



مجله روش های محاسباتی در علوم مهندسی

(فصل نامه علمی)

شماره پیاپی 6

مجله روش های محاسباتی در علوم مهندسی، جلد 2، شماره 2، تابستان 1403

فهرست مقالات

Digital Poetry Production Using Word Embedding Technology

1-6

تأثیر ریخته گری اغتشاشی نیمه جامد بر ریزساختار، خواص مکانیکی و مقاومت
سایشی آلیاژ Mg-6%Si

7-12

تله رباتیک به عنوان راهکاری در جهان پسا اپیدمی

13-17

تشخیص اوتیسم از روی تصویر صورت کودک با استفاده از شبکه های عصبی عمیق

18-30

بهینه سازی عملکرد میکروکانال های شامل دیواره الاستیک نوسانی با استفاده از
دینامیک سیالات محاسباتی و مینی تب

31-37

پیشبینی چگالی، پارامتر حلالیت و ضریب نفوذ استیک اسید در n-بوتیل
استات با استفاده از شبیهسازی دینامیک مولکولی

38-45

سردبیر: دکتر سید حسین حسینی

مدیر مسئول: دکتر جعفر طاوسی

کارشناس نشریه: مهندس محمدمین شیرخانی

آدرس سایت نشریه: cmes.ilam.ac.ir

Digital Poetry Production Using Word Embedding Technology

Ali Abdali ^{1,*}

¹ Control Systems and Instrumentation Department of Iranian Offshore Oil Company, Kharg, Bushehr 7546143572, Iran

* Corresponding Author

Received: 19/10/2024, Revised: 08/11/2024, Accepted: 20/11/2024.

Abstract

Natural language processing or NLP is a branch of artificial intelligence that deals with the interaction between computers and human language. The goal of NLP is to give machines the ability to understand, analyze, and generate natural language. Natural language processing is an interdisciplinary science that tries to facilitate the interaction between human language and computer by using computer science, linguistics and artificial intelligence. In this paper, we present a method for producing synthetic digital poetry using word embedding technology. Word embedding is a technique used to represent words as numerical vectors in multidimensional space. This technique allows NLP to better understand the semantic and syntactic connections between words. The importance and advantages of using the word vector are discussed below. Machine learning models using word vectors have higher accuracy in analysis and prediction. These models can learn more complex relationships and patterns.

Keywords

Digital Poetry, Word Embedding, Neural Networks.

1. Introduction

Digital poetry is developing day by day as a new attitude and as a new artistic genre in line with the advancement of technology. In this type of poetry, the poet becomes a programmer who produces poetry by combining machine language and human language. This genre has grown significantly in recent years along with the issues raised in the field of computational linguistics. Computational linguistics is one of the interdisciplinary sciences in which the machine modeling of natural language is done using mathematical methods. With the processing of natural language, the presence of artificial intelligence in digital poetry becomes more visible and a new discourse begins in the text. In the programming of this unconventional type of poetry, several algorithms are used in the text game [1,2]. The word embedding is one of the fundamental elements of natural language processing that helps to better understand language and improve the performance of NLP systems. With the advancement of technology and the development of new models, the importance and applications of word vector continue to expand. The technology of text generation using artificial intelligence dates back to the early years of the 1950s. During this period, basic research in the field of artificial intelligence and natural language processing began [3-5]. Early systems such as ELIZA (developed in the 1960s) attempted to generate human text using simple rules. At this time, most attention was focused on linguistic analysis and generating simple sentences. In the 1990s, with the advancement of machine learning algorithms, statistical models such as n-grams and Hidden Markov Models

(HMMs) were developed. These models are better able to simulate natural language. In the years after 2010, the emergence of neural networks, especially recurrent neural networks (RNNs) and later transformer networks, created a great transformation in text generation. Models such as GPT (Generative Pre-trained Transformer) and BERT (Bidirectional Encoder Representations from Transformers) emerged, which dramatically increased the quality of text production. These models can be used in various fields such as creative writing, translation, summarizing and answering questions. This technology is developing rapidly and a bright future is predicted in the field of text production and its applications in various industries. Using optimization algorithms in the text production process can help improve the quality and efficiency of text production. These algorithms allow us to produce texts with more desirable properties, such as coherence, diversity, and accuracy. Genetic algorithms (GA) are one of the optimization methods inspired by the natural processes of natural selection and evolution. In this method, a set of generated texts can be considered as a population of solutions and then gradually optimized. This algorithm is used in the production of digital poetry [6-8].

Simulated Annealing is another text generation algorithm. This algorithm is inspired by the process of gradual cooling of materials. This method can be used to search the answer space and generate optimal texts. In this method, starting from an initial text and making small changes such as changing words or sentences are used to produce larger texts. Also, in some researches, machine learning technique has been used to produce Bangla Poetry [9]. In the articles [10-12], methods about thematic poems

and how to analyze them are examined. In different languages, due to the difference in the structure of poetry, the way of processing digital poetry is different, among others, we can mention research in this field in Chinese language, which investigates a solution to produce poetry in Chinese language using neural networks. Pay [13]. Also, in some researches, strategies for producing Bahasa Indonesia poetry are examined [14]. Among other works done in this field and in the Japanese language, artificial intelligence methods in the production of Haiku can be mentioned [15]. Also, in the field of producing meaningful poetic texts using genetic algorithm, there have been researches and researches, most of the efforts are to arrange sentences and transfer a semantic unit from the poetic text to the audience [16]. Also, in the field of computational models and ways of thinking in prose and poetry, there have been significant studies and researches in which the structure of language and grammar in machine text is closer to the text written by a human author [17], [18]. Optimization using deep learning is also one of the important methods in text production and digital poetry production. Deep learning models such as Recurrent Neural Networks (RNN) or Transformers can be trained using optimization methods such as Adam or SGD to produce higher quality texts. Deep learning models such as LSTM or GRU can be used to generate poetry. These models can be trained using input word vectors and generating subsequent words. Using recurrent neural networks (RNN) is one of the main techniques in text generation. Due to their special structure, RNN networks are able to process data sequences such as text and have been very successful in generating natural language. Unlike conventional neural networks, RNNs have the ability to consider information from previous sequences and depend on each step in the input chain. This feature makes them very useful for problems such as natural language processing (NLP), because the order of words in a sentence is very important [19-23].

In this paper, we will use word vector and deep learning to generate synthetic digital poetry. In the first part, we will explain the word embedding technology and its important role in the process of producing digital text and poetry. Then, in the second part, we describe its famous models, and by converting words into numerical vectors, we process the input data of neural networks, and in the third part, we describe our method for producing digital poetry using word vectors. In the fourth part, we examine the simulation of the model based on neural networks, in the fifth part, we examine the challenges related to semantic understanding. At the end and in the conclusion section, we present the limitations, obstacles and future ways of poetry production.

2. Word Embedding

Word Embedding is one of the common methods in natural language processing (NLP) that represents words as numerical vectors in multidimensional space. The purpose of using word vectors is to display the concepts and meanings of words in such a way that they can be used in machine learning algorithms and neural networks. In general, word vectors are constructed by models such as Word2Vec, GloVe, and FastText. By learning from a huge

volume of texts, these models assign a vector to each word that represents the semantic features of that word. Vectors belonging to similar words will be close to each other in the vector space.

The important features of the word vector can be mentioned as follows:

- Low dimensionality, rich meaning: Each word is represented as a multidimensional vector (eg 300 dimensions). Each dimension encodes different information about the meaning and usage of the word.

- Distance and semantic similarity: Euclidean or cosine distance between the vectors of two words can indicate their semantic similarity.

- Semantic composability: using algebraic operations (such as addition and subtraction of vectors) it is possible to obtain approximately the meaning of new expressions or combinations. For example:

Gender calculation:

$Sister \approx man - brother + woman$ In this example, if we have the vector of the word "man" and subtract the vector of "brother" from it, the concept of "dominion" is somehow obtained regardless of gender. Then by adding the vector "woman", we get the word "sister". Figure 1

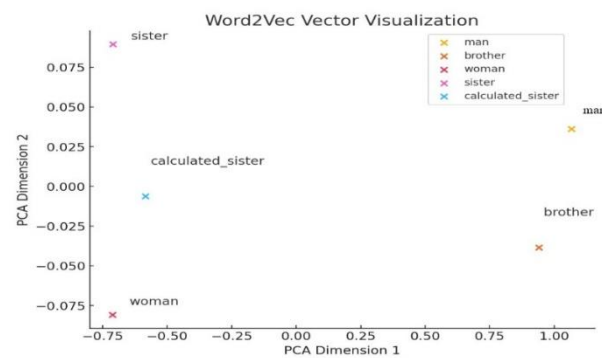


Fig.1 Two-dimensional diagram of the word2vec model based on word meaning categories.

Calculation of nationality:

$$Moscow - Russia + Turkey \approx Ankara$$

This operation states that "Moscow" has the same relation to "Russia" as "Ankara" has to "Turkey". By subtracting the vector "Russia" from "Moscow" and adding the vector "Turkey", we can arrive at "Ankara". Figure 2

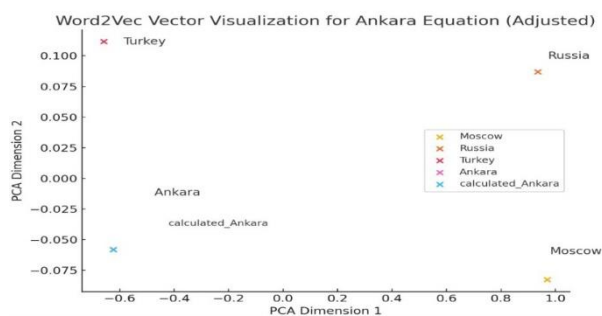


Fig.2 Two-dimensional diagram of the word2vec model based on word meaning categories.

Job relationships and roles:

$$Doctor - hospital + university \approx professor$$

- In this example, if "doctor" is related to "hospital", by replacing "hospital" with "university", we can get a similar role, "professor".

Change seasons:

Summer - heat + cold \approx winter

- The vectors related to the characteristics of the seasons, such as "heat" for summer and "cold" for winter, can be well combined in this operation.

Tools and jobs:

Painter + brush \approx carpenter + hammer

- This relationship somehow shows the relationship between jobs and the tools used in them. For example, "painter" has the same relation to "brush" as "carpenter" has to "hammer".

Kinship:

father + mother \approx parents

- The sum of the two vectors "father" and "mother" usually results in a vector that represents the meaning of "parents" well.

These operations are derived using word vector models such as Word2Vec and GloVe and show how semantic relations can be achieved through vector computation.

3. Training models to produce digital poetry

We used the following two models in the production of digital poetry in this paper and trained word vector models using large textual data in Persian literature. Training models in the process of producing poetry is one of the most important steps that allows the model to learn language patterns, meanings and relationships between words and then produce meaningful and logical poems. In this section, the process of training linguistic models, characteristics of input data and different methods of training in the production of digital poetry are discussed.

• Word2Vec:

Skip-Gram model: In this model, the goal is to predict the surrounding words (surrounding words) using a target word. In other words, for each word, the model tries to predict which words are near it.

Continuous Bag of Words (CBOW) model: This model does the opposite. That is, it uses the surrounding words to predict the target word.

By training these models, each word is assigned to a numerical vector that shows the semantic connections between words in multidimensional space.

• GloVe (Global Vectors for Word Representation):

Instead of predicting words from each other, this method works based on the co-occurrence matrix of words. GloVe tries to use this matrix to create vectors that represent the meaning of words in relation to their co-occurrences.

3.1 The process of training models in the production of digital poetry

In this paper, we used the Word2Vec model, which is one of the most important and popular methods for representing words as numerical vectors to produce digital poetry. This model is widely used in natural language processing (NLP). Word2Vec is trained in two general modes:

1. Continuous Bag of Words (CBOW): The central word prediction model according to neighboring words.

2. Skip-gram: a model for predicting neighboring words according to the central word

3.1.1 Word2Vec training steps

3.1.1.1 Data collection (input text)

First, a text dataset is needed, which may be collected from various sources such as books, articles, news, etc. This text should contain a large amount of real language data so that the model can learn the semantic relationships between words well.

3.1.1.2 Pre-processing of the poem

Before starting to train the model, the poetic text must be pre-processed. In this method, we applied the following pre-processing to the input data to produce digital poetry in Persian, which includes the following:

- Removal of punctuation marks: such as periods, commas and question and exclamation marks.

- Convert to lowercase: all words are converted to lowercase.

- Stop Words: Words such as "and", "or", "of" which usually have no special meaning are removed.

- Tokenization: breaking text into tokens (words).

3.1.1.3 Choosing the word window (Window Size)

In Word2Vec, every word in a sentence is related to the words around it. The window size determines how many words before and after the target word the model will pay attention to. For example, if the window size is 2, the model will only pay attention to two words before and two words after the target word.

3.1.1.4 Model selection: CBOW or Skip-gram

Word2Vec is trained in two ways:

Continuous Bag of Words (CBOW):

In this method, the model tries to predict the central word (target) according to the neighboring words. The model first combines the neighboring word vectors and then a neural network is used to predict the central word. This method is more suitable for smaller data sets and when speed is important. In this paper, we used this method to produce digital poetry according to our case study, which was a small data set. Word2Vec uses a simple two-layer neural network (one input layer and one output layer) to learn word vectors. The learning process is such that each word in the input layer is converted into a vector (usually initialized with random numbers).

Using a cost function (such as Negative Sampling) or Hierarchical Softmax, the weights are updated such that words have similar vectors that are close to each other.

3.1.1.5 Optimization and learning

During training, the model uses methods such as backpropagation and Stochastic Gradient Descent (SGD) to improve the weights of the neural network. This process is repeated until the model optimally learns the relationships between words.

3.1.1.6 Model output:

After completing the training, each word in the dataset was converted into a numerical vector. These vectors are displayed as points in a multidimensional space. Word

vectors that are semantically close to each other have a small distance from each other in this space.

Two stanzas from a sample poem produced using the CBOW model

A woman is standing by the wall

And the beauty that has come down a few steps from the sky

In the first stanza, the CBOW model uses neighboring words ("woman", "beside", "wall", "is") to predict "standing".

The training of the neural network in this study was conducted using the Word2Vec model, specifically the Continuous Bag of Words (CBOW) method. This approach leverages a dataset of Persian literary texts to create word vectors that capture semantic relationships between words. During training, each word in the input text is represented as a numerical vector, which the network learns to optimize through techniques like backpropagation and stochastic gradient descent (SGD). The primary goal of this training is to enable the model to generate coherent, meaningful, and contextually accurate lines of poetry by predicting target words based on their surrounding context. Ultimately, the objective is to create a system that can autonomously generate poetic text that resonates with the structural and emotional nuances characteristic of human-written poetry.

4. Network structure

The CBOW model is a neural network that has an input layer and an output layer, which is used to learn the word vector. We taught:

- Input: neighboring words enter the network as one-hot vectors.

In the CBOW model, the input consists of neighboring words. Suppose for a target word t whose neighboring words C_1, C_2, \dots, C_n , we have:

Input Vector = one-hot(C_1) + one-hot(C_2) + ... + one-hot(C_n)

- Hidden layer: vectors of neighboring words are averaged and converted into a combined vector.

If W is the weight matrix of the hidden layer with dimensions $N \times V$ (where V is the total number of words in the dictionary and N is the dimension of the word vector), then to calculate the hidden vector h we have:

$$h = 1/n \sum_{i=1}^n Wc_i$$

where Wc_i represents the neighboring word vector c_i .

- Output: The model predicts what the central word (target word) is using the Softmax layer.

We use the hidden vector h to predict the target word t . The output vector U is calculated as follows:

$$u = W'h$$

where W' is the weight matrix of the output layer with dimensions $V \times N$.

In this network, we used the cost function (Negative Sampling).

And through gradient descent and backpropagation, the weights were updated, which made the model gradually improve.

4.1 Mathematical Equations in the CBOW Model

Let's assume the following:

- Wt
- C : the number of words in the context window.
- $Wt - c, Wt - (c - 1), \dots, Wt - 1, Wt + 1, \dots, Wt + c$: the context words.

-
-

4.2 Averaging the context word vectors

First, each context word (from the window) is mapped to its embedding vector. Let V_w be the embedding vector of word w . Then, the embedding vectors of the context words are summed:

$$V_{\text{context}} = 1/2C \sum_{i=-C, i \neq 0}^C V_{W_{t+i}}$$

This means the average of the context word vectors is computed. This forms the input to the CBOW model.

4.3 Predicting the target word

The model uses the vector V_{context} to predict the probability of the target word Wt

This is done using the softmax function:

$$P(Wt | Wt - c, \dots, Wt + c) = \frac{\exp(V_{Wt}^T V_{\text{context}})}{\sum_{w \in V} \exp(V_w^T V_{\text{context}})}$$

where:

- V : the set of all words in the vocabulary.
- Wt : the embedding vector of word w .

4.4 Loss Function

The loss function used to optimize the model is typically the cross-entropy. For each pair of target and context words, the loss is defined as:

$$L = -\log P(Wt | Wt - c, \dots, Wt + c)$$

This loss is computed and used to update the model parameters (i.e., the word embedding vectors) through optimization methods such as stochastic gradient descent (SGD).

5. Challenges related to semantic understanding

Poetry production by linguistic models and text production algorithms faces specific and more complex challenges compared to normal text production. Due to the unique nature of poetry, these challenges include special language structures, rhythm, emotions, and complex artistic images that require a high level of semantic and artistic understanding to understand and produce.

5.1 Metaphors and similes

One of the main challenges in producing poetry is understanding and producing metaphors and similes. Metaphors and similes are one of the main poetic tools to express feelings and complex concepts indirectly. Linguistic models are often unable to understand or generate complex metaphors because these concepts are usually dependent on human mental and emotional experiences.

For example, in the Persian language, understanding the metaphor "the sea is heartbroken" requires understanding the symbolic connection between "the sea"

and "feeling heartbroken", which goes beyond the normal linguistic patterns and requires a deeper interpretation of the meaning.

5.2 Ambiguity and Multilayered Meaning

One of the prominent features of poetry is its multi-layeredness and semantic ambiguity. In poetry, many words and sentences may be interpreted in several ways. For example, a word like "fire" in Persian literature can both refer to its real meaning (i.e. flame) and metaphorically refer to love, anger, or inner transformation. Text generation models are usually based on statistical data and ordinal patterns, and they can hardly cope with the understanding and generation of multi-layered meaning in poetry. These models may assume a superficial or incorrect meaning for words and may not have a correct understanding of complex metaphors and symbolism.

5.3 Maintaining rhythm

Poetry usually follows a rhythmic pattern that contributes to the musical flow and beauty of the text. Rhymes and weights are very important in many classical poems (such as Persian ghazal or English) and producing a text that respects these rules is one of the main challenges. Combining rhythm and rhyme with the right meaning is a problem that is challenging even for humans. Linguistic models may be unable to produce correct rhymes while preserving the exact meaning of the text, especially in languages with complex rhyming and weight structures. In many cases, models may produce texts that are semantically correct but not rhyme or rhythm, or vice versa.

5.4 Maintaining sentiment and tone

One of the most important aspects of poetry is conveying emotions and appropriate tone. Poetry is often a means of expressing human emotions such as love, sadness, happiness, and anger. Therefore, not only the meaning of the words must be correct, but the emotions behind them must also be correctly conveyed. Text generation models are usually unable to accurately detect the emotions and tone of the lyrics. They may not be able to correctly discern when the tone should be formal, romantic, or emotional. For example, a model designed to generate romantic poetry might produce sentences that convey inappropriate or out-of-context sentiments.

5.5 Semantic Coherence and Thematic Consistency

A good poem should usually have thematic coherence and semantic coherence. Poems, despite being short, often convey a single message or feeling completely. Text generation models may have difficulty maintaining thematic coherence, especially over longer texts. Many models cannot properly maintain the semantic connection between different lines of the poem. The result may be a text in which each line is acceptable independently, but which as a whole does not convey a clear meaning or message. For example, one line might be about love and the next about nature, with no meaningful connection between them.

5.6 Polysemy

Poetry often uses ambiguity as an artistic device. The poet may deliberately use words that have multiple meanings to invite the reader to different interpretations.

Text generation models often have difficulty choosing the appropriate meaning for a word in poetic contexts. Models may choose one of the meanings of a polysemous word, while the poet's intended meaning may be more complex and multi-layered.

5.7 Creativity and Innovation

Poetry is inherently a creative activity that depends on innovation in language and meaning. Poets often combine words in new ways, use unusual structures, and go beyond common language patterns. Linguistic models are highly dependent on their training data and are therefore limited in innovation and creation of new linguistic combinations. These models usually do not have the ability to create something completely new and creative and are more concerned with reproducing known linguistic structures.

6. Conclusion

Producing poetry through linguistic models is more challenging than producing prose due to its semantic, emotional and structural complexity. Understanding and producing multi-layered meanings, complex metaphors, rhythm and maintaining thematic continuity are among the main problems. To improve this process, we need models that can access deeper cultural, historical, and semantic knowledge in addition to linguistic patterns and can correctly reproduce the creative aspects of language. In this paper, we tried to produce poetry by artificial intelligence by presenting a language model for digital poetry production in Persian language. Although the poems produced by this model as given in the examples of this article are acceptable and thinkable, artificial intelligence still faces challenges compared to human creativity in artistic creation, most of these challenges are rooted in hardware limitations. It seems that in the near future, by increasing the processing power of microprocessors based on artificial intelligence, it will be possible to process a higher volume of data, and there is a possibility of reducing the challenges presented in this article about artificial poems. In such a way that the aesthetics of poetry based on artificial intelligence and the creativity provided by it may overcome the poetic productions of great human poets. In any case, it doesn't matter whether the poem has a human origin or a machine origin, and what is important is that the poem is something that happens in the language. Future research in digital poetry generation should focus on enhancing semantic depth, emotional resonance, rhythmic precision, and creative language use, ultimately aiming to bridge the gap between artificial and human poetic expression.

References

- [1] Ali Abdali, Digital poetry production using neural networks, Computational methods in engineering sciences, vol. 1, no. 4, Winter 2024
- [2] P. Kumar, S. Manikandan, R. Kishore, A Novel Approach for Text Generation using RNN for Language Modeling, 2023 3rd International Conference on Innovative Mechanisms for Industry Applications (ICIMIA)
- [3] Nourizadeh H, Nazar MS. Customer-oriented scheduling of active distribution system considering integrated demand response programs and multi-carrier

energy hubs. *Journal of Cleaner Production*. 2024 Apr 1;447:141308.

[4] Nourizadeh H. Long-term Planning of Optimal Placement of Distribution Transformers to Improve Reliability and Power Quality with the Approach of Reducing Costs and Losses. *Iranian Electric Industry Journal of Quality and Productivity*. 2020 Mar 10;9(1):49-58.

[5] Nourizadeh H, Niasati M. Optimal Placement of Distribution substations with The Purpose of Reducing Losses and Energy Not Supplied by A Multi-Objective Function and Artificial Bee Colony (ABC) Optimization Algorithm. *Computational Intelligence in Electrical Engineering*. 2020 Dec 21;11(4):65-80.

[6] Ali. Abdali, Designing the Artificial Poet Using Genetic Algorithm, Kingston University, London, <http://epc.buffalo.edu/e-poetry/2013/ExtendedProgramme.pdf>, June 17-20, 2013

[7] Prakash, Kolla Bhanu, Sanjeevikumar Padmanaban, and Massimo Mitolo. *Smart and Power Grid Systems–Design Challenges and Paradigms*. River Publishers, 2023.

[8] Padmanaban, Sanjeevikumar, et al. "Energy Storage." *Smart and Power Grid Systems–Design Challenges and Paradigms*. River Publishers, 2023. 211-236.

[9] Diaz-Agudo, Belen, Pablo Gervas, and Pedro A Gonzalez-Calero Poetry generation in COLIBRI. *European Conference on Case-Based Reasoning* springer Berlin Heidelberg, 2002.

