو و دیل -
 گلدستون نشان داد مقادیر ضریب شکست محاسبه‌شده از
 همه مدل‌ها بهتر بوده و از میان آن‌ها، قانون اختلاط استر
 نتیجه‌ای سازگارتر و رضایت‌بخش‌تر نسبت به بقیه به همراه
 داشته است [۷].

در سال ۲۰۱۴ قراقیزی و همکارانش ضریب شکست
 ترکیبات آلی خالص را با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی،
 با بهره‌گیری از روش مشارکت گروهی^۵ تخمین زدند.
 مجموعه داده‌ها شامل ۱۱۹۱۸ و بیشتر ترکیبات آلی از
 مرجع خواص فیزیکی و ترمودینامیکی ترکیبات شیمیایی
 «یاو^۶» استخراج شد. همچنین همه داده‌ها در شرایط
 استاندارد (T=298K و P=1atm) و در محدوده
 ضریب شکست ۱-۱.۸۷۲ و جرم مولکولی
 ۸۹۱.۴۹۷-۱۶.۰۴۲ گزارش شده است.

ترکیبات به‌کاررفته، هیدروژن (۱ تا ۱۱۰ اتم در هر ترکیب)،
 کربن (۱ تا ۱۵۷ اتم در هر ترکیب)، نیتروژن (۱ تا ۶ اتم در
 هر ترکیب)، اکسیژن (۱ تا ۱۹ اتم در هر ترکیب)، فسفر (۱

⁴ Symmetric and non-Symmetric Fuzzy means Algorithm

⁵ Group Contribution

⁶ YAW's Handbook

¹ Prediction of Polymer Properties

² Gradient-base

³ Radial Basis Function (RBF)

مایعات یونی قبلی را با مدل جدیدی به نام روش کیفی ساختار - ویژگی^۳ مدل‌سازی کردند. این روش برای در نظر گرفتن ساختار کاتیونی و آنیونی ترکیبات، به جای استفاده از روش مشارکت گروهی ارائه شد. ۸۰٪ داده‌ها به‌عنوان داده آموزش و ۲۰٪ به‌عنوان داده آزمایش در نظر گرفته شد. برای انتخاب پارامترهای مدل QSPR (توصیفگر مولکولی) از تابع تخمین ژنتیک^۴ استفاده شد [۹].

این شبکه عصبی در نهایت با میانگین درصد خطای نسبی مطلق ۰/۴۷٪ برای داده‌های آموزش و ۰/۶٪ برای داده‌های آزمایش، توانست این مدل‌سازی را تخمین بزند. از میان خانواده‌های بررسی‌شده، خانواده فسفونیوم با دقت بهتری پیش‌بینی شد. از بررسی نتایج این دو پژوهش توسط این محققان، میتوان دریافت که روش اول، یعنی استفاده از مشارکت گروهی، نتیجه‌ای بهتر نسبت به روش QSPR به دست آورد [۱۰].

در سال ۲۰۱۶ سوریانو و همکارانش ضریب شکست ترکیب مایعات یونی و الکل‌ها (متانول، اتانول و ۱-پروپانول) را با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی پیش‌بینی کردند. ورودی‌های این شبکه عصبی، دما، کسر مولی، تعداد اتم‌های کربن در کاتیون، تعداد اتم‌ها در آنیون، تعداد اتم‌های هیدروژن در آنیون و تعداد اتم‌های کربن در الکل‌ها و تنها خروجی شبکه ضریب شکست بوده است. داده‌های ضریب شکست از پایگاه داده «ترمو - مایع یونی»^۵ استخراج شد که ۷۵۲ مجموعه نقاط بوده است. ساختار ۱-۶-۶ به‌منظور دستیابی به پارامترهای بهینه شبکه عصبی با دو لایه میانی انتخاب شد. این شبکه توانست نتایج مطلوبی با درصد خطای میانگین ۰/۵۵٪ ارائه دهد که همچنین قادر به پیش‌بینی دیگر سیستم‌های دوتایی شامل آنیون و کاتیون است [۱۱].

با توجه به کاربرد گسترده برخی مواد خالص و مخلوط‌های مایع، روش تجربی همیشه پاسخگو نیست. همچنین روش تجربی، در برخی مواقع به دلیل نیاز به زمان زیاد و در صورت داشتن تابعیت نسبت به دما، نیاز به هزینه زیاد، همیشه امکان‌پذیر نیست. برای حل این مشکل، روش پیش‌بینی با استفاده از داده‌های اندک ارائه شده است. در این پژوهش، از هر دو روش نظری و تجربی برای اندازه‌گیری

تا ۴ اتم در هر ترکیب)، گوگرد (۱ تا ۴ اتم در هر ترکیب)، فلورور (۱ تا ۲۷ اتم در هر ترکیب)، کلر (۱ تا ۱۰ اتم در هر ترکیب)، برم (۱ تا ۶ اتم در هر ترکیب)، ید (۱ تا ۲ اتم در هر ترکیب)، بور (۱ تا ۳ اتم در هر ترکیب)، سیلیسیوم (۱ تا ۱۱ اتم در هر ترکیب)، آرسنیک (۱ تا ۲ اتم در هر ترکیب) و سلنیوم (۱ تا ۲ اتم در هر ترکیب) و بیسموت در مجموعه داده‌ها قرار گرفت. ۸۰٪ داده‌ها (۹۵۳۶ نقطه) به‌عنوان داده آموزش، ۱۰٪ (۱۱۹۱ نقطه) به‌عنوان داده اعتبارسنجی و ۱۰٪ باقیمانده به‌عنوان داده آزمایش قرار گرفتند. ساختارهای شیمیایی همه ترکیبات برای شناسایی گروه‌های عاملی مورد بررسی قرار گرفت. شبکه عصبی توانست این مجموعه را با میانگین درصد خطای نسبی مطلق ۰/۸۳ تخمین بزند [۲].

در سال ۲۰۱۴ ستاری و همکارانش، پژوهش قراقیزی و همکارانش را ادامه دادند و ضرایب شکست مایعات یونی را با استفاده از روش مشارکت گروهی در شبکه عصبی پیش‌بینی کردند. این پژوهشگران، مایعات یونی را به دلیل کاربرد گسترده‌شان در فرایندهای استخراج و جداسازی، پل‌های خورشیدی، سلول‌های سوختی، فرایندهای پلیمری و زیست پلیمری، جداسازی گاز و گرفتن کربن‌دی‌اکسید و موارد دیگر انتخاب کرده‌اند. در به‌کارگیری این مدل، از داده‌های ضریب شکست ($\lambda = 589\text{nm}$) مایعات یونی از پایگاه داده مرجع استاندارد «مؤسسه ملی فناوری و استانداردها»^۱ که شامل ۵۰ کاتیون و ۳۳ آنیون بود، استفاده شد. ۸۰٪ این داده‌ها به‌عنوان داده آموزش و ۲۰٪ باقیمانده به‌عنوان داده آزمایش^۲ در نظر گرفته شد.

