

تولید الماس مصنوعی با گاز متان خروجی از فلر پالایشگاه بندرعباس به کمک شبکه هوش مصنوعی و به کمک شبیه سازی با نرم افزار قدرتمند LAMMPS

سید سجاد روان سالار^{۱*}، احسان حاتمی پور^۲، سید ساعد روان سالار^۳، سلمان رضائی مقدم^۴، پیمان رهبرنیا^۵، شهاب الدین سعیدی^۶

^۱ کارشناسی ارشد مهندسی نفت، گرایش حفاری و بهره برداری، دانشگاه آزاد اسلامی واحد امیدیه و شاغل در شرکت ملی پخش فرآورده های نفتی ایران، منطقه هرمزگان، Ravansalar63@gmail.com

^۲ کارشناسی ارشد نرم افزار، دانشگاه آزاد اسلامی واحد یاسوج

^۳ کارشناسی ارشد برق الکترونیک - ابزارهای میکرو نانو الکترونیک، دانشگاه غیرانتفاعی پاسارگاد شیراز

^۴ کارشناسی مهندسی شیمی، دانشگاه آزاد اسلامی واحد قوچان و شاغل در بخش ذخیره سازی گاز پالایشگاه شهید هاشمی نژاد، سرخس (شیفت B)

^۵ کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی قوچان و شاغل در بخش ذخیره سازی گاز پالایشگاه شهید هاشمی نژاد، سرخس (شیفت D)

^۶ دکترای مهندسی شیمی، دانشگاه فردوسی مشهد و شاغل در بخش ذخیره سازی گاز پالایشگاه شهید هاشمی نژاد، سرخس (شیفت B)

چکیده:

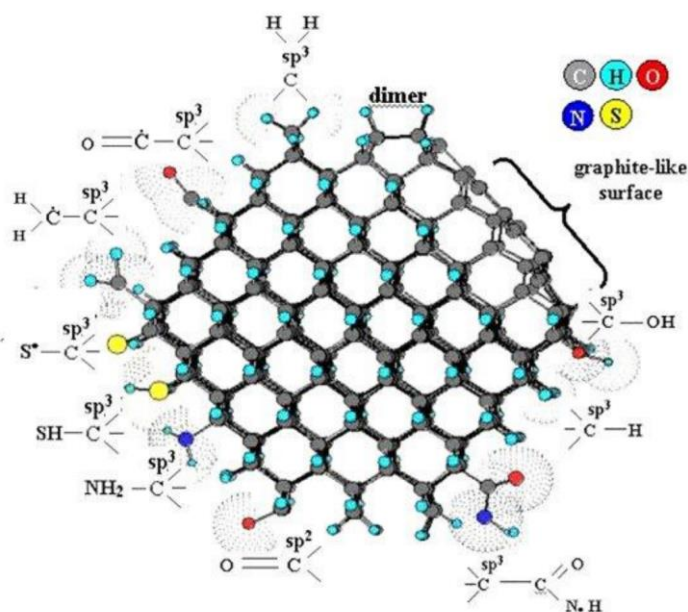
در سال های اخیر الماس مصنوعی به عنوان یک ماده گران قیمت و حیاتی، انقلابی نوین به پا کرده است. الماس به واسطه دارا بودن ویژگی های مهمی از قبیل رسانندگی گرمایی بالا، سختی، مقاومت الکتریکی و همچنین ضریب اصطکاک پایین، گذردهی امواج الکترومغناطیسی و ارزشمندی بسیار بالا مورد توجه قرار گرفته است. در این مقاله به بررسی امکان تشکیل الماس مصنوعی از گاز متان خروجی از فلر پالایشگاه بندرعباس به کمک شبیه سازی با نرم افزار لمپس پرداخته شده است. نتایج حاکی از این است که الماس مصنوعی قابلیت تشکیل دارد.

کلمات کلیدی: الماس مصنوعی، گاز فلر، متان، شبیه ساز لمپس.

مقدمه:

الماس خصوصیات و ویژگی های فراوانی دارد نظیر:

- الماس ماده نوری ایده آلی است که توانایی انتقال طیف نوری فروسرخ تا فرابنفش را داراست.
 - شاخص بازتابش بسیار بالایی دارد.
 - خواص نیمه رسانایی قابل توجهی دارد. شکست الکتریکی آن به طور متوسط ۵۰ برابر نیمه رساناهای متداول است.
 - در برابر تابش نوترونی به شدت مقاوم است.
 - سخت ترین ماده شناخته شده است.
 - در مجاورت هوا روانی طبیعی فوق العاده ای دارد (مانند تفلون)
 - استحکام و صلیبیت بسیار بالایی دارد.
 - تنها به وسیله اکسیژن خالص می توان الماس را سوزاند.
 - استفاده در مدارهای نیروگاهی و ترانزیستورهای اثر میدان با فرکانس بالا، روغن های روان کننده، تولید جواهرات زینتی، ابزارهای حافظه مغناطیسی و...
- در شکل ۱ می توان ساختار الماس و گروه های شیمیایی موجود در سطح آن را مشاهده کرد.



شکل ۱: ساختار الماس به همراه گروه های شیمیایی موجود در سطح الماس

ترکیب عناصر موجود در الماس معمولاً به صورت زیر است:

۸۵-۸۷٪ کربن، ۰,۱ تا ۲,۵٪ ازت، ۰,۵ تا ۲,۵٪ هیدروژن و بقیه اکسیژن است که تمامی اتم های اکسیژن و اتم های هیدروژن متعلق به گروه های شیمیایی سطح الماس می باشد.

روش های ساخت الماس مصنوعی:

الماس های آزمایشگاهی که به دست انسان ساخته و پرداخت می شوند به دو روش ساخته می شوند ولی ما قصد داریم در این مقاله روش سومی پیشنهاد، شبیه سازی و بررسی کنیم که انقلابی در این زمینه ایجاد خواهد کرد. دو روش رایج به شرح زیر می باشند:

۱. در فشار و دمای بالا ساخته می شوند یا به اصطلاح (HPHT)^۱ نیز گفته می شود.

۲. رسوب بخار شیمیایی که مولکول های گازهای خاص را با اتم های کربن و هیدروژن تجزیه می کنند به این روش رسوب بخار شیمیایی یا (CVD)^۲ گفته می شود.