[10] Erica Greene, Tugba Bodrumlu, and Kevin Knight. 2010. Automatic analysis of rhythmic poetry with Applications to generation and translation. In *Proc. EMNLP*.

[11] Hisar Manurung. An evolutionary algorithm approach to poetry generation. PhD. thesis, University of Edinburgh. 2003.

[12] Zhe Wangy, Wei Hez, Hua Wuz, Haiyang Wuz, Wei Liz, Haifeng Wangz, Enhong Cheny , Chinese Poetry Generation with Planning based Neural Network, arXiv:1610.09889v2 [cs.CL] 7 Dec 2016.

[13] Fam Rashel, Ruli Manurung Poetry Generation for Bahasa Indonesia using a Constraint Satisfaction Approach, ISBN: 978-979-1421-19-5 ICACSSIS 2013.

[14] Miroslava Hroncová, Kristína Machová, Generating Haiku Poems Using Method of Artificial Intelligence, ISBN 978-80-553-2271-1 WIKT 2015.

[15] Ruli Manurung a, Graeme Ritchie b, Henry Thompson, using genetic algorithms to create meaningful poetic text, *Journal of Experimental & Theoretical Artificial Intelligence* Vol. 24, No. 1, March 2012, 43–64.

[16] Sarjoun Doumit, Nagendra Marupaka and Ali A Minai, "Thinking in Prose and Poetry: A Semantic Neural Model" *IJCNN*, IEEE, 4 - 9 Aug, 2013.

[17] David M. Kaplan, David M. Blei "A Computational Approach to Style in American Poetry, Seventh IEEE International Conference on Data Mining, 1550-4786/07 25.00 © 2007 IEEE.

[18] [S. Joshua Johnson](#), [M. Ramakrishna Murty](#), [I. Navakanth](#), A detailed review on word embedding techniques with emphasis on word2vec, Springer Published: 03 October 2023, Volume 83, pages 37979–38007, (2024)

[19] Hongzhong Wang, Kun Guo, Zhanghui Liu, Mixed Word Embedding Method Based on Knowledge Graph Augment for Text Classification, 2019 IEEE Intl Conf on Parallel & Distributed Processing with Applications, Big Data & Cloud Computing, Sustainable Computing & Communications, Social Computing & Networking (ISPA/BDCLOUD/SocialCom/SustainCom)

[20] Rifat Rahman, Robust and Consistent Estimation of Word Embedding for Bangla Language by fine-tuning Word2Vec Model, 2020 - 23rd International Conference on Computer and Information Technology (ICCIT)

[21] Liang Wang, Nan Yang, Xiaolong Huang, Linjun Yang, Rangan Majumder, Furu Wei, Improving Text Embeddings with Large Language Models, arXiv:2401.00368v3 [cs.CL] ,(2024)

[22] Ali Abdali, Verya Monjezi, Machine Learning-based Flexible Link Robot Control, *Computational methods in engineering sciences*, (2023)

[23] Deepak Suresh Asudani, Naresh Kumar Nagwani, Pradeep Singh, Impact of word embedding models on text analytics in deep learning environment, Springer, Volume 56, pages 10345–10425, (2023)

Investigation of the effect of Semi-solid stir casting on the microstructure, mechanical properties and wear resistance of Mg-6%Si alloy

Teymor Fazelifar¹, Sayyed Hassan Nourbakhsh^{2*}, Mahdi Raiesi³

1- M. Sc student, Department of Mechanical Engineering, Shahrekord University, Shahrekord, Iran.

2- Associate professor, Department of Mechanical Engineering, Shahrekord University, Shahrekord, Iran.

2- Assistance professor, Department of Material Engineering, Shahrekord University, Shahrekord, Iran

*Corresponding Author: P.O.B. 8818634141 Shahrekord, Iran, Nourbakhsh.sh@sku.ac.ir

Abstract

Magnesium is one of the lightest structural metals, increasing its strength is always considered. In the present study, Mg-6%Si alloy was casted using the stir casting process at three temperatures of 790, 770, and 750 degrees Celsius in a semi-solid state, and then the melt was subjected to a pressure of 110 MPa until complete solidification. Also, in order to compare the results and observe the effects of semi-solid casting conditions, a sample was cast without stirring and at temperature of 800 degrees Celsius. The microstructure, compressive strength, hardness and wear resistance of the samples were determined and evaluated. The results of the microstructure analysis showed that semi-solid casting leads to a change in the microstructure from dendritic to spherical; The best conditions were related to the sample with casting temperature of 770°C, in this sample the dendritic structure was almost eliminated and a quasi-spherical structure was created. The results showed that in the optimal sample, the compressive strength and hardness increased by 17.5 and 42%, respectively, and the friction coefficient decreased by 7% in comparison with the sample which was casted in non-semi-solid state.

Keywords

Semi-solid casting, Magnesium, Stir casting, compressive strength, wear.

تأثیر ریخته گری اغتشاشی نیمه جامد بر ریزساختار، خواص مکانیکی و مقاومت سایشی آلیاژ Mg-6%Si

تیمور فاضلی فرا^۱، سید حسن نوربخش^{۲*}، مهدی ریسی^۳

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد، مهندسی مکانیک، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

۲- دانشیار، مهندسی مکانیک، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

۳- استادیار، مهندسی مواد و متالورژی، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد

* شهرکرد، صندوق پستی ۸۸۱۸۶۳۴۱۴۱، Nourbakhsh.sh@sku.ac.ir

چکیده

منیزیم یکی از سبکترین فلزات سازه ای می باشد که افزایش مقاومت آن همواره مورد توجه می باشد. در پژوهش حاضر آلیاژ Mg-6%Si با استفاده از فرآیند ریخته گری اغتشاشی در سه دمای ۷۹۰، ۷۷۰ و ۷۵۰ درجه سانتیگراد در حالت نیمه جامد ریخته گری و سپس مذاب تحت فشار ۱۱۰ مگاپاسکال تا زمان انجماد کامل قرار گرفت. همچنین جهت مقایسه نتایج و مشاهده تأثیرات شرایط ریخته گری نیمه جامد، یک نمونه به صورت معمولی (بدون همزدن و در دمای ۸۰۰ درجه سانتیگراد) ریخته گری شد. ریزساختار، مقاومت فشاری، سختی و مقاومت سایشی نمونه ها تعیین و مورد ارزیابی قرار گرفتند. نتایج تحلیل ریزساختار نشان دادند که ریخته گری نیمه جامد منجر به تغییر ریزساختار از حالت دندردیتی به کروی می شود؛ بهترین شرایط مربوط به نمونه با دمای ریخته گری ۷۷۰°C بود، در این نمونه ساختار دندردیتی تقریباً حذف و ساختاری شبه کروی ایجاد شد. نتایج آزمون های نشان دادند که در نمونه بهینه، مقاومت فشاری و سختی به ترتیب ۱۷/۵ و ۴۲ درصد افزایش و ضریب اصطکاک ۷ درصد کاهش را نسبت به نمونه ریخته گری شده در شرایط غیر نیمه جامد نشان دادند.

کلمات کلیدی

نیمه جامد، منیزیم، ریخته گری اغتشاشی، مقاومت فشاری، سایش

نام نویسنده مسئول: سیدحسن نوربخش

ایمیل نویسنده مسئول: Nourbakhsh.sh@sku.ac.ir

تاریخ ارسال مقاله: ۱۴۰۳/۰۸/۱۸

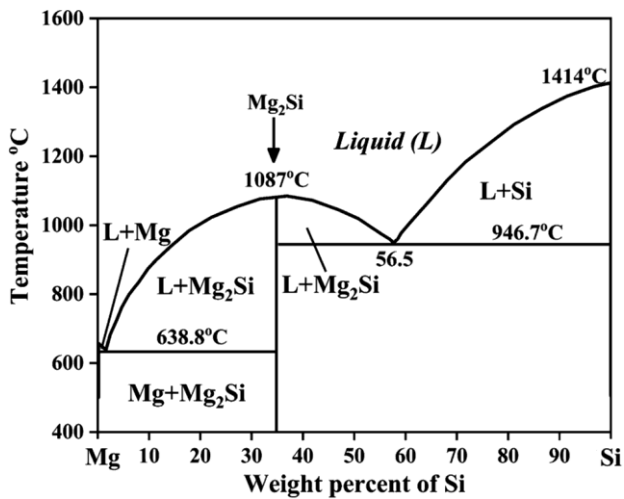
تاریخ(های) اصلاح مقاله: ۱۴۰۳/۰۹/۰۱

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۳/۰۹/۰۳

۱- مقدمه

بسیاری از عناصر آلیاژی مذاب بین بازوهای دندردیتی حبس شوند و چون غلظت عناصر آلیاژی در نقاط مختلف مذاب متفاوت می شود، در نهایت خواص مکانیکی قطعه تضعیف می گردد. خرد کردن بازوهای دندردیتی سبب ریز شدن دانه ها و در نهایت توزیع بهتر عناصر آلیاژی و دستیابی به خواص مکانیکی بالاتر در ماده می شود. روش ریخته گری نیمه جامد همراه با همزدن مذاب یکی از فرآیندهایی است که با کاهش بازوهای دندردیتی باعث بهبود خواص مکانیکی و متالورژیکی قطعه می گردد [۶]. آغاز شکل دهی نیمه جامد فلزات به اوایل دهه ۱۹۷۰ بر می گردد؛ در آن زمان اسپنسر و فلمینگز از موسسه فناوری ماساچوست (MIT) موفق شدند معضل انجماد دندردیتی را برطرف و به ساختاری کروی دست یابند [۷، ۸]. آنها دریافتند که هم زدن مذاب در حین خنک کردن آن از حالت مایع تا محدوده دمایی نیمه جامد، باعث حصول ریزساختاری کروی و غیردندردیتی می شود [۹]. از این رو فرآیند ریخته گری نیمه جامد فلزات را می توان ریخته گری آلیاژها بین دماهای لیکوئیدوس و سالییدوس دانست؛ که این فرآیند متکی به رفتار تیکسوتروپیک آلیاژهای فلزی است [۷، ۸]. یعنی هنگامی که مواد برش داده شوند جریان می یابند، اما در موقع سکون غلیظ می شوند [۱۰]. به عبارتی در ریخته گری نیمه جامد فلزات، یک آلیاژ به شکل دوغاب دارای ذرات جامد تقریباً کروی معلق در یک زمینه مایع، به درون قالب تزریق می شود [۱۱]. به دلیل ریزساختار منحصر به فردی که در شکل دهی نیمه جامد حاصل می شود، می توان به خواص مکانیکی بسیار خوبی دست

منیزیم (Mg) با وزن مخصوص ۱/۸ g/cm³ سبکترین ماده ساختاری است؛ بیش از چهار برابر سبک تر از فولاد و ۱/۵ برابر سبک تر از آلومینیم می باشد [۱]. به همین دلیل افزایش مقاومت مکانیکی و استفاده از آن در سازه ها مورد توجه ویژه محققان قرار گرفته است. جهت افزایش مقاومت مکانیکی منیزیم، افزودن عناصر و بکارگیری روشها و فرآیندهای مورد توجه ویژه محققین قرار گرفته است. تعدادی از این فرآیندها در حالت جامد قرار دارند که می توان به عنوان نمونه به فرآیند اصطکاک اغتشاشی اشاره نمود [۲] و تعدادی دیگر از این فرآیندها در حالت مذاب قرار دارند که می توان به عنوان نمونه به فرآیند ریخته گری اغتشاشی [۳] اشاره نمود. در فرآیند ریخته گری اغتشاشی مذاب قبل از ریخته گری توسط پره هایی با سرعت دورانی خاصی همزده و دچار تلاطم قرار می گیرد. این فرآیند به طور ویژه برای افزودن عناصر به مذاب مورد استفاده قرار می گیرد، کومار و سولومون [۴] با استفاده از این فرآیند نانوذرات B₄C را به آلیاژ LM30 افزودند، آنها نشان دادند که افزودن ۱٪ نانوذرات با این روش می تواند به طور یکنواخت در ماده توزیع شود و مقاومت مکانیکی ماده افزایش یابد. همچنین می توان به تحقیق سورندران و همکاران [۵] اشاره نمود که با این روش عناصر میکرو AL₂O₃ را به آلیاژ AZ91 افزودند و کارایی این روش را در افزودن ذرات به آلیاژ نشان دادند. بجز تعداد کمی از آلیاژها که حالت انجماد خمیری دارند، بقیه آلیاژها، حالت انجماد دندردیتی دارند؛ و همین امر سبب می شود تا



شکل ۱ دیاگرام فازی تعادلی Mg-Si

لازم به ذکر است که به منظور عدم تماس اکسیژن با سطح منیزیم مذاب و جلوگیری از اکسیداسیون و سوختن آلیاژ، در طول فرآیند گاز آرگون با دبی ۵L/min بر روی سطح آلیاژ تزریق شد. همچنین جهت مقایسه نتایج و تاثیرات ریخته گری نیمه جامد، یک نمونه تحت ریخته گری معمولی قرار گرفت. شماتیک دستگاه مورد استفاده در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل ۲ دستگاه ریخته گری اغتشاشی تحت گاز خنثی

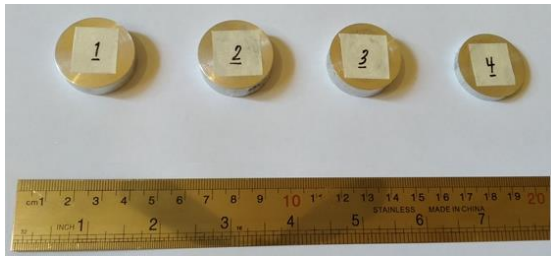
در جدول ۱ شرایط مربوط به نمونه های مختلف و همچنین در شکل ۳ شماتیک مربوط به نمونه های ریخته گری شده قابل مشاهده می باشند.

یافت [۱۲]. بارتکس^۱ و همکاران [۱۳] تأثیر کسر جامد بر ریزساختار و خواص مکانیکی آلیاژ Mg-Al-La-Ca را مورد بررسی قرار دادند. آزمایش های آنها به وسیله همزن مکانیکی با کسرهای جامد ۰/۶۱ و ۰/۴۹ و ۰/۳۰، fs = ۰/۳۰ rpm در ۹۵۰ به مدت ۱۰ دقیقه انجام شد. لی^۲ و همکاران [۱۴] به پردازش نیمه جامد آلیاژ منیزیم AZ91D با استفاده پرداختند. آنها جهت تحریک دوغاب از یک همزن مکانیکی استفاده نمودند و تاثیر نرخ برش بر ریزساختارهای منجمد دوغاب نیمه جامد را بررسی کردند. همچنین یک نمونه ریخته گری معمولی نیز از آلیاژ فوق، جهت مقایسه تهیه نمودند. رائی^۳ و همکاران [۱۵] با به کارگیری فرآیند ریخته گری اغتشاشی توانستند کامپوزیت زمینه آلومینیومی تقویت شده با ذرات کاربرد بور (B4C) را تولید و تاثیر سرعت و زمان هم زدن را بر ریزساختار و خواص مکانیکی آن، ارزیابی کردند. آشوک و همکاران [۱۶] با استفاده از فرآیند ریخته گری اغتشاشی ذرات SiC را به آلومینیوم AL8011 در سه سرعت مختلف و زمانهای همزدن مختلف پرداختند، آنها نتیجه گیری کردند که سرعت دورانی ۴۰۰ درو بر دقیقه و زمان همزن ۱۵ دقیق بهترین نتایج را ارائه می کند. دو^۴ و همکاران [۱۷] ریزساختار و خواص مکانیکی آلیاژ منیزیم AZ91D تهیه شده توسط ریخته گری نیمه جامد تحت فشار^۵ (SSDC) را ارزیابی نمودند. آنها پس از تهیه دوغاب نیمه جامد با میزان کسر حجمی جامد مد نظر (fs = ۰/۱۵)، بلافاصله دوغاب را به غلاف تزریق ماشین ریخته گری تحت فشار محافظه سرد، انتقال داده و دوغاب را به درون قالب تزریق نمودند. نوگروهو^۶ و همکاران [۱۸] اقدام به ساخت و بررسی خواص مکانیکی کامپوزیت های زمینه آلومینیومی تقویت شده با ذرات کاربرد سلیسیم با به کارگیری فرآیند استیرکستینگ نیمه جامد نمودند. فرآیند هم زدن به صورت مکانیکی توسط یک پروانه سرامیکی با زاویه تیغه ۴۵° در سرعت دورانی ۶۰۰ rpm و به مدت ۱۵min انجام شد.

مذاب منیزیم تمایل به اکسیداسیون و سوختن دارد، مگر اینکه در محافظت از سطح آن دقت شود. از این رو محافظت از آلیاژ مذاب با استفاده از یک فلاکس یا یک پوشش گاز محافظ جهت مانع شدن و عدم تماس اکسیژن ضروری است [۱۹]. از اینرو تحقیقات انجام شده بر روی ریخته گری منیزیم به گستردگی آلیاژهای دیگر همانند آلومینیوم نیست. همچنین در مورد آلیاژ منیزیم با توجه به کاربرد گسترده آن در صنعت و تاثیر افزودن عنصر Si به آن در حالت نیمه جامد تحقیقات اندک می باشد. بنابراین در این تحقیق به بررسی اثر افزودن عنصر Si و ریخته گری آن در حالت نیمه جامد تحت فشار پرداخته شد. آلیاژ Mg-6%Si پس از ذوب در بالای دمای لیکوئیدوس، تحت همزدن با سرعت ۷۲۰ دور بر دقیقه تا نیمه جامد سرد شد و سپس عملیات ریخته گری انجام و مذاب تا انجماد کامل تحت فشار قرار گرفت و در نهایت خواص مکانیکی، متالورژی و سایش نمونه ها بررسی شدند.

روش تجربی

در پژوهش حاضر از منیزیم با خلوص ۹۹/۹۹٪ و سلیسیم با خلوص ۹۹/۹۹٪ برای ساخت آلیاژ Mg-6%Si استفاده شد. شکل ۱ دیاگرام فازی تعادلی Mg-Si را نشان می دهد. بر اساس این دیاگرام، این آلیاژ دارای دمای لیکوئیدوس تعادلی حدود ۸۰۶ درجه سانتی گراد است. در این تحقیق، ریخته گری نمونه ها در ناحیه نیمه جامد در سه دمای مختلف ۷۹۰، ۷۷۰ و ۷۵۰°C انجام شد. درصد جامد تعادلی در این سه دما با استفاده از قانون اهرم به ترتیب حدود ۱۵، ۲۵ و ۳۵ درصد محاسبه شد. روش انجام فرایند به این صورت بود که ابتدا نمونه ها تا بالای دمای لیکوئیدوس حرارت داده شدند، سپس همزدن مذاب آغاز و تا دمای نیمه جامد ادامه یافت و در نهایت فلز نیمه جامد به درون قالب فلزی ریخته گری و کوبش دوغاب جک هیدرولیکی انجام پذیرفت.



شکل ۵. نمونه های سایش

جدول ۱ متغیرهای مربوط به نمونه های مختلف

شماره نمونه	دمای ریخته گری	سرعت همزدن
۱	۸۸۰	-
۲	۷۹۰	۷۲۰
۳	۷۷۰	۷۲۰
۴	۷۵۰	۷۲۰



شکل ۶. شماتیک دستگاه سایش

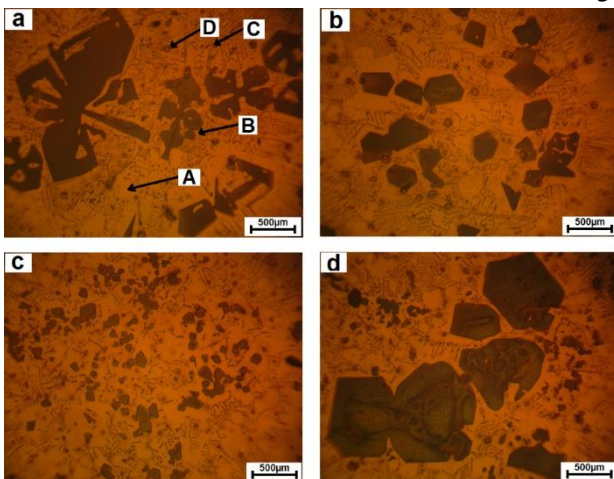


شکل ۳. نمونه های ریخته گری شده

نتایج و بحث

3-1- متالوگرافی و سختی

شکل 6 تصویر متالوگرافی سطح نمونه های ریخته گری شده را نشان می دهد. شکل 7-a تصویر ریزساختار نمونه شماره ۱ (ریخته گری عادی) را نشان می دهد، ریزساختار آلیاژ در این حالت متشکل از زمینه α -mg بوده که حاوی منیزیم است و با نماد A مشخص گردیده است. نماد B نمایانگر ذرات درشت دندریتی Mg_2Si (سیلیسید منیزیم) می باشد. نماد C نشانگر ذرات پونکتیک Mg_2Si و نماد D بیانگر وجود تخلخل می باشد. چنانچه در تصویر مشاهده می شود، ذرات Mg_2Si کاملاً دندریتی بوده و بازوهای درشت دندریتی به وضوح مشخص هستند.



شکل ۷. تصاویر ریزساختاری؛ (a) نمونه اول (ریخته گری معمولی در دمای $880^{\circ}C$)، (b) نمونه دوم (ریخته گری نیمه جامد در دمای $790^{\circ}C$)، (c) نمونه سوم (ریخته گری نیمه جامد در دمای $770^{\circ}C$)، (d) نمونه چهارم (ریخته گری نیمه جامد در دمای $750^{\circ}C$)

شکل 7-b تصویر ریزساختار نمونه دوم را نشان می دهد. همانطور که در

به منظور بررسی ریزساختار نمونه ها و انجام متالوگرافی، ابتدا قسمتی از نمونه ها بریده و سطح مقطع آنها توسط سنباده های شماره ۱۰۰ تا ۳۰۰۰ سنباده زنی و سپس توسط پالیش نرم به میزان مورد نیاز پالیش شدند. در مرحله بعد سطح مقطع نمونه ها توسط محلول نایتال ۲٪ (۲ میلی لیتر اسید نیتریک در ۹۸ میلی لیتر اتیل الکل) به مدت ۷ ثانیه اچ گردید. جهت به دست آوردن میزان سختی نمونه ها از آزمون سنجی ماکرو ویکرز با نیروی ۱۰۰N استفاده شد. به منظور تعیین خواص فشاری نمونه ها از آزمون فشار استفاده گردید. بدین ترتیب نمونه ها به صورت استاندارد با نسبت طول به قطر ۱/۵ (طول ۱۵mm و قطر ۱۰mm) با تolerانس ابعادی $\pm 0.1mm$ توسط ماشین تراش، تراشکاری شدند. آزمون در دمای محیط و با سرعت ۱mm/min صورت گرفت. لازم به ذکر است که هر آزمون بر روی سه نمونه ی یکسان انجام پذیرفت. جهت بررسی خواص سایشی و اصطکاکای نمونه ها از آزمون پین روی دیسک مطابق با استاندارد ASTM G99 استفاده گردید. پین مورد استفاده جهت سایش، به صورت استاندارد و از جنس فولاد بلرینگ ۵۲۱۰۰ به قطر ۵mm، ارتفاع ۵۰mm، سختی ۶۴HRC، زبری سطح $0.05\mu m$ و شعاع سر پین (عرق چین) ۱۰mm تهیه گردید و دیسک از جنس نمونه ها با قطر ۳۰mm و ضخامت ۸mm ساخته شد. در شکل 4 و 5 نمونه های فشار و سایش نشان داده شده اند و در شکل ۶ دستگاه سایش مورد استفاده نشان داده شده است.