در انتهای کار، به این نتیجه رسیدند که یک جمع خطی از گروه‌های عاملی می‌تواند یک مدل خطی ساده و قابل اعتماد را به وجود آورد.

شبکه عصبی به‌کاررفته با میانگین درصد خطای نسبی مطلق ۰/۳۲٪ برای داده‌های آموزش و ۰/۴۵٪ برای داده‌های آزمایش، ضریب شکست مایعات یونی را تخمین زد [۸].

در سال ۲۰۱۵ ستاری و همکارانش در ادامه کار پیشین خود، برای پیش‌بینی ضریب شکست مجموعه داده‌های

^۴ Genetic Function Approximation

^۵ ThermoLL

^۱ National Institute of Standards and Technology (NIST)

^۲ Test Data

^۳ Quantitative Structure-Property Relationship (QSPR)

ضریب شکست ثبت گردیده است. در جدول‌های ۱ تا ۱۳ مقادیر آزمایشگاهی ضریب شکست برای نمونه‌های مخلوط و جداول ۱۴ و ۱۵ مقادیر آزمایشگاهی ضریب شکست را برای الکل‌های خالص ارائه می‌دهد.

جدول ۱: ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-پروپانول

درصد حجمی متانول	ضریب شکست مخلوط
۱۰٪ متانول	۱/۳۷۹۸
۲۰٪ متانول	۱/۳۷۵۴
۳۰٪ متانول	۱/۳۶۹۹
۴۰٪ متانول	۱/۳۶۶۹
۵۰٪ متانول	۱/۳۵۸
۶۰٪ متانول	۱/۳۵۲۸
۷۰٪ متانول	۱/۳۴۳۵
۸۰٪ متانول	۱/۳۴۲۵
۹۰٪ متانول	۱/۳۳۶۵

جدول ۲: ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-بوتانول

درصد حجمی متانول	ضریب شکست مخلوط
۱۰٪ متانول	۱/۳۹۴۱
۲۰٪ متانول	۱/۳۹۱
۳۰٪ متانول	۱/۳۸۵۲
۴۰٪ متانول	۱/۳۷۶۷
۵۰٪ متانول	۱/۳۷۲۲
۶۰٪ متانول	۱/۳۷۱۵
۷۰٪ متانول	۱/۳۵۶۷
۸۰٪ متانول	۱/۳۴۵۶
۹۰٪ متانول	۱/۳۳۹۳

جدول ۳: ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-بوتانول

درصد حجمی اتانول	ضریب شکست مخلوط
۱۰٪ اتانول	۱/۳۹۳۱
۲۰٪ اتانول	۱/۳۸۹۳
۳۰٪ اتانول	۱/۳۸۳۹
۴۰٪ اتانول	۱/۳۷۹۳
۵۰٪ اتانول	۱/۳۷۴۳
۶۰٪ اتانول	۱/۳۷۱۲
۷۰٪ اتانول	۱/۳۶۴۷
۸۰٪ اتانول	۱/۳۵۴۲
۹۰٪ اتانول	۱/۳۵۴۵

میزان ضریب شکست مخلوط‌های دوتایی استفاده شده است. در بخش آزمایشگاهی، با استفاده از دستگاه شکست‌سنج، ضریب شکست نمونه‌های خالص و مخلوط الکل‌های نوع اول به صورت تجربی اندازه‌گیری و این نتایج در نمودارهایی ارائه شده که با مقایسه آن‌ها تأثیر عوامل مختلف از جمله دما و تعداد کربن بر روی ضریب شکست بررسی شده است. این نتایج علاوه بر اندازه‌گیری تجربی، به کمک شبکه عصبی مصنوعی MLP مدل‌سازی و خطای بهینه مقادیر تجربی و مدل‌سازی شده محاسبه شد. در مدل‌سازی با استفاده از شبکه عصبی، با مقایسه میزان خطا، تعداد نورون بهینه تعیین و در نهایت با مقایسه نتایج تجربی و مدل‌سازی شده، نقاط مثبت پژوهش بررسی شده است. همچنین در این پروژه سعی شده است مواد آزمایشگاهی از یک خانواده در نظر گرفته شود تا کیفیت مدل ارائه شده بهبود یابد.

۲- روش آزمایش

به طور کلی میزان ضریب شکست، تابع پارامتر دما است و همچنین این میزان اندازه‌گیری شده برای سری مشابه از مواد مانند الکل‌ها که دارای اتم کربن هستند، تابع تعداد کربن است. در این پژوهش با روش آزمایشگاهی و با استفاده از دستگاه رفرکتومتر، میزان ضریب شکست نمونه‌های خالص و مخلوط الکل‌های نوع اول از متانول تا ۱-دکانول به جز ۱-نونانول مورد بررسی قرار گرفت. برای تهیه مخلوط‌های دوجزئی از الکل‌ها، متانول و اتانول با الکل‌های با کربن بالاتر در درصدهای حجمی مختلف از ۱۰٪ تا ۹۰٪ ترکیب شده است. در هر بار تهیه این مخلوط‌ها، درصدهای حجمی در نظر گرفته شده نمونه‌ها با ترازو اندازه‌گیری شد تا بتوان با محاسبات مربوط، درصد مولی و درصد وزنی ترکیبات را محاسبه کرد. به دلیل فرار بودن الکل‌ها، نمونه‌ها در ویال پنی‌سیلین تیره، نگهداری و منافذ درها با پارافیلیم پوشانده شده است. بدین ترتیب ۱۱۷ مخلوط دوجزئی تهیه شد. همچنین ضریب شکست نمونه‌های خالص از متانول تا ۱-دکانول به جز ۱-نونانول در این پروژه در نظر گرفته شده است.

از آنجا که دستگاه رفرکتومتر، به دمای محیط وابسته است، در طی یک پروسه زمانی ۲ تا ۳ ساعته، دمای محیط برای نمونه‌های مخلوط، اطراف 22°C و برای نمونه‌های خالص، اطراف (22°C و 25°C) ثابت نگه داشته شده و مقادیر

۱/۳۸۲۴	۵۰٪ اتانول
۱/۳۷۶۲	۶۰٪ اتانول
۱/۳۶۹۴	۷۰٪ اتانول
۱/۳۶۲۲	۸۰٪ اتانول
۱/۳۵۵۵	۹۰٪ اتانول

جدول ۸: ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-هپتانول

ضریب شکست مخلوط	درصد حجمی متانول
۱/۴۱۳۸	۱۰٪ متانول
۱/۴۰۴۴	۲۰٪ متانول
۱/۳۹۳۹	۳۰٪ متانول
۱/۳۸۴۹	۴۰٪ متانول
۱/۳۷۵	۵۰٪ متانول
۱/۳۶۶	۶۰٪ متانول
۱/۳۵۶۵	۷۰٪ متانول
۱/۳۴۸	۸۰٪ متانول
۱/۳۳۹۱	۹۰٪ متانول