۱. فشار و دمای بالا (HPHT):

یکی از ابتدایی و سنتی ترین روش های پرورش و تولید الماس با فشار و حرارت بالا است. در این روش که شباهت بالایی به شیوه تشکیل الماس درون زمین دارد، از کربن استفاده می کنند. گرافیت یا کربن در ابتدا درون یک کپسول در دستگاه پرس مخصوص HPHT قرار می گیرد. سپس توسط الکتریسیته بر روی آن فشار وارد می کنند تا زمانی که دستگاه مخصوص این کار تا دمای ۱۳۰۰ تا ۱۶۰۰ درجه سانتی گراد گرم شود. هنگامی که دستگاه به میزان دمای موردنظر رسید، فلز مذاب موجود در آن، کربن با خلوص زیاد را در خود حل می کند. در این شرایط اتم های کربن بر روی قطعه الماس رسوب می کنند. با تداوم این کار، پس از گذشت چند روز الماس ساخته می شود. در نهایت کریستال ساخته شده، توسط دستگاه های مخصوص تراش داده می شوند. نکته ای که برای ساخت الماس مصنوعی در این روش وجود دارد، درصد خلوص آن است. درواقع به دلیل ترکیب شدن یک محلول فلزی با کربن، میزان خلوص این نوع الماس، نسبت به الماس طبیعی متفاوت است. این نوع از الماس های مصنوعی هشت وجهی اند و به صورت کیوبیک تشکیل می شوند.

^۱ High Pressure High Temperature

^۲ Chemical Vapor Deposition

این ویژگی باعث تفاوت ساختاری و الگوهای رشد داخلی میان الماس طبیعی و مصنوعی شده است. از آنجا که نیتروژن باعث زرد شدن رنگ الماس می‌شود، باید در هنگام ساخت الماس آزمایشگاهی، این گاز را از محیط پرورش آن خارج کرد. به طور کلی، نمونه‌های بی رنگ الماس، در طول زمان بیشتری تشکیل می‌شوند و نیاز به کنترل دما دارند.

۲. رسوب بخار شیمیایی (CVD):

ساخت الماس مصنوعی در این روش با به کارگیری فشار شدید صورت می‌گیرد. برای این کار قطعه‌ای از الماس را در محفظه مایکروویو می‌گذارند. بعد از آن، گاز طبیعی یا متان را با تابش مایکروویو به درون آن می‌فرستند. زمانی که حرارت تقریباً ۹۰۰ تا ۱۲۰۰ درجه سانتی‌گراد باشد، یک توپ پلاسمایی در محفظه تشکیل می‌شود. پرتوی ماکروویو باعث ته‌نشین شدن کربن از ابر و رسوب آن بر روی قطعه می‌گردد. در نهایت اتم‌های کربن، توسط گاز موجود در محفظه، تجزیه و سپس تبلور پیدا می‌کنند. این روند ۱۰ هفته زمان می‌برد اما در نهایت الماس مصنوعی ساخته شده با این روش از مرغوبیت خوبی برخوردار است به طوری که تشخیص آن از نوع طبیعی نیازمند دستگاه‌های خاصی است که در آزمایشگاه الماس و یا گوهرشناسی وجود دارند. در طی این فرآیند الماس‌ها، هر چند روز برداشته می‌شوند تا پولیش داده شوند. این کار باعث از بین رفتن کربن‌های غیر الماس شده می‌شود. از نکات مهم این روش تشکیل گرافیت سیاه و رنگ قهوه‌ای بر روی بلورها است. در این حالت گرافیت سیاه برداشته می‌شود و در صورتی که بلور قهوه‌ای‌رنگ باشد تحت عملیات حرارتی قرار می‌گیرد. جالب است بدانید بیشتر الماس‌های رشد یافته به روش CVD در ابتدا قهوه‌ای هستند و سپس توسط فرایند آنیل شدن یا بازپخت به روش HPHT رنگ‌زدایی می‌شوند.

از جمله تفاوت‌های میان دو روش حرارت بالا و رسوب بخار شیمیایی می‌توان به کم‌هزینه‌تر بودن تجهیزات CVD اشاره کرد اما این در صورتی است که گاهی الماس‌های رشد یافته آن نیازمند بهسازی ثانویه جهت بهبود رنگشان هستند.

روش سومی که می‌خواهیم در این مقاله صحبت کنیم استفاده از گاز متان خروجی از فلر پالایشگاه‌ها است که پس از خالص سازی از گاز متان خروجی، الماس مصنوعی تولید کنیم. بنابراین می‌توان گفت:

۳. تولید الماس مصنوعی به کمک گاز متان (CH_4) خروجی از فلر پالایشگاه بندرعباس:

ما مشخصات گاز فلر خروجی از پالایشگاه بندرعباس را از این پالایشگاه تحویل گرفته و با شبیه سازی با نرم افزار شبیه ساز دینامیک ملکولی LAMMPS (لمپس) می‌خواهیم این روش سوم را آنالیز و بررسی کنیم.

اینکه نرم افزار لمپس چیست و چه ویژگی هایی دارد می توان گفت Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator یا به اختصار LAMMPS، یک نرم افزار شبیه سازی مولکولی قدرتمند است. از ترجمه این نام می توان به قدرت لمپس، در شبیه سازی های انبوه اتمی و مولکولی در مقیاس بزرگ و به صورت موازی پی برد. بنابراین نرم افزار لمپس قدرت فوق العاده ای در مطالعه رفتار اتم ها و مولکول ها در سیستم های مختلف به ویژه سیستم های کربنی دارد. این نرم افزار به شما امکان می دهد تا انواع مختلفی از سیستم های مولکولی را شبیه سازی کنید. در واقع LAMMPS یک موتور شبیه سازی مولکولی است که برای تعیین مسیر واکنش اتم ها و مولکول ها در سیستم، می تواند ویژگی های مختلفی را برای مواد محاسبه کند. مانند: انرژی های پتانسیلی، دینامیک اتم ها، تغییرات حرکتی، دما، فشار و هزاران پارامتر فیزیکی و شیمیایی دیگر.