شکل ۴. نمونه های فشار

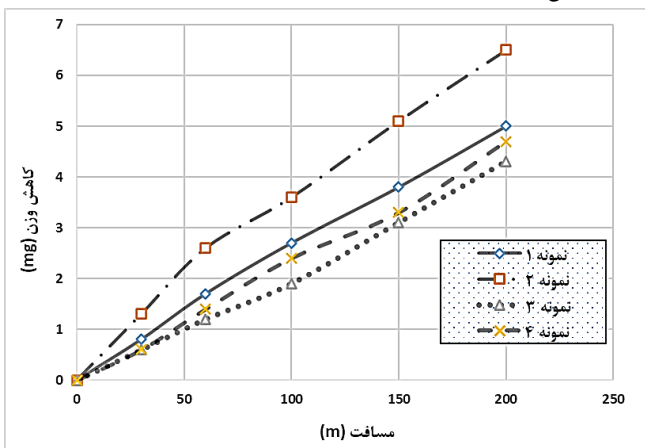
جدول ۲ مقادیر ازدیاد طول و استحکام نهایی نمونه های مختلف

نمونه	نمونه	نمونه	نمونه	
شماره ۱	شماره ۲	شماره ۳	شماره ۴	
۰/۸	۰/۸۴	۰/۸۴	۰/۷۹	ازدیاد طول (%)
۲۰۰	۱۹۰	۲۳۵	۲۱۰	استحکام نهایی MPa

همانطور که در جدول ۲ مشاهده می گردد استحکام نهایی در نمونه شماره ۳ به میزان ۱۷/۵ درصد افزایش و در نمونه ۲ به مقدار ۵ درصد کاهش یافته است. این افزایش استحکام در نمونه ۳ را که منطبق با نتایج متالوگرافی و سختی است را می توان ناشی از ریزساختار نمونه دانست. همانطور که در بخش 1-3 ذکر گردید، در نمونه فوق ذرات Mg₂Si از حالت دندردیتی و چند وجهی خارج شده و به صورت شبه کروی ریز در آمده اند و همچنین توزیع تقریباً یکنواختی را در زمینه تشکیل داده اند که همین عوامل سبب گشته اند تا استحکام فشاری افزایش یابد. ریزساختار و خواص مکانیکی قطعات تولیدی متأثر از اندازه ذرات جامد می باشد. اثبات شده است که ریز بودن اندازه ذرات جامد اولیه، کمک شایانی به بهبودی خواص مکانیکی می کند [۱۳]. جهت دستیابی به خواص مکانیکی مطلوب باید ریزساختار از حالت دندردیتی به کروی تبدیل شود، بنابراین نوع آلیاژ و سیستم همزن دو پارامتر برای تعیین زمان مناسب هم زدن و دستیابی به ساختار کروی می باشند. بنابراین با انتخاب مناسب پارامترهای فرآیند ریخته گری نیمه جامد می توان به قطعاتی با مقاومت مکانیکی مناسب دست یافت.

۳-۳- سایش

سایش یکی از معضلات صنعت بوده که باعث از کار افتادگی قطعات شده و در نهایت تخریب سازه را در پی خواهد داشت. به همین منظور جهت تعیین خواص سایشی و ضریب اصطکاک نمونه های مختلف، آزمون های سایش توسط نیروی ۶۰۰g انجام پذیرفتند. در شکل 10 نتایج مربوط به کاهش وزن نمونه های مختلف نشان داده شده است.

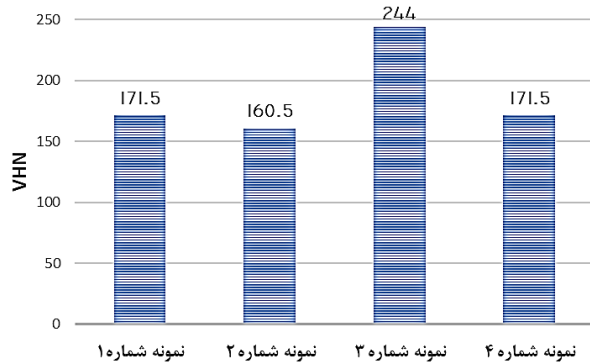


شکل ۱۰. نمودار کاهش وزن نمونه های مختلف

چنانچه در شکل 10 مشاهده می شود بیشترین مقاومت به سایش مربوط به نمونه شماره ۳ می باشد؛ مقاومت سایشی بالای نمونه مذکور را می توان ناشی از مورفولوژی ریزساختار آن دانست؛ همانگونه که در بخش ۳-۳ مشاهده گردید در نمونه فوق ذرات Mg₂Si مورفولوژی شبه کروی ریز به خود گرفته اند، همچنین به طور یکنواخت تری در زمینه α-mg، توزیع شده اند. از طرفی نمونه

تصویر پیداست بازوهای دندردیتی ذرات Mg₂Si تحت تاثیر هم زدن، شکسته شده و ذرات از حالت دندردیتی خارج و مورفولوژی چند وجهی و غیردندردیتی به خود گرفته اند و به طور غیر یکنواخت در زمینه α-mg توزیع شده اند. چنانچه مشهود است دمای ریخته گری و زمان هم زدن به میزان کافی نبوده و همین امر سبب گشته تا تنها بازوهای دندردیتی در هم شکسته شوند و فرم چند وجهی به خود بگیرند. شکل c تصویر ریزساختار نمونه سوم را نشان می دهد چنانچه در شکل مشاهده می شود، ذرات Mg₂Si تحت تاثیر زمان هم زدن بیشتر و دمای پایین تر، از حالت دندردیتی و چند وجهی خارج گردیده و مورفولوژی شبه کروی ریز به خود گرفته اند؛ همچنین توزیع یکنواخت تری از ذرات نیز مشاهده می شود. شکل d تصویر ریزساختار نمونه چهارم را نشان می دهد، چنانچه در تصویر مشهود است ذرات Mg₂Si، مجدداً از حالت دندردیتی و چند وجهی خارج شده اند؛ ولی در نمونه ی حاضر به شکل ذرات کروی درشت در آمده اند و با یک توزیع غیریکنواختی در زمینه قرار گرفته اند. درشتی کره ها ناشی از زمان هم زدن طولانی تر می باشد؛ هرچه زمان هم زدن بیشتر شود، اندازه گلبول ها نیز افزایش می یابد و به دلیل پدیده گسترش استوالد درشت تر می شوند [۲۰].

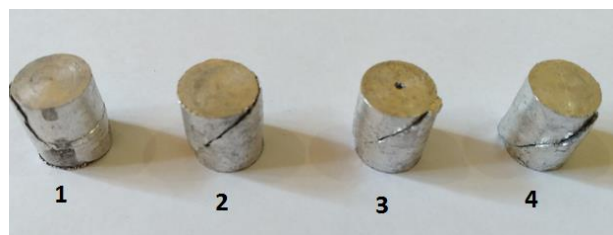
سختی نمونه ها ارتباط مستقیمی با ریزساختار آنها دارد. در شکل 8 مقادیر سختی نمونه های مختلف نشان داده شده است. همانطور که در شکل 8 مشاهده می شود در نمونه اول به دلیل دندردیتی بودن ذرات Mg₂Si، میزان سختی برابر با ۱۷۱/۵HV می باشد. در نمونه دوم به دلیل عدم توزیع یکنواخت ذرات چند وجهی Mg₂Si، سختی نسبت به قبل کاهش یافته و برابر با ۱۶۰/۵HV می باشد. در سومین نمونه به دلیل شبه کروی، ریز بودن و توزیع تقریباً یکنواخت ذرات Mg₂Si، سختی نمونه افزایش چشمگیری داشته و به ۲۴۴HV رسیده است؛ به گونه ای که نسبت به نمونه اول با ۴۲/۲۷٪ افزایش همراه بوده است. و در چهارمین نمونه به دلیل درشت شدن ذرات کروی Mg₂Si و عدم توزیع یکنواخت آنها، سختی نمونه نسبت به نمونه سوم، ۲۹/۳٪ کاهش یافته و برابر با ۱۷۲/۵HV شده است.



شکل ۸. مقادیر سختی نمونه های مختلف

2-3- مقاومت مکانیکی

در شکل 9 نمونه های فشار بعد از انجام آزمایش قابل مشاهده می باشند. همچنین در جدول ۲ مقادیر مربوط به استحکام نهایی و میزان ازدیاد طول نمونه های مختلف آورده شده است.



شکل ۹. تصاویر نمونه ها بعد از انجام آزمایش فشار

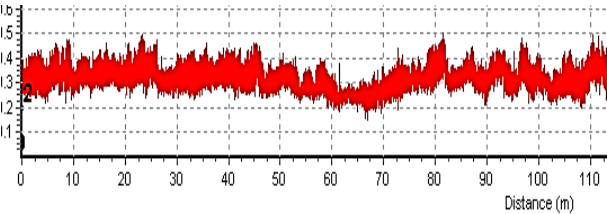
۴۲/۲۷ افزایش یافت.

۳- مقاومت سایشی نمونه ها ارتباط مستقیمی با سختی آنها دارد. با توجه به نتایج آزمون سایش مشخص گردید که بیشترین مقاومت به سایش مربوط به نمونه سوم می باشد که دارای بیشترین مقدار سختی بود. و نمونه دوم که دارای کمترین میزان سختی بود، کمترین مقاومت سایشی را داشت.

مراجع:

- Ślęzak, M.J.M., *Study of semi-solid magnesium alloys (with RE elements) as a non-Newtonian fluid described by rheological models*. 2018. **8**(4): p. 222.
- Raeissi, M. and S.H.J.M.R.E. Nourbaksh, *Enhancement of the microstructure homogeneity and mechanical performance of the As-Cast Mg/Mg2Si in-situ composite through friction stir processing*. 2019. **6**(10): p. 1065e7.
- Nourbaksh, S., M. Tavakoli, and M.J.M.R.E. Shahrokhian, *Investigations of mechanical, microstructural and tribological properties of Al2024 nanocomposite reinforced by TiO2 nanoparticles*. 2018. **5**(11): p. 116531.
- P.K., D.K. and D.G. Solomon, *Investigations on microstructure and mechanical properties on LM30-B4C nanocomposites fabricated through ultrasonic-squeeze assisted stir-casting*. *Materials Today Communications*, 2023. **37**: p. 106978.
- Surendran, K.T.S., A. Gnanavelbabu, and K. Rajkumar, *Microstructure and mechanical properties of AZ91D/Al2O3 bimodal composite fabricated through stir-ultrasonic-squeeze casting process*. *Materials Today: Proceedings*, 2021. **45**: p. 7822-7828.
- Spencer, D., et al., *Rheological behavior of Sn-15 pct Pb in the crystallization range*. 1972. **3**(7): p. 1925-1932.
- Spencer, D., R. Mehrabian, and M.C. Flemings, *Rheological behavior of Sn-15 pct Pb in the crystallization range*. *Metallurgical and Materials Transactions B*, 1972. **3**(7): p. 1925-1932.
- Rogal, Ł., *Critical assessment: opportunities in developing semi-solid processing: aluminium, magnesium, and high-temperature alloys*. *Materials Science and Technology*, 2017. **33**(7): p. 759-764.
- Modigell, M., A. Pola, and M. Tocci, *Rheological characterization of semi-solid metals: a review*. *Metals*, 2018. **8**(4): p. 245.
- Zhang, X., et al., *Texture evolution in semi-solid partial remelting and its effect on the microstructure of magnesium alloy*. *Materials Letters*, 2019. **237**: p. 141-144.
- Pola, A., M. Tocci, and P. Kapranos, *Microstructure and properties of semi-solid aluminum alloys: a literature review*. *Metals*, 2018. **8**(3): p. 181.
- Hirt, G. and R. Kopp, *Thixoforming: Semi-solid metal processing*. 2009: John Wiley & Sons.
- Bartex, S.L., et al., *Effect of solid fraction on microstructures and mechanical properties of a Mg-Al-La-Ca alloy processed by rheocasting*. *Journal of Alloys and Compounds*, 2019. **776**: p. 297-305.
- Li, D., et al., *Study on the semi-solid rheocasting of magnesium alloy by mechanical stirring*. *Journal of materials processing technology*, 2002. **129**(1-3): p. 431-434.
- Raei, M., M. Panjepour, and M. Meratian, *Effect of stirring speed and time on microstructure and mechanical properties of Cast Al-Ti-Zr-B 4 C composite produced by stir casting*. *Russian Journal of Non-Ferrous Metals*, 2016. **57**(4): p. 347-360.
- Ashok, N., et al., *Effect of stirring speed and time on the mechanical properties of Al8011-SiC metal matrix composites*. *Materials Today: Proceedings*, 2022. **64**: p. 194-199.
- Du, X. and E. Zhang, *Microstructure and mechanical behaviour of semi-solid die-casting AZ91D magnesium alloy*. *Materials Letters*, 2007. **61**(11-12): p. 2333-2337.
- Nugroho, S. and D.F. Fitriana, *Investigation of Mechanical Properties of Al7Si/SiC and Al7SiMg/SiC Composites Produced by Semi Solid Stir Casting Technique*. in *MATEC Web of Conferences*. 2018. EDP Sciences.
- Luo, A.A., *Magnesium casting technology for structural applications*. *Journal of Magnesium and Alloys*, 2013. **1**(1): p. 2-22.
- Bartex, S.L.T., L. Schaeffer, and V.K. de Barcellos, *Morphological Evolution of Mg-Al-La-Ca Alloy Induced by a Mechanical Stirring Process*. *Journal of Materials Engineering and Performance*, 2019. **28**(7): p. 3878-3886.

دوم دارای کمترین مقاومت سایشی می باشد. این موضوع در تطابق با نتایج مرتبط با سختی نیز است. آن گونه که نمودار کاهش وزن بر حسب مسافت سایش نشان می دهد، آنچه در مقدار مقاومت در برابر سایش نمونه ها اهمیت داشته مقدار مطلق سختی بوده است [۱۷]. کومار^۷ و همکاران [۱۷] اثبات کردند که در آلیاژهای Mg-Si مقاومت در برابر سایش با افزودن محتوای Si، افزایش یافته می یابد. همان طور که در شکل 10 پیداست نرخ سایش در مسافت های لغزش بالاتر از ۶۰m، روندی صعودی داشته است؛ به گونه ای که در این مسافت ها نمونه با کاهش وزن بیشتری مواجه شده، این روند صعودی در نتیجه افزایش تماس پین با دیسک بوده که منجر به سایش بیشتر دیسک شده است. در شکل 11 نمودار ضریب اصطکاک مربوط به نمونه سوم و در جدول ۳ ضریب اصطکاک تمام نمونه ها آورده شده است.



شکل ۱۱. نمودار ضریب اصطکاک نمونه سوم

جدول ۳ ضریب اصطکاک نمونه های مختلف

نمونه	نمونه	نمونه	نمونه	ضریب اصطکاک
شماره ۱	شماره ۲	شماره ۳	شماره ۴	
۰/۳۵۳	۰/۴۱۲	۰/۳۲۸	۰/۳۵۶	

چنانچه در شکل 11 مشاهده می شود بازه ضریب اصطکاک در مسافت های اولیه، پایین بوده و سپس با افزایش مسافت لغزش، بازه ضریب اصطکاک نیز افزایش می یابد. علت گستردگی بازه ضریب اصطکاک می تواند به دلیل تشکیل حفرات ناشی از کندگی براده های سایش و حذف آنها از روی سطح باشد که در اثر آن سطح ناهموار شده و به این ترتیب ضریب اصطکاک دچار تغییر می شود [۱۷].

همانطور که در جدول ۳ مشاهده می گردد ضریب اصطکاک نمونه ۳ از دیگر نمونه ها کمتر شده است که این موضوع در همخوانی با نتایج ذکر شده در قسمتهای قبل است.

نتیجه گیری و جمع بندی

در پژوهش حاضر آلیاژ Mg-6%Si به منظور بهبود ریزساختار، افزایش خواص مکانیکی و خواص تریبولوژیکی تحت ریخته گری نیمه جامد قرار گرفت. نتایج حاصل به شرح زیر است:

- ۱- ریخته گری نیمه جامد منجر به تغییر ریزساختار از حالت دندردیتی شده و ریزساختار را به سمت کروی شدن سوق می دهد. بهترین ریزساختار مربوط به نمونه سوم یعنی نمونه ای که در دمای ۷۷۰°C ریخته گری شده بود می باشد؛ به طوری که ذرات Mg₂Si به صورت شبه کروی ریز تبدیل شده و به صورت تقریباً یکنواختی در زمینه -αMg توزیع شده بودند.
- ۲- ریخته گری نیمه جامد می تواند منجر به افزایش سختی آلیاژ گردد. بالاترین مقدار سختی مربوط به نمونه سوم بود و سختی نمونه مذکور برابر با ۲۴۴HV شد. به گونه ای که نسبت به نمونه اول به میزان

Telerobotics As a Solution In The Post-Epidemic World

Jafar Tavosi^{1,2} and Amirreza Azizi²

¹Department of Electrical Engineering, Faculty of Engineering, Ilam University, Ilam, Iran

²Department of Electrical Engineering, Shahed University, Tehran, Iran

E-mails: j.tavoosi@ilam.ac.ir , , amirreza.azizi@shahed.ac.ir, ma.shirkhani@ilam.ac.ir

* Corresponding Author

Abstract

In this paper, with the aim of presenting an optimized adaptive control method in telerobotic systems, the impact of this technology on medical nanorobots and microrobots and their application in telemedicine and remote surgery systems has been analyzed. The proposed method has been designed and simulated considering the existing challenges such as actuator saturation and time delays. The simulation results showed that this adaptive controller was successfully able to improve the system performance under different conditions and ensure the stability of the system. The innovation of this research in presenting an optimized control structure for teleoperative systems with an emphasis on practical applications in the medical field, especially in critical situations such as the Corona pandemic, has been highlighted. This technology can reduce the need for the constant presence of medical personnel and improve access to medical services in deprived areas. However, limitations such as high costs, technical complexity, and the impact of environmental noise have been raised as potential challenges, the investigation of which could pave the way for future research.

Keywords

Telemedicine, Nanorobotics, Adaptive Control, Robust Control, Artificial Intelligence,.

تله رباتیک به عنوان راهکاری در جهان پسا اپیدمی

جعفر طاوسی^{۱*}، امیررضا عزیزی^۲

گروه مهندسی برق، دانشگاه ایلام، ایلام، ایران

گروه مهندسی برق، دانشگاه شاهد، تهران، ایران

ایمیل نویسندگان: j.tavoosi@ilam.ac.ir, amirreza.azizi@shahed.ac.ir

چکیده

در این مقاله، با هدف ارائه یک روش بهینه‌سازی شده کنترل تطبیقی در سیستم‌های تله‌رباتیک، تأثیر این فناوری بر نانوروبات‌ها و میکروروبات‌های پزشکی و کاربرد آن‌ها در سیستم‌های تله‌مدیسین و جراحی از راه دور مورد تحلیل قرار گرفته است. روش پیشنهادی با توجه به چالش‌های موجود مانند اشباع محرک‌ها و تأخیرهای زمانی، طراحی و شبیه‌سازی شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که این کنترلر تطبیقی با موفقیت توانست عملکرد سیستم را در شرایط مختلف بهبود بخشد و پایداری سیستم را تضمین کند. نوآوری این پژوهش در ارائه یک ساختار کنترلی بهینه‌شده برای سیستم‌های تله‌اپراتوری با تأکید بر کاربردهای عملی در حوزه پزشکی، به‌ویژه در شرایط بحرانی مانند همه‌گیری کرونا، برجسته شده است. این فناوری می‌تواند نیاز به حضور مداوم پرسنل پزشکی را کاهش داده و دسترسی به خدمات درمانی در مناطق محروم را بهبود بخشد. با وجود این، محدودیت‌هایی مانند هزینه‌های بالا، پیچیدگی‌های فنی و تأثیر نویز محیطی به‌عنوان چالش‌های بالقوه مطرح شده‌اند که بررسی آن‌ها می‌تواند زمینه‌ساز تحقیقات آینده باشد.

کلمات کلیدی: تله مدیسین-نانورباتیک-کنترل تطبیقی-کنترل مقاوم-هوش مصنوعی

نام نویسنده مسئول: جعفر طاوسی

ایمیل نویسنده مسئول: j.tavoosi@ilam.ac.ir

تاریخ ارسال مقاله: ۱۴۰۳/۰۸/۱۶

تاریخ(های) اصلاح مقاله: ۱۴۰۳/۰۹/۲۷

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۳/۱۰/۲۳

۱- مقدمه

تله‌ربات نوعی ربات است، که از طریق کانال ارتباطی معین و از مسافتی دور توسط یک متصدی انسانی یا ماشینی دستورات و فرمان‌ها را اجرا می‌کند. متصدی انسانی بدین وسیله می‌تواند حرکت‌هایی را در قالب یک ماشین از مسافت طولانی مدیریت نماید. در این راستا حسگرهای مستقر بر روی ربات، متصدی را از چگونگی و نتایج انجام حرکات ربات مطلع می‌سازد. معمولاً به دلیل فاصله زیاد بین ربات‌های موجود در سیستم‌های حرکت از راه دور، در انتقال اطلاعات مذکور بین ربات‌ها تاخیر وجود دارد که این تاخیر مهمترین چالش در کنترل پایداری و کارایی این سیستم‌ها می‌باشد. در حالت ایده آل محرک‌ها توانایی تولید هر گشتاور را داشته و اطلاعات دقیق از پارامترهای سیستم‌های رباتیکی نیز وجود دارد. ولی در عمل به دلیل نامعلوم بودن یا احتمال تغییرات برخی پارامترهای ربات نظیر اصطکاک، جرم و اغتشاشات خارجی، امکان دسترسی به مقادیر واقعی ربات وجود ندارد. اخیراً تحقیقاتی در خصوص در نظر گرفتن مساله اشباع محرک‌ها در سیستم‌های تله‌اپراتوری صورت گرفته است. در مرجع [۱] کنترل به صورت ترکیبی با ساختار ضد اشباع برای سیستم تله PID کننده اپراتوری معین و بدون تاخیر در کانال ارتباطی طراحی شده است. در مرجع [۲] ساختاری متفاوت با ترکیب روش متغیرهای موج و کنترل کننده تناسبی غیرخطی برای کنترل سیستم‌های تله اپراتوری مقید به مساله اشباع ارائه شده است که در آن تاخیر موجود در کانال انتقال اطلاعات ثابت و دینامیک ربات هم معین باشد. در پژوهشی دیگر جهت کنترل موقعیت و تضمین پایداری ربات‌های فرمانده و فرمانبر معین مقید به مساله اشباع محرک‌ها با تاخیر زمانی ثابت روش ترکیبی متغیرهای موج با ساختار ضد اشباع مطرح شده است [۳]. از جمله راه‌های دیگر کنترل سیستم‌ها استفاده

این روزها شیوع کروناویروس، فشار مضاعفی را بر سیستم بهداشت و درمان بسیاری از کشورها وارد کرده است؛ اما مقوله "تله مدیسین" می‌تواند از روش‌های ضروری مقابله با آن به ویژه برای افرادی باشد که سلامتشان تحت تأثیر این ویروس قرار گرفته است. با ورود نانو تکنولوژی به عرصه پزشکی زمینه تسریع در درمان بیماری به روش‌های نوین فراهم شده است. با پیشرفت نانو تکنولوژی در مهندسی پزشکی و توسعه میکرو ماشین‌ها و افزایش کاربرد آنها در قابلیت‌های حسی، نظیر حسگرهای مختلف میتوان این انتظار را داشت که برای سالهای آینده این نانو ماشینها بتوانند از فواصل بسیار دور عمل‌های جراحی بسیار حساس را نیز انجام دهند. با توجه به وضعیت پاندمی کرونا این بستر برای توسعه تله مدیسین و نانو رباتهای پزشکی فراهم شده است. تله مدیسین به معنای "پزشکی از راه دور" مشتمل بر نگهداری، مراقبت، تشخیص، مشاوره و معالجه بیماران است که با انتقال داده‌های پزشکی و مسائل آموزشی به درمان و مراقبت از بیماران کمک می‌کند. در نگاهی جامع تر و کامل تر بطور عمومی پزشکی از راه دور کاربرد فناوری‌های پزشکی و ارتباطی جهت تبادل هر گونه اطلاعات، اعم از داده، صدا یا ارتباطات تصویری بین پزشک و بیمار یا پزشک و متخصصان بهداشت و درمان در موقعیت‌های مجزای جغرافیایی و به منظور ایجاد امکان تبادل، جهت مقاصد پزشکی، بهداشتی درمانی، تحقیقاتی و آموزشی است. اکنون که تماس حضوری با بیماران کرونا می‌تواند خطر ابتلای کارکنان بهداشتی و درمانی را بیشتر کند این شیوه مراقبت و نگهداری برای بیماران کرونایی موثر است. همین‌طور به افراد سالم، از طریق پزشکی از راه دور کمک کنند و آنان را از ابتلا به این ویروس بازدارند و افراد مبتلا به ویروس و مرخص شده از بیمارستان را پیگیری کنند.

$$(q_s(t))\ddot{q}_s(t) + C_s(q_s(t), \dot{q}_s(t))\dot{q}_s(t) + F_s\dot{q}_s(t) + F_{cs}(\dot{q}_s(t)) + M_s \tau_e(t) = S(\tau_s(t) - \tau_e(t)) \quad (2)$$

در روابط بالا موقعیت، سرعت و شتاب ربات های فرمانده و فرمانبر $R^{n \times 1} \in$ در q_j و \dot{q}_j که $j \in \{m, s\}$ مشخص شده اند. $G_j(q_j(t)) \in R^{n \times 1}$ بردار جاذبه، $M_j(q_j(t)) \in R^{n \times n}$ و $C_j(q_j(t), \dot{q}_j(t)) \in R^{n \times n}$ ماتریس های کوریولیوس و سانتریفیوژ و اینرسی می باشند. $F_j \in R^{n \times n}$ و $F_{c_j}(\dot{q}_j(t)) \in R^{n \times 1}$ ضرایب اصطکاک ویسکوز و کولمبی سیستم اند. $\tau_m(t), \tau_s(t) \in R^{n \times 1}$ و $\tau_h(t), \tau_e(t) \in R^{n \times 1}$ گشتاور های اعمالی و نیز سیگنال های کنترلی رباتهای فرماندهی و فرمانبری می باشند که از تابع اشیا $S: R^{n \times 1} \rightarrow R^{n \times 1}$ عبور میکنند.