جدول ۹: ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-هپتانول

ضریب شکست مخلوط	درصد حجمی اتانول
۱/۴۱۵۵	۱۰٪ اتانول
۱/۴۰۷۵	۲۰٪ اتانول
۱/۳۹۹۸	۳۰٪ اتانول
۱/۳۹۲	۴۰٪ اتانول
۱/۳۸۴۸	۵۰٪ اتانول
۱/۳۷۷۲	۶۰٪ اتانول
۱/۳۷	۷۰٪ اتانول
۱/۳۶۳	۸۰٪ اتانول
۱/۳۵۵۹	۹۰٪ اتانول

جدول ۱۰: ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-اکتانول

ضریب شکست مخلوط	درصد حجمی متانول
۱/۴۱۸۴	۱۰٪ متانول
۱/۴۰۸	۲۰٪ متانول
۱/۳۹۷۸	۳۰٪ متانول
۱/۳۸۷	۴۰٪ متانول
۱/۳۷۷۳	۵۰٪ متانول
۱/۳۶۷۱	۶۰٪ متانول
۱/۳۵۷۵	۷۰٪ متانول
۱/۳۴۷۷	۸۰٪ متانول
۱/۳۳۸۸	۹۰٪ متانول

جدول ۴: ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-پنتانول

ضریب شکست مخلوط	درصد حجمی متانول
۱/۴۰۰۳	۱۰٪ متانول
۱/۳۹۲۳	۲۰٪ متانول
۱/۳۸۴۹	۳۰٪ متانول
۱/۳۷۶	۴۰٪ متانول
۱/۳۶۷۹	۵۰٪ متانول
۱/۳۵۹۸	۶۰٪ متانول
۱/۳۵۲۴	۷۰٪ متانول
۱/۳۴۴۹	۸۰٪ متانول
۱/۳۳۶	۹۰٪ متانول

جدول ۵: ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-پنتانول

ضریب شکست مخلوط	درصد حجمی اتانول
۱/۴۰۴۸	۱۰٪ اتانول
۱/۴۰۱۳	۲۰٪ اتانول
۱/۳۹۳۵	۳۰٪ اتانول
۱/۳۸۳۹	۴۰٪ اتانول
۱/۳۸۳۶	۵۰٪ اتانول
۱/۳۷۶۸	۶۰٪ اتانول
۱/۳۷۱۴	۷۰٪ اتانول
۱/۳۶۴۹	۸۰٪ اتانول
۱/۳۵۷۸	۹۰٪ اتانول

جدول ۶: ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-هگزانول

ضریب شکست مخلوط	درصد حجمی متانول
۱/۴۰۳۳	۱۰٪ متانول
۱/۴۰۱	۲۰٪ متانول
۱/۳۹۱۱	۳۰٪ متانول
۱/۳۸۲۲	۴۰٪ متانول
۱/۳۷۳	۵۰٪ متانول
۱/۳۶۴۲	۶۰٪ متانول
۱/۳۵۴۸	۷۰٪ متانول
۱/۳۶۴۵	۸۰٪ متانول
۱/۳۳۷۸	۹۰٪ متانول

جدول ۷: ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-هگزانول

ضریب شکست مخلوط	درصد حجمی اتانول
۱/۴۰۹۸	۱۰٪ اتانول
۱/۴۰۳۵	۲۰٪ اتانول
۱/۳۹۶۵	۳۰٪ اتانول
۱/۳۸۹۵	۴۰٪ اتانول

۱/۴۰۹	۱- پنتانول
۱/۴۱۶۵	۱- هگزانول
۱/۴۲۲۸	۱- هپتانول
۱/۴۲۷۱	۱- اکتانول
۱/۴۳۵۵	۱- دکانول

جدول ۱۵: ضریب شکست الکل‌های خالص در دمای ۲۵°C

ماده خالص	ضریب شکست ماده خالص
متانول	۱/۳۲۶۵
اتانول	۱/۳۴۶۶
۱- پروپانول	۱/۳۸۲۸
۱- بوتانول	۱/۳۹۶۹
۱- پنتانول	۱/۴۰۷۲
۱- هگزانول	۱/۴۱۵۴
۱- هپتانول	۱/۴۲۲۱
۱- اکتانول	۱/۴۲۶۲
۱- دکانول	۱/۴۳۵۱

۳- مدل‌سازی

برخی از خواص مواد خالص و مخلوط‌های مایع در گزارش‌های علمی ارائه شده است؛ اما این داده‌های اندازه‌گیری شده پاسخگوی کاربردهای وسیع صنعتی نیست. همچنین اندازه‌گیری تجربی همیشه امکان‌پذیر نبوده، در بعضی موارد زمان‌بر و هزینه‌بر است. برای حل این مشکل، روش پیش‌بینی با استفاده از داده‌های اندک ارائه شده است. یکی از این روش‌ها، مدل‌سازی با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی است. شبکه‌های عصبی از تعداد زیادی نورون به هم پیوسته یا واحد پردازشگر تشکیل شده است [۱۲]. این شبکه‌ها با توانایی قابل توجه خود در استنتاج نتایج از داده‌های پیچیده، می‌توانند در استخراج الگوها و شناسایی گرایش‌های مختلفی که شناسایی آن‌ها برای انسان و کامپیوتر دشوار است، استفاده شوند [۱۳]. در این پژوهش، از دو شبکه عصبی مصنوعی پرسپترون چندلایه برای پیش‌بینی ضریب شکست نمونه‌های خالص و مخلوط استفاده شده است. ورودی‌های شبکه باید به نحوی انتخاب شود که دسترسی به اطلاعات آن‌ها ممکن باشد. در این پروژه ورودی‌های شبکه عصبی مربوط به مواد خالص شامل دما، جرم مولکولی و گروه‌های عاملی CH_2 ، CH_3 و OH و برای محلول‌ها شامل کسر مولی، جرم مولکولی جزء اول، جرم مولکولی جزء دوم و گروه‌های عاملی CH_3

جدول ۱۱: ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-اکتانول

درصد حجمی اتانول	ضریب شکست مخلوط
۱۰٪ اتانول	۱/۴۲
۲۰٪ اتانول	۱/۴۱۱۵
۳۰٪ اتانول	۱/۴۰۳۱
۴۰٪ اتانول	۱/۳۹۵
۵۰٪ اتانول	۱/۳۸۷۱
۶۰٪ اتانول	۱/۳۷۸۹
۷۰٪ اتانول	۱/۳۷۱
۸۰٪ اتانول	۱/۳۶۳۵
۹۰٪ اتانول	۱/۳۵۰۷

جدول ۱۲: ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-دکانول

درصد حجمی متانول	ضریب شکست مخلوط
۱۰٪ متانول	۱/۴۲۵۳
۲۰٪ متانول	۱/۴۱۳۵
۳۰٪ متانول	۱/۴۰۳۲
۴۰٪ متانول	۱/۳۹۱۵
۵۰٪ متانول	۱/۳۸۱۵
۶۰٪ متانول	۱/۳۷۰۱
۷۰٪ متانول	۱/۳۵۹۵
۸۰٪ متانول	۱/۳۴۹۳
۹۰٪ متانول	۱/۳۳۹۵

