

## پیش بینی ثابت تعادل در سیستم های شامل کربن دی اکسید با استفاده از سیستم استنتاج فازی عصبی تطبیقی

عرفان اروسخانی<sup>۱</sup>، میثم اروسخانی<sup>۲\*</sup>

دانشجوی کارشناسی مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شیمی و نفت، دانشگاه صنعتی شریف<sup>۱</sup>

دانشجوی دکتری، گروه مهندسی کامپیوتر، شعبه علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی<sup>۲</sup>

### چکیده

در این مقاله تعادل مایع-بخار سیستم های دوجزئی شامل کربن دی اکسید به عنوان یک سیال فوق بحرانی مهم در صنعت مورد بررسی قرار گرفته و به منظور محاسبه ثابت تعادل این واکنش در دما و فشارهای مختلف از سیستم استنتاج فازی عصبی تطبیقی استفاده شده است. سیستم های فازی عصبی به عنوان یک تخمین گر قدرتمند با ترکیب توانایی یادگیری شبکه های عصبی و استنتاج سیستم فازی، ابزاری رایج در مدل کردن و پیش بینی سیستم ها می باشند. ورودی های سیستم فازی عصبی، دما و فشار بوده که هر کدام بوسیله چهار تابع عضویت گوسی پوشش داده شده اند. نتایج شبیه سازی بدست آمده از تخمین ثابت تعادل بوسیله سیستم فازی عصبی تطبیقی برای سه سیستم دوجزئی شامل کربن دی اکسید و مواد متیل سالیسیلات، اوژنول و دی اتیل فتالات نشان می دهد ثابت تعادل به عنوان خروجی شبکه به مقادیر آزمایشگاهی نزدیک بوده و سیستم مذکور می تواند مقدار ثابت تعادل برای این سه تعادل را با خطای کمی تخمین بزند.

**کلمات کلیدی:** ثابت تعادل، کربن دی اکسید، سیال فوق بحرانی، سیستم استنتاج فازی عصبی تطبیقی

## ۱- مقدمه

امروزه سیالات فوق بحرانی اهمیت ویژه‌ای در علوم تحقیقاتی و صنایع شیمیایی دارند. این سیالات می‌توانند به عنوان حلال بکار روند و محیط مناسب را برای انجام برخی واکنش‌ها فراهم نمایند. کربن دی اکسید به دلیل سازگاری با محیط و پایین بودن دما و فشار بحرانی به عنوان یک سیال فوق بحرانی دارای شرایط ویژه‌ای است. همچنین کربن دی اکسید فوق بحرانی ارزان، پایدار، بی اثر و غیرقابل اشتعال است و از نظر زیست محیطی نیز قابل پذیرش است و در استخراج بسیاری از مواد کاربرد دارد. استخراج سه ماده متیل سالیسیلات، اوژنول و دی اتیل فتالات توسط کربن دی اکسید فوق بحرانی بصورت یک تعادل مایع-بخار سیستم دوجزئی انجام می‌شود. معمولاً این تعادل با استفاده از معادلات حالت تخمین زده می‌شود که نیازمند تعداد زیادی پارامتر تنظیم کننده می‌باشد و یا در آزمایشگاه و بوسیله دستگاه‌های مخصوص اندازه گیری می‌شود [۲۱-۱].

یکی از روش‌های پرکاربرد در مسائل تخمین، مدل سازی و پیش‌بینی، روش‌های هوشمند می‌باشند. شبکه‌های عصبی و سیستم‌های فازی دو نمونه قدرتمند از این روش‌ها هستند. تاکنون مطالعات بسیاری در مورد استفاده از شبکه‌های عصبی در تخمین و پیش‌بینی خواص مواد و سیستم‌های تعادلی همچون ویسکوزیته [۲-۳-۴] و ظرفیت حرارتی [۵-۶-۷] و تخمین و محاسبه تعادل مایع-بخار برای سیستم‌هایی همچون متان-اتان [۸]، محلول‌های الکترولیت [۹] و موارد دیگر [۱۰-۱۱-۱۲-۱۳] صورت گرفته شده است. همچنین مقالات [۱۴-۲۱] با استفاده از شبکه‌های عصبی تعادل در سیستم‌های شامل کربن دی اکسید را مورد بررسی قرار داده‌اند. با وجود اینکه شبکه‌های عصبی دارای قدرت یادگیری و محاسبات موازی هستند ولی مشکل استخراج دانش و عدم توانایی در استفاده از دانش قبلی را دارند. سیستم‌های فازی به عنوان یکی دیگر از روش‌های هوشمند هرچند قابلیت یادگیری ندارند ولی توانایی نمایش و بیان دانش به سبک قابل فهم برای انسان از ویژگی‌های آنها می‌باشد. با ترکیب این دو سیستم، سیستم‌های فازی-عصبی ایجاد می‌شود که با استفاده همزمان از ویژگی توانایی یادگیری شبکه‌های عصبی و تفسیرپذیری سیستم استنتاج فازی، ابزاری رایج و قدرتمند در مدل کردن سیستم‌ها می‌باشند [۱۵]. در این مقاله ثابت تعادل سه سیستم دوجزئی شامل کربن دی اکسید و مواد متیل سالیسیلات، اوژنول و دی اتیل فتالات در دما و فشارهای مختلف با استفاده از سیستم استنتاج فازی عصبی تطبیقی تخمین زده شده است.

سایر قسمت‌های این مقاله بدین صورت بیان شده‌اند: در بخش دوم سیالات فوق بحرانی و ویژگی‌های کربن دی اکسید به عنوان یک سیال فوق بحرانی مهم در صنعت و در بخش سوم سیستم فازی عصبی تطبیقی مورد بررسی قرار گرفته شده است. در بخش چهارم و پنجم مطالب مربوط به شبیه سازی، تحلیل نتایج بدست آمده از شبیه سازی و نتیجه گیری نهایی بیان شده است.

## ۲- سیالات فوق بحرانی

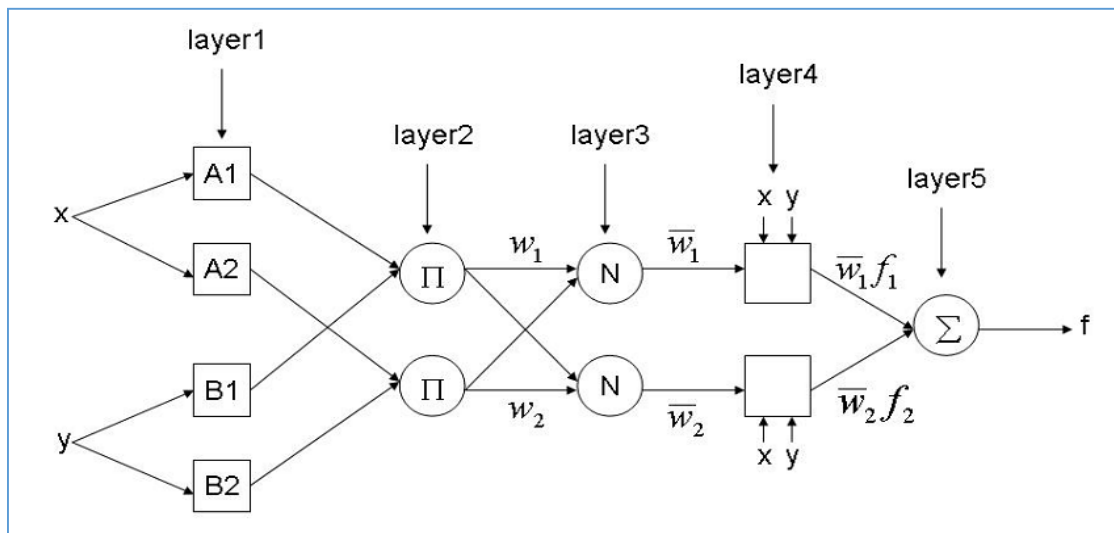
امروزه سیالات فوق بحرانی اهمیت ویژه‌ای در علوم تحقیقاتی و صنایع شیمیایی دارند. این سیالات می‌توانند به عنوان حلال بکار روند و محیط مناسب را برای انجام برخی واکنش‌ها فراهم نمایند. عمل استخراج نیز با استفاده از سیالات فوق بحرانی همچون کربن دی‌اکسید به دلیل اینکه در دمای پایین انجام می‌شود برای استخراج مواد حساس به دما بسیار مناسب بوده و نقش مهمی را در صنعت ایفا می‌کند. به عنوان مثال استخراج مشتقات نیتروفلن بوسیله کربن دی‌اکسید بحرانی امروزه حائز اهمیت شده است. یک سیال فوق بحرانی به دلیل ویسکوزیته پایین و قدرت نفوذ بالا همراه با نیروی شناوری بسیار زیاد که موجب دانسیته بالا در فصل مشترک می‌شود، سبب بروز خصوصیات انتقال جرم بهتر این سیال در مقایسه با حلال‌های معمولی می‌شود. خواص سیال‌های فوق بحرانی مابین دو فاز مایع و گاز بوده و از نظر خواص انتقالی همانند گازها بوده اما از نظر قدرت حلالیت شبیه حلال‌های مایع هستند و در کل بیشتر خواص سیالات فوق بحرانی به مایعات نزدیک است. [۲۲]

کربن دی‌اکسید به دلیل سازگاری با محیط و پایین بودن دما و فشار بحرانی دارای شرایط ویژه‌ای است. کربن دی‌اکسید فوق بحرانی ارزان، پایدار، بی‌اثر و غیرقابل اشتعال است و از نظر زیست محیطی نیز قابل پذیرش است. همه این خصوصیات باعث شده است که این ماده به عنوان یک سیال فوق بحرانی در اکثر صنایع بویژه صنایع دارویی آرایشی بکار گرفته شود. استخراج سه ماده متیل سالیسیلات، اوژنول و دی‌اتیل فتالات توسط کربن دی‌اکسید فوق بحرانی یکی دیگر از کاربردهای این ترکیب است.

در این مقاله تعادل مایع-بخار سیستم‌های دوجزئی شامل کربن دی‌اکسید مورد بررسی قرار گرفته‌اند. تاکنون مطالعات مختلفی بروی این تعادل صورت گرفته است. در مقاله [۱] با استفاده از دستگاه آزمایشگاهی ثابت تعادل مایع-بخار کربن دی‌اکسید با یکی از مواد متیل سالیسیلات، اوژنول و دی‌اتیل فتالات در دماهای ۳۰۸،۱۵، ۳۱۸،۱۵ و ۳۲۸،۱۵ کلوین و محدوده فشاری بالای ۱،۴ تا ۱۳ مگاپاسکال محاسبه شده است. متیل سالیسیلات  $C_8H_8O_3$  دارای جرم مولکولی ۱۵۲،۱ گرم بر مول به منظور تسکین دردهای عضلانی، دی‌اتیل فتالات  $C_{12}H_{14}O_4$  با جرم مولکولی ۲۲۲،۲۴ گرم بر مول حلالی مناسب برای بسیاری از ترکیبات آلی و اوژنول  $C_{10}H_{12}O_2$  دارای جرم مولکولی ۱۶۴،۲ گرم بر مول در محصولات آرایشی و دارویی به عنوان طعم دهنده اضافه می‌شود. در مقاله فوق با دما و فشار بحرانی و ضریب انستریک سه ماده مذکور و با استفاده از رابطه پنگ-رابینسون [۱۷-۱۶] فشار ترکیب دو جزئی اندازه‌گیری و اصلاح شده است. این کار در آزمایشگاه درنهایت منجر به محاسبه ثابت‌های تعادلی سیستم دوجزئی شامل کربن دی‌اکسید در دماهای مختلف شده است. [۱]