در کل LAMMPS یک ابزار قدرتمند برای محققان و مهندسان در زمینه های مختلف از شیمی تا فیزیک و مهندسی مواد است که به آن ها امکان مطالعه رفتار مولکولی مواد را می دهد. این نرم افزار از معادلات نیوتن استفاده می کند تا حرکت اتم ها و مولکول ها را در یک سیستم مشخص کند و مشخصات مختلف مواد را برای مطالعه و تحلیل به کاربران ارائه می دهد. بخشی از کاربردهای اصلی LAMMPS عبارتند از:

- بررسی رفتار حرارتی:

LAMMPS به کمک شبیه سازی مولکولی می تواند ویژگی های حرارتی مواد مانند دما، فشار، گرمایش، انتقال حرارت، و سایر ویژگی های حرارتی را مطالعه کند.

- بررسی ویژگی های الکترونیک:

LAMMPS برای مدل سازی و مطالعه خواص الکترونیکی و اپتیکال مواد نیز مورد استفاده قرار می گیرد شامل انرژی های الکترونیکی، جذب نور، تراکم الکترونی و خواص الکترونیکی دیگر.

- مدل سازی ترکیبات شیمیایی:

این نرم افزار به شیمی دانان امکان مدل سازی ترکیبات شیمیایی مختلف از جمله مولکول های آلی و معدنی را می دهد تا ویژگی های شیمیایی و فیزیکی آنها را مطالعه کنند.

- تحلیل تاثیر تغییر پارامترها و شرایط اولیه:

محققان می توانند با استفاده از LAMMPS تاثیر تغییر پارامترهای مختلف مانند دما، فشار، تراکم و ارتباطات مولکولی را بر رفتار مواد مورد مطالعه قرار دهند. این نرم افزار در علوم مختلف از جمله فیزیک، شیمی، مهندسی

مواد، بیوشیمی، نانوتکنولوژی و دیگر حوزه‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد و به تحلیل و شبیه‌سازی مولکولی سیستم‌های متنوع کمک می‌کند.

مزایای نرم افزار لمپس:

متن باز و رایگان:

LAMMPS یک نرم‌افزار منبع باز است، به این معنا که کدهای منبع آن در دسترس عموم قرار دارند. کاربران می‌توانند مشکلات را دوباره گزارش کرده و بهبود های لازم را اعمال کنند.

انعطاف پذیری بالا:

LAMMPS ابزاری بسیار انعطاف‌پذیر است و قابلیت تعریف مدل‌های مولکولی سفارشی یا پارامترهای خاص را فراهم می‌کند.

پشتیبانی از مدل‌های مختلف:

این نرم‌افزار انواع مدل‌های تعامل اتمی و مولکولی را پشتیبانی می‌کند، بنابراین می‌توانید برای مطالعه مواد مختلف از مدل‌های متفاوتی استفاده کنید.

کارایی بالا:

LAMMPS بهینه‌سازی‌های بسیاری دارد که از کارایی بالایی برخوردار است و به شما امکان می‌دهد تا شبیه‌سازی‌های پیچیده را با تعداد بزرگی از اتم‌ها را در حد فمتو ثانیه انجام دهید و در هر فمتو ثانیه تمامی خواص فیزیکی، شیمیایی و ریاضی آن شبیه سازی به شما داده می‌شود.

حال به تولید الماس مصنوعی به کمک گاز متان (CH_4) خروجی از فلر پالایشگاه بندرعباس می‌پردازیم:

مشخصات گاز خروجی از فلر پالایشگاه بندرعباس به شرح زیر می‌باشد:

REQ.	PROPERTY	UNIT	V.21	V.22	TEST METHOD
1	H2	%	57.7	44.1	G.C
2	C1	%	9.9	26.8	G.C
3	C2	%	3.8	5.8	G.C
4	C3	%	7.8	8.0	G.C
5	IC4	%	4.0	2.8	G.C
6	NC4	%	10.2	5.9	G.C
7	IC5	%	2.3	1.6	G.C
8	NC5	%	1.6	1.4	G.C
9	C6+	%	0.9	1.1	G.C
10	N2	%	0.0	0.0	G.C
11	CO2	%	0.0	0.0	G.C
12	H2S	%	1.8	2.5	G.C
13	H2O	%	0.0	0.0	G.C
توضیحات : گاز ورودی به فلر					
☐ تطابق ☐ عدم تطابق ۲- نظریه مهندسی پالایش : ۳- امضاء مهندسی پالایش :					
۱- تأیید کننده آزمایشگاه :					

در ابتدای کار یکی از پارامترهای مهم در نرم افزار شبیه ساز دینامیک ملکولی لمپس محاسبه پارامتر پتانسیل لنارد-جونز کربن می باشد.

بررسی پتانسیل لنارد- جونز برای کربن به صورت فرمولی و نرم افزاری:

پتانسیل لنارد- جونز یک پتانسیل با تقریب بسیار خوب برای توصیف برهمکنش میان دو ذره (اتم یا ملکول) است که در فاصله های دور، نیروی جاذبه و در فاصله های نزدیک نیروی دافعه دارند. نیروی جاذبه نیروی وندروالسی و نیروی دافعه نیروی رانش ناشی از همپوشانی ابر الکترونی دو ذره است (نیروی پائولی که از اصل طرد پائولی می آید). رابطه ریاضی این پتانسیل به شکل زیر است:

$$V(r) = 4 \epsilon \left(\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right)$$

در این رابطه ϵ نشانگر عمق چاه پتانسیل (قدرت برهمکنش) است و σ فاصله ای است که در آن پتانسیل صفر می شود. در ادامه پتانسیل لنارد- جونز برای کربن به صورت فرمولی و نرم افزاری محاسبه شد.

- محاسبه پتانسیل لنارد - جونز کربن:

حل به صورت فرمولی:

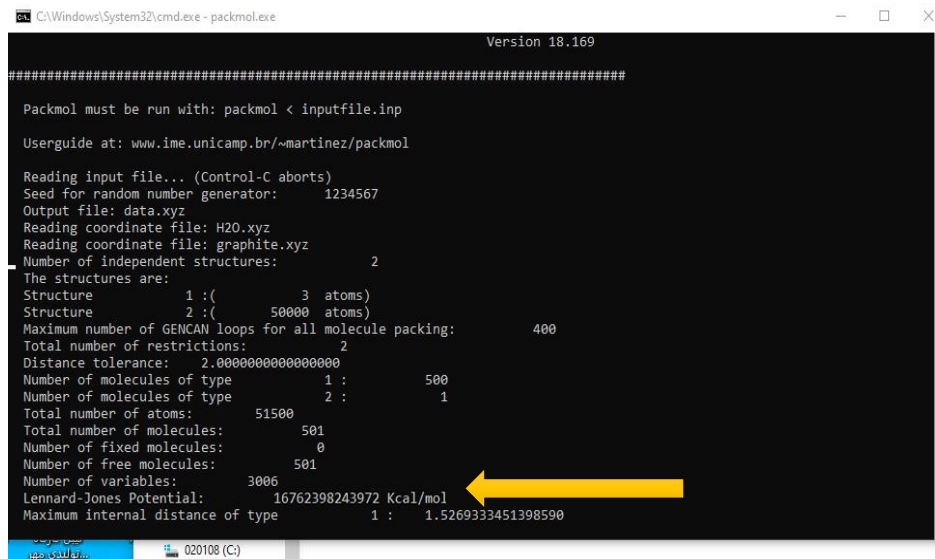
$$\sigma_{AB} = \frac{1}{2}(\sigma_{AA} + \sigma_{BB}) = \frac{1}{2}(3.2\text{\AA} + 3.51\text{\AA}) = 3.355\text{\AA}$$

$$\epsilon_{AB} = \sqrt{\epsilon_{AA} \times \epsilon_{BB}} = \sqrt{0.01 \times 0.215} = 0.046 \frac{\text{Kcal}}{\text{mol}}$$

$$r_{ij} = r_j - r_i = 0.56\text{\AA} - 0.33\text{\AA} = 0.230\text{\AA}$$

$$V(r, j) = 4 \times 0.046 \times \left(\left(\frac{3.35 \times 10^{-10}}{0.230 \times 10^{-10}} \right)^{12} - \left(\frac{3.335 \times 10^{-10}}{0.230 \times 10^{-10}} \right)^6 \right) \\ = 1.6763 \times 10^{13} \frac{\text{Kcal}}{\text{mol}}$$

حل با نرم افزار لمپس:



```

C:\Windows\System32\cmd.exe - packmol.exe
Version 18.169
#####
Packmol must be run with: packmol < inputfile.inp
Userguide at: www.ime.unicamp.br/~martinez/packmol

Reading input file... (Control-C aborts)
Seed for random number generator: 1234567
Output file: data.xyz
Reading coordinate file: H2O.xyz
Reading coordinate file: graphite.xyz
Number of independent structures: 2
The structures are:
Structure 1 : ( 3 atoms)
Structure 2 : ( 50000 atoms)
Maximum number of GENCAN loops for all molecule packing: 400
Total number of restrictions: 2
Distance tolerance: 2.0000000000000000
Number of molecules of type 1 : 500
Number of molecules of type 2 : 1
Total number of atoms: 51500
Total number of molecules: 501
Number of fixed molecules: 0
Number of free molecules: 501
Number of variables: 3006
Lennard-Jones Potential: 16762398243972 Kcal/mol
Maximum internal distance of type 1 : 1.5269333451398590
    
```

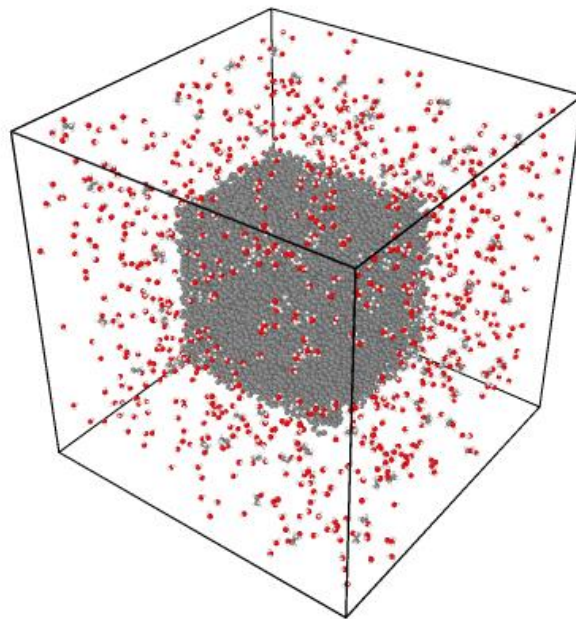
$$V(r, j) = 1.6762 \times 10^{13} \frac{\text{Kcal}}{\text{mol}}$$

با این محاسبات متوجه می شویم که نرم افزار به درستی کار می کند و اعداد محاسبه شده با اعداد گزارش شده در رفرنس های قدیمی و جدید، تطابق کامل دارد.

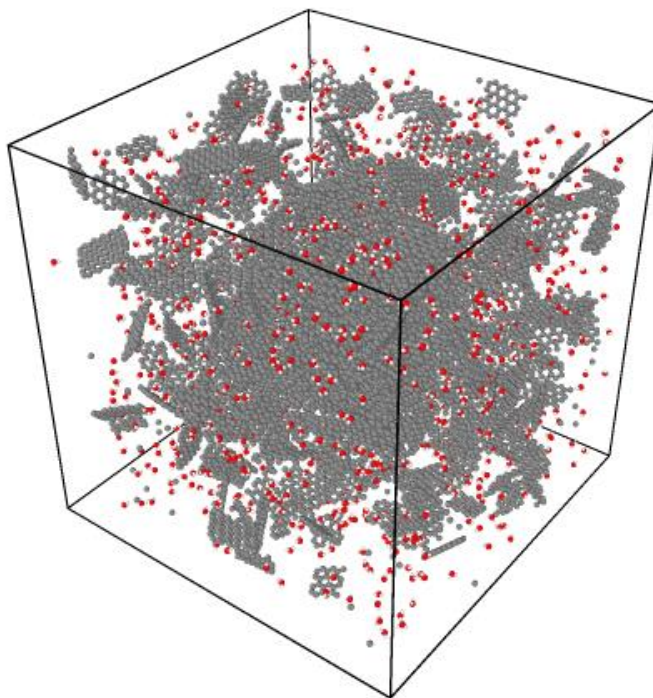
حال برنامه نویسی و مشخصات گاز خروجی از فلر پالایشگاه را به نرم افزار لمپس به عنوان ورودی می دهیم و از نرم افزار می خواهیم مراحل الماس مصنوعی ساخته شده و مشخصات شیمیایی و فیزیکی آن را به ما بدهد. نرم افزار حدود ۶ ساعت به طور پیوسته در حال RUN می باشد تا بتواند محاسبات را انجام دهد (با گام ۱، ۰).