جدول ۱۳: ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-دکانول

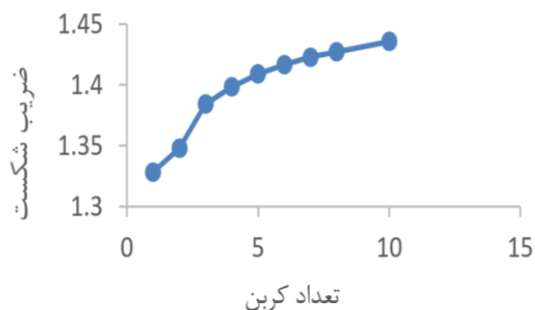
درصد حجمی اتانول	ضریب شکست مخلوط
۱۰٪ اتانول	۱/۴۲۶۹
۲۰٪ اتانول	۱/۴۱۷۸
۳۰٪ اتانول	۱/۴۰۹۲
۴۰٪ اتانول	۱/۴
۵۰٪ اتانول	۱/۳۹۰۷
۶۰٪ اتانول	۱/۳۸۲
۷۰٪ اتانول	۱/۳۷۳۵
۸۰٪ اتانول	۱/۳۶۴۸
۹۰٪ اتانول	۱/۳۵۶۹

جدول ۱۴: ضریب شکست الکل‌های خالص در دمای ۲۲°C

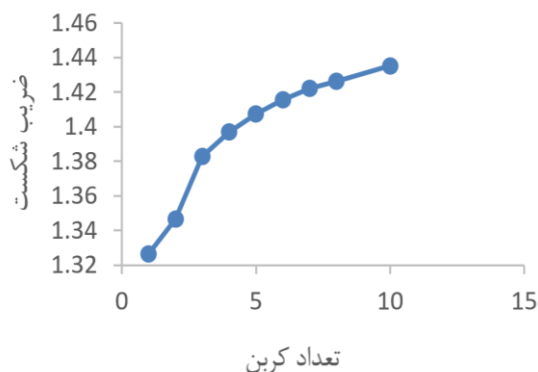
ماده خالص	ضریب شکست ماده خالص
متانول	۱/۳۲۸۵
اتانول	۱/۳۴۸
۱- پروپانول	۱/۳۸۴۲
۱- بوتانول	۱/۳۹۸۲

داده‌ها (زوج ورودی و خروجی) است. رابطه سمت راست، حداکثر تعداد نورون را کنترل می‌کند تا برای شبکه عملکرد نامناسبی به وجود نیاید [۱۶]. تعداد نورون لایه آخر نیز همیشه برابر با تعداد خروجی‌ها است ($n_2 = n_o$).

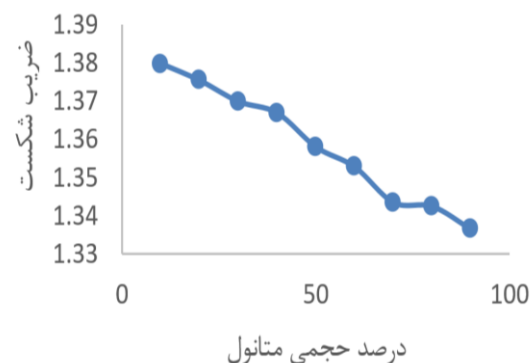
شکل (۱) ساختار شبکه عصبی به کار گرفته شده در این پروژه را نشان می‌دهد که شامل سه لایه و رو به جلو است.



شکل ۱: رفتار ضریب شکست نمونه‌های خالص با افزایش تعداد کربن در دمای 22°C



شکل ۲: رفتار ضریب شکست نمونه‌های خالص با افزایش تعداد کربن در دمای 25°C



شکل ۳: نمودار ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-پروپانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای 22°C

، CH_2 و OH است. تجزیه ساختمانی ترکیبات به روش جوبک^۱ [۱۴] انجام شد که به گروه‌های ساختاری^۲ معروف است. پس از مشخص شدن ورودی‌های شبکه، ساختار شبکه باید تعیین شود. ساختار کلی شبکه عصبی مصنوعی شامل لایه ورودی، یک یا چند لایه پنهان و لایه خروجی است [۱۵]. شبکه عصبی استفاده شده شامل دو لایه است که مفهوم دو لایه به زبان متلب، یعنی شبکه یک لایه ورودی، یک لایه میانی یا مخفی و یک لایه خروجی دارد. تعداد لایه میانی با در نظر گرفتن مسئله باید انتخاب شود. با توجه به بررسی تعداد لایه میانی، تعداد آن یک در نظر گرفته شده است که در بیشتر مسائل، یک یا حداکثر دو در نظر گرفته می‌شود. در ادامه طراحی شبکه، داده‌ها باید به سه دسته آموزش، اعتبارسنجی و آزمایش تقسیم‌بندی شود. ۷۰٪ داده‌ها برای آموزش، ۱۵٪ به عنوان داده اعتبارسنجی و ۱۵٪ برای داده‌های آزمایش اختصاص می‌یابد.

پس از بررسی توابع مختلف انتقال که شامل توابع لگاریتمی - خطی، شعاعی - خطی، تانژانت هیپربولیک - تانژانت هیپربولیک و تانژانت هیپربولیک - خطی است، از تابع انتقال تانژانت هیپربولیک برای لایه اول و تابع انتقال خطی برای لایه دوم استفاده شده است. همچنین برای تابع آموزش شبکه، از تابع لونبرگ مارکواریت^۳ استفاده شده است. برای تعیین تابع آموزش، از توابع دیگر نیز استفاده شد که این تابع نتایج بهتری ارائه داد.

برای مشخص کردن تعداد نورون لایه میانی، از روش حدس و خطا استفاده شده است؛ به این صورت که از تعداد نورون پایین شروع و شبکه اجرا می‌شود. اگر خطای مطلوب حاصل نشد، تعداد نورون‌ها تک‌تک افزایش داده می‌شود تا به خطای قابل قبول شبکه دست یافته شود. نورونی که با در نظر گرفتن آن خطای مطلوب حاصل شد، نورون بهینل لایه میانی محسوب می‌شود. روش دیگری که برای تعیین تعداد نورون بهینه لایه میانی ارائه شده، فرمول (۱) است.