در فرمول های بالا زیروند m به معنای ربات فرمانده و زیروند s نمایانگر ربات فرمانبر می باشد. d نیز تعداد مفصل های ربات هارا نشان میدهد.

۳-۲- معادله حرکت ربات ها بصورت خطی شده

معادلات حرکات رباتها با رابطه زیر بیان میشود:

$$M(q(t))\ddot{q}(t) + C(q(t), \dot{q}(t))\dot{q}(t) + F\dot{q}(t) + F(q(t)) + G(q(t)) = Y(q(t), \dot{q}(t), \ddot{q}(t))\theta = \tau$$

بیان میشود. که در آن $Y(q(t), \dot{q}(t), \ddot{q}(t))\theta = \tau$ یک ماتریس تابع پیوسته است. که اعضای آن موقعیت و شتاب و سرعت ربات هاست که ماتریس رگرسیون نامیده میشود. $\theta \in R^1$ یک بردار ثابت و τ گشتاور کنترلی و l نیز تعداد پارامتر های نامعین است.

۳-۳- مدل محرک اشباع با ناحیه خطی محدود

مدل محرک اشباع در ناحیه خطی که محدود شده است، بصورت تابع $s(x)$ ارائه شده است. پارامتر های بردار مذکور بصورت زیر ارائه شده است:

$$s_i(x_i) = \begin{cases} > M_i & x_i > M_i \\ = x_i & -M_i \leq x_i \leq M_i \\ < -M_i & x_i < -M_i \end{cases} \quad R \rightarrow R, i = 1, \dots, n \quad (4)$$

با استفاده از تابع فوق میتوان توابع جداگانه ای را برای مفصل ها در ناحیه غیر خطی در نظر گرفت. در این مدلسازی تابع باید در بازه $-M_i \leq x_i \leq M_i$ خطی شده باشد و در خارج از این ناحیه تابع غیر خطی است.

۳-۴- طراحی کنترلر تطبیقی

برای مقابله با اشباع محرک ها و مسئله سنکرونیسم سیگنالها و میزان سرعت در رباتهای فرمانده و فرمانبر در سیستم های کنترلر تله اپراتوری غیرخطی یک کنترلر تناسبی-مشتق غیر خطی (np+nd) به همراه عبارات کنترل تطبیقی محدود به صورت زیر پیشنهاد شده است:

$$\tau_m(t) = Y_m(q_m(t), \dot{q}_m(t))\hat{\theta}_m - P(q_m(t) - q_s(t - d_s(t))) - k_m P(\dot{q}_m(t)) \quad (5)$$

$$\tau_s(t) = Y_s(q_s(t), \dot{q}_s(t))\hat{\theta}_s - P(q_s(t) - q_m(t - d_m(t))) - K_s P(\dot{q}_s(t)) \quad (6)$$

در توابع بالا $K_m(t), K_s(t) \in R^{n \times n}$ ماتریس های مثبت معین، متقارن ثابت می باشند. $d_m(t), d_s(t)$ نمایانگر تاخیر های ارتباطی از مسیر فرمانبر به فرمانده و از فرمانده به فرمانبر است. $\hat{\theta}_m, \hat{\theta}_s \in R^1$ بردار تخمین پارامتر های نامعین و $Y_s(q_s(t), \dot{q}_s(t)) \in R^{n \times n}$ ، $Y_m(q_m(t), \dot{q}_m(t)) \in R^{n \times n}$ ماتریس های رگرسیون ربات های فرمانده و فرمانبر میباشد.

از روش های مبتنی بر هوش محاسباتی می باشد که در مقالات مورد بررسی قرار گرفته است [۴-۹].

در این مقاله به بررسی تاثیرات یک سیستم تله اپراتوری در مسئله درمان از راه دور و نقش آن در دوران پاندمی کرونا پرداخته میشود. یک نوع ساختار بهینه سازی شده در سیستم کنترل رباتهایی که از الگوریتم فرمانده و فرمانبر استفاده میکنند ارائه شده و مشاهده میشود که الگوریتم های کنترل تطبیقی بهینه سازی شده در محیط محدود چگونه از اشباع در فرایند اجرای دستورات کنترلی جلوگیری میکند؛ و ارتباط آن در نانو رباتهای تله مدیسین و نقش آنها در جراحی های ویژه ارائه شده است.

۲- نانو رباتیک

نانوربات ها از فناوری های نوین در زمینه رباتیک هستند که مقیاس هایی از ۱ تا ۱۰ میکرومتر را در برمیگیرند. [۱۰] نانو ربات ها از طریق سیگنالهای اولتراسونیک وارد بدن شده و با شناسایی و هدایت به سمت منشا بیماری این سیگنالها را منعکس کرده و اطلاعات را به منبع منتقل میکنند. این روش میتواند به صورت بی سیم از راه دور اعمال شده و میتوان از آن در تله مدیسین هم استفاده کرده و در شرایط شیوع بیماری های ویروسی نظیر کووید-۱۹ و عدم دسترسی به جراحان و متخصصان استفاده کرد. [۱۱-۱۳].

۲-۱- کاربرد نانو ربات ها در جراحی

نانورباتها امروزه در جراحی سرطان ها یا جراحی از راه دور مورد استفاده قرار میگیرند. در نانو رباتهای مورد استفاده در جراحی سرطان، موتور های بسیار ریزی قرار دارد که دستگاه را تا نقاط تومور هدایت میکند. [۱۴]. استفاده از نانو رباتها نقش جراحان را مانند نقش هدایتی خلبان در ناوبری، آنان را بصورت ناظر بر عملکرد رباتها در طول جراحی قرار میدهند. [۱۴].

۲-۲- طراحی میکوربات

باید در طراحی میکوربات ها در محیط بافتها و ارگانهای بدن، بالا بودن میزان درجه آزادی^۲ را مد نظر قرار داد. در طراحی این نانو ماشین ها مدل های زیستی شامل اجزا و بر مبنای گردش مولکولی مورد استفاده قرار میگیرند. با استفاده از بازو های ربات برای کارکرد های ویژه و مخصوص باید سازش پذیری و تطبیق پذیری نانوماشین در محیط مورد بررسی قرار گیرد [۱۵]. سیستم های کنترلی در نانو ربات ها بر مبنای داده های دریافتی سنسور هایی که بر روی آنها قرار گرفته است عمل میکنند. این حسگر ها با بررسی عملکرد مویرگها، قابلیت عملیات در ناحیه هدف مورد بررسی قرار میدهند. با توجه به ابعاد نانومتری این ماشینها، باید از سنسور های شیمیایی استفاده کرد. [۱۵]

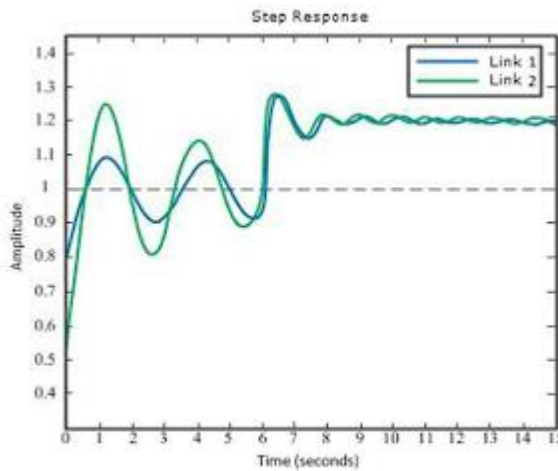
۳- کنترل عملکرد نانو رباتها

امروزه روش های بسیاری برای کنترل عملکرد نانو ربات ها ارائه شده است. یکی از پرکاربرد ترین این روشها الگوریتم کنترل تطبیقی است. یک الگوریتم بهینه سازی شده تطبیقی برای سیستم های تله اپراتوری که در زمینه میکورباتهای پزشکی موثراند، در ادامه ارائه میشود [۱۹-۱۶]

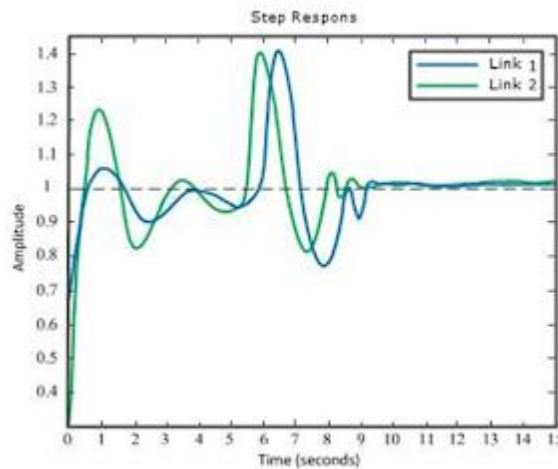
۳-۱- مدل سیستم تله اپراتوری با کنترلر مقید به مسئله اشباع

مدلسازی سیستم های تله اپراتوری غیرخطی مبتنی بر کنترلر عای مبتنی بر اشباع بصورت زیر طراحی شده است:

$$M_m(q_m(t))\ddot{q}_m(t) + c_m(q_m(t), \dot{q}_m(t))\dot{q}_m(t) + F_m\dot{q}_m(t) + F_{cm}(\dot{q}_m(t)) + G_m(q_m(t)) = \tau_h(t) + S(\tau_m(t)) \quad (1)$$



(a)



(b)

شکل-۲. پاسخ پله برای یک ربات دولینک کنترل از راه دور

پس شبیه سازی ها مشاهده می شود که سرعت زاویه ای ربات ها به سمت صفر میل می کند و همچنین سیگنالهای کنترل کمتر از محدوده اشباع عمل می کنند. با اعمال کنترلر تطبیقی پایداری سیستم افزایش می یابد. از کنترلر تطبیقی برای سیستم های تله اپراتوری مورد استفاده قرار می گیرند. با استفاده از کنترلر پیشنهادی می توان پایداری سیستم را نسبت به روش های کلاسیکی که پایداری کامل را تضمین نمی کنند، در سیستم های تله اپراتوری تضمین کند.

۵- نتیجه گیری

این پژوهش با هدف ارائه یک کنترلر تطبیقی بهینه شده برای سیستم های تله اپراتوری غیرخطی انجام شد. نتایج به دست آمده از شبیه سازی ها نشان داد که روش پیشنهادی توانست عملکرد سیستم های تله اپراتوری را بهبود دهد و مشکلاتی مانند اشباع محرک ها و تأخیرهای زمانی را کاهش دهد. همچنین، این روش در حفظ پایداری سیستم و کنترل دقیق ربات های فرمانده و فرمانبر مؤثر عمل کرد. استفاده از این سیستم ها در حوزه پزشکی، به ویژه در شرایط پاندمی کرونا و دیگر بیماری های همه گیر، امکان پذیر است. نانوربات ها و میکوربات های مجهز به این نوع کنترلر می توانند به صورت موثری در جراحی از راه دور و ارائه خدمات درمانی در مناطق محروم و دورافتاده به کار گرفته شوند. همچنین، این فناوری می تواند نیاز به حضور مداوم پرسنل پزشکی در نزدیکی بیماران را کاهش دهد و امکان انتقال داده های مورد نیاز برای تجزیه و تحلیل را به صورت دیجیتالی و از فواصل دور فراهم کند. با این وجود، محدودیت هایی مانند هزینه های بالا، پیچیدگی های فنی، تأثیر نویز محیطی و

با توجه به ۶۵، کنترلر تطبیقی ارائه شده، دارای کران بالا به شکل زیر خواهد بود:

$$|\tau_{mi}(t)| \leq N_i + \lambda_{\max}\{K_m\}N_i + B_{Dm_i}^0 \leq M_i, i = 1, \dots, n \quad (9)$$

$$(\lambda) |\tau_{si}(t)| \leq N_i + \lambda_{\max}\{K_s\}N_i + B_{Ds_i}^0 \leq M_i, i = 1, \dots, n$$

در روابط بالا $B_{Ds_i}^0$ و $B_{Dm_i}^0$ باند های بالای ترم های کنترلر های تطبیقی در [۱۱] است. تعریف های محرک در تابع (۴) با انتخاب K_m, K_s کران بالای تابع غیر خطی N_i و باند های بالا ترم تطبیقی به شکل توابع زیر انجام شده و در نهایت سیگنالهای کنترلی ارسالی همواره در باند خطی محرک عمل میکنند.

$$N_i + \lambda_{\max}\{K_m\}N_i + B_{Dm_i}^0 \leq M_i, i = 1, \dots, n$$

$$N_i + \lambda_{\max}\{K_s\}N_i + B_{Ds_i}^0 \leq M_i, i = 1, \dots, n \quad (10)$$

با در نظر گرفتن روابط ۹ و ۱۰ و ترکیب ۶۵ در ۲ و معادله حلقه بسته

سیستم به صورت زیر است:

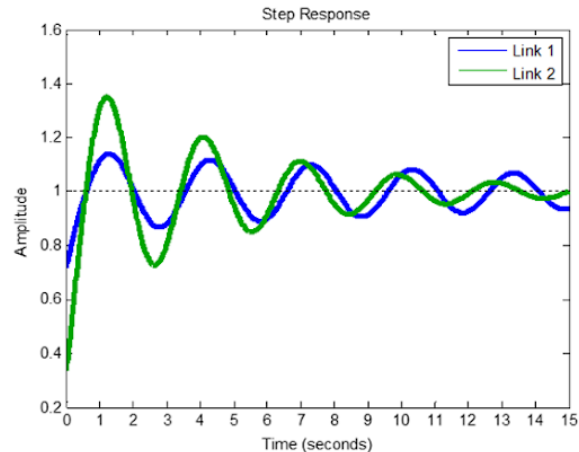
$$M_m(q_m(t))\ddot{q}_m(t) + C_m(q_m(t), \dot{q}_m(t))\dot{q}_m(t) = \tau_h(t) + Y_m(q_m(t), \dot{q}_m(t))\bar{\theta}_m - P(q_m(t) - q_s(t - d_s(t))) - K_m P(\dot{q}_s(t))$$

$$M_s(q_s(t))\ddot{q}_s(t) + C_s(q_s(t), \dot{q}_s(t))\dot{q}_s(t) = Y_s(q_s(t), \dot{q}_s(t))\bar{\theta}_s - \tau_e(t) - P(q_s(t) - q_m(t - d_m(t))) - K_s P(\dot{q}_s(t)) \quad (12)$$

در توابع بالا $\bar{\theta} = \hat{\theta} - \theta$ نشان دهنده خطای تخمین میباشد.

۴- نتایج شبیه سازی

در این قسمت در محیط نرم افزار MATLAB روش کنترلی پیشنهادی جهت ربات پیاد سازی شده و مورد ارزیابی قرار می گیرد. در شکل ۱- نتایج پاسخ پله برای یک ربات دولینک کنترل از راه دور نشان داده شده است.



شکل-۱. پاسخ پله برای یک ربات دولینک کنترل از راه دور

در شکل-۲ قسمت (a) فرض می شود نامعینی شدیدی در پارامترهای ربات رخ داده و هدف رسیدن به ۱.۲ واحد است. در شکل ۲- قسمت (b) اثر تأخیر ۷ ثانیه ای ناشی از اینترنت در کنترل ربات از راه دور، به تصویر کشیده شده است. همانطور که ملاحظه می شود سیستم کنترل بخوبی توانسته است ربات دو لینک را کنترل کند.

Control for T-S Fuzzy-Based Nonlinear Systems. Complexity. 2024;2024(1):7126978.

[18] Shirkhani M, Karimizad SS, Dadvand Z. Proof of stability of linear and non-linear TSK type-2 fuzzy systems. Computational methods in engineering sciences. 2023 May 22;1(1):5-10.

[۱۹] گنجه فر سهیل، رضایی سارا، هاشم زاده فرزاد. کنترل تطبیقی

محدود سیستم تله اپراتوری غیرخطی نامعین با وجود اشباع محرک ها و تاخیر

زمانی نامتقارن و متغیر بازمان. مجله کنترل. ۱۳۹۶؛ ۱۱ (۱): ۱۹-۲۵

تأخیرهای زمانی متغیر همچنان به عنوان چالش های اصلی مطرح هستند که نیازمند بررسی و رفع در تحقیقات آینده می باشند. علاوه بر این، توسعه بیشتر در زمینه تطبیق این فناوری با شرایط عملی و بررسی تأثیر پارامترهای مختلف بر عملکرد آن، گامی اساسی در مسیر کاربردی سازی این فناوری خواهد بود. در مجموع، این تحقیق گام مهمی در جهت استفاده از فناوری های پیشرفته مانند تله مدیسین و نانوربات ها در حوزه پزشکی از راه دور به شمار می رود و می تواند مبنای تحقیقات آینده برای بهینه سازی بیشتر سیستم های کنترل تطبیقی در کاربردهای پزشکی باشد.

مراجع

[1] S. H. Ahn and J. S. Yoon, "A bilateral control scheme for 2-DOF telemanipulators with control input saturation," Control Engineering Practice, vol. 10, pp. 1081-1090, 2002.

[2] S.-J. Lee and H.-S. Ahn, "Synchronization of bilateral teleoperation systems with input saturation," in Control Automation and Systems (ICCAS), 2010 International Conference on, ۲۰۱۰, pp. 1357-1361.

[3] S.-J. Lee and H.-S. Ahn, "A study on bilateral teleoperation with input saturation and systems", in Control, The International Conference on Automation and Systems, 2011, pp. ۱۶۱-۱۶۶.

[4] J Tavooosi, R Azami, A New Method for Controlling the Speed of a Surface Permanent Magnet Synchronous Motor using Fuzzy Comparative Controller with Hybrid Learning, Journal of Computational Intelligence in Electrical Engineering, Vol. 10, 2019, pp. 57-68.

[5] J Tavooosi, S Rahmati, New Applications on Linguistic Mathematical Structures and Stability Analysis of Linguistic Fuzzy Models, International Journal of Smart Electrical Engineering, Vol.5, No.3, Summer 2016, pp. 153-159.

[6] MS Hesarian, J Tavooosi, Green Technology used in Finishing Process Study of the Wrinkled Cotton Fabric by Radial Basis Function neurons.(Experimental and Modeling analysis), Advances in Environmental Technology, Volume 5, Issue 1, Winter 2019, Pages 35-45.

[7] J Tavooosi, MA Badamchizadeh, S Ghaemi, Adaptive Inverse Control of Nonlinear Dynamical System Using Type-2 Fuzzy Neural Networks, Journal of Control, Vol. 5, No. 2, 2011, pp. 52-60.

[8] J Tavooosi, M Alaei, B Jahani, MA Daneshwar, A novel intelligent control system design for water bath temperature control, Australian Journal of Basic and Applied Sciences, Vol. 5, No. 12, 2011, pp. 1879-1885.

[9] J. Tavooosi, A. A. Suratgar, and M. B. Menhaj, "Nonlinear System Identification Based on a Self-Organizing Type-2 Fuzzy RBFN," Engineering Applications of Artificial Intelligence, Vol. 54, Sep. 2016.

[10] Azizi A, Toohidinejad Z, Haghghatpoor I. Design and analysis of adaptive control of the reference model to control the output pressure of the boiler system. Computational methods in engineering sciences. 2023 May 22;1(1):21-6.

[11] Nano – Medicine based drug delivery system “ Journal of Advanced pharmacy Education & Research , 1(1) 211-213 (2111) ISSN 2219 – 3339 , -11

[12] Yadar, Akash,. GhuneMeenal,. Jain, Dinesh Kumar. NANOROBOTICS – AN UPCOMING Revolution”, Kumar , Piyush.

[13] Motion Control Algorithms for Nanorobot Swarms in Medicine”, Hegarty , James . Gillespie , Anna , EE21N, Wong , Philip , H.-S. -11

[14]technology/nanotechnologyhttp://www.library.tebyan.net/Science

[۱۵] حمیدرضا شریفانی، فن آوری و نانوربات و کاربرد آن در پزشکی،

مجله صنعت هوشمند ، سال دوازدهم ، بهمن ۸۸ ، شماره ۱۰۵

[16] Swallowable Wireless Capsule Endoscopy progress and Technical Challenges – Guobing Pan and Litong Wang – Review Article – October 2011.

[17] Soltanian F, Valadbeigi AP, Tavooosi J, Aazami R, Shasadeghi M, Shirkhani M, Azizi A. Adaptive Optimal Terminal Sliding Mode

Autism diagnosis using child facial image and deep neural networks

Kambiz Moradi ¹, Mozafar Bag-Mohammadi ^{1,*} and Mojtaba Karami ¹

¹ Faculty of Engineering, Ilam University, Ilam, Iran

E-mails: k.moradi5@ilam.ac.ir ; mozafarbm@yahoo.com ; m.karami@ilam.ac.ir

* Corresponding Author

Abstract

Autism Spectrum Disorder (ASD) is a complex neurodevelopmental disorder that affects physical, social, and language skills. There is no specific medicine to treat ASD. To diagnose this disorder, doctors consider the child's behavior and his developmental history. Autism is often difficult to diagnose because it can have a wide range of symptoms. Children with autism often have subtle facial features that distinguish them from normal children. Early diagnosis and appropriate medical intervention can significantly improve the lives of children with autism and save a lot of money. Deep neural networks (DNN) are a type of machine learning algorithm that can be used to automatically extract features from images as well as classify them. In this research, a practical solution for autism screening is proposed using images of Iranian children's faces through the use of a deep neural network based on transfer learning with 97% detection accuracy. The proposed method can also be used to improve the accuracy of clinical diagnosis.

Keywords

Autism spectrum disorder, deep learning, artificial intelligence, ASD, CNN.

تشخیص اوتیسم از روی تصویر صورت کودک با استفاده از شبکه‌های عصبی عمیق

کامبیز مرادی^۱، مظفر بگ محمدی^{۱*} و مجتبی کرمی^۱^۱ گروه مهندسی کامپیوتر، دانشگاه ایلام، ایلام، ایرانایمیل نویسندگان: k.moradi5@ilam.ac.ir; mozafarbm@yahoo.com; m.karami@ilam.ac.ir

چکیده

اختلال طیف اوتیسم یک اختلال رشد عصبی پیچیده است که مهارت‌های بدنی، اجتماعی و زبانی را تحت تأثیر قرار می‌دهد. هیچ داروی خاصی برای درمان این بیماری وجود ندارد. برای تشخیص این اختلال، پزشکان رفتار و تاریخچه رشد کودک را در نظر می‌گیرند. اوتیسم اغلب به‌سختی قابل تشخیص است، زیرا می‌تواند با طیف گسترده‌ای از علائم ظاهر شود. کودکان مبتلا به اوتیسم اغلب دارای ویژگی‌های ظریفی در صورت هستند که آن‌ها را از کودکان معمولی در حال رشد متمایز می‌نماید. تشخیص زودهنگام و مداخله پزشکی مناسب می‌تواند به‌طور چشمگیری زندگی کودکان مبتلا به اوتیسم را بهبود بخشد و صرفه‌جویی زیادی از لحاظ هزینه نیز داشته باشد. شبکه‌های عصبی عمیق نوعی الگوریتم یادگیری ماشینی هستند که می‌توان از آن‌ها برای استخراج ویژگی‌ها از تصاویر و همچنین دسته‌بندی آن‌ها استفاده شوند. در این تحقیق یک راه‌حل عملی غربالگری اوتیسم با استفاده از تصاویر چهره کودکان ایرانی از طریق استفاده از یادگیری عمیق مبتنی بر یادگیری انتقالی با دقت تشخیص ۹۷٪ پیشنهاد می‌شود. همچنین می‌توان از روش پیشنهادی برای بهبود دقت تشخیص بالینی استفاده نمود.

کلمات کلیدی: اختلال طیف اوتیسم، یادگیری عمیق، هوش مصنوعی، CNN، ASD

نام نویسنده مسئول: مظفر بگ محمدی

ایمیل نویسنده مسئول: mozafarbm@yahoo.com

تاریخ ارسال مقاله: ۱۴۰۳/۰۷/۲۰

تاریخ(های) اصلاح مقاله: ۱۴۰۳/۰۸/۲۲

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۳/۰۹/۰۳

۱- مقدمه

اوتیسم (درخودماندگی) یا اختلال طیف اوتیسم (ASD^۱) اختلالی عصبی که مهارت‌های بدنی، اجتماعی و زبانی را تحت تأثیر قرار می‌دهد. همان‌طور که از اصطلاح «طیف» برمی‌آید، طیف وسیعی از علائم و سطوح شدت دارد [۱]. این اختلالات در حال حاضر در طبقه‌بندی آماری بین‌المللی بیماری‌ها و مشکلات مربوط به سلامتی به‌عنوان اختلالات روانی و رفتاری، در دسته اختلالات رشدی فراگیر قرار می‌گیرند [۲].

نشانه‌های اوتیسم معمولاً پیش از ۲.۵ سالگی بروز می‌یابد. افراد مبتلا نسبت به محبت بی‌اعتنا یا بیزار به نظر می‌رسند. آن‌ها ممکن است وابستگی بی‌موردی به بعضی از اشیاء پیدا کنند. فردی که از اختلال طیف اوتیسم رنج می‌برد به‌طور کلی قادر به برقراری تعامل اجتماعی و ارتباط با افراد دیگر نیست [۳]. زندگی یک فرد مبتلا معمولاً در تمام طول عمر او تحت تأثیر قرار می‌گیرد. علائم این مشکل ممکن است تا آخر عمر ادامه داشته باشد. درمان کامل افراد مبتلا به این بیماری امکان‌پذیر نیست [۴]. اگرچه اوتیسم در هر سنی قابل تشخیص است، اما علائم آن به‌طور کلی در دو سال اول زندگی ظاهر و در طول زمان ایجاد می‌شود. نرخ مبتلایان به اوتیسم در سراسر جهان متعدد است و با سرعت بسیار بالایی در حال افزایش است. بر اساس مطالعه‌ی که زیدان و همکاران [۵] انجام داده‌اند، تخمین زده می‌شود که در سراسر جهان از هر ۱۰۰ کودک یک نفر مبتلا به اوتیسم است. در ایران نیز آمار با میانگین جهانی برابر است.

فرآیند تشخیص اوتیسم شامل یک ارزیابی جامع از اندازه‌گیری‌های بالینی و مشاهدات متنوع پزشک از رفتار کودک در سن سه سال یا بالاتر از آن است [۶]. به‌عنوان بخشی از تشخیص بالینی از روش‌های تصویربرداری

پرتومغناطیسی مغز، نوار مغز، آزمایش‌های ژنتیک، مطالعات رفتاری و معاینه فیزیکی صورت استفاده می‌شود. فرآیندهای تشخیص استاندارد اوتیسم شامل ارزیابی ضریب هوشی IQ^۲، بهره هوشی کلامی با استفاده از مقیاس رتبه‌بندی اوتیسم در دوران کودکی (CARS^۳)، ابزار تشخیص اوتیسم - رتبه‌بندی ADI^۴ (R) و مقیاس هوش اختصاری وکسلر (WAIS^۵) است. اخیراً برای تسریع روند تشخیص اوتیسم، کارهای تحقیقاتی متعددی انجام شده است.

نتایج تحقیقات نشان می‌دهند که اوتیسم به دلیل نقص در رشد جنینی مغز ایجاد می‌شود و این نقص در شکل‌گیری فیزیکی صورت افراد مبتلا به اوتیسم قابل مشاهده است [۷]. با توجه به اینکه اوتیسم یک اختلال رشد عصبی است و رشد عصبی با رشد مغز مرتبط است. رشد مغز را می‌توان در نشانه‌های چهره افراد اوتیسم در مقایسه با افراد غیر اوتیسم مشاهده کرد. تغییرات مغز در چهره منعکس می‌شود [۸]. افراد مبتلا به اوتیسم در نقاط و مختصات نشانه‌های چهره تفاوت‌هایی با افراد غیرمبتلا دارند [۹]. یافتن تفاوت‌های نشانه‌های چهره در افراد اوتیسم و ناتوانی‌های رشدی مختلف، به‌عنوان نشانگر زیستی در تشخیص اوتیسم، کمک می‌کند. دانشمندان دانشگاه میسوری در مطالعه‌ی [۱۰] با استفاده از ویژگی‌های صورت کودکان غیر مبتلا و مبتلا را موردبررسی قرار دادند و دریافتند که کودکان مبتلا به اوتیسم در مقایسه با کودکان غیر مبتلا دارای ویژگی مشترکی در صورت همچون پهن بودن غیرمعمول صورت فوقانی، چشم‌های پهن و ناحیه میانی کوتاه‌تر شامل گونه‌ها و بینی هستند.

DSM-5 یک راهنمای تشخیصی و آماری برای اختلال‌های روانی است. تمام روشهای تشخیصی برای اختلال‌های روانی باید الزامات DSM-5 را لحاظ کرده باشند. در روش پیشنهادی، ما نظر پزشک در خصوص ابتلا به این اختلال را ملاک قرار داده‌ایم. در این تحقیق ما یک مجموعه داده از تصاویر کودکان مبتلا و غیرمبتلا در ایران را گردآوری کرده‌ایم. سپس، با استفاده از شبکه‌های

⁴ Autism Diagnosis Instrument—Rating

⁵ Weschler Abbreviated Intelligence Scale

¹ Autism Spectrum Disorder

² Intellectual Quotient

³ Childhood Autism Rating Scale

رشد معمولی (برگرفته از چندین مهدکودک و مدرسه ابتدایی در چین) مربوط به کودکان دو تا ۱۲ ساله و از یک نژاد است. مدل آن‌ها دارای دقت طبقه‌بندی ۹۵٪ و F1-Score برابر ۹۵٪ است. آن‌ها همچنین به این نتیجه رسیدند که برای راه‌حل‌های یادگیری عمیق مبتنی بر تصویر صورت، مجموعه داده‌های مخصوص نژاد باید برای توسعه مدل ساخته شود تا خطاهای طبقه‌بندی به دلیل تفاوت‌های آنترپومتریکی^۶ بین نژادها حذف شود. لذا، اطلاعات نژادی باید به‌عنوان پیش‌نیاز استفاده از یک مدل قابل اجرا در تشخیص یا غربالگری اوتیسم شناخته شود.

بیری و همکاران در [۱۳] یک مدل Mobilenet برای استخراج ویژگی و دسته‌بندی تصاویر برای طبقه‌بندی کودکان به‌عنوان سالم یا بالقوه اوتیسم با دقت ۹۴.۶٪ با استفاده از یادگیری عمیق معرفی کردند. آن‌ها برای تحقیق خود، از مجموعه داده‌ای که در Kaggle[14] قرار دارد و شامل بیش از ۳۰۰۰ تصویر از کودکان اوتیسم و غیر اوتیسم است استفاده کردند. مدل آن‌ها با استفاده از ۳۰۱۴ تصویر آموزش دیده و آزمایش شده است که به‌طور مساوی بین کودکان مبتلا به اوتیسم و کودکان بدون اوتیسم تقسیم شده است. در نهایت به‌دقت بالای ۹۴.۶۴ درصد دست یافتند. به این معنی که مدل در ۹۵٪ مواقع توانسته است کودکان مبتلا به اوتیسم یا عادی را به‌درستی شناسایی کند.

ساعد و همکاران [۱۵] یک مدل یادگیری عمیق مبتنی بر یادگیری انتقالی را برای تشخیص اوتیسم با استفاده از ویژگی‌های صورت در کودکان اوتیسمی و عادی بر روی مجموعه داده عمومی [۱۴] پیشنهاد کردند. مدل‌های یادگیری عمیق این مقاله بر اساس سه مدل از پیش آموزش دیده VGG19، Nasnetmobile و Xception برای تشخیص اوتیسم با استفاده از تصاویر ویژگی‌های صورت است. آن‌ها از معیارهای ارزیابی استاندارد مانند دقت، ویژگی و حساسیت برای ارزیابی نتایج سه مدل یادگیری عمیق استفاده کردند. مدل Xception بالاترین نتیجه دقت ۹۱٪ را داشت. پس از آن VGG19 و Nasnetmobile به ترتیب ۸۰٪ و ۷۸٪ دقت به دست آوردند.

علم و همکاران در سال ۲۰۲۲ [۱۶] یک مطالعه باهدف یافتن بهترین مدل یادگیری انتقالی برای طبقه‌بندی اوتیسم با در نظر گرفتن پنج مدل رایج مبتنی بر CNN برای تنظیم فرآیندها و بهینه‌سازیها انجام دادند. آن‌ها مدل‌های VGG19، Efficientnetb0، Xception، Mobilenetv2 و Resnet50v2 را بر روی مجموعه داده عمومی موجود در [۱۴] آزمایش کردند. مدل اصلاح شده Xception بهترین عملکرد را با دقت ۹۵٪ نشان داد. در تحقیق انجام شده توسط احمد و همکاران [۱۷] از CNN، ویژگی‌های صورت و یادگیری انتقالی برای شناسایی کودکان اوتیسمی استفاده شد. محققان سه مدل انتقالی (Mobilenet، Xception و Inceptionv3) را روی مجموعه داده عمومی [۱۴] اعمال کردند و برای Mobilenet به دقت ۹۵٪ رسیدند.

رحمان و همکاران [۱۸] مطالعه‌ای باهدف ایجاد یک مدل مبتنی بر CNN که بتواند اوتیسم را با استفاده از تصاویر صورت کودکان پیش‌بینی کند، انجام دادند. از مدل Mobilenet به‌عنوان یک مدل پایه برای مقایسه عملکرد دو مدل دیگر یعنی Xception و Efficientnets استفاده کردند. در این مطالعه به کاربرد ویژگی‌های صورت به‌عنوان نشانگر زیستی برای تشخیص دقیق کودکان اوتیسم از کودکان غیر اوتیسم پرداخته و از مجموعه داده عمومی [۱۴] استفاده کردند. آن‌ها پنج مدل طبقه‌بندی کننده اوتیسم مبتنی بر CNN ساختند و از یک طبقه‌بندی کننده DNN برای پیش‌بینی استفاده کردند. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که مدل Xception عملکرد بهتری نسبت به سایر مدل‌ها دارد و به AUC ۹۶.۶۳٪ حساسیت ۸۸.۴۶٪ و NPV ۸۸٪ دست یافتند. آن‌ها نرخ تشخیص

عصبی کانولوشن^۶ (CNN) مبتنی بر یادگیری انتقالی، داده‌ها را با یکی از معماری‌های طراحی شده دوباره آموزش دادیم. نتایج شبیه‌سازی حاکی از دقت ۹۷٪ مدل در تشخیص کودکان مبتلا به اوتیسم است. می‌توان از این مدل برای تشخیص زودهنگام اوتیسم و کاهش هزینه‌های مربوطه استفاده نمود. در ادامه‌ی این کار، قصد داریم تا با راه‌اندازی یک وب‌سایت به عموم مردم اجازه دهیم تا با آپلود تصاویر کودک خود از مدل استفاده نمایند. در ادامه‌ی مقاله، ابتدا کارهای مرتبط معرفی خواهند شد. بخش سوم به چالش‌ها اختصاص دارد. در بخش چهارم ادبیات مورد نیاز توضیح داده می‌شود. روش پیشنهادی در بخش پنجم توضیح داده می‌شود. بخش ششم به نتایج شبیه‌سازی و بخش آخر نیز به نتیجه‌گیری اختصاص دارد.

در نهایت، این مطالعه پتانسیل استفاده از شبکه‌های عصبی عمیق و یادگیری انتقالی برای تشخیص زودهنگام اوتیسم در کودکان ایرانی را نشان می‌دهد، که می‌تواند به مداخلات مؤثرتر و نتایج بهتر برای کودکان مبتلا و تحقیقاتی گسترده‌تر در این زمینه منجر شود.

۲- پیشینه تحقیق

در زمینه تشخیص اوتیسم با استفاده از هوش مصنوعی تحقیقات متعددی انجام و از روش‌های مختلفی استفاده شده است که در اینجا چند مورد از روش‌هایی که مبتنی بر شبکه‌های عصبی و یادگیری عمیق هستند را مورد بررسی قرار می‌دهیم. علاوه بر این موارد، از هوش مصنوعی در روش‌های تصویربرداری پرتو مغناطیسی و روش‌های مبتنی بر تحلیل رفتار اشخاص نیز برای تشخیص اوتیسم استفاده می‌گردد.

پروینا و ماتا [۱۱] روشی برای تشخیص اوتیسم از روی تصاویر صورت با استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی باهدف ایجاد یک متدولوژی تشخیص برای اوتیسم ارائه کردند. برای تجزیه و تحلیل نشانه‌های چهره افراد اوتیسمی، مراحل مختلفی مانند تشخیص چهره از تصاویر، تشخیص نشانه چهره، تبدیل نشانه‌ها به‌عنوان ویژگی و استخراج ویژگی را انجام دادند. آن‌ها برای کودکان بین ۱ تا ۱۰ سال، مجموعه داده‌ای خود را از ۵۰ تصویر از کودکان اوتیسم (جمع‌آوری شده از یک گروه Facebook به نام Autism Parenting Hub) و ۵۰ تصویر از کودکان معمولی در حال رشد (جمع‌آوری شده از منابع آنلاین) جمع‌آوری کرده بودند. الگوریتم‌های تشخیص نشانه‌های چهره مانند CNN، ماشین محدود بولتزمن (RBM) و رمزگذارهای خودکار RBM برای شناسایی نقاط کلیدی در چهره و مقایسه یا طبقه‌بندی چهره‌ها استفاده شدند. بدین ترتیب ۶۸ علامت مشخصه برای پیش‌بینی چهره به دست آوردند. برای استخراج و انتخاب ویژگی‌های موردنیاز و مهم و مرتبط با اوتیسم برای طبقه‌بندی و تشخیص اوتیسم از دو روش استفاده کردند. در روش اول ۸ ویژگی را با محاسبه میانگین ارزش نقطه عطف نقاط یک منطقه خاص و در روش دیگر ۱۵ ویژگی را با یافتن فاصله اقلیدسی بین نقاط شاخص انتخاب کردند. در نهایت با استفاده از نشانه‌های چهره افراد مورد آزمایش و آموزش یک مدل مناسب توانستند اوتیسم را با دقت ۸۰ درصد تشخیص دهند.

لو و پرکوفسکی [۱۲] یک راه‌حل غربالگری اوتیسم با استفاده از تصاویر چهره از روش یادگیری عمیق مبتنی بر VGG16 (به‌عنوان یک مدل از پیش آموزش دیده برای یادگیری انتقالی) ارائه کردند. مجموعه داده مورد استفاده، شامل حدود ۶۰۰ تصویر از صورت کودکان دارای اوتیسم با تشخیص بالینی برگرفته از مرکز توان‌بخشی اوتیسم الیم (که در کودکان مبتلا به اوتیسم تخصص دارد و مقر آن در شاندونگ، چین است) و ۵۶۱ تصویر از کودکان با

⁶ Convolutional Neural Networks

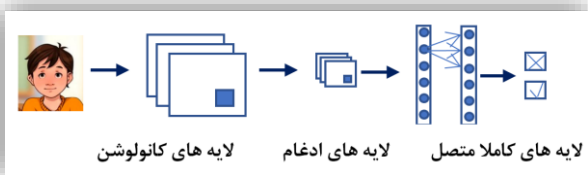
^۷ آنترپومتری یا انسان‌سنجی به اندازه‌گیری بخش‌های مختلف بدن انسان برای شناسایی تفاوت‌ها و دسته‌بندی‌های فیزیکی افراد گفته می‌شود

متمایزی مانند چشم‌های پهن تر و وسط صورت صاف تر دارند [۱۰]. با این حال، این مطالعات بر اندازه‌گیری‌های دستی و ارزیابی‌های ذهنی تکیه داشتند که می‌تواند زمان‌بر و مستعد خطا باشد. فرآیند تشخیص تصویر شامل شناسایی و طبقه‌بندی اشیاء یا الگوهای درون یک تصویر است. در سال‌های اخیر، پیشرفت‌ها در یادگیری ماشین و بینایی کامپیوتر، امکان خودکار سازی فرآیند تجزیه و تحلیل ویژگی‌های صورت را فراهم کرده است. CNN نوعی الگوریتم یادگیری عمیق هستند که با دستیابی به عملکرد پیشرفته در کارهای مختلف می‌توانند الگوهای موجود در داده‌ها از جمله تصاویر را تشخیص دهند. توانایی آن‌ها در یادگیری خودکار ویژگی‌ها از داده‌های خام، آن‌ها را برای کارهای بصری پیچیده که در آن فنون بینایی تصویر سنتی کم می‌آورند، مناسب می‌سازد.

تشخیص بیماری از روی تصاویر یک کار چالش برانگیز است. در سال‌های اخیر، یادگیری عمیق و به ویژه CNN به عنوان یک ابزار قدرتمند برای تجزیه و تحلیل تصاویر ظاهر شده است. CNN ها نوعی از شبکه‌های عصبی هستند که برای کارهای پردازش تصویر مناسب هستند، زیرا می‌توانند یاد بگیرند که ویژگی‌هایی مناسب را از تصاویر استخراج کنند. CNN ها با وجود مزایای فراوانی که دارند، محدودیت‌هایی نیز دارند. یکی از این محدودیت‌ها هزینه محاسباتی بالا است که می‌تواند زمان آموزش و استنباط را برای مجموعه داده‌های بزرگ یا مدل‌های پیچیده بسیار طولانی کند. دوم، CNN ها به داده‌های برجسته دار زیادی نیاز دارند. این محدودیت برای تشخیص بیماری‌هایی مثل اوتیسم که تعداد داده‌های آن‌ها کم است یک چالش جدی است.

۴- شبکه‌های عصبی کانولوشنال یا CNN

CNN ها [۲۶] نوعی شبکه عصبی مصنوعی هستند که نشان داده‌اند در حل وظایف پیچیده مانند طبقه‌بندی تصویر، از جمله طبقه‌بندی تصاویر دودویی، مؤثر هستند. CNN به طور خاص برای یادگیری و استخراج خودکار ویژگی‌های مرتبط از تصاویر طراحی شده و برای کارهایی مانند تمایز بین کلاس‌های مختلف مناسب است. معماری یک CNN از چندین لایه، از جمله لایه‌های کانولوشن، لایه‌های ادغام^۸ و لایه‌های کاملاً متصل تشکیل شده است. شکل ۱ ساختار یک شبکه عصبی کانولوشن را نمایش می‌دهد. این لایه‌ها به صورت متوالی کار می‌کنند تا به تدریج نمایش‌های سلسله مراتبی تصاویر ورودی را یاد بگیرند و ویژگی‌های آن‌ها را استخراج کنند.



شکل ۱ ساختار یک شبکه عصبی کانولوشن

لایه‌های کانولوشن بلوک‌های اصلی سازنده CNN ها هستند. آن‌ها از فیلترها یا هسته‌های متعددی تشکیل شده‌اند. کار هر فیلتر تشخیص الگوها یا ویژگی‌های خاص مانند لبه‌ها، گوشه‌ها یا بافت‌ها در تصویر ورودی است. با اعمال چندین فیلتر در هر لایه کانولوشن، CNN ها می‌توانند طیف وسیعی از ویژگی‌ها را در مقیاس‌های فضایی مختلف بیاموزند.

لایه‌های ادغام معمولاً بعد از لایه‌های کانولوشن درج می‌شوند تا ابعاد فضایی نقشه‌های ویژگی را کاهش دهند و در عین حال مهم‌ترین اطلاعات خود

هر مدل را با سطح اطمینان ۹۵٪ مقایسه کردند که Efficientb0 بالاترین امتیازها را دریافت کرد (۵۹.۳۳٪ برای کلاس اوتیسم و ۵۸.۶۷٪ برای کلاس غیر اوتیسم).

۳- چالش‌ها

تشخیص اوتیسم به روش‌های کنونی دارای چالش‌های متعددی است که در ادامه به آن‌ها اشاره می‌گردد:

روش‌های تصویربرداری پرتو مغناطیسی مغز، نوار مغز و آزمایش‌های ژنتیک به دلیل تنوع و عدم تعریف روشن از ویژگی‌های آن برای تشخیص اوتیسم دارای محدودیت‌های مثل در دسترس نبودن، هزینه‌ی بالا، زمان طولانی و مشکل در تفسیر هستند. کودکان خردسال یا آن‌هایی که اضطراب قابل توجهی دارند نمی‌توانند در حین انجام روش تصویربرداری پرتو مغناطیسی ثابت بمانند. این موضوع منجر به کاهش کیفیت تصویر و زمان اسکن طولانی‌تر می‌شود. حتی ممکن است برای گرفتن تصاویر به داروی آرام‌بخش و یا بیهوشی نیاز داشته باشند، که خود دارای عوارض جانبی و خطرات بالقوه‌ای برای فرد مبتلا است.

از طرف دیگر، تشخیص اوتیسم در کودکان از طریق پرسش‌نامه یا چالش‌های متعددی از جمله اعتبار محدود، عدم شفافیت گزینه‌ها، پایایی و روایی پایین پرسش‌نامه، تنوع پرسش‌نامه‌ها و سوگیری فرهنگی و زبانی بالقوه همراه است.

در حقیقت درمان افراد مبتلا به اوتیسم جزو پرهزینه‌ترین و سخت‌ترین درمان‌ها هستند [۱۹، ۲۰]. در یک مطالعه [۲۱] در مورد مداخلات رفتاری فشرده اولیه در هلند نشان داد که اگر مداخله زودهنگام قبل از ۳۰ ماهگی شروع شود، می‌تواند تا بیش از یک میلیون یورو برای هر فرد صرفه‌جویی در هزینه‌های درمان در طول عمر بیمار داشته باشد.

تأثیر این بیماری بر بنیاد خانواده‌ها و کیفیت زندگی آن‌ها بسیار زیاد و گاه ویرانگر است [۲۲، ۲۳].

پیش‌آگهی برای افراد مبتلا به اوتیسم از لحاظ تاریخی ضعیف بوده است [۲۴، ۲۵]. در اغلب موارد، افراد به‌اشتباه این بیماری را جزء مشکلات فرهنگی و رفتاری طبقه‌بندی می‌کنند.

در روش پیشنهادی مشکلاتی مثل در دسترس نبودن، هزینه‌ی بالا، زمان طولانی تشخیص، پایایی و روایی پایین پرسش‌نامه، سوگیری فرهنگی و زبانی و تفسیر نامناسب وجود ندارند. به علاوه، تشخیص احتمال ابتلا به آسانی و به سرعت انجام می‌گردد. یافته‌ها نشان می‌دهند اگر تشخیص اوتیسم در سنین پایین صورت گیرد، می‌تواند سازوکار درمان را بهبود بخشد و منجر به کاهش قابل توجه هزینه‌ها به خصوص در جوامع توسعه‌نیافته گردد [۲۱].

۳-۱- راهکار

برای تشخیص زودهنگام کودکان مبتلا به اوتیسم، وجود یک راه‌حل غربالگری عینی، ارزان با دسترسی آسان و قابل درک در هر خانواده ضروری است. تشخیص اوتیسم به زمان و هزینه قابل توجهی نیاز دارد. تشخیص زودهنگام می‌تواند از وخامت بیشتر وضعیت بیمار جلوگیری و به کاهش هزینه‌های طولانی‌مدت ناشی از تأخیر در تشخیص کمک کند. بنابراین به یک ابزار آزمون غربالگری کارآمد، دقیق و آسان نیاز داریم که بتواند ویژگی‌های اوتیسم در یک فرد را پیش‌بینی و انجام ارزیابی جامع اوتیسم را پیشنهاد کند. ایده استفاده از ویژگی‌های صورت برای تشخیص اوتیسم جدید نیست. مطالعات قبلی نشان داده‌اند که افراد مبتلا به اوتیسم ویژگی‌های صورت

را در هر کانال ورودی اعمال می‌کند، درحالی‌که کانولوشن نقطه‌ای یک کانولوشن 1×1 را در همه کانال‌ها انجام می‌دهد. با جدا کردن فیلتر فضایی از اختلاط کانال، Mobilenet به تعادل خوبی بین کارایی و دقت دست می‌یابد. معماری‌های Mobilenet توسط دو فرآیند تعریف می‌شوند: ضرب کننده عرض (A) و ضرب کننده وضوح (P). ضرب عرض تعداد کانال‌ها را در هر لایه کنترل می‌کند و آن را از مقدار پایه معماری اصلی کاهش می‌دهد. این پارامتر امکان معامله بین اندازه و دقت مدل را فراهم می‌کند. ضرب رزولوشن وضوح تصویر ورودی را کاهش می‌دهد و نیازهای محاسباتی را بیشتر کاهش می‌دهد.

معماری اصلی Mobilenet در مقایسه با سایر مدل‌های محبوب مانند VGG یا Resnet، عملکردی پیشرفته را در وظایف طبقه‌بندی Imagenet با پارامترهای کمتر و هزینه محاسباتی کمتر به دست آورد. همچنین عملکرد عالی در سایر وظایف بینایی مانند تشخیص اشیا و تقسیم‌بندی معنایی را نشان داد. Mobilenet از زمان معرفی خود به دلیل کارایی آن در دستگاه‌های تلفن همراه به طور گسترده در برنامه‌های مختلف مورد استفاده قرار گرفته است. Mobilenet به یک انتخاب استاندارد برای کارهای بینایی کامپیوتری در زمان واقعی^۹ در تلفن‌های هوشمند تبدیل شده است و برنامه‌هایی مانند تشخیص چهره، واقعیت افزوده و طبقه‌بندی تصویر روی دستگاه را بدون تکیه بر پردازش مبتنی بر ابر فعال می‌کند.

Inceptionv3 [۲۹] یک معماری شبکه عصبی عمیق است که محبوبیت قابل توجهی در زمینه بینایی کامپیوتر به دست آورده است. این معماری توسط محققان گوگل توسعه یافته است و به دلیل عملکرد استثنایی خود در وظایف طبقه‌بندی تصاویر شناخته شده است. Inceptionv3 بر اساس موفقیت نسخه قبلی خود، Inceptionv1، با معرفی چندین بهبود و بهینه‌سازی استوار است. معماری Inceptionv3 بر اساس مفهوم "Inception Modules" است. این ماژول‌ها برای ثبت اطلاعات در مقیاس‌ها و وضوح‌های مختلف در یک تصویر طراحی شده‌اند. آن‌ها از چندین لایه کانولوشن موازی با اندازه‌های مختلف فیلتر تشکیل شده‌اند که سپس به هم متصل می‌شوند تا یک نقشه ویژگی غنی را تشکیل دهند. این موضوع به شبکه اجازه می‌دهد تا به طور مؤثر اطلاعات محلی و جهانی را از یک تصویر ورودی بگیرد.

یکی از نوآوری‌های کلیدی در Inceptionv3 استفاده از لایه‌های "Bottleneck" است. این لایه‌های گلوگاه، ابعاد نقشه‌های ویژگی را قبل از اعمال پیچیدگی‌های گران‌قیمت کاهش می‌دهند و در نتیجه پیچیدگی محاسباتی را بدون از دست رفتن دقت کاهش می‌دهند. این تکنیک به آموزش شبکه‌های عمیق‌تر با منابع محاسباتی محدود کمک می‌کند. یکی دیگر از جنبه‌های مهم Inceptionv3، ادغام طبقه‌بندی کننده‌های کمکی است. این طبقه‌بندی در مراحل میانی شبکه قرار می‌گیرند و به مبارزه با مشکل ناپدید شدن گرادیان در طول آموزش کمک می‌کنند. آن‌ها با ارائه سیگنال‌های نظارتی اضافی، شبکه را تشویق می‌کنند تا ویژگی‌های متمایز بیشتری را بیاموزد.

Inceptionv3 همچنین تکنیکی به نام "Factorized 7x7 Convolutions" را معرفی می‌کند. به جای استفاده از یک لایه کانولوشن 7×7 ، آن را به دو کانولوشن 1×7 و 7×1 متوالی تجزیه می‌کند. این فاکتورسازی هزینه محاسباتی را کاهش می‌دهد و درعین حال قدرت بینایی را حفظ می‌کند. این معماری همچنین شامل بهینه‌سازی‌های دیگری مانند نرمال‌سازی دسته‌ای است که به همگرایی سریع‌تر و تکنیک‌های منظم‌سازی تهاجمی مانند حذف تصادفی (Dropout) برای جلوگیری از بیش برآزش در طول آموزش کمک می‌کند.

با توجه به نتایج موجود در مقاله تحقیقاتی در Inceptionv3 با عنوان "بازاندیشی در معماری اولیه برای بینایی کامپیوتر" [۲۹]، این معماری به

را حفظ کنند. حداکثر ادغام رایج‌ترین نوع عملیات ادغام است که حداکثر مقدار را در یک منطقه کوچک (مثلاً 3×3) انتخاب می‌کند و بقیه را دور می‌ریزد. این عملیات نمونه‌برداری، به کاهش پیچیدگی محاسباتی کمک می‌کند و ویژگی‌های آموخته شده را تا تغییرات فضایی کوچک قوی‌تر می‌کند. لایه‌های کاملاً متصل معمولاً در انتهای شبکه اضافه می‌شوند تا بر اساس ویژگی‌های استخراج شده، استدلال و تصمیم‌گیری در سطح بالا انجام شود. این لایه‌ها هر نورون را از یک لایه به هر نورون در لایه بعدی متصل می‌کنند و امکان یادگیری روابط غیرخطی پیچیده بین ویژگی‌ها را فراهم می‌کنند.

آموزش CNN شامل دو مرحله اصلی است: انتشار به جلو و پس انتشار. در انتشار روبه‌جلو، یک تصویر ورودی به صورت متوالی از هر لایه عبور داده می‌شود و هر لایه با استفاده از وزن‌ها و سوگیری‌های آموخته شده، ورودی خود را به یک نمایش سطح بالاتر تبدیل می‌کند. خروجی نهایی از آخرین لایه کاملاً متصل به دست می‌آید که نشان‌دهنده احتمالات کلاس پیش‌بینی شده است. در طول عملیات مرحله‌ی پس انتشار، از تفاوت بین برجسب‌های کلاس پیش‌بینی شده و واقعی برای محاسبه تلفات یا خطا استفاده می‌شود. سپس این خطا به عقب در شبکه منتشر می‌شود و وزن‌ها و سوگیری‌های هر لایه را با استفاده از الگوریتم‌های بهینه‌سازی مانند نزول گرادیان تنظیم می‌کند. این روند تکراری تا زمانی ادامه می‌یابد که شبکه به مجموعه‌ای از وزن‌های بهینه همگرا شود که تلفات کلی را به حداقل می‌رساند.

شبکه‌های CNN ابزار قدرتمندی برای وظایف طبقه‌بندی تصاویر دودویی هستند. آن‌ها می‌توانند به طور خودکار ویژگی‌های مرتبط را از تصاویر از طریق چندین لایه فیلتر کانولوشنال و عملیات ادغام بیاموزند و استخراج کنند. با آموزش بر روی مجموعه داده‌های بزرگ با انتشار پس‌زمینه، این شبکه‌ها می‌توانند به نتیجه‌ی دلخواه برسند. یکی از کارهای اساسی در CNN‌های عمیق، معماری Alexnet است که توسط کریژفسکی و همکاران [۲۷] پیشنهاد شده است. در سال ۲۰۱۲، Alexnet با برنده شدن در چالش تشخیص تصویری در مقیاس بزرگ (ILSVRC) با یک حاشیه بزرگ به پیشرفت قابل توجهی در طبقه‌بندی تصاویر دست یافت. از آن زمان، پیشرفت‌های زیادی در CNN‌های عمیق برای طبقه‌بندی تصاویر دودویی انجام شده است. محققان معماری‌های مختلفی مانند Vggnet، Googlenet (Inception)، Resnet و Densenet را پیشنهاد کرده‌اند که عملکرد پیشرفته‌ای را در مجموعه داده‌های معیار مانند Imagenet به دست آورده‌اند. در ادامه برخی از معماری‌های رایج CNN معرفی می‌شوند.

Mobilenet [۲۸] یک معماری شبکه عصبی عمیق است که به طور خاص برای برنامه‌های موبایل و بینایی کامپیوتری طراحی شده است. این معماری توسط محققان گوگل در سال ۲۰۱۷ معرفی شد و هدف آن ارائه مدل‌های کارآمد و سبک‌وزن است که می‌توانند بر روی دستگاه‌های دارای محدودیت منابع مانند گوشی‌های هوشمند اجرا شوند. این معماری به دلیل توانایی آن در دستیابی به دقت بالا با حفظ نیازهای محاسباتی پایین، محبوبیت قابل توجهی به دست آورده است.

ایده کلیدی پشت Mobilenet استفاده از کانولوشن‌های قابل تفکیک عمیق است که تعداد پارامترها و محاسبات را در مقایسه با لایه‌های کانولوشن سنتی به میزان قابل توجهی کاهش می‌دهد. با توجه به مقاله [۲۸]، این تکنیک هم ردپای حافظه و هم هزینه محاسباتی شبکه را کاهش می‌دهد و درعین حال دقت را حفظ می‌کند.

کانولوشن‌های قابل تفکیک عمیق از دو عملیات مجزا تشکیل شده‌اند: یک کانولوشن عمقی و به دنبال آن یک کانولوشن نقطه‌ای. کانولوشن عمقی فیلتر

⁹ Real time

آن را برای کارهای مختلف آسان می‌کند. این انعطاف‌پذیری در تحقیقات یادگیری عمیق بسیار مهم است، جایی که معماری‌ها اغلب نیاز به سفارشی‌سازی یا گسترش برای مطابقت با نیازهای خاص دارند. پس Xception یک معماری برای شبکه‌های عصبی عمیق است که پیچیدگی‌های قابل تفکیک عمیق را به‌عنوان راهی برای بهبود کارایی و عملکرد معرفی می‌کند. ساختار مدولار، قابلیت‌های یادگیری بازنمایی بهبود یافته و عملکرد پیشرفته آن را به ابزاری ارزشمند در زمینه بینایی کامپیوتر تبدیل کرده است.

۴-۱- بهبود کارایی آموزش در CNN

بهبود کارایی آموزش در CNN به معنای افزایش دقت، سرعت و پایداری مدل در فرآیند یادگیری است. این بهبود می‌تواند از طریق روش‌ها و تکنیک‌های مختلفی حاصل شود که به مدل کمک می‌کنند تا بهتر و سریع‌تر به نتایج مطلوب برسد. برخی از این تکنیک‌ها عبارتند از:

- **تقویت داده:** با ایجاد تغییرات کوچک در تصاویر موجود، می‌توان مجموعه داده‌های آموزشی را بزرگتر و متنوع‌تر کرد که به جلوگیری از بیش‌برازش کمک می‌کند [۳۱].
 - **نرمال‌سازی دسته‌ای:** این تکنیک باعث می‌شود که شبکه عصبی سریع‌تر و پایدارتر آموزش ببیند. نرمال‌سازی دسته‌ای با تنظیم میانگین و واریانس خروجی لایه‌ها، به بهبود همگرایی کمک می‌کند [۳۱].
 - **استفاده از لایه‌های Dropout:** این لایه‌ها به صورت تصادفی برخی از نورون‌ها را در طول آموزش غیرفعال می‌کنند تا از وابستگی بیش از حد شبکه به نورون‌های خاص جلوگیری شود و به این ترتیب، شبکه به طور کلی قوی‌تر و مقاوم‌تر می‌شود [۳۱].
 - **تنظیمات بهینه‌سازی:** استفاده از الگوریتم‌های بهینه‌سازی پیشرفته مانند Adam، Rmsprop و تنظیم مناسب نرخ یادگیری می‌تواند به بهبود کارایی آموزش کمک کند [۳۲].
 - **توقف زودهنگام:** یک تکنیک منظم‌سازی^{۱۰} است که برای جلوگیری از بیش‌برازش در CNN استفاده می‌شود و به این صورت عمل می‌کند که در طول فرآیند آموزش، عملکرد مدل روی مجموعه داده‌های اعتبارسنجی را نظارت می‌کند و زمانی که عملکرد مدل روی این مجموعه داده‌ها بهبود نمی‌یابد یا شروع به بدتر شدن می‌کند، آموزش را متوقف می‌کند [۳۳].
 - **یادگیری انتقالی^{۱۱}:** استفاده از مدل‌های پیش‌آموزش دیده^{۱۲} و تنظیم آن‌ها برای وظایف خاص می‌تواند زمان آموزش را کاهش داده و دقت مدل را افزایش دهد [۳۴].
- در ادامه در مورد یادگیری انتقالی و توقف زودهنگام بیشتر بحث خواهد خواهد شد.

۴-۲- یادگیری انتقالی

یادگیری انتقالی [۳۵] تکنیکی در یادگیری عمیق است که به مدل‌ها اجازه می‌دهد از دانش کسب‌شده در یک کار برای بهبود عملکرد در یک کار دیگر استفاده کنند. در هنگام استفاده از CNN برای طبقه‌بندی تصاویر دودویی، این روش می‌تواند زمانی که داده‌های برجسب‌گذاری شده کمی در دسترس است، بسیار مؤثر باشد [۳۴]. به‌جای آموزش مدل از ابتدا، از یک مدل از پیش آموزش‌دیده (که قبلاً روی مجموعه داده بزرگی آموزش دیده است) به‌عنوان

عملکرد پیشرفته‌ای در مجموعه داده‌های معیار مختلف مانند Imagenet دست یافت و از نظر دقت و کارایی محاسباتی از مدل‌های قبلی پیشی گرفت. این مقاله همچنین بینش‌های دقیقی در مورد انتخاب‌های طراحی و نتایج تجربی ارائه می‌دهد که از اثربخشی Inceptionv3 پشتیبانی می‌کنند. Inceptionv3 به‌طور گسترده در کاربردهای مختلف از جمله طبقه‌بندی تصویر، تشخیص اشیا و تقسیم‌بندی تصویر مورد استفاده قرار گرفته است. تطبیق‌پذیری و عملکرد بالا آن را به انتخابی محبوب برای محققان و متخصصان در زمینه بینایی کامپیوتر تبدیل کرده است. به‌طور کلی، Inceptionv3 یک معماری شبکه عصبی عمیق است که از ماژول‌های اولیه، لایه‌های Bottleneck، طبقه‌بندی کننده‌ی کمکی و سایر بهینه‌سازی‌ها برای دستیابی به عملکرد پیشرفته در وظایف طبقه‌بندی تصویر استفاده می‌کند. انتخاب‌های طراحی آن توسط تحقیقات و آزمایش‌های دقیق پشتیبانی می‌شود و آن را به یک انتخاب قابل اعتماد برای برنامه‌های بینایی کامپیوتر تبدیل می‌کند.

Xception (مخفف «Extreme Inception») یک معماری برای شبکه‌های عصبی عمیق است که توسط فرانسوا شولت، خالق کتابخانه یادگیری عمیق Keras پیشنهاد شده است. نتایج این کار در یک مقاله تحقیقاتی با عنوان "Xception: یادگیری عمیق با پیچیدگی‌های قابل جداسازی عمیق" در سال ۲۰۱۷ منتشر شده است [۳۰]. هدف معماری Xception بهبود کارایی و عملکرد CNN با معرفی یک رویکرد جدید به نام پیش‌های قابل جداسازی عمیق است [۳۰]. در CNN های سنتی، هر لایه کانولوشن هم پیچیدگی فضایی و هم پیچیدگی کانال را انجام می‌دهد. این بدان معنی است که فیلترهای مورد استفاده در عملیات کانولوشن برای همه کانال‌های ورودی اعمال می‌شود. با این حال، Xception این رویکرد سنتی را با پیچیدگی‌های قابل تفکیک عمیق جایگزین می‌کند، که این دو عملیات را به لایه‌های جداگانه تقسیم می‌کند.

اولین گام در پیچیدگی‌های قابل تفکیک عمیق، پیچیدگی عمقی است، که در آن هر کانال ورودی با مجموعه‌ای از فیلترها به‌طور مستقل در هم پیچیده می‌شود. این عملیات با استفاده از پارامترهای کمتر در مقایسه با پیچیدگی‌های سنتی، اطلاعات مکانی را ضبط می‌کند و در عین حال پیچیدگی محاسباتی را کاهش می‌دهد. مرحله دوم پیچیدگی نقطه‌ای است که در آن پیچیدگی‌های ۱×۱ برای ترکیب کانال‌های خروجی از مرحله قبل در نقشه ویژگی نهایی اعمال می‌شود. Xception با جدا کردن کانولوشن‌های فضایی و کانالی، تعداد پارامترها و محاسبات مورد نیاز را کاهش می‌دهد که منجر به بهبود کارایی و زمان‌های آموزشی سریع‌تر می‌شود. این طراحی معماری همچنین امکان یادگیری بازنمایی بهتر را فراهم می‌کند، زیرا استخراج ویژگی‌های دقیق‌تر را امکان‌پذیر می‌سازد.

در مقاله [۳۰] نشان داده شده است که معماری Xception به عملکرد پیشرفته‌ای در کارهای مختلف بینایی کامپیوتری مانند طبقه‌بندی تصویر و تشخیص اشیا دست می‌یابد. در واقع، در طول ارزیابی خود از مدل‌های پیشرفته قبلی در مجموعه داده Imagenet عملکرد بهتری داشت. نویسندگان همچنین نشان داده‌اند که Xception می‌تواند به‌عنوان یک استخراج کننده ویژگی برای انتقال وظایف یادگیری استفاده شود و تطبیق‌پذیری آن فراتر از طبقه‌بندی تصاویر را نشان می‌دهد.

یکی از مزایای Xception توانایی آن در یادگیری ویژگی‌های انتزاعی بیشتر به دلیل معماری عمیق‌تر آن در مقایسه با مدل‌های قبلی مانند Inception است. پیچیدگی‌های قابل تفکیک عمیق امکان استفاده کارآمدتر از ظرفیت مدل را فراهم می‌کند و شبکه را قادر می‌سازد تا الگوها و روابط پیچیده را در داده‌ها ثبت کند. علاوه بر این، Xception یک ساختار ماژولار دارد که سازگاری و اصلاح

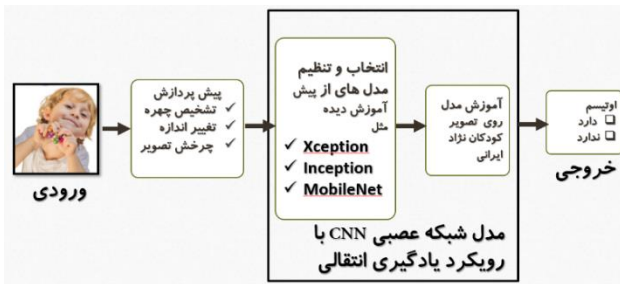
¹² Pre-trained Models

¹⁰ Regularization

¹¹ Transfer Learning

۵- روش پیشنهادی

در این مطالعه، یادگیری عمیق مبتنی بر یادگیری انتقالی را با استفاده از سه مدل (Xception، Mobilenet و Inception) برای تشخیص اوتیسم از طریق از ویژگی‌های صورت کودکان اوتیسم و عادی، پیشنهاد می‌کنیم. این مدل‌ها از ویژگی‌های قابل توجهی که از تصاویر چهره استخراج می‌کنند برای تعیین اینکه آیا کودک مبتلا به اوتیسم است یا نیست بهره می‌برند. یکی از مزایای استفاده از الگوریتم‌های یادگیری عمیق، توانایی استخراج جزئیات بسیار کوچک از یک تصویر است که شخص نمی‌تواند با چشم غیرمسلح متوجه آن شود. **شکل ۲ چارچوب کلی مطالعه** شامل جمع‌آوری داده‌ها، پیش‌پردازش و بارگذاری داده‌ها، آماده‌سازی و آموزش مدل را نشان می‌دهد.



شکل ۲ چارچوب کلی مطالعه

برای استفاده از CNN و اعمال یادگیری انتقال در طبقه‌بندی تصاویر دودویی، این مراحل را دنبال می‌کنیم:

۱. **انتخاب یک مدل CNN از پیش آموزش دیده:** چندین معماری محبوب CNN وجود دارد که روی مجموعه داده‌های بزرگ از قبل آموزش داده شده‌اند، مانند VGG16، Resnet50 و Inceptionv3. انتخاب مدل از پیش آموزش دیده به عواملی مانند منابع محاسباتی و الزامات خاص کار بستگی دارد.
۲. **حذف آخرین لایه کاملاً متصل:** آخرین لایه(های) مدل از پیش آموزش دیده، مسئول طبقه‌بندی تصاویر به دسته‌های خاص از مجموعه داده اصلی آن است. از آنجایی که ممکن است کار طبقه‌بندی تصاویر دودویی دارای کلاس‌ها یا برچسب‌های متفاوتی نسبت به موارد موجود در مجموعه داده اصلی باشد، این لایه(ها) را حذف کرده و با لایه‌های جدیدی جایگزین می‌کنیم که متناسب با وظیفه ما باشد.
۳. **منجمد کردن لایه‌های قبلی:** لایه‌های اولیه مدل از پیش آموزش دیده ویژگی‌های سطح پایینی را که عموماً برای بسیاری از کارها قابل اجرا هستند، نشان می‌دهند. برای جلوگیری از اصلاح این ویژگی‌های آموخته‌شده در طول تمرین، وزن این لایه‌ها را منجمد می‌کنیم. این به ما اجازه می‌دهد تا روی تنظیم دقیق لایه‌های بعدی که مخصوص کار ما هستند تمرکز کنیم.
۴. **افزودن لایه‌های کاملاً متصل جدید:** به بالای مدل از پیش آموزش دیده، لایه‌های کاملاً متصل جدیدی اضافه می‌کنیم که به‌طور خاص برای طبقه‌بندی تصاویر دودویی آموزش داده می‌شوند. این لایه‌های جدید یاد می‌گیرند که ویژگی‌های استخراج‌شده از مدل از پیش آموزش دیده را به کلاس‌های خروجی مورد نظر نگاشت کنند.
۵. **آموزش و تنظیم دقیق:** ما کل شبکه را آموزش می‌دهیم، هم لایه‌های جدید اضافه‌شده و هم لایه‌های بعدی مدل از پیش آموزش دیده که منجمد نشده‌اند. وزن‌های این لایه‌ها با استفاده از مجموعه داده برچسب‌گذاری‌شده مخصوص کار طبقه‌بندی تصاویر دودویی به‌روزرسانی می‌شوند. با دنبال کردن این مراحل، یادگیری انتقالی به ما امکان می‌دهد هم از دانش عمومی که توسط مدل از پیش آموزش دیده گرفته شده است و هم از دانش خاصی که از مجموعه داده‌های برچسب‌گذاری‌شده‌مان آموخته‌ایم، بهره

نقطه شروع استفاده می‌شود. این مدل از پیش آموزش دیده ویژگی‌های مفید را از تصاویر استخراج کرده و الگوهای بصری کلی مانند لبه‌ها، بافت‌ها و اشکال را درک کرده است.

ایده اصلی این است که ویژگی‌های سطح پایین آموخته‌شده توسط مدل از پیش آموزش دیده برای کارهای جدید نیز قابل استفاده هستند. این ویژگی‌ها به ما اجازه می‌دهند که مدل‌های دقیق‌تری با داده‌های آموزشی کمتر بسازیم. یادگیری انتقالی با استفاده از وزن‌های مدل اول به‌عنوان نقطه شروع و تنظیم دقیق پارامترها با داده‌های کار جدید، می‌تواند در زمان و منابع صرفه‌جویی کند و عملکرد مدل را بهبود بخشد. این رویکرد به‌ویژه وقتی داده‌های کمی برای کار جدید در دسترس است، بسیار مفید است.

۳-۴- توقف زود هنگام

توقف زود هنگام در CNN تکنیکی است که برای بهبود کارایی آموزش استفاده می‌شود. با توقف زود هنگام فرآیند آموزش در صورت رعایت شرایط خاص متوقف می‌شود. این می‌تواند به کاهش منابع محاسباتی و زمان مورد نیاز برای آموزش کمک کند و درعین حال عملکرد خوبی به دست آورد [۳۶]. یکی از کاربردهای توقف زود هنگام در CNN در زمینه انتخاب مدل است. به جای آموزش یک شبکه برای تعداد ثابتی از دوره‌ها و سپس انتخاب بهترین مدل با عملکرد بر اساس دقت اعتبارسنجی، توقف زود هنگام امکان نظارت بر دقت اعتبارسنجی در طول آموزش و توقف فرآیند را به محض شروع به کاهش، می‌دهد. این به جلوگیری از بیش‌برازش کمک می‌کند و تضمین می‌کند که مدل بیش‌ازحد لازم آموزش داده نمی‌شود. این روش به ما اجازه می‌دهد که مدل را در زمانی که دقت آن در مجموعه اعتبارسنجی بهبود نمی‌یابد متوقف کنیم.

به‌طور کلی، توقف زود هنگام در CNN می‌تواند به سرعت بخشیدن به فرآیند آموزش، کاهش هزینه‌های محاسباتی و بهبود کارایی کلی بدون به خطر انداختن عملکرد کمک کند. در روش توقف زود هنگام اصطلاح «مانیتور» به معیاری اطلاق می‌شود که مدل برای ارزیابی عملکرد خود در طول آموزش استفاده می‌کند. زمانی که از تلفات اعتبارسنجی به‌عنوان مانیتور استفاده می‌شود، به این معنی که مدل در حین آموزش، تلفات اعتبارسنجی را ردیابی می‌کند. تلفات اعتبارسنجی معیاری است که نشان می‌دهد مدل در مجموعه‌ای از داده‌های جداگانه که آموزش ندیده‌اند، چقدر خوب عمل می‌کند. با نظارت بر تلفات اعتبارسنجی، مدل می‌تواند از تطبیق بیش از حد داده‌های آموزشی جلوگیری کند و اطمینان حاصل کند که به خوبی به داده‌های جدید و دیده نشده تعمیم می‌یابد.

پارامتر «Patience» در روش توقف زود هنگام به تعداد دوره‌هایی اشاره دارد که مدل قبل از توقف آموزش در صورت عدم بهبود در معیار نظارت شده منتظر می‌ماند. به عبارت دیگر، اگر تلفات اعتبارسنجی برای تعداد معینی از دوره‌ها (مثلاً ۱۰ دوره) کاهش پیدا نکند، فرآیند آموزش قبل از اینکه مدل کل دوره‌ها را آموزش ببیند، متوقف می‌شود. این می‌تواند برای جلوگیری از بیش‌برازش و صرفه‌جویی در زمان با پرهیز از دوره‌های غیرضروری آموزش در زمانی که هیچ پیشرفت دیگری انجام نمی‌شود، مفید باشد. به عنوان مثال، اگر در یک کار از تلفات اعتبارسنجی به‌عنوان مانیتور و تنظیم Patience بر روی مقدار ۱۰ استفاده کنید یعنی به CNN خود دستور می‌دهید که عملکرد خود را بر اساس تلفات اعتبارسنجی زیر نظر داشته باشد و در صورت عدم مشاهده بهبود در تلفات اعتبار برای ۱۰ دوره متوالی، آموزش را متوقف کند. این کمک می‌کند تا اطمینان حاصل شود که مدل ما به خوبی به داده‌های جدید تعمیم می‌یابد و از بیش‌برازش جلوگیری می‌کند و درعین حال در زمان آموزش نیز صرفه‌جویی می‌کند.

کودکان	تعداد داده آموزشی	تعداد داده اعتبارسنجی	تعداد داده آزمون	کل داده‌ها
غیر اوتیسم	۳۶۰	۴۰	۱۰۰	۵۰۰
اوتیسم	۳۶۰	۴۰	۱۰۰	۵۰۰
مجموع	۷۲۰	۸۰	۲۰۰	۱۰۰۰

۵-۳- پیش‌پردازش داده‌ها

هدف از پیش‌پردازش داده‌ها، تمیز کردن، برش دادن تصاویر، حذف هرگونه نویز و افزایش کیفیت تصویر است. این کار به دلیل جمع‌آوری داده‌ها از منابع مختلف و تنوع بالای تصاویر، اهمیت بسیاری داشت. با توجه به اینکه تصاویر از طریق خانواده‌ها و مراکز جمع‌آوری شدند، قبل از آنکه برای آموزش مدل‌های یادگیری عمیق استفاده شوند، باید پیش‌پردازش می‌شدند. مجموعه‌ی تصاویر چهره را از تصویر اصلی با استفاده از نرم‌افزار فتوشاپ برش و آن‌ها را به نسبت (۱:۱) و اندازه 224×224 پیکسل تغییر دادیم. تصاویر بی کیفیت از مجموعه حذف شدند. با توجه به اینکه برای انتخاب داده‌های از روش **K-Fold** استفاده و مقدار **k** را برابر ۵ قرار داده شده است، تصاویر به سه دسته آموزش، اعتبارسنجی و آزمون به ترتیب با نسبت ۸۰ درصد آموزش و اعتبارسنجی و ۲۰ درصد آزمون تقسیم شدند. به طوری که از ۵۰۰ تصویر ۳۶۰ تصویر برای آموزش، ۴۰ تصویر برای اعتبارسنجی و ۱۰۰ تصویر برای آزمون تخصیص داده شدند.

برای مقیاس‌گذاری، از روش نرمال‌سازی استفاده کردیم. به این صورت که مقادیر پیکسل تمام تصاویر از بازه [۰،۲۵۵] به بازه [۰،۱] تغییر مقیاس دادیم. این روش مقیاس‌گذاری، به قابلیت مقایسه و بهبود عملکرد مدل در آموزش و آزمون کمک کرد. در نهایت، پیش‌پردازش داده‌ها در بهبود دقت کار طبقه‌بندی توسط مدل‌های یادگیری عمیق، تأثیر مثبتی داشت.

۵-۴- انتخاب مدل

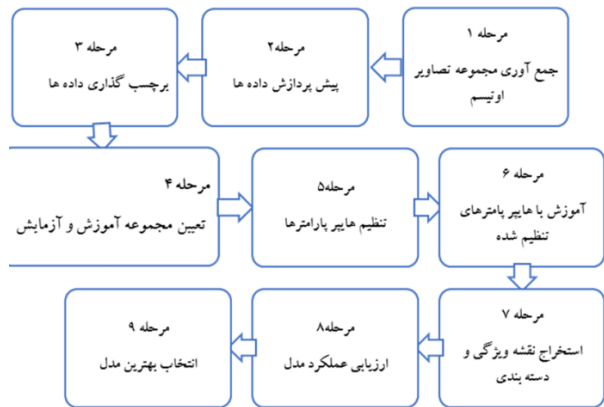
در اینجا از مدل‌های CNN استفاده می‌کنیم، زیرا CNN می‌تواند یک تصویر را دریافت کند، به اشیاء مختلف درون تصویر اهمیت بدهد و سپس اشیاء درون تصویر را از یکدیگر متمایز کند. علاوه بر این، در CNN‌ها پیش‌پردازش در مقایسه با روش‌های دیگر حداقل کار و زمان لازم دارد [۳۷]. برای آموزش از سه مدل Inceptionv3، Xception و Mobilenet با تأکید بر روی مدل Mobilenet با توجه به سبک بودن حجم و موفقیت در آزمایش‌های دیگر، استفاده کردیم. برای Mobilenet، از پایه‌ترین نسخه Mobilenet با آلفای ۱ و ضریب عمق ۱ استفاده کردیم. برای انجام پیش‌بینی‌های دودویی، دولایه کاملاً متصل به انتهای مدل اضافه کرده ایم. اولین لایه یک لایه مترامک با ۵۱۲ نورون است (نرمال‌سازی $L2 = 0.015$ ، فعال‌ساز ReLU) که سپس به لایه پیش‌بینی متصل می‌شود که فقط دو خروجی دارد (فعال‌ساز Softmax). حذف تصادفی ۰.۵ را به لایه اول اعمال کردیم تا از بیش‌برازش جلوگیری کند. خروجی نهایی یک طبقه‌بندی دودویی از «اوتیسم» یا «غیر اوتیسم» است.

برای اجرای برنامه از زبان برنامه‌نویسی پایتون و پلتفرم کولاب استفاده شد. کولاب^{۱۴} یک پلتفرم گوگل است که کاربر را قادر می‌سازد تا کد را بر روی یک GPU اختصاصی اجرا کند و این فرصت را فراهم می‌کند تا مجموعه داده کاربر را به اشتراک بگذارد و نتایج را منتشر کند. سخت‌افزار مورد استفاده GPU RAM 12 Gb و T4 8G است. جهت آموزش از مدل‌های یادگیری انتقال عمیق

ببریم. این رویکرد اغلب منجر به عملکرد بهتر در مقایسه با آموزش یک CNN از ابتدا می‌شود، به‌خصوص زمانی که داده‌های برجسته‌گذاری شده محدودی در دسترس داریم.

۵-۱- روش کار

در این کار، با استفاده از مدل‌های یادگیری عمیق، تشخیص اوتیسم در کودکان ایرانی با دقت قابل قبولی انجام گرفته است و می‌تواند به‌عنوان یک شیوه جدیدی در تشخیص اوتیسم از روی ویژگی‌های صورت استفاده شود و در تشخیص اوتیسم در کودکان مفید باشد. در شکل ۳ فلوجارت مراحل انجام کار آورده شده است.



شکل ۳ فلوجارت مراحل انجام کار

۵-۲- مجموعه داده

از مجموعه داده‌ای شامل تصاویر صورت کودکان اوتیسم و کودکان عادی نژاد ایرانی استفاده شده است. این مجموعه داده، از طریق شبکه اجتماعی تلگرام با اعلام آمادگی والدین داری فرزند اوتیسم جهت شرکت در اینکار، مرکز آموزش استثنایی بشارت و توانبخشی حس پنهان کرمانشاه برای کودکان اوتیسم^{۱۳} و کودکان مدارس عادی برای کودکان غیر اوتیسم جمع‌آوری شده است. دیتاست مجموعاً شامل ۱۰۰۰ تصویر چهره است که نیمی از آن‌ها مربوط به کودکان اوتیسم و نیمی دیگر از کودکان غیر اوتیسم می‌باشند.

روش اعتبارسنجی متقابل K-Fold یکی از تکنیک‌های مهم در یادگیری ماشین و یادگیری عمیق است که برای ارزیابی مدل‌ها و انتخاب داده‌ها استفاده می‌شود. در این روش، داده‌ها به **K** قسمت تقسیم می‌شوند. هر بار یکی از این بخش‌ها به‌عنوان داده آزمون و باقی بخش‌ها به‌عنوان داده آموزش استفاده می‌شوند. این فرآیند **K** بار تکرار می‌شود و هر بار یک قسمت متفاوت به‌عنوان داده آزمون در نظر گرفته می‌شود. این روش کمک می‌کند تا اطمینان حاصل شود که مدل روی تمامی داده‌ها خوب عمل می‌کند و وابسته به انتخاب خاصی از داده‌ها نیست. در پایان، نتایج هر **K** بار آزمون تجمیع شده و میانگین نتایج به‌عنوان عملکرد نهایی مدل گزارش می‌شود. در این کار برای انتخاب داده‌ها از روش **K-Fold** استفاده شده است. جدول ۱ توزیع داده توزیع داده‌ها را نشان می‌دهد.

جدول ۱ توزیع داده‌ها

¹⁴ Google Colab

^{۱۳} با تعهد عدم انتشار تصاویر بصورت اخلاقی و تعهد کتبی صورت گرفته است

		مقادیر واقعی	
		مثبت	منفی
مثبت	TP	FP	مثبت
	FN	TN	

سایر معیارهای مهم ارزیابی که با استفاده از ماتریس سردرگمی محاسبه می‌شوند عبارت‌اند از دقت^{۱۷} که با استفاده از فرمول (۲)، بازخوانی^{۱۸} با روش فرمول (۳) و رتبه F1 با استفاده از فرمول (۴) محاسبه می‌شوند. دقت نسبت موارد مثبت پیش‌بینی شده درست را از بین همه موارد مثبت پیش‌بینی شده اندازه‌گیری می‌کند. درحالی‌که بازخوانی نسبت نمونه‌های مثبت درست پیش‌بینی شده را به همه نمونه‌های مثبت واقعی اندازه‌گیری می‌کند. امتیاز F1 ترکیبی از دقت و بازخوانی است که معیاری متعادل بین آن‌ها فراهم می‌کند.

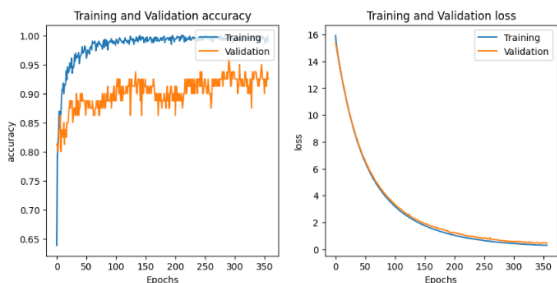
$$\text{Accuracy} = \frac{TP + TN}{TP + TN + FP + FN} \quad \text{فرمول (۱)}$$

$$\text{Precision} = \frac{TP}{TP + FP} \quad \text{فرمول (۲)}$$

$$\text{Recall} = \frac{TP}{TP + FN} \quad \text{فرمول (۳)}$$

$$F1 = 2 \times \frac{\text{Precision} \times \text{Recall}}{\text{Precision} + \text{Recall}} \quad \text{فرمول (۴)}$$

با توجه به اینکه مدل Mobilenet باهدف ایجاد یک مدل سبک، سریع و با دقت قابل قبول، مورد استفاده در دستگاه‌های با منابع محدود مانند موبایل‌ها و بردهای مینی کامپیوتری و کاربردهای بلادرنگ طراحی شده است، نسبت به سایر مدل‌های مورد آزمایش عملکرد بهتری داشت. نمودار دقت و تلفات داده‌های انتخاب شده برای آموزش و اعتبارسنجی در شکل ۴ نشان داده شده است.



شکل ۴ نمودار دقت و تلفات داده‌های آموزشی و اعتبارسنجی

کار را با تنظیم فرآیندها (تنظیم لایه‌ها، بهینه‌ساز) بر روی مدل Mobilenet پنج بار و هر بار بر روی مجموعه داده‌های پنج‌گانه که قبلاً توضیح داده شد اجرا و به نتایج جدول ۱ ماتریس سردرگمی برای داده‌های اصلی رسیدیم. با استفاده از تقویت داده تعداد تصاویر مجموعه آموزش را برای هر کلاس به ۲۰۰۰ تصویر افزایش دادیم و به نتایج جدول ۲ ماتریس سردرگمی برای داده‌های تقویت شده رسیدیم که تفاوت آنچنانی نداشت.

در کتابخانه Keras API و برای تجزیه و تحلیل عملکرد مدل‌ها از چندین کتابخانه پردازش داده مانند Tensorflow, Matplotlib, Sklearn, Pandas و Numpy استفاده کردیم.

مجموعه پارامترهای بهینه آموزش مدل را که پس از انجام آزمایش‌های متعدد به دست آوردیم به صورت زیر است: اندازه دسته ۶۴ و نرخ یادگیری 2×10^{-5} است. از بهینه‌ساز تنظیم شده آدام برای تنظیم وزن‌ها استفاده کردیم. این بهینه‌ساز وزن‌های شبکه را بر اساس نزول گرادیان به گونه‌ای تنظیم می‌کند که عملکرد تابع تلفات را به حداقل می‌رساند و در نهایت توانایی آن را برای دسته‌بندی دقیق تصاویر دودویی بهبود می‌بخشد. در نهایت، آنتروپی متقابل دودویی را به عنوان تابع تلفات در نظر گرفتیم. برای ۵۰۰ دوره، مدل را با استفاده از توقف زودهنگام با تنظیمات Patience برابر ۱۰ و تلفات اعتبارسنجی آموزش داده و مدل را اعتبارسنجی کردیم.

۶- نتایج شبیه‌سازی

ما در این بخش ابتدا به معرفی معیارهای ارزیابی و سپس به نتایج حاصل از آزمایش مدل‌های ارائه شده در این پژوهش می‌پردازیم. در بخش انتهایی نیز میزان دقت و خطای روش در این کار را با روش‌های دیگر مورد بررسی و مقایسه قرار خواهیم داد. بعد از مرحله آموزش، مدل‌ها جهت ارزیابی مورد آزمایش قرار می‌گیرند تا در شرایطی یکسان، وضعیت آن‌ها در مقایسه با مدل‌های دیگر سنجیده شود. در یادگیری عمیق برای آنکه میزان کارایی یک مدل مورد بررسی قرار گیرد، ابتدا خروجی مدل بر اساس معیارهای استاندارد همان حوزه مورد ارزیابی قرار داده می‌شود. سپس، نتایج حاصل از ارزیابی مدل با نتایج سایر پژوهش‌های مشابه مقایسه می‌شود.

۶-۱- معیارهای ارزیابی شبکه‌های عصبی عمیق

یکی از معیارهای کلیدی ارزیابی شبکه‌های عصبی عمیق در طبقه‌بندی دودویی تصاویر، صحت^{۱۵} مدل است. صحت اندازه‌گیری می‌کند که چگونه مدل به درستی برجسب‌های کلاس تصاویر را پیش‌بینی می‌کند [۳۸]. باین حال، صحت ممکن است به تنهایی برای ارزیابی عملکرد یک شبکه عصبی عمیق کافی نباشد. در فرمول (۱) نحوه محاسبه آن توضیح داده شده است.

ماتریس سردرگمی^{۱۶} [۳۸] یک ابزار تحلیلی در یادگیری ماشین و آمار است که برای ارزیابی عملکرد الگوریتم‌های دسته‌بندی استفاده می‌شود. این ماتریس یک جدول با ترکیبی از مقادیر پیش‌بینی شده و واقعی است. ماتریس سردرگمی به عنوان جدولی تعریف می‌شود که اغلب برای توصیف عملکرد یک مدل طبقه‌بندی بر روی مجموعه‌ای از داده‌های آزمایشی که مقادیر واقعی آن‌ها مشخص است، استفاده می‌شود. درایه‌های ماتریس سردرگمی عبارت‌اند از:

۱. مثبت واقعی (TP): مثبت را پیش‌بینی و درست است.
۲. منفی واقعی (TN): منفی را پیش‌بینی و درست است.
۳. مثبت کاذب (FP): مثبت را پیش‌بینی و نادرست است. (خطای نوع ۱)
۴. منفی کاذب (FN): منفی را پیش‌بینی و نادرست است. (خطای نوع ۲)

جدول ۲ ماتریس سردرگمی را نمایش می‌دهد.

جدول ۲ ماتریس سردرگمی

¹⁸ Recall

¹⁵ Accuracy

¹⁶ Confusion Matrix

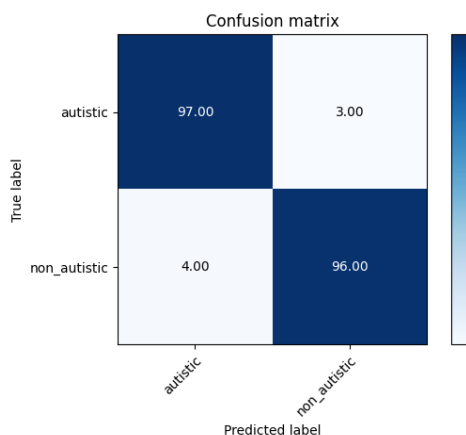
¹⁷ Precision

داده	Accuracy:	Precision:	Recall:	F1 Score:
فولد ۱	۰.۸۹	۰.۹۱	۰.۸	۰.۸۹
فولد ۲	۰.۹۵۵	۰.۹۷	۰.۹	۰.۹۵
فولد ۳	۰.۹۲۵	۰.۹۰	۰.۹	۰.۹۳
فولد ۴	۰.۹۶۵	۰.۹۷	۰.۹	۰.۹۶
فولد ۵	۰.۹۴۵	۰.۹۴	۰.۹	۰.۹۵
می انگین	۰.۹۴	۰.۹۳۴	۰.۹	۰.۹۴

جدول ۴ نتایج به دست آمده برای داده‌های تقویت شده

داده	Accuracy:	Precision:	Recall:	F1 Score:
فولد ۱	۰.۹۰	۰.۹۰	۰.۹۱	۰.۹۱
فولد ۲	۰.۹۴	۰.۹۴	۰.۹۴	۰.۹۴
فولد ۳	۰.۹۲	۰.۹۵	۰.۸۹	۰.۹۲
فولد ۴	۰.۹۴	۰.۹۳	۰.۹۵	۰.۹۴
فولد ۵	۰.۹۳	۰.۹۰	۰.۹۵	۰.۹۳
میان گین	۰.۹۲	۰.۹۲	۰.۹۲	۰.۹۳

جزئیات ماتریس سردرگمی در شکل ۵ نشان داده شده است. برای موارد مثبت واقعی (TP)، مدل می‌تواند به درستی ۹۷ کودک را به‌عنوان مبتلا به اوتیسم پیش‌بینی کند. برای موارد منفی واقعی (TN)، مدل به درستی می‌تواند ۹۶ کودک را به‌عنوان غیراوتیسم پیش‌بینی کند. برای موارد منفی کاذب (FN)، مدل به اشتباه ۳ کودک را به‌عنوان غیراوتیسم پیش‌بینی کرد، اما آن‌ها اوتیسم داشتند. برای موارد مثبت کاذب (FP)، مدل به اشتباه ۴ کودک را به‌عنوان اوتیسم پیش‌بینی کرد، اگرچه آن‌ها اوتیسم نداشتند.



شکل ۵ ماتریس سردرگمی مربوط به بهترین حالت

جدول ۱ ماتریس سردرگمی برای داده‌های اصلی

داده	تعداد دوره آموزش	زمان اجرا	ثابت واقعی	منفی واقعی	منفی کاذب	ثابت کاذب
فولد ۱	۳۴	۰.۰۸	۹	۹	۱	۸
فولد ۲	۵۹	۳۰.۸	۹	۷	۶	۹
فولد ۳	۱۳	۷۵۶	۰	۰	۵	۹
فولد ۴	۷۵	۲۵۰	۹	۷	۴	۹
فولد ۵	۷۲	۴۶۴	۹	۴	۵	۹
می انگین	۵۱	۳۵۲	۹	۴	۶	۹

جدول ۲ ماتریس سردرگمی برای داده‌های تقویت شده

داده	تعداد دوره آموزش	زمان اجرا	ثابت واقعی	منفی واقعی	منفی کاذب	ثابت کاذب
فولد ۱	۳۴	۳۰.۸	۹	۸	۱	۹
فولد ۲	۰.۷	۳۸۳	۹	۷	۶	۹
فولد ۳	۰.۳	۵۱۹	۹	۷	۵	۸
فولد ۴	۶۱	۷۴۲	۹	۵	۷	۹
فولد ۵	۳۰	۰.۶۰	۹	۸	۵	۹
می انگین	۴۷	۴۶۷.۲	۹	۸	۷	۹

همان‌طور که در جداول ۳ و ۴ مشاهده می‌شود، تعداد دوره‌های آموزش برای داده‌های تقویت شده نسبت به داده‌های تقویت نشده کمتر است. در حالی که میانگین نتایج داده‌های تقویت نشده بهتر است. نتایج معیارهای ارزیابی برای داده‌های اصلی در جدول ۳ نتایج به دست آمده برای داده‌های اصلی و برای داده‌های تقویت شده در جدول ۴ نتایج به دست آمده برای داده‌های تقویت شده آورده شده است.

جدول ۳ نتایج به دست آمده برای داده‌های اصلی

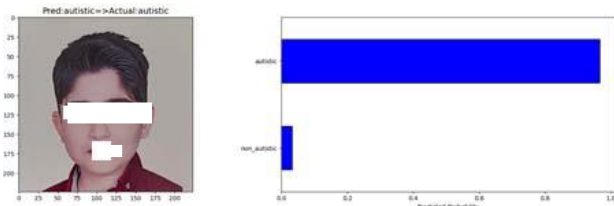
۶-۲- بحث

این تحقیق یک مدل برای تشخیص اوتیسم از روی تصویر صورت کودکان با استفاده از CNN مبتنی بر یادگیری انتقالی پیشنهاد می‌کند. معماری‌های CNN این توانایی را دارند که ویژگی‌های درون تصویر را استخراج کنند و با استفاده از این ویژگی‌های مشترک آن‌ها را به دو گروه اوتیسم و غیر اوتیسم طبقه‌بندی کنند. محققان مدل‌های مختلف را برای تصاویر عمومی [۱۴] و اختصاصی [۱۲] اعمال کردند. ما در این کار توانستیم برای اولین بار یک مدل بر پایه Mobilenet برای تشخیص اوتیسم در کودکان ایرانی ارائه کنیم و به نتایج میانگین مندرج در **جدول ۵ میانگین نتایج بدست آمده** برسیم. در بهترین حالت نیز برای مدل اصلاح شده Mobilenet نتایج $Accuracy=97\%$ ، $Precision=97\%$ ، $Recall=96\%$ ، $AUC_ROC=97\%$ و $F1\ score=96\%$ به دست آمده است.

جدول ۵ میانگین نتایج بدست آمده

Mean AUC	Accuracy	Precision	Recall	F1_Score
۹۸٪	۹۳٪	۹۲٪	۹۳٪	۹۳٪

در آینده با استفاده از این مدل یک برنامه کاربردی جهت نصب بر روی گوشی‌های هوشمند تهیه می‌شود. این برنامه می‌تواند توسط مراکز سنجش کودکان برای ورود به مدرسه در آموزش و پرورش، مراکز سنجش بهزیستی، والدین و مربیان مورد استفاده قرار گیرد. تا با استفاده از یک تصویر ساده بتوانند تشخیص اولیه اوتیسم را همانند شکل ۶ انجام دهند و از نتایج بدست آمده جهت مراجعه به پزشکان متخصص در مغز و اعصاب یا روان پزشکی و تشخیص نهایی استفاده کنند. به عنوان کار آینده، می‌توان اوتیسم را با استفاده از جمعیت ویژگی‌های استخراج شده از تصاویر EEG و FMRI تشخیص داد و از آن در کنار برگه‌های ارزیابی و مدل تشخیص تصاویر چهره در پژوهش حاضر استفاده کرد تا متخصصان بتوانند با سهولت از آن استفاده کنند.



شکل ۶ نمونه خروجی برنامه

۸- حمایت

این کار بر اساس تصاویر ارسالی بعضی از والدین کودکان مبتلا و همچنین اداره کل بهزیستی و اداره کل آموزش و پرورش استان کرمانشاه با تعهد عدم انتشار تصاویر انجام گرفت. جا دارد در اینجا از همکاری این مجموعه‌ها تقدیر و تشکر گردد. این کار تحقیقی در آزمایشگاه هوش مصنوعی دانشگاه ایلام انجام گرفته است.

۹- محدودیت

در زمینه شرکت کردن در پروژه‌های تحقیقاتی به اندازه کافی برای خانواده و بخصوص مسئولین فرهنگ‌سازی نشده است. ما در اینکار، با ترس مردم و خانواده‌ها از مشارکت در این پروژه تحقیقی و نگرانی آنها بابت در اختیار قرار دادن تصاویر فرزندانشان مواجه شدیم.

با وصف اینکه اوتیسم در رفتار یک شخص مشخص می‌شود و چون یک اختلال رشدی عصبی است، می‌تواند با سایر اختلالات رشدی عصبی در زندگی واقعی اشتباه گرفته شود. بنابراین تشخیص آن کار ساده‌ای نیست. برای اینکه بتوان اوتیسم را با استفاده از تصاویر چهره تشخیص داد نیاز به جمع‌آوری تصاویر کودکان اوتیسمی و غیر اوتیسمی هست که این تصاویر را باید نشانه‌گذاری کرد. اگر بخواهید با استفاده از الگوریتم‌های یادگیری عمیق برای دسته‌بندی این دو گروه اقدام کنید نیاز به مجموعه‌ای بزرگ از تصاویر دارید که این تصاویر نیز باید دارای ویژگی‌های خاصی از جمله کیفیت، اندازه و... باشند که در غیر این صورت نتایج مناسبی به دست نخواهد آمد. در این تحقیق، مدل‌های مختلف پیش آموزش را با تغییرات مناسب در تنظیم پارامترها، تغییر و افزودن لایه‌ها، نرخ یادگیری و تعیین بهینه‌ساز مناسب با تصاویر گردآوری شده از چهره کودکان نژاد ایرانی آموزش داده شده و به نتایجی به شرح جدول ۳ دست یافتیم.

همان‌طور که در مرور ادبیات گفتیم شش مقاله مرتبط پیدا شد که در چهار مورد [۱۳، ۱۵، ۱۷، ۳۹] از مخزن عمومی تصاویر [۱۴] استفاده شده بود. در یک مورد مارک پرکوفسکی و همکاران [۱۲] از تصاویر چهره کودکان چینی و در یک مورد دیگر پروینا و ماتا در مطالعه‌ی [۱۱] از تعداد خیلی کمی از تصاویر چهره استفاده کردند. آنها ویژگی‌ها را به صورت دستی استخراج کرده بودند. باتوجه به اینکه طبق مطالعه مارک پرکوفسکی و همکاران [۱۲] نژاد در تشخیص اوتیسم با استفاده از تصاویر چهره تأثیر می‌گذارد، بنابراین در این مطالعه منحصراً از تصاویر چهره کودکان ایرانی استفاده شده است. در کار پروینا و ماتا [۱۱] از شبکه‌های عصبی مصنوعی و از ۶۸ علامت مشخصه صورت استفاده شده است که به دقت ۸۰٪ رسیدند. در حالی که شبکه‌های عصبی عمیق می‌توانند مشخصه‌های بیشتری را استخراج کنند.

در چهار مطالعه‌ای که بر روی داده‌های عمومی [۱۴] انجام شد فواز و همکاران [۱۵] با xception دقت ۹۱٪ را به دست آوردند. علیم و همکاران [۱۶] با استفاده از مدل اصلاح شده xception به دقت ۹۵٪ رسیدند. زیاد و همکاران [۱۷] با استفاده از mobilenet به دقت ۹۵٪ روی داده‌های اعتبار سنجی رسیدند. ولی برای داده‌های آزمون نتایج نشان داده نشد. رحمان و همکاران [۱۸] با xception به $AUC=96.63\%$ رسیدند. اما آنها نتایج مربوط به دقت و صحت را ارائه نکردند. نهایتاً پرکوفسکی و همکاران [۱۲] توانستند یک مدل را با دقت ۹۵٪ برای تشخیص اوتیسم در کودکان چینی آموزش دهند.

نکته‌ای که در این مطالعات قابل‌ارائه بود نحوه انتخاب داده‌ها بود که هیچ‌گونه توضیحی داده نشده است. در حالی که در این مطالعه انتخاب داده‌ها براساس روش K-Fold بوده است که روشی مورد قبول و شناخته شده در انتخاب داده‌ها هست. در بهترین حالت برای مدل اصلاح شده Mobilenet نتایج $Accuracy=97\%$ ، $Precision=97\%$ ، $Recall=96\%$ ، $AUC_ROC=97\%$ ، $F1\ score=96\%$ و $Mean\ AUC=99\%$ به دست آمده است. نتایج امیدوار کننده‌ای هستند و می‌توان با استفاده از آنها برنامه‌ای جهت تلفن همراه هوشمند جهت تشخیص اوتیسم با استفاده از ویژگی‌های صورت توسعه داد. کیفیت تصاویر سن کودکان شرکت کننده در کیفیت مدل تأثیر بسزایی دارد. در اینجا اکثر کودکان شرکت کننده در محدوده سنی 3 ± 7 بودند. چنانچه گروه سنی محدودتر و تصاویر با کیفیت‌تر شوند و از پس‌زمینه یکسانی استفاده شود نتایج بهتری به دست خواهد آمد.

۷- نتیجه‌گیری

- [21] A. Estes, J. Munson, S. J. Rogers, J. Greenon, J. Winter, and G. Dawson, "Long-term outcomes of early intervention in 6-year-old children with autism spectrum disorder," *Journal of the American Academy of Child & Adolescent Psychiatry*, vol. 54, no. 7, pp. 580-587, 2015.
- [22] R. Bouma and R. Schweitzer, "The impact of chronic childhood illness on family stress: A comparison between autism and cystic fibrosis," *Journal of clinical psychology*, vol. 46, no. 6, pp. 722-730, 1990.
- [23] M. E. Dunn, T. Burbine, C. A. Bowers, and S. Tantleff-Dunn, "Moderators of stress in parents of children with autism," *Community mental health journal*, vol. 37, pp. 39-52, 2001.
- [24] V. Lotter, "Factors related to outcome in autistic children," *Journal of autism and childhood schizophrenia*, vol. 4, no. 3, pp. 263-277, 1974.
- [25] K. Aldridge et al., "Facial phenotypes in subgroups of prepubertal boys with autism spectrum disorders are correlated with clinical phenotypes," *Molecular autism*, vol. 2, pp. 1-12, 2011.
- [26] S. Albawi, T. A. Mohammed, and S. Al-Zawi, "Understanding of a convolutional neural network," in 2017 International conference on engineering and technology (ICET), 2017, pp. 1-6: Ieee.
- [27] A. Krizhevsky, I. Sutskever, and G. E. Hinton, "Imagenet classification with deep convolutional neural networks," *Advances in neural information processing systems*, vol. 25, 2012.
- [28] A. G. Howard et al., "Mobilenets: Efficient convolutional neural networks for mobile vision applications," *arXiv preprint arXiv:1704.04861*, 2017.
- [29] C. Szegedy, V. Vanhoucke, S. Ioffe, J. Shlens, and Z. Wojna, "Rethinking the inception architecture for computer vision," in *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, 2016, pp. 2818-2826.
- [30] F. Chollet, "Xception: Deep learning with depthwise separable convolutions," in *Proceedings of the IEEE conference on computer vision and pattern recognition*, 2017, pp. 1251-1258.
- [31] J. Gu et al., "Recent advances in convolutional neural networks," *Pattern recognition*, vol. 77, pp. 354-377, 2018.
- [32] R. Zaheer and H. Shaziya, "A study of the optimization algorithms in deep learning," in 2019 third international conference on inventive systems and control (ICISC), 2019, pp. 536-539: IEEE.
- [33] L. Prechelt, "Early stopping-but when?," in *Neural Networks: Tricks of the trade*: Springer, 2002, pp. 55-69.
- [34] L. Alzubaidi et al., "Review of deep learning: Concepts, CNN architectures, challenges, applications, future directions," *Journal of big Data*, vol. 8, pp. 1-74, 2021.
- [35] K. Weiss, T. M. Khoshgoftar, and D. Wang, "A survey of transfer learning," *Journal of Big Data*, vol. 3, no. 1, p. 9, 2016/05/28 2016.
- [36] L. Prechelt, "Early Stopping - But When?," in *Neural Networks: Tricks of the Trade*, G. B. Orr and K.-R. Müller, Eds. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1998, pp. 55-69.
- [37] L. Alzubaidi et al., "Review of deep learning: concepts, CNN architectures, challenges, applications, future directions," *Journal of Big Data*, vol. 8, no. 1, p. 53, 2021/03/31 2021.
- [38] P. Cichosz, "Assessing the quality of classification models: Performance measures and evaluation procedures," *Central European Journal of Engineering*, vol. 1, no. 2, pp. 132-158, 2011/06/01 2011.
- [39] M. S. Alam, M. M. Rashid, R. Roy, A. R. Faizabadi, K. D. Gupta, and M. M. Ahsan, "Empirical Study of Autism Spectrum Disorder Diagnosis Using Facial Images by Improved Transfer Learning Approach," *Bioengineering (Basel, Switzerland)*, vol. 9, no. 11, p. 710, Accessed on: 2022/11/. doi: 10.3390/bioengineering9110710 Available: <http://europepmc.org/abstract/MED/36421111>
<https://doi.org/10.3390/bioengineering9110710>
<https://europepmc.org/articles/PMC9687350>
<https://europepmc.org/articles/PMC9687350?pdf=render>
- [1] C. S. Paula, S. H. Ribeiro, E. Fombonne, and M. T. Mercadante, "Brief report: prevalence of pervasive developmental disorder in Brazil: a pilot study," *Journal of autism and developmental disorders*, vol. 41, pp. 1738-1742, 2011.
- [2] L. C. Nunes et al., "A hybrid model to guide the consultation of children with autism spectrum disorder," in *Research & Innovation Forum 2019: Technology, Innovation, Education, and their Social Impact 1*, 2019, pp. 419-431: Springer.
- [3] F. Thabtah, "Machine learning in autistic spectrum disorder behavioral research: A review and ways forward," *Informatics for Health and Social Care*, vol. 44, no. 3, pp. 278-297, 2019.
- [4] N. Bagatell, "From cure to community: Transforming notions of autism," *Ethos*, vol. 38, no. 1, pp. 33-5, 2010.
- [5] J. Zeidan et al., "Global prevalence of autism: A systematic review update," *Autism Research*, vol. 15, no. 5, pp. 778-790, 2022.
- [6] D. Bone, M. S. Goodwin, M. P. Black, C.-C. Lee, K. Audhkhasi, and S. Narayanan, "Applying machine learning to facilitate autism diagnostics: pitfalls and promises," *Journal of autism and developmental disorders*, vol. 45, pp. 1121-1136, 2015.
- [7] G. Tripi et al., "Cranio-facial characteristics in children with autism spectrum disorders (ASD)," *Journal of Clinical Medicine*, vol. 8, no. 5, p. 641, 2019.
- [8] W. DeMyer, W. Zeman, and C. G. Palmer, "The face predicts the brain: diagnostic significance of median facial anomalies for holoprosencephaly (arhinencephaly)," *Pediatrics*, vol. 34, no. 2, pp. 256-263, 1964.
- [9] K. Aldridge et al., "Facial phenotypes in subgroups of prepubertal boys with autism spectrum disorders are correlated with clinical phenotypes," (in eng), *Mol Autism*, vol. 2, no. 1, p. 15, Oct 14 2011.
- [10] M. Beary, A. Hadsell, R. Messersmith, and M.-P. Hosseini, "Diagnosis of autism in children using facial analysis and deep learning," *arXiv preprint arXiv:2008.02890*, 2020.
- [11] T. Lakshmi Praveena and N. Muthu Lakshmi, "A methodology for detecting ASD from facial images efficiently using artificial neural networks," in *Advances in Computational and Bio-Engineering: Proceeding of the International Conference on Computational and Bio Engineering*, 2019, Volume 1, 2020, pp. 365-373: Springer.
- [12] A. Lu and M. Perkowski, "Deep learning approach for screening autism spectrum disorder in children with facial images and analysis of ethnorracial factors in model development and application," *Brain Sciences*, vol. 11, no. 11, p. 1446, 2021.
- [13] M.-P. Hosseini, M. Beary, A. Hadsell, R. Messersmith, and H. Soltanian-Zadeh, "Deep learning for autism diagnosis and facial analysis in children," *Frontiers in Computational Neuroscience*, p. 119, 2022.
- [14] G. Piosenka, "Concerns with 'Detect Autism' Dataset ,Kaggle," <https://www.kaggle.com/datasets/cihan063/autism-image-data>, 2021.
- [15] F. W. Alsaade and M. S. Alzahrani, "Classification and detection of autism spectrum disorder based on deep learning algorithms," *Computational Intelligence and Neuroscience*, vol. 2022, 2022.
- [16] M. S. Alam, M. M. Rashid, R. Roy, A. R. Faizabadi, K. D. Gupta, and M. M. Ahsan, "Empirical study of autism spectrum disorder diagnosis using facial images by improved transfer learning approach," *Bioengineering*, vol. 9, no. 11, p. 710, 2022.
- [17] Z. A. Ahmed et al., "Facial features detection system to identify children with autism spectrum disorder: deep learning models," *Computational and Mathematical Methods in Medicine*, vol. 2022, 2022.
- [18] K. Mujeeb Rahman and M. M. Subashini, "Identification of autism in children using static facial features and deep neural networks," *Brain Sciences*, vol. 12, no. 1, p. 94, 2022.
- [19] J. W. Jacobson and J. A. Mulick, "System and cost research issues in treatments for people with autistic disorders," *Journal of autism and developmental disorders*, vol. 30, no. 6, p. 585, 2000.
- [20] S. Bryson, "Our most vulnerable citizens: Needs of and service models for people with autism," Toronto: Autism Society Ontario, 1991.

Multi-objective Optimization of microchannel heat transfer including elastic wall

Farzad Havasi ^{1,*}

¹ Department of mechanical engineering, Tabriz, Iran

E-mails: farzadhavasi@gmail.com

* Corresponding Author

Abstract

In this study, a multi-objective optimization of microchannel performance is conducted using Computational Fluid Dynamics (CFD) and the Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE) method. The primary objective is to enhance heat transfer while minimizing pressure drop within the flow system. The ALE equations are employed to simulate flow and heat transfer in the microchannel, allowing for geometric deformations and boundary displacements. Experimental data are analyzed using software, and multi-objective optimization is performed utilizing the NSGA-II genetic algorithm. The obtained optimal point includes $Re = 10$, $f = 0.125$ Hz, $Ae = 0.165$ mm, and $T_{in} = 279.75$ K) where indicated Reynolds number, frequency of elastic wall, amplitude of elastic wall and temperature), resulting in a thermal performance ratio of $TPR = 1.3294$. The findings of this study contribute to improving microchannel design in cooling systems and other microfluidic applications.

Keywords

Heat transfer, fluid-structure interaction (FSI), microchannel, optimization, convection, Arbitrary Lagrangian-Eulerian (ALE), thermal performance ratio (TPR).

بهینه سازی عملکرد میکروکانال های شامل دیواره الاستیک نوسانی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی و

مینی تب

فرزاد هواسی^{۱*}

دپارتمان مهندسی مکانیک دانشگاه تبریز، تبریز، آذربایجان شرقی، ایران

ایمیل نویسنده: farzadhavasi@gmail.com

چکیده

در این پژوهش، بهینه سازی چندهدفه عملکرد میکروکانال ها با استفاده از روش دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) و مدل لاگرانژی-اولری اختیاری (ALE) برای بررسی تاثیر برهمکنش سازه-سیال انجام شده است. هدف اصلی، افزایش انتقال حرارت و کاهش افت فشار در سیستم جریان است. برای شبیه سازی جریان و انتقال حرارت در میکروکانال، از معادلات ALE استفاده شده که امکان مدل سازی تغییرات هندسی و جابجایی مرزها را فراهم می کند. داده های تجربی با استفاده از نرم افزار مربوطه تحلیل شده و بهینه سازی چندهدفه با بهره گیری از الگوریتم ژنتیک NSGA-II انجام گرفته است. نتایج نشان می دهند که نقطه بهینه به دست آمده عبارت است از $Re=10$, $f=0.125$ Hz, $Ae=0.165$ mm, $Tin=279.75$ K (به ترتیب نشانگر دمای ورودی، دامنه دیواره الاستیک، فرکانس دیواره الاستیک، و عدد رینولدز می باشند) که منجر به نسبت عملکرد حرارتی $TPR = 1.3294$ * شده است. این پژوهش می تواند به بهبود طراحی میکروکانال ها در سیستم های خنک کننده و سایر کاربردهای میکروفلوئیدیک کمک کند.

کلمات کلیدی: انتقال حرارت، برهم کنش سیال-سازه، میکروکانال، بهینه سازی، همرفت، مدل لاگرانژی-اولری، نسبت عملکرد حرارتی

نام نویسنده مسئول: فرزاد هواسی

ایمیل نویسنده مسئول: farzadhavasi@gmail.com

تاریخ ارسال مقاله: ۱۴۰۳/۰۹/۱۰

تاریخ (های) اصلاح مقاله: ۱۴۰۳/۱۱/۲۵

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۳/۱۲/۱۴

۱- مقدمه

پرداخت (Zăvoianu et al., 2017). در نهایت، توجه به جوانب اقتصادی و محیطی در طراحی میکروکانال ها نیز از اهمیت بالایی برخوردار است. بهینه سازی در این زمینه نه تنها می تواند به بهبود عملکرد سیستم ها منجر شود، بلکه می تواند به کاهش مصرف انرژی و هزینه های عملیاتی کمک کند (Gao et al., 2016). با توجه به این موارد، پژوهش در زمینه میکروکانال ها و بهینه سازی آن ها می تواند نقشی کلیدی در پیشرفت فناوری های نوین ایفا کند. برهمکنش سیال-سازه (FSI) به تعاملات میان جریان سیال و سازه های جامد اطلاق می شود که در آن تغییرات نیروهای ناشی از جریان سیال می تواند بر رفتار سازه و بالعکس تاثیر بگذارد. این برهمکنش به ویژه در سیستم های میکروفلوئیدیک و میکروکانال ها از اهمیت بالایی برخوردار است، زیرا طراحی مؤثر میکروکانال ها می تواند منجر به بهبود انتقال حرارت و کاهش افت فشار شود (Wen et al., 2019).

در میکروکانال ها، تغییر شکل های ناشی از فشار سیال و جریان می تواند بر الگوهای جریان تأثیر بگذارد و باعث ایجاد نواحی جدید انتقال حرارت شود. به عنوان مثال، تغییرات در هندسه میکروکانال به واسطه برهمکنش با سیال می تواند منجر به افزایش سطح تماس و بهبود انتقال حرارت شود (Chakraborty et al., 2012). این تغییرات می توانند به شکل انحناهای دینامیکی، انبساط و انقباض سازه ها یا تغییر در شرایط مرزی ایجاد شوند که همگی به افزایش کارایی انتