سیویلیکا - ناشر تخصصی مقالات کنفرانس ها و ژورنال ها
گواهی ثبت مقاله در سیویلیکا
CIVILICA.com

عنوان مقاله:
مدل سازی و پیش بینی نقطه اشتعال ترکیبات هیدرو کربنی با استفاده از شبکه عصبی

محل انتشار:
فصلنامه مدل سازی در مهندسی, دوره 19, شماره 64 (سال: 1400)

تعداد صفحات اصل مقاله: 8

نویسندگان:
حمیدرضا میرشاهولد - *مهندسی مکانیک،دانشگاه واحد تهران غرب،دانشگاه آزاد اسلامی،تهران،ایران*

رامین قاسمی اصل - *مهندسی مکانیک،دانشگاه واحد تهران غرب،دانشگاه آزاد اسلامی،تهران،ایران*

ناهید رئوفی - *مهندسی شیمی، واحد تهران جنوب - دانشگاه آزاد اسلامی، دانشکده مهندسی شیمی و پلیمر، تهران، ایران*

مهرداد ملک زاده دیرین - *مهندسی مکانیک،دانشگاه واحد تهران غرب،دانشگاه آزاد اسلامی،تهران،ایران*

خلاصه مقاله:
نقطه اشتعال یکی از مهمترین خواص احتراقی ترکیبات شیمیایی است. در این مقاله مدلی بر پایه شبکه های عصبی به منظور پیش بینی نقطه اشتعال ترکیبات هیدروکربنی از خانواده های گوناگون با دقت بالا ارائه می شود. بر این اساس، تعداد اتم های هیدروژن و کربن، دمای بحرانی، دمای جوش نرمال، ضریب بی مرکزی و آنتالپی تشکیل به عنوان متغیر های ورودی مدل انتخاب شده اند. با بررسی شبکه های عصبی گوناگون، بهترین نتایج برای یک شبکه عصبی پیش رونده با چهار نورون در لایه میانی، تابع انتقال لوگ سیگموید و الگوریتم آموزش پس انتشار خطا لونبرگ- مارکارت مشاهده شده است. با استفاده از مدل به دست آمده، میزان خطای مطلق نسبی متوسط۰/۹۷%، ۰/۹۶%، ۰/۹۶% و ۱ % به ترتیب برای داده های آموزش، ارزیابی و آزمون مدل و نتایج کلی مدل حاصل گردید.در این مدل سازی ۳۹۳ ترکیب مورد بررسی قرار گرفته شده است.در این مقاله نحوه انتخاب بهترین الگوریتم آموزش و همچنین بهترین تابع فعالساز به همراه نمودار خطای نسبی آنها در شبکه ارائه و توضیح داده شده است.

کلمات کلیدی:
نقطه اشتعال, مدل های پیش بینی کننده, شبکه های عصبی, QSPR, مدل های مبتنی بر تسهیم گروه ها

لینک ثابت مقاله در پایگاه سیویلیکا:
https://civilica.com/doc/1322106