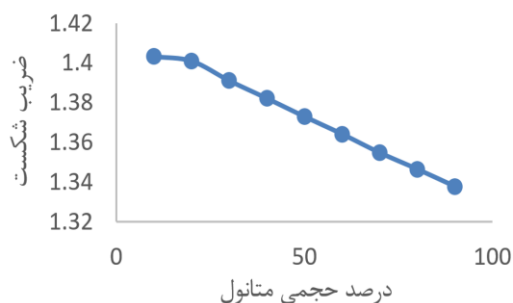
$$n_1 \leq \frac{k(n_i - n_o) - n_o}{n_i + n_o + 1}$$

در رابطه فوق، n_i تعداد ورودی‌ها، n_o تعداد خروجی‌ها، n_1 تعداد نورون لایه میانی که باید بهینه شود و k تعداد

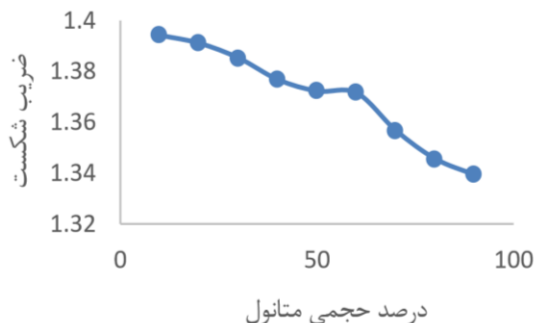
³ Lewenberg Marquard

¹ Joback method

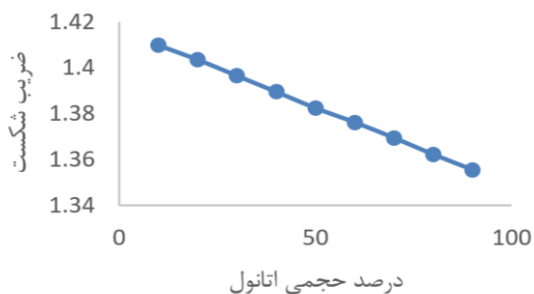
² Structural Groups



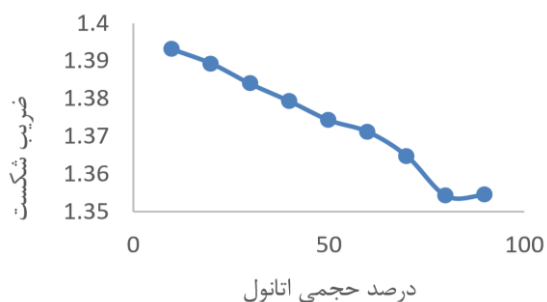
شکل ۸: نمودار ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-هگزانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C



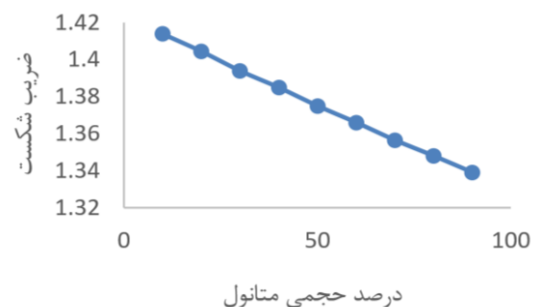
شکل ۴: نمودار ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-بوتانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C



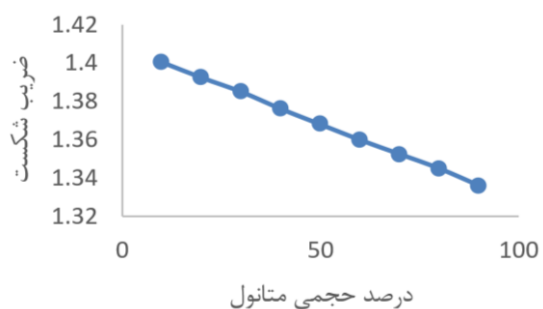
شکل ۹: نمودار ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-هگزانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C



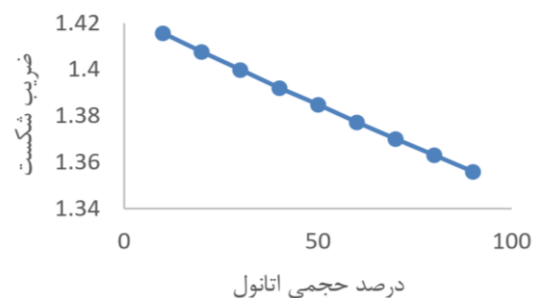
شکل ۵: نمودار ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-بوتانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C



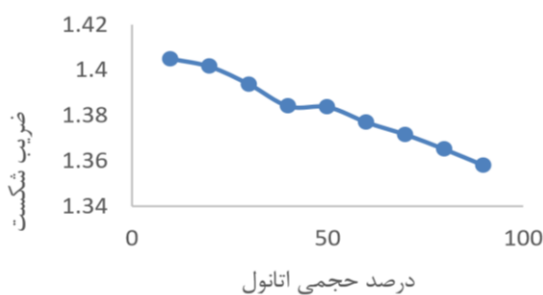
شکل ۱۰: نمودار ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-هپتانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C



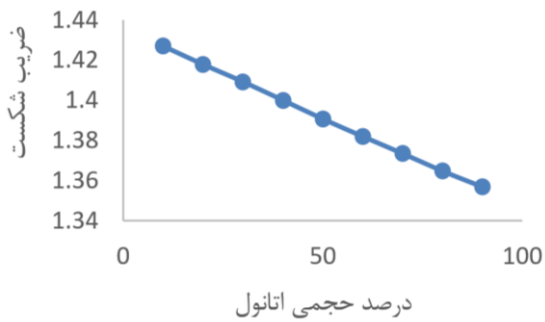
شکل ۶: نمودار ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-پنتانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C



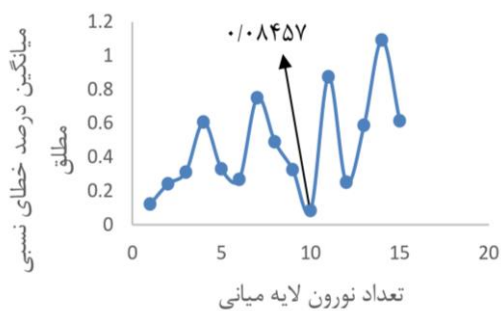
شکل ۱۱: نمودار ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-هپتانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C



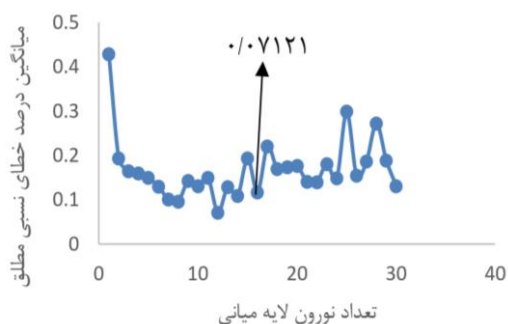
شکل ۷: نمودار ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-پنتانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C



شکل ۱۵: نمودار ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-دکانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C



شکل ۱۶: نمودار تعداد نورون لایه میانی در برابر میانگین درصد خطای نسبی مطلق داده‌های آزمایش برای نمونه‌های خالص

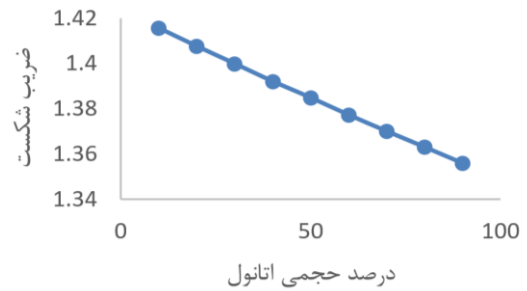


شکل ۱۷: نمودار تعداد نورون لایه میانی در برابر میانگین درصد خطای نسبی مطلق داده‌های آزمایش برای نمونه‌های مخلوط