### ۳- سیستم استنتاج فازی عصبی تطبیقی<sup>۱</sup>

تعاریف متفاوتی می توان از یک سیستم فازی-عصبی ارائه نمود. از یک دیدگاه، سیستم فازی ای که از الگوریتم های یادگیری بدست آمده از تئوری شبکه عصبی برای تعیین پارامترهایش استفاده می کند، سیستم فازی-عصبی است و از دیدگاه دیگر شبکه عصبی ای که معادل یک مدل استنتاجی فازی عمل می کند سیستم فازی-عصبی نامیده می شود. بنابراین در سیستم های فازی-عصبی ویژگی های شبکه های عصبی و سیستم های فازی یعنی قابلیت محاسبات موازی و یادگیری و توانایی نمایش و بیان دانش به سبک قابل فهم برای انسان با یکدیگر جمع شده است. سیستم فازی عصبی تطبیقی با قابلیت تطبیق پذیری با محیط شامل پنج لایه می باشد که در شکل ۱ نشان داده شده است [۱۵]. قوانین در یک سیستم فازی عصبی تطبیقی بصورت مدل سوگنو بوده و بخش مقدم هر قانون، بصورت فازی و بخش تالی بصورت غیرفازی بیان می شود [۱۹]. به عنوان نمونه اگر  $x$  و  $y$  دو ورودی و  $A$  و  $B$  مجموعه های فازی این سیستم باشد، قانون اول در این سیستم بصورت زیر بیان می شود: اگر  $x$   $A_1$ ،  $y$   $B_1$  باشد، آنگاه  $f_1 = p_1x + q_1y + r_1$  [۱۸]



شکل ۱: ساختار کلی سیستم فازی عصبی تطبیقی

پنج لایه سیستم فازی عصبی تطبیقی بصورت زیر عمل می کنند:

لایه ۱: در این لایه ورودی ها از توابع عضویت عبور<sup>۲</sup> کرده و میزان عضویت هر ورودی برای هر تابع عضویت مشخص می شود.

<sup>۱</sup> Adaptive Neuro-fuzzy Inference System (ANFIS)

<sup>۲</sup> Membership Functions

$$O_{1,i} = \mu A_i(x) \quad \text{for } i = 1,2 \quad (1)$$

$$O_{1,i} = \mu B_i(y) \quad \text{for } i = 3,4$$

توابع عضویت هر تابع پارامتری مناسبی می تواند باشد که در اکثر موارد توابع گوسی انتخاب می شوند. مانند تابع زنگی زیر که در آن  $\{a_i, b_i, c_i\}$  مجموعه پارامترهای اولیه<sup>۳</sup> هستند.

$$\mu A(x) = \frac{1}{1 + \left| \frac{x - c_i}{a_i} \right|^{2b}} \quad (2)$$

لایه ۲: خروجی این لایه ضرب سیگنال های ورودی است و هر نرون در این لایه متناظر با یک قانون فازی مدل سوگنو می باشد.

$$O_{2,i} = w_i = \mu A_i(x) \times \mu B_i(y), \quad i = 1,2 \quad (3)$$

لایه ۳: نرون های این لایه، ورودی هایشان را از همه نرون های لایه قبل دریافت می کنند و قدرت آتش نرمال شده<sup>۴</sup> قانون خود را محاسبه می کنند. قدرت آتش نرمال شده برابر با نسبت قدرت آتش یک قانون به مجموع قدرت آتش همه قوانین است که در واقع سهم یک قانون را در نتیجه نهایی نشان می دهد. بنابراین خروجی این لایه نرمال شده لایه قبلی است و بصورت زیر می باشد:

$$O_{3,i} = \bar{w}_i = \frac{w_i}{w_1 + w_2}, \quad i = 1,2 \quad (4)$$

لایه ۴: این لایه، لایه مربوط به غیرفازی سازی می باشد. هر نرون این لایه به نرون متناظرش در لایه نرمالیزه کردن متصل است و همچنین مقادیر اولیه متغیرهای ورودی را نیز دریافت می کند. در این لایه پارامترهای بخش تالی<sup>۵</sup> قرار دارند.

$$O_{4,i} = \bar{w}_i f_i = \bar{w}_i (p_i x + q_i y + r_i) \quad (5)$$

لایه ۵: خروجی این لایه به عنوان خروجی کل سیستم در نظر گرفته می شود:

$$O_{5,i} = \sum_i \bar{w}_i f_i = \frac{\sum_i w_i f_i}{\sum_i w_i} \quad (6)$$

<sup>۳</sup> Premise Parameters

<sup>۴</sup> Normalized Firing Strength

<sup>۵</sup> Consequent Parameters

#### ۴- شبیه سازی و نتایج بدست آمده

ساختار سیستم استنتاج فازی عصبی تطبیقی استفاده شده در این مقاله شامل ۴ نرون (تابع عضویت گوسی) برای هر ورودی و تعداد ۱۶ قانون می باشد که در شکل ۲ نشان داده شده است. ورودی های سیستم نیز دما و فشار بوده و ثابت تعادل به عنوان خروجی در نظر گرفته می شود. در این قسمت ثابت تعادل برای سه سیستم مختلف از ترکیب کربن دی اکسید و هر یک از مواد متیل سالیسیلات، اوژنول و دی اتیل فتالات با استفاده از آموزش پارامترهای سیستم فازی عصبی تطبیقی تخمین زده شده است. آموزش پارامترها در سیستم فازی عصبی تطبیقی طراحی شده در دو مرحله و بدین صورت انجام می شود که در مرحله نخست<sup>۶</sup>، پارامترهای اولیه ثابت در نظر گرفته می شوند و با استفاده از الگوریتم آموزشی کمترین مربعات<sup>۷</sup> [۲۰] به آموزش پارامترهای بخش تالی پرداخته می شود. سپس در مرحله دوم<sup>۸</sup> پارامترهای بخش تالی ثابت بوده و این پارامترهای اولیه هستند که توسط الگوریتم آموزشی گرادیان نزولی<sup>۹</sup> [۲۰] آموزش داده می شوند. برای بررسی کارایی سیستم نیز پس از آموزش توسط داده های آموزشی<sup>۱۰</sup>، بخشی از داده های موجود به عنوان داده های تست<sup>۱۱</sup> در نظر گرفته می شود.

در جدول ۱ میانگین خطای<sup>۱۲</sup> داده های آموزشی و داده های تست نشان داده شده است. نتایج جدول ۱ نشان می دهد با افزایش تعداد تکرارهای اجرا، خطای داده های آموزش و تست کاهش می یابد. به عنوان مثال برای ماده اوژنول خطای داده های تست با افزایش تعداد تکرار از ۱,۶۳۴ به ۰,۳۲۳ کاهش یافته است. در جدول ۲ تعداد داده های آموزشی و تست را برای هر یک از سه مواد نشان می دهد. در جداول ۳ تا ۵ نیز مقایسه ای بین ثابت تعادلی واقعی و مقادیر تخمین زده شده برای داده های تست صورت گرفته شده است. نتایج این جدول ها نشان می دهد در صورت استفاده از داده های آموزشی کافی و افزایش تعداد تکرار، دقت و کارایی سیستم بالاتر رفته و شبکه مذکور می تواند مدل سازی دقیق تری از ثابت تعادل انجام دهد. به عنوان مثال در جدول ۵ ثابت تعادل واقعی برای ماده دی اتیل فتالات در دمای ۳۱۸,۱۵ درجه کلوین و فشار ۴,۳ مگاپاسکال برابر ۲,۷۳ بوده است که شبکه مورد نظر برای تکرارهای ۱۰۰م و ۳۰۰م به ترتیب مقادیر ثابت تعادل ۲,۴ و ۲,۷۱ را تخمین زده است. قابل ذکر است مقادیر ثابت تعادلی واقعی در این جدول ها از منبع [۱] استخراج شده اند.

<sup>۶</sup> Forward Phase

<sup>۷</sup> Least Square Method

<sup>۸</sup> Backward Phase

<sup>۹</sup> Gradient Descent

<sup>۱۰</sup> Training Data

<sup>۱۱</sup> Test Data

<sup>۱۲</sup> Mean Square Error

جدول ۱: مقایسه خطای داده‌های آموزشی و داده‌های تست برای سه ماده

خطای داده‌های آموزشی			خطای داده‌های تست			تعداد تکرار
متیل سالیسیلات	اوژنول	دی اتیل فتالات	متیل سالیسیلات	اوژنول	دی اتیل فتالات	
۰,۱۲۹۷	۰,۰۹۵۲	۰,۰۹۹۴	۰,۵۵۶۱	۱,۶۳۴	۰,۱۹۶۸	۱۰۰
۰,۰۵۵۶	۰,۰۲۷۳	۰,۰۲۱۰	۰,۳۵۷۲	۰,۳۲۳	۰,۰۷۳۴	۳۰۰

جدول ۲: تعداد داده‌های آموزشی و تست برای سه ماده

ماده	تعداد داده‌های آموزشی	تعداد داده‌های تست
متیل سالیسیلات	۱۷	۶
اوژنول	۱۶	۵
دی اتیل فتالات	۲۱	۷

جدول ۳: مقایسه نتایج بدست آمده از ثابت تعادلی تخمینی با مقدار واقعی برای داده‌های تست ماده متیل سالیسیلات

دما	فشار	ثابت تعادل واقعی	ثابت تعادل تخمینی با ۱۰۰ بار تکرار	ثابت تعادلی تخمینی با ۳۰۰ بار تکرار
۳۰۸,۱۵	۵,۵۹۹۰	۲,۲۸۶۰	۲,۶۷۰	۲,۴۲
۳۱۸,۱۵	۴,۳۲۴۰	۳,۵۶۱۰	۲,۷۷	۳,۱۲
۳۱۸,۱۵	۸,۲۷۲۰	۱,۸۱۴۰	۱,۷۶	۱,۷۹
۳۲۸,۱۵	۱,۵۴۹۰	۱۱,۳۸۶۰	۱۰,۵	۱۰,۷
۳۲۸,۱۵	۶,۹۶۱۰	۲,۴۶۳۰	۲,۹۵	۲,۶۳
۳۲۸,۱۵	۱۲,۰۹۸۰	۱,۵۶۹۰	۱,۵۴	۱,۵۵

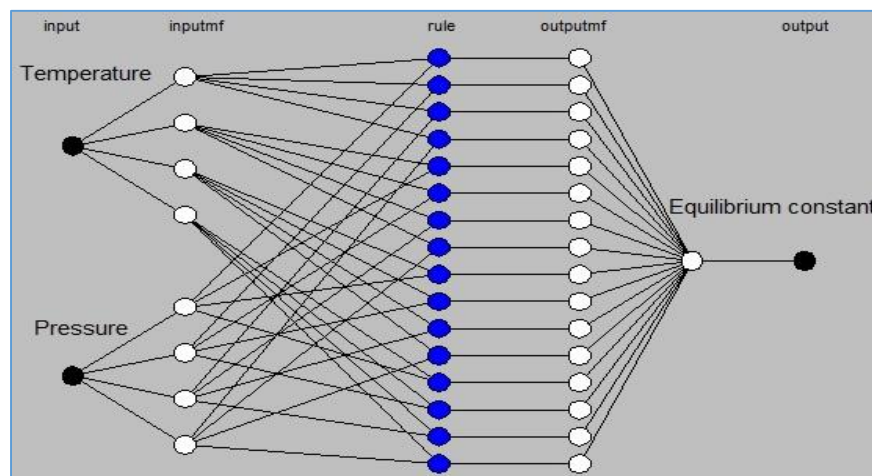
جدول ۴: مقایسه نتایج بدست آمده از ثابت تعادلی تخمینی با مقدار واقعی برای داده‌های تست ماده اوژنول

ثابت تعادل واقعی	ثابت تعادل تخمینی با ۱۰۰ بار تکرار	ثابت تعادلی تخمینی با ۳۰۰ بار تکرار	فشار	دما
۲,۷۰۳	۲,۲۶	۲,۳۴	۴,۲۵۲	۳۰۸,۱۵
۲,۵۲۷	۳,۰۶	۲,۹۳	۵,۵۴۸	۳۱۸,۱۵
۱,۴۳۹	۴,۹۷	۴,۵۹	۹,۷۶۱	۳۱۸,۱۵
۲,۸۷۰	۳,۴۷	۳,۳۲	۵,۶۵۲	۳۲۸,۱۵
۱,۵۱۸	۱,۵۱	۱,۵۲	۱۱,۲۳۶	۳۲۸,۱۵

جدول ۵: مقایسه نتایج بدست آمده از ثابت تعادلی تخمینی با مقدار واقعی برای داده‌های تست ماده دی اتیل فتالات

ثابت تعادل واقعی	ثابت تعادل تخمینی با ۱۰۰ بار تکرار	ثابت تعادلی تخمینی با ۳۰۰ بار تکرار	فشار	دما
۲,۸۷۲۰	۲,۵۵	۲,۷۵	۳,۵۳۲۰	۳۰۸,۱۵
۱,۷۷۱۰	۱,۷۹	۱,۷	۶,۳۰۷۰	۳۰۸,۱۵
۲,۷۳۳۰	۲,۴	۲,۷۱	۴,۳۰۷۰	۳۱۸,۱۵
۱,۷۷۶۰	۱,۸۴	۱,۷	۷,۱۳۴۰	۳۱۸,۱۵
۴,۴۲۶۰	۴,۵۶	۴,۴۹	۲,۸۵۹۰	۳۲۸,۱۵
۲,۰۱۰۰	۲,۱۸	۱,۹۴	۷,۰۳۱۰	۳۲۸,۱۵
۱,۵۶۸۰	۱,۵۲	۱,۶۲	۱۰,۰۹۹	۳۲۸,۱۵





شکل ۲: ساختار سیستم فازی عصبی طراحی شده با ۴ نرون برای هر ورودی و ۱۶ قانون

## ۵- نتیجه گیری

در این مقاله به منظور تخمین و پیش بینی ثابت تعادلی واکنش‌های سیستم دوجزئی کربن دی اکسید از سیستم استنتاج فازی عصبی تطبیقی استفاده شده است. نتایج بدست آمده از میانگین خطای داده‌های آموزشی و داده‌های تست برای شبیه‌سازی سه سیستم دوجزئی کربن دی اکسید با متیل سالیسیلات، اوزنول و دی‌اتیل فتالات نشان می‌دهد سیستم فازی عصبی تطبیقی به دلیل استفاده همزمان از ویژگی‌های سیستم‌های فازی و شبکه‌های عصبی در یادگیری و استفاده از دانش قبلی مربوطه می‌تواند بخوبی ثابت تعادل را برای این سیستم‌ها با خطای قابل قبولی تخمین بزند و ثابت تعادل تخمینی دارای مقادیری نزدیک به مقدار آزمایشگاهی می‌باشد.

## مراجع

- [1] K.W. Cheng, S.J. Kuo, M. Tang, Y.P. Chen, Vapor-liquid equilibrium at elevated pressures of binary mixtures of carbon dioxide with methyl salicylate, eugenol, and diethyl phthalate, J. Supercritical Fluids, 18 (2000) 87-99.
- [2] F. Ghaderi, A.H. Ghaderi, B. Najafi, N. Ghaderi, Viscosity prediction by computational method and artificial neural network approach: The case of six refrigerants, J. Supercrit. Fluids 81 (2013) 67-78.
- [3] F. Yousefi, H. Karimi, M.M. Papari, Modeling viscosity of nano fluids using diffusional neural networks, J. Mol. Liq. 175 (2012) 85-90.
- [4] G. Cristofoli, L. Piazza, G. Scalabrin, A viscosity equation of state for R134 a through a multi-layer feedforward neural network technique, Fluid Phase Equilib. 199 (2002) 223-236.
- [5] A. Habibi, M. Esmailian, Prediction Partial Molar Heat Capacity at Infinite Dilution for Aqueous Solutions of Various Polar Aromatic Compounds over a Wide Range of Conditions Using Artificial Neural Networks, Bull. Korean Chem. Soc. 28 (2007) 1477-1484.

- [6] H. Golmohammadi, Z. Dashtbozorgi, W.E. Acree, Prediction of Heat Capacities of Hydration of Various Organic Compounds Using Partial Least Squares and Artificial Neural Network, *J. Solution Chem.* 42 (2013) 338–357.
- [7] M. Lashkarbolooki, A. Zeinolabedini, S. Ayatollahi, Artificial neural network as an applicable tool to predict the binary heat capacity of mixtures containing ionic liquids, *Fluid Phase Equilib.* 324 (2012) 102–107.
- [8] R. Sharma, D. Singhal, R. Ghosh, A. Dwivedi, Potential applications of artificial neural networks to thermodynamics: vapor-liquid equilibrium predictions, *Comput. Chem. Eng.* 23 (1999) 385–390.
- [9] M.C. Iliuta, I. Iliuta, F. Larachi, Vapour-liquid equilibrium data analysis for mixed solvent electrolyte systems using neural network models, *Chem. Eng. Sci.* 55 (2000) 2813–2825.
- [10] L. Govindarajan, P.L. Sabarathinam, Prediction of Vapor-liquid Equilibrium Data by Using Radial Basis Neural Networks, *Chem. Biochem. Eng.* 20 (2006) 319–323.
- [11] S. Mohanty, Estimation of vapour liquid equilibria for the system carbon dioxide difluoromethane using artificial neural networks, *Int. J. Refrig.* 29 (2006) 243–249.
- [12] S. Mohanty, Estimation of vapour liquid equilibria of binary systems, carbon dioxide–ethyl caproate, ethyl caprylate and ethyl caprate using artificial neural networks, *Fluid Phase Equilib.* 235 (2005) 92–98.
- [13] S. Urata, A. Takada, J. Murata, T. Hiaki, A. Sekiya, Prediction of vapor–liquid equilibrium for binary systems containing HFEs by using artificial neural network, *Fluid Phase Equilibria.* 199 (2002) 63–78.
- [14] M. Lashkarbolooki, Z.S. Shafipour, A. Zeinolabedini Hezave, H. Farmani, Use of artificial neural networks for prediction of phase equilibria in the binary system containing carbon dioxide, *J. Supercrit. Fluids* 75 (2013) 144–151.
- [15] J.S.R. Jang, “ANFIS: adaptive-network-based fuzzy inference system”, *IEEE Trans. Systems Man and Cybernet*, 1993.
- [16] G. Soave, Equilibrium constants from a modified Redlich–Kwong equation of state, *Chem. Eng. Sci.* 27 (1972) 1197–1203.
- [17] D.Y. Peng, D.B. Robinson, A new two constant equation of state, *Ind. Eng. Chem. Fundam.* 15 (1976) 59–64.
- [18] L. A. Zadeh, Fuzzy sets. *Information and control*, 8:338-353, 1965.
- [19] T. Takagi and M. Sugeno, "Derivation of fuzzy control rules form human operators control actions", in *Proc, IFAC Symp. Fuzzy Inform, Knowledge Representation and Decision Analysis*, 1983, pp 55-60.
- [20] D. B. Parker, "Optimal algorithms for adaptive networks", in *Proc IEEE Int, Conf. Neural Networks*, 1987, pp.593-600.

[۲۱] س. المعی، سوده، و ع. ترجمان نژاد، استفاده از شبکه عصبی برای پیش بینی ثابت تعادل در سیستم های شامل کربن دی اکسید، اولین همایش ملی تکنولوژی های نوین در شیمی و پتروشیمی، شرکت هم اندیشان چرخه علم و صنعت، ۱۳۹۳.

[۲۲] ا. اسمعیلی فر، س. روشن ضمیر و م. ایکانی، نانوذرات و سیالات فوق بحرانی، اولین کنفرانس پتروشیمی ایران، تهران، شرکت ملی صنایع پتروشیمی، ۱۳۸۷.

## Prediction of the Equilibrium Constant in Systems Containing Carbon Dioxide Using Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System

E.Orouskhani<sup>1</sup>, M.Orouskhani<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Bsc Student, Chemical and Petroleum Engineering Department, Sharif University of Technology, Tehran, iran.

<sup>2</sup> PhD Candidate, Department of Computer Engineering, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.

orouskhani@gmail.com

### Abstract

This paper considers vapor–liquid equilibria of binary systems containing CO<sub>2</sub> as a supercritical fluid and in order to estimate the equilibrium constant, Adaptive neuro-fuzzy inference system (ANFIS) is used. Neuro-Fuzzy systems as a powerful estimator are common tools for modeling and systems identification. Temperature and pressure are inputs of the neuro-fuzzy system that are covered by four Gaussian membership functions. Simulation results for estimating of equilibrium constant for methyl salicylate, eugenol, and diethyl phthalate at 308.15, 318.15, and 328.15 K show that ANFIS can model and estimate equilibrium constant of these systems with low training and test error.

**Key Words:** ANFIS, Equilibrium Constant, CO<sub>2</sub>, Supercritical Fluid.