لازم به توضیح است صفحات خاکستری صفحات کربن هستند (به صورت صفحات لانه زنبوری شش وجهی).

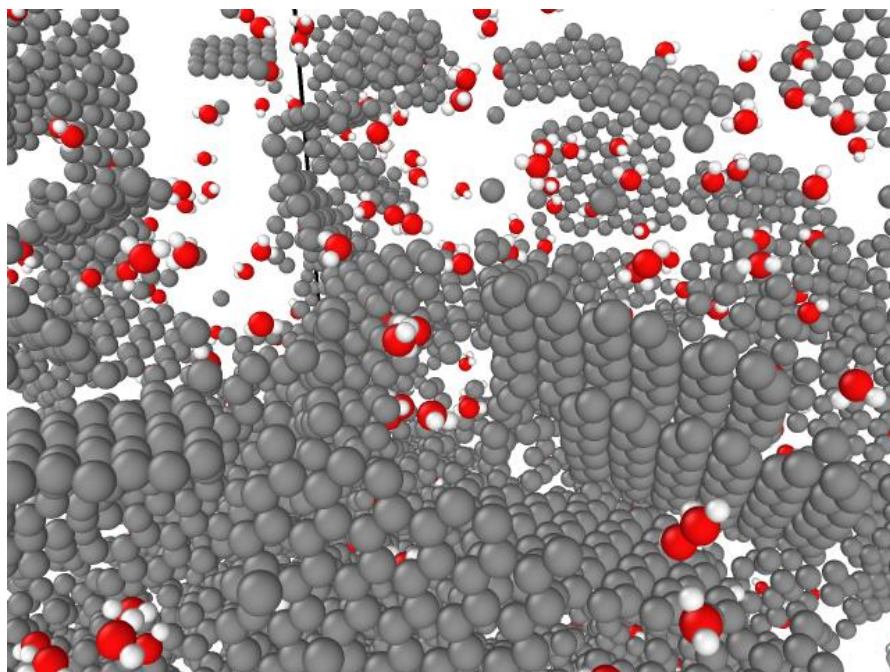
در ادامه تصاویر و نتیجه محاسبات آورده شده است. نتایج حاکی از تشکیل الماس می باشد. همچنین مشخصات فیزیکی و شیمیایی حاصل شده از نرم افزار برای الماس با نتایج فیزیکی و شیمیایی درج شده در رفرنس ها برای الماس مطابقت کامل دارد. این بدان معناست که خروجی متان (کربن) خروجی از گاز فلر پالایشگاه را می توان به الماس مصنوعی با ارزش قیمتی بالا تبدیل کرد.



شکل ۲: گاز خروجی متان (کربن) خروجی از فلر در یک باکس شبیه سازی در نرم افزار دینامیک ملکولی لمپس



شکل ۳: تکه های کربن در حال جدا شدن و تواما الماس در حال شکل گرفتن (نمای دور)



شکل ۴: الماس در حال تشکیل (نمای نزدیک)

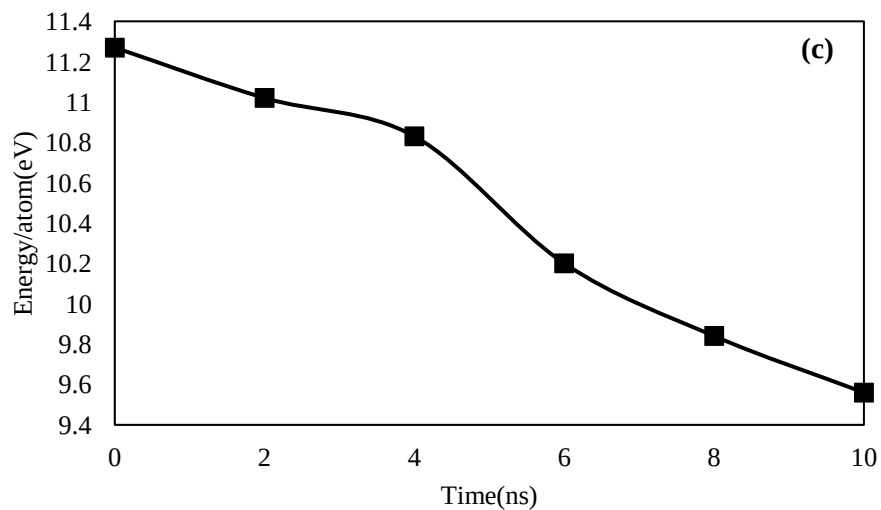
جدول ۱: کمیت های محاسبه شده توسط نرم افزار لمپس

انرژی جنبشی	۱۵۴۹۶ الکترون ولت
انرژی پتانسیل	۱۶۸۳۲۱ الکترون ولت
انرژی کل	۱۹۳۵۷۴ الکترون ولت
انرژی پیوندی	۸۶۹۵ الکترون ولت
آنتالپی	۱۴۱۲۶۴ الکترون ولت

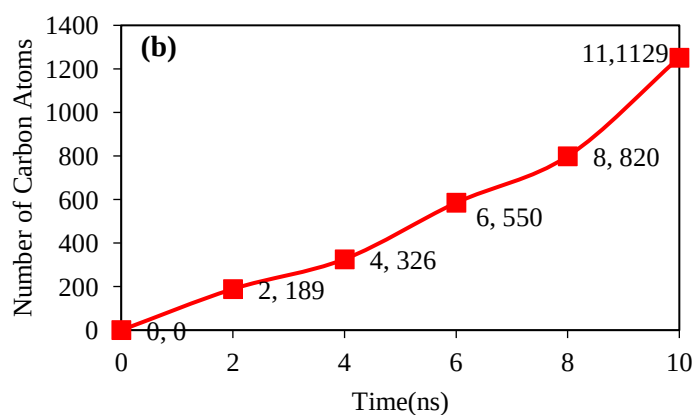
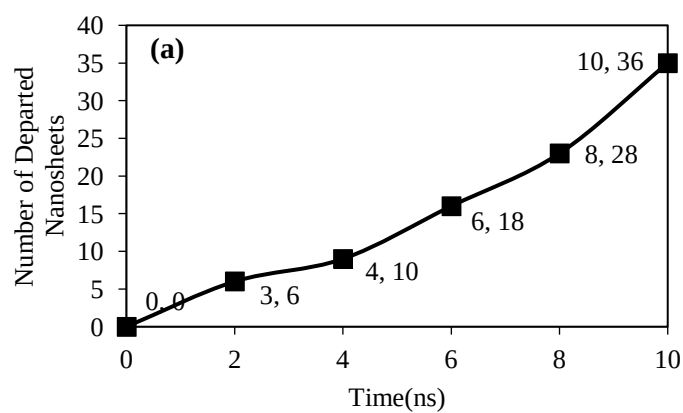
اعداد گزارش شده در جدول فوق با اعداد کتاب مرجع الماس شناسی جهان یعنی کتاب **Diamond Handbook** با ISBN: 978-0-929975-53-5 تطابق کامل دارد. این بدان معناست که قوی ترین نرم افزار شبیه ساز جهان یعنی لمپس تایید می کند که گاز فلر خروجی پالایشگاه (که حاوی مقادیر زیادی کربن است)، می تواند به الماس تبدیل شود.

سپس از نرم افزار خواسته شد تا در مورد تابع توزیع شعاعی الماس تشکیل شده به ما به صورت نمودار گزارش ارائه کند. در توضیح بیشتر می توان گفت:

پس از تشخیص فاز تعادل، تابع توزیع شعاعی (RDF) نمونه برای تایید فرآیند انجام شده محاسبه می شود. در شبیه سازی، RDF پارامتری است که احتمال کشف یک اتم را در فاصله معینی از اتم مرجع اندازه گیری می کند. این اطلاعات در مورد آرایش فضایی اتم ها/مولکول ها در یک سیستم شبیه سازی شده، به درک ساختار و برهمکنش های درون سیستم کمک می کند. خروجی RDF بسته LAMMPS برای ماتریس متعادل در ادامه نشان داده شده است. بنابراین، این سازگاری ساختاری روش محاسباتی ما را تأیید می کند.



شکل ۵: تابع هدف C-C و CH₄ محیط در کار محاسباتی جاری پس از ۱۰ نانوثانیه (پس از تشخیص فاز تعادل)



شکل ۶: تعداد الف) الماس های تشکیل شده ب) اتم های کربن در داخل الماس های جدا شده به عنوان تابعی از زمان شبیه سازی

ساخت و بررسی به کمک شبکه هوش مصنوعی:

برای ساختن یک شبکه هوش مصنوعی احتیاج به یک سری پارامترهای ورودی و خروجی داریم. این پارامترها باید در تعداد نقاط قابل قبولی نمونه گیری شده باشند. هرچه تعداد نقاط نمونه گیری بیشتر باشد این شبکه ی ساخته شده با دقت بالاتری می تواند فرآیند مورد نظر را پیش بینی کند. در اینجا شبکه هوش مصنوعی ساخته و آموزش داده شده حاوی ۴۰ نقطه نمونه گیری می باشد.

یکی از نقاط قوت شبکه های هوش مصنوعی قدرت درون یابی آنها برای داده هایی است که تا به حال ندیده اند و اگر شبکه ای به خوبی و به درستی آموزش دیده باشد باید قادر باشد که در نقاط میانی داده های آموزشی نیز، مقادیری قابل مقایسه با مقادیر واقعی پیش بینی کند. حال تعیین بهینه تعداد لایه های شبکه هوش مصنوعی، تعداد نورون ها و تابع انتقال در هر لایه و تابع آموزش مورد استفاده در شبکه دارای اهمیت بالایی است. در واقع سعی بر این است تا با تعیین نقطه بهینه هرکدام از این پارامترها، شبکه ای با کمترین خطا و بیشترین تعمیم یافتگی نسبت به داده های جدید و ناشناخته ساخته شود. در نتیجه برای مقایسه شبکه های هوش مصنوعی ساخته شده با خصوصیات مختلف، از میانگین مربعات خطا داده های آزمایشی ^۳ (MSE) استفاده می کنیم. میانگین مربعات خطا از رابطه زیر به دست می آید:

$$MSE = \sum_{i=1}^n (PVo_{NN} - PVo_{act})^2 / n$$

لایه های یک شبکه چند لایه وظایف متفاوتی دارند. لایه ای که خروجی شبکه را ایجاد می کند (لایه آخر) تحت عنوان لایه خروجی شناخته می شود. بقیه لایه ها تحت عنوان لایه های مخفی نام گذاری شده اند. در مورد لایه ها می توان گفت اکثر شبکه های مورد استفاده ۱ و ۲ لایه می باشند و به ندرت از شبکه هایی با ۴ و یا بیشتر لایه استفاده می شود. در شبکه های تک لایه نیاز به تعیین تعداد نورون ها در یک لایه مخفی می باشد که برای این کار روشی کلی وجود ندارد. روش های موجود، مبتنی بر سعی و خطا می باشند که در میان این روش ها دو روش هرس شبکه ^۴ و رشد شبکه ^۵ دارای طرفداران بیشتری هستند. در روش هرس شبکه ابتدا ساختار بزرگی برای شبکه در نظر گرفته می شود و سپس با حذف نورون ها، از شاخ و برگ شبکه چیده می شود تا به یک حالت بهینه منجر شود. مشکل این روش تعیین ساختار اولیه شبکه است. از طرف دیگر، در روش رشد شبکه، از یک ساختار بسیار کوچک برای شبکه شروع کرده و با افزودن تعداد نورون ها، سعی در تامین هدف

^۳ Mean Square Error (MSE)

^۴ Network Pruning

^۵ Network Growing

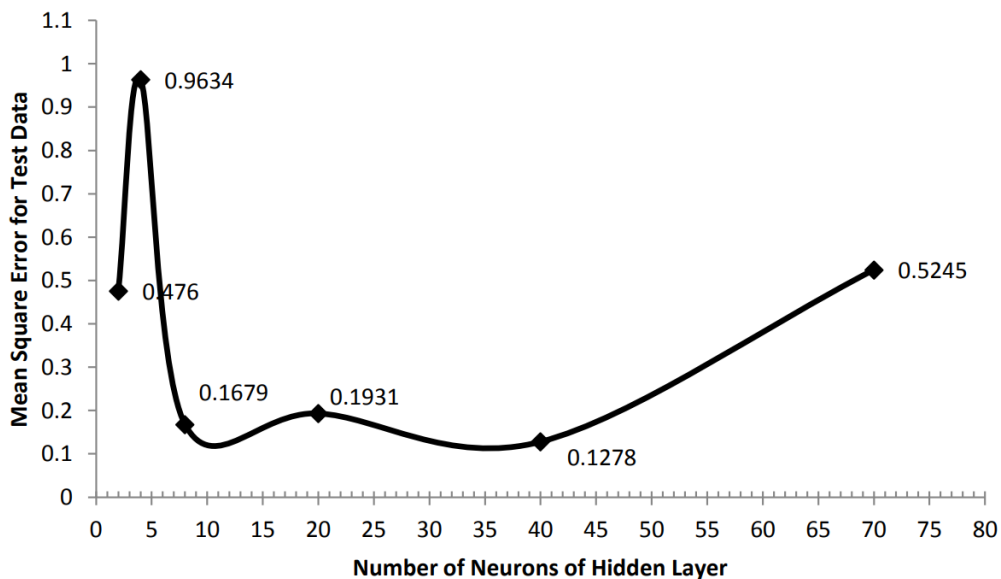
آموزش می شود. از جمله مشکلات این دو روش، طولانی بودن زمان آموزش می باشد. از طرف دیگر تضمینی برای رسیدن به ساختار بهینه شبکه وجود ندارد. در اینجا تعداد نورون های لایه مخفی در شبکه های تک لایه با استفاده از روش رشد شبکه و در دو مرحله تعیین شده است. در مرحله اول محدوده تعداد نورون های بهینه با استفاده از جستجوی دودویی مشخص شده و در مرحله دوم در محدوده مشخص شده به صورت ریزتر به جستجوی تعداد بهینه نورون های لایه مخفی پرداخته شده است. در شبکه های BP اغلب از نورون های سیگموئید در لایه مخفی و نورون های خطی در لایه آخر استفاده می کنیم. اگر آخرین لایه از شبکه چند لایه دارای نورون های سیگموئید باشد خروجی شبکه به یک محدوده کوچک محدود می شود در حالی که اگر شامل نورون های خطی باشد خروجی می تواند هر مقداری را اختیار کند. در واقع لایه خروجی خطی به شبکه این امکان را می دهد که خروجی خارج از محدوده $+1$ و -1 داشته باشد. وجود چند لایه مخفی از نورون ها با یک تابع انتقال غیر خطی نیز به شبکه اجازه می دهد که توانایی یادگیری رابطه خطی و غیر خطی را بین ورودی ها و خروجی ها داشته باشد. در شبکه های پس از انتشار ساخته شده در این تحقیق از تابع انتقال خطی برای لایه آخر استفاده شده است. این در حالی است که مسئله مهم، تعیین نوع تابع انتقال در لایه های مخفی می باشد. در شبکه های دولایه بعد از استفاده از توابع انتقال logsig و tansig در شبکه های مختلف با تعداد نورون ها و توابع آموزش متفاوت، این نتیجه حاصل شد که تابع انتقال logsig نتایج مطلوب تری را تولید می کند.

برای آموزش شبکه ابتدا باید شبکه مورد نظر ساخته و سپس آموزش داده شود. برای ساختن شبکه از داده های ورودی و خروجی استفاده می شود. این کار با استفاده از تابع newp صورت گرفت. سپس برای آموزش شبکه از تابع train استفاده شد. در واقع تابع آموزش ورودی ها را دریافت کرده و وزن ها و بایاس ها را تنظیم می کند تا تابع کارایی شبکه حداقل و خروجی ها همگرا شوند. طبق پیش بینی تابع آموزشی trainlm مربوط به الگوریتم LMBP در بسیاری موارد به حداقل خطا رسیده و شبکه مطلوب تری را تولید کرده است. در استفاده از هوش مصنوعی قسمت بهینه سازی که به وسیله روش سعی و خطا و براساس حداقل سازی میزان خطا انجام پذیرفته، زمان زیادی را به خود اختصاص می دهد که همین نکته از نقاط ضعف استفاده از روش شبکه هوش مصنوعی به تنهایی، به شمار می رود. اما هنگامی که تلفیقی از شبکه هوش مصنوعی و الگوریتم رقابت استعماری استفاده شود، بخش بهینه سازی کار توسط الگوریتم رقابت استعماری انجام می گیرد و با سرعت بالاتری الگوی بهینه را توسط شبکه تلفیقی معرفی می نماید.

جهت ارائه یک مدل مناسب که بتواند علاوه بر داده های مجموعه آموزشی، داده مجموعه آزمایشی را نیز به خوبی پیش بینی کند، شبکه هوش مصنوعی در شرایط مختلف اولیه آموزش داده شد. بعد از آموزش و یافتن یک شبکه هوش مصنوعی با حداقل میانگین مربعات خطا برای داده های آزمایشی، به بهینه سازی این شبکه جهت بهترین پیش بینی داده های آزمایشی پرداخته خواهد شد.

پس از تقسیم بندی داده های اولیه و آماده سازی آنها، تابع trainbr جهت آموزش شبکه هوش مصنوعی به کار برده شد. تعیین پارامترهای دیگر شبکه هوش مصنوعی نیز برای شبکه های هوش مصنوعی دولایه با یک لایه مخفی صورت پذیرفت. سپس شبکه هوش مصنوعی به دو روش الگوریتم ژنتیک و الگوریتم رقابت استعماری آموزش داده شد تا بهترین شبکه با حداقل میانگین مربعات خطا برای داده های آزمایشی به دست آید.

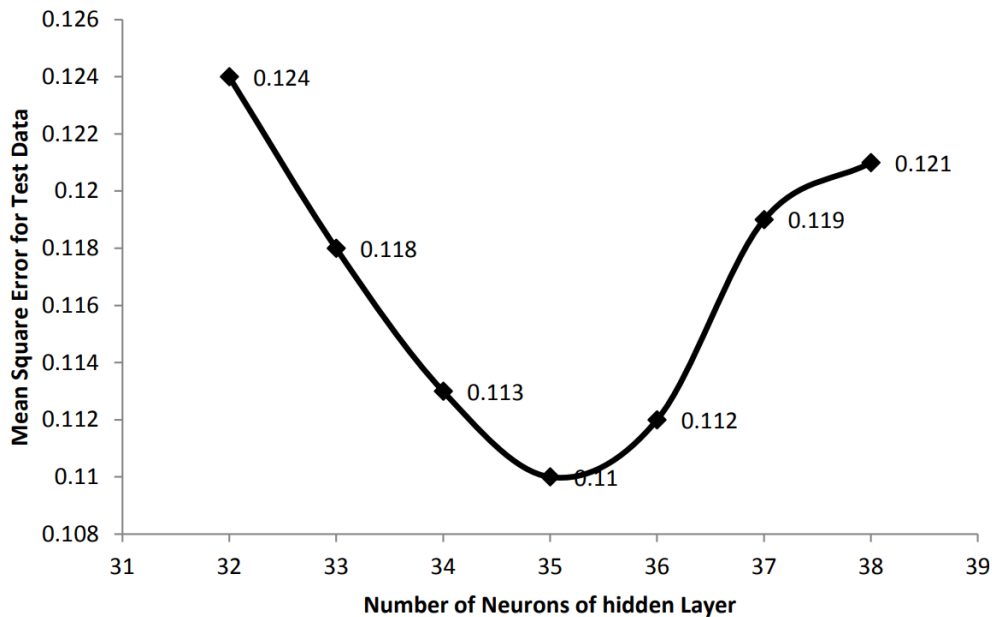
در این روش برای تعیین تعداد نوروں های لایه مخفی، در مرحله اول، تعداد نوروں های لایه مخفی را برابر با ۲، ۴، ۸، ۲۰، ۴۰ و ۷۰ در نظر گرفته شده و در تمام این حالات برای شبکه آموزش داده شده از تابع انتقال logsig استفاده شده است. میانگین مربعات خطا در شکل زیر ترسیم شده است:



شکل ۷: نمودار میانگین مربعات خطا داده های آزمایشی بر اساس تعداد نوروں های لایه مخفی

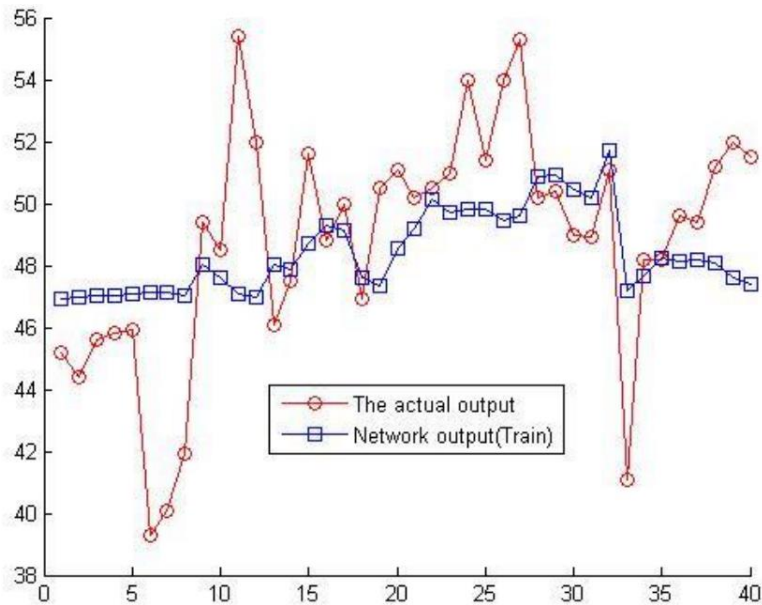
همانطور که دیده می شود، اگر تعداد نوروں های لایه مخفی برابر ۴۰ در نظر گرفته شود کم ترین میزان میانگین مربعات خطا برابر ۰/۱۲۷۸ بدست می آید. بر این اساس در محدوده ۳۲ تا ۳۸ نوروں، تعداد نوروں ها یکی یکی

بالا برده شد تا تعداد نورونی که کم ترین مقدار برای میانگین مربعات خطا داده های آزمایشی را ارائه می دهد به عنوان تعداد بهینه نورون ها در لایه مخفی انتخاب شود. نتایج این جستجو در شکل زیر نمایش داده شده است:



شکل ۸: نمودار میانگین مربعات خطا داده آزمایشی بر اساس تعداد نورون های لایه مخفی در جستجوی ریز

برای آگاهی از توانایی هوش مصنوعی در پیش بینی خروجی داده های واقعی، خروجی های حاصل از این شبکه مورد بررسی قرار گرفت. کراس پلات خروجی شبکه هوش مصنوعی و نتایج حاصل از شبیه سازی لمپس در شکل زیر نمایش داده شد که حاکی از تطابق بالا، نزدیک بودن و همپوشانی این دو داشت که نشان می دهد الماس مصنوعی می تواند از گاز متان خروجی از فلر پالایشگاه بندرعباس تشکیل شود.



شکل ۹: کراس پلات خروجی شبکه هوش مصنوعی

نتایج:

نتایج استفاده از شبیه سازی با نرم افزار لمپس و هوش مصنوعی حاکی از این بود که امکان تشکیل الماس مصنوعی از گاز متان خروجی از فلر پالایشگاه بندرعباس وجود دارد. الماس که در تمامی ادوار تاریخی جزو مهم ترین و گرانبهاترین سنگ ها بوده و از طرفی وضعیت بحرانی محیط زیست در ایران و جهان، می تواند ما را به این سمت سوق دهد که بجای هدررفت این گاز ارزشمند از فلر پالایشگاه، به سمت احداث یک پالایشگاه کوچک برای خالص سازی گاز متان و تولید الماس مصنوعی پیش برویم.

منابع:

- [1] H. Kanda, Large diamonds grown at high pressure conditions, Brazilian Journal of Physics, 30 (2000) 482-489.
- [2] H. Kanda, T. Sekine, High temperature high pressure synthesis of single crystal diamond, in: A.J. Neves, M.H. Nazaré (Eds.) Properties, Growth, and Applications of Diamond, INSPEC, The Institution of Electrical Engineers, Lodon, 2001, pp. 247-255.
- [3] E.A.J. Burke, Raman microspectrometry of fluid inclusions, Lithos, 55 (2001) 139-158.