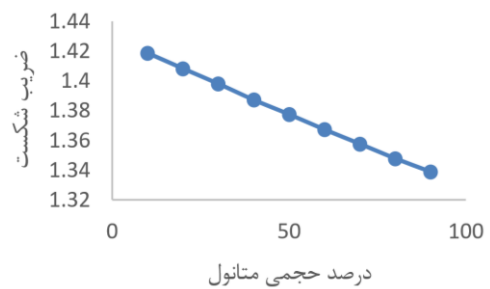
۴- بحث و نتایج

۴-۱- نتایج تجربی

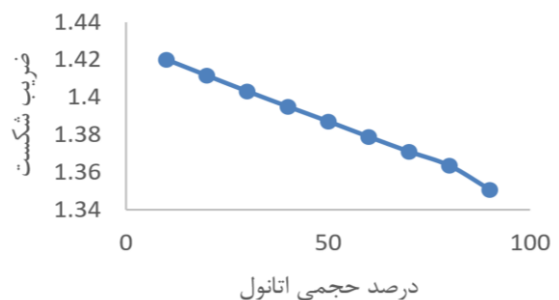
با مشاهده ضریب شکست‌های به‌دست‌آمده در آزمایشگاه، نمودارهای زیر برای تحلیل داده‌ها ارائه شده است. در شکل‌های (۱) و (۲) رفتار ضریب شکست نمونه‌های خالص با افزایش تعداد کربن در دماهای (۲۲°C و ۲۵°C) نشان داده شده است. با انطباق این دو شکل می‌توان نتیجه گرفت که در تعداد



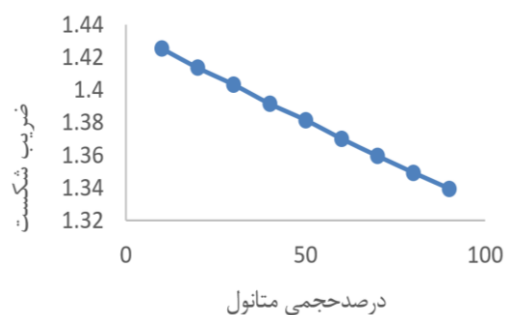
شکل ۱۱: نمودار ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-هپتانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C



شکل ۱۲: نمودار ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-اکتانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C



شکل ۱۳: نمودار ضریب شکست مخلوط اتانول و ۱-اکتانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C



شکل ۱۴: نمودار ضریب شکست مخلوط متانول و ۱-دکانول در درصدهای حجمی مختلف از متانول در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C

جدول ۱۷: پارامتر AARD% داده‌های آزمایش در برابر تعداد نورون میانی برای نمونه‌های مخلوط

تعداد نورون	میانگین درصد خطای نسبی مطلق
نورون ۱	۰/۴۲۷۷۷
نورون ۲	۰/۱۹۲۸
نورون ۳	۰/۱۶۴۰۸
نورون ۴	۰/۱۵۸۹۳
نورون ۵	۰/۱۴۹۱۱
نورون ۶	۰/۱۲۹۶۸
نورون ۷	۰/۱۰۰۷
نورون ۸	۰/۰۹۵۷۲
نورون ۹	۰/۱۴۲۱۶
نورون ۱۰	۰/۱۳۰۸۸
نورون ۱۱	۰/۱۴۹۶۱
نورون ۱۲	۰/۰۷۱۲۱
نورون ۱۳	۰/۱۲۸۹
نورون ۱۴	۰/۱۰۸۵۶
نورون ۱۵	۰/۱۹۳۰۷
نورون ۱۶	۰/۱۱۶۹۲
نورون ۱۷	۰/۲۱۹۵۷
نورون ۱۸	۰/۱۶۸۸۵
نورون ۱۹	۰/۱۷۳۱۲
نورون ۲۰	۰/۱۷۶۲۳
نورون ۲۱	۰/۱۴۰۵۸
نورون ۲۲	۰/۱۳۹۸
نورون ۲۳	۰/۱۸۰۵۳
نورون ۲۴	۰/۱۴۷۹۳
نورون ۲۵	۰/۲۹۸۲۸
نورون ۲۶	۰/۱۵۴۲
نورون ۲۷	۰/۱۸۶۴۱
نورون ۲۸	۰/۲۷۱۷۲
نورون ۲۹	۰/۱۸۸۶۳
نورون ۳۰	۰/۱۳۰۶۹

همچنین در شکل‌های (۱۷) و (۱۸) نمودار تعداد نورون لایه میانی در برابر میانگین درصد خطای نسبی مطلق نمایش داده شده است.

میزان میانگین درصد خطای نسبی برای نمونه‌های خالص از نورون ۱ تا ۱۵ و برای نمونه‌های مخلوط از نورون ۱ تا ۳۰ محاسبه و نمودار آن‌ها در شکل‌های (۱۶) و (۱۷) نشان داده شده است. همان‌طور که در نمودارها مشخص است، نمونه‌های خالص در نورون ۱۰ با مقدار خطای ۰/۰۸۴۵۷ و نمونه‌های مخلوط در نورون ۱۲ با مقدار خطای ۰/۰۷۱۲۱

کربن ثابت، میزان ضریب شکست، با افزایش دما کاهش می‌یابد.

در شکل‌های (۳) تا (۱۵) رفتار ضریب شکست مخلوط‌های دوتایی در درصدهای حجمی مختلف در شرایط اتمسفریک و دمای ۲۲°C نشان داده شده است. از مقایسه اطلاعات آزمایشگاهی نمونه‌های مخلوط میتوان نتیجه گرفت که در تعداد کربن ثابت با افزایش درصد حجمی متانول یا اتانول در هر مخلوط، ضریب شکست کاهش می‌یابد.

۲-۴- نتایج مدل‌سازی

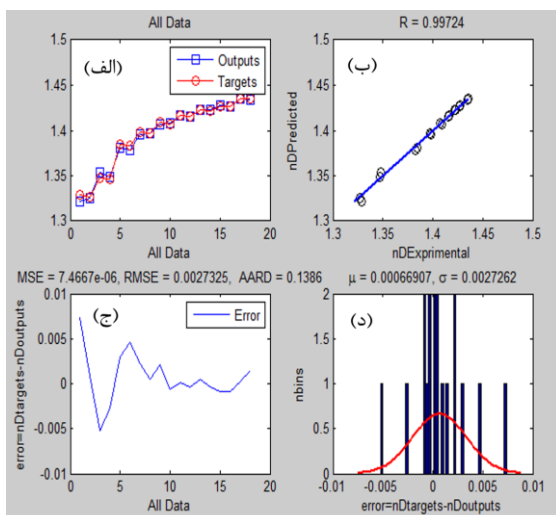
پس از طراحی کامل شبکه، میانگین درصد خطای نسبی مطلق برای نورون‌های لایه میانی محاسبه شد تا با مقایسه این پارامتر در نورون‌های مختلف، نورون بهینه تعیین شود. نورونی که میانگین درصد خطای نسبی مطلق کمتری داشته باشد، نورون بهینه مورد نظر شبکه است. ابتدا با استفاده از فرمول حداکثر تعداد نورون لایه میانی، تعداد نورون مجاز تعیین شده، سپس خطاهای مدنظر در شبکه محاسبه می‌شود.

جدول‌های ۱۶ و ۱۷ میانگین درصد خطای نسبی مطلق را برای نمونه‌های خالص و مخلوط نمایش می‌دهد.

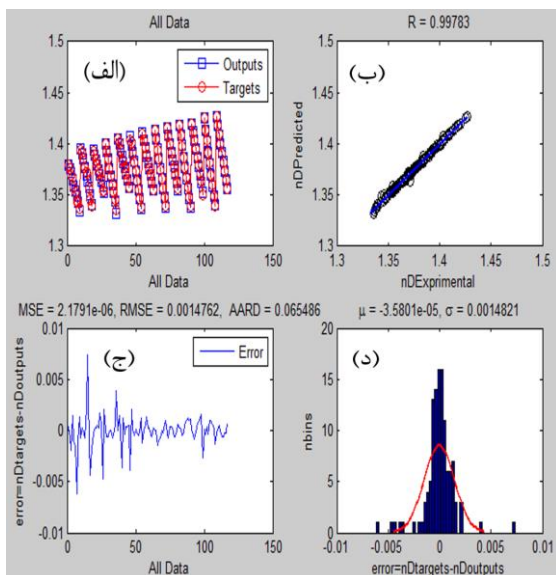
جدول ۱۶: پارامتر AARD% داده‌های آزمایش در برابر تعداد نورون میانی برای نمونه‌های خالص

تعداد نورون	میانگین درصد خطای نسبی مطلق
نورون ۱	۰/۱۲۲۲۹
نورون ۲	۰/۲۴۰۸۱
نورون ۳	۰/۳۱۱۵۴
نورون ۴	۰/۶۰۵۸۲
نورون ۵	۰/۳۲۹۱۳
نورون ۶	۰/۷۴۹۷۴
نورون ۷	۰/۴۸۸۸۹
نورون ۸	۰/۳۲۳۹۸
نورون ۹	۰/۰۸۴۵۷
نورون ۱۰	۰/۸۷۳۲۴
نورون ۱۱	۰/۲۵۰۰۷
نورون ۱۲	۰/۵۸۸۲۱
نورون ۱۳	۰/۰۹۱
نورون ۱۴	۰/۶۱۴۴۴
نورون ۱۵	۰/۱۲۲۲۹

داده‌ها در شکل (۲۰) برای نمونه‌های خالص و در شکل (۲۱) برای نمونه‌های مخلوط ارائه گردیده است.



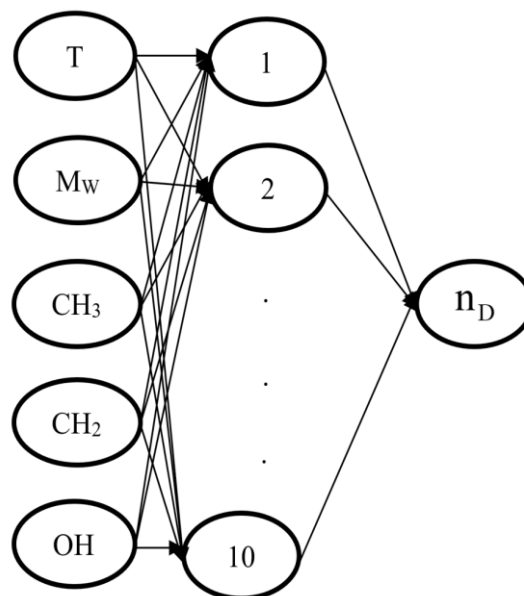
شکل ۲۰: عملکرد مدل شبکه عصبی در قالب نمودار مقایسه، رگرسیون، خطا و هیستوگرام برای نمونه‌های خالص الف- نمودار مقایسه، ب- نمودار رگرسیون، ج- نمودار میانگین مربعات خطا، ریشه میانگین مربعات خطا و میانگین درصد خطای نسبی مطلق، د- نمودار هیستوگرام



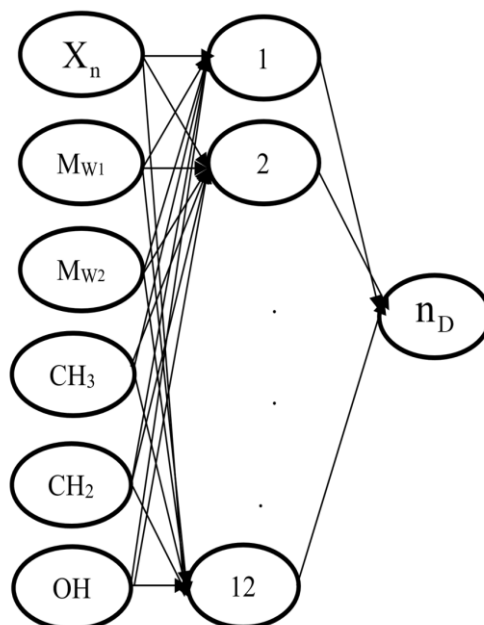
شکل ۲۱: عملکرد مدل شبکه عصبی در قالب نمودار مقایسه، رگرسیون، خطا و هیستوگرام برای نمونه‌های مخلوط الف- نمودار مقایسه، ب- نمودار رگرسیون، ج- نمودار میانگین مربعات خطا، ریشه میانگین مربعات خطا و میانگین درصد خطای نسبی مطلق، د- نمودار هیستوگرام

در نمودار (۲۰)، عملکرد کلی شبکه برای نمونه‌های خالص ارائه شده است که در نمودار نخست، انطباق خوبی بین داده‌های تجربی و مدل‌سازی شده وجود دارد. رگرسیون کلی ۰/۹۹۷۲۴ است که نشان‌دهنده تمرکز داده‌ها در

کمترین خطا را دارد. به عبارت دیگر، در نورون ۱۰ و ۱۲ شبکه بهترین عملکرد را از خود نشان می‌دهد. در نتیجه، این نورون‌ها به‌عنوان نورون بهینه شبکه‌های طراحی شده در نظر گرفته می‌شود و پارامترهای بعدی شبکه با در نظر گرفتن این تعداد نورون بهینه محاسبه می‌شود.



شکل ۱۸: مدل شبکه عصبی سه لایه برای نمونه‌های خالص



شکل ۱۹: مدل شبکه عصبی سه لایه برای نمونه‌های مخلوط

در شکل‌های (۱۸) و (۱۹) مدل شبکه عصبی طراحی شده سه لایه برای نمونه‌های خالص و مخلوط، طبق محاسبه تعداد نورون بهینه لایه میانی نمایش داده شده است. برای ارزیابی بهتر و جامع‌تر عملکرد مدل، نمودارهای رگرسیون، خطا و هیستوگرام ترسیم شده و حاصل برای

۵- نتیجه‌گیری

این مقاله نشان داده است که میزان ضریب شکست الکل‌ها به شدت تابع دما و تعداد کربن الکل‌ها است. همچنین مشاهده شده است که در یک دمای ثابت میزان ضریب شکست الکل‌ها با افزایش کربن افزایش یافته و برای الکل با تعداد کربن ثابت، با افزایش دما، ضریب شکست کاهش می‌یابد. در بخش پس از بررسی نمودارهای عملکرد شبکه‌های عصبی طراحی‌شده و مقایسه آن با روش آزمایشگاهی، انطباق خوبی بین دو روش آزمایشگاهی و مدل‌سازی مشاهده شده که نشان‌دهنده کیفیت مدل ارائه‌شده است. در واقع، هرچه تعداد داده‌های استفاده‌شده برای مدل‌سازی بیشتر باشد، خطای بهینه کمتری حاصل می‌شود. همچنین هرچه ترکیبات ماده‌های استفاده‌شده در مدل‌سازی به هم نزدیک‌تر و ساختارشان به هم شبیه‌تر باشد، خطاها بهبود می‌یابد.

اطراف خط ۴۵ درجه است. مقدار میانگین مربعات خطا و ریشه میانگین مربعات خطا نیز حاکی از کیفیت مدل ارائه‌شده است. در نمودار آخر، پراکندگی داده‌ها تمرکز خوبی دارد و نمودار تیزتر است؛ در نتیجه، مقدار میانگین مربعات خطا و ریشه میانگین مربعات خطا کوچک‌تر می‌شود.

در نمودار (۲۱)، عملکرد کلی شبکه برای نمونه‌های مخلوط ارائه شده است که در نمودار نخست، انطباق خوبی بین داده‌های تجربی و مدل‌سازی‌شده وجود دارد. رگرسیون کلی ۰/۹۹۷۸۳ است که نشان‌دهنده تمرکز داده‌ها در اطراف خط ۴۵ درجه است. مقدار میانگین مربعات خطا و ریشه میانگین مربعات خطا نیز حاکی از کیفیت مدل ارائه‌شده است. در نمودار آخر، پراکندگی داده‌ها تمرکز خوبی دارد و نمودار تیزتر بوده، در نتیجه، مقدار میانگین مربعات خطا و ریشه میانگین مربعات خطا کوچک‌تر است.

۶- مراجع

- [1] R. Francesconi and S. Ottani, "Correlation of density and refraction index for liquid binary mixtures containing polyglycols. Use of the group contributions in the Lorentz-Lorenz, Gladstone-Dale and Vogel equations to evaluate the density of mixture", *Journal of molecular liquids*, Vol.133, No. 1, March 2007, pp. 125-133.
- [2] F. Gharagheizi, p. Ilani-Kashkouli, A. Karimi, A.H. Mohammadi and D. Ramjugeranth, "Group contribution model for the prediction of refractive indices of ionic liquids", *Chemical and engineering data*, Vol.59, No. 6, December 2014, pp.1930-1943.
- [3] H. Eugne, *Optics*, 4th edition, Adison-Wesley, 2002.
- [4] F. Gharagheizi, P. Ilani-Kashkouli, A. Karimi, A.H. Mohammadi and D. Ramjugeranth, "A chemical structure based model for the estimation of refractive indices of organic compounds", *Fluid phase equilibria*, Vol.384, December 2014, pp. 1-13.
- [5] G. Astray, A. Cid, O. Moldes, J.A. Ferreira-Lage, J.F. Galvez and J.C. Mejuto, "Prediction of refractive index of polymers using artificial neural networks", *Journal of Chemical & Engineering Data*, Vol. 55, No.11, October 2010, pp. 5393-5388.
- [6] A. Alexandridis, E. Chondrodima, K. Moutzouris and D. Triantis, "A neural network approach for the prediction of the refractive index based on experimental data", *Journal of Materials Science*, Vol. 47, No. 2, January 2012, pp. 883-891.
- [7] A.B. Knezevich-Stevanovich, "Experimental determination and modeling of densities and refractive indices of the binary mixtures of dimethylphthalate (or dimethyladipate)+ 1-butanol, or+ 2-butanol, or+ 2-butanone at 288.15k and 323.15k", *Thermochimica acta*, Vol. 533, April 2012, pp.28-38.
- [8] M. Sattari, A. Kamari, A.H. Mohammadi and D. Ramjugernath, "A group contribution method for estimating the refractive indices of ionic liquids", *Journal of Molecular Liquids*, Vol. 200, December 2014, pp. 410-415.
- [9] D. Rogers and A.J. Hopfinger, "Application of genetic function approximation to quantitative structure-activity relationships and quantitative structure-property relationships", *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, Vol. 34, No. 4, July 1994, pp. 854-866.

- [10] M. Sattari, A. Kamari, A.H. Mohammadi and D. Ramjugernath, "Prediction of refractive indices of ionic liquids—a quantitative structure-property relationship based model", *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, Vol. 52, July 2015, pp. 165-180.
- [11] A.N. Soriano, K.F.P. Ornedo-Ramos, C.A.M. Muriel, A.P. Adornado, V.C. Bungay, and Li. Mengu-Hui, "Prediction of refractive index of binary solutions consisting of ionic liquids and alcohols (methanol or ethanol or 1-propanol) using artificial neural network", *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineer*, Vol. 65, August 2016, pp.83-90.
- [۱۲] حسین بخشی، محمد خراسانی، محمد رضا فدوی، غلامرضا قدرتی امیری و محمدعلی برخوردار، «تخمین پارامترهای شتاب، سرعت و جابه‌جایی ماکزیمم زمین با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی»، *مجله مدل‌سازی در مهندسی*، دوره ۵، شماره ۱۹، زمستان ۱۳۸۸، صفحه ۲۲-۱۱.
- [۱۳] علی‌رضا مرتضایی و علی خیرالدین، «مدل‌سازی و تخمین طول مفصل پلاستیک ستون‌های بتن آرمه به کمک شبکه‌های عصبی مصنوعی»، *مجله مدل‌سازی در مهندسی*، دوره ۱۰، شماره ۲۹، تابستان ۱۳۹۱، صفحه ۱۷-۱۰.
- [14] J. Prausnitz and J. O'Connell, *Properties of gases and liquids*, 5th edition, *Journal of the American Chemical Society (JACS) publications*, USA, 2000.
- [۱۵] حسن امیرآبادی، جواد عاشوری و فرشید جعفریان، «بهینه‌سازی برشکاری جت آب همراه با ذرات ساینده با استفاده از شبکه عصبی-الگوریتم ژنتیک»، *مجله مدل‌سازی در مهندسی*، دوره ۸، شماره ۲۳، زمستان ۱۳۸۹، صفحه ۳۶-۲۵.
- [16] F. Gharagheizi and G.R. Salehi, "Prediction of enthalpy of fusion of pure compounds using an artificial neural network-group contribution method", *Thermochimica acta*, Vol. 521, No. 1, July 2011, pp. 37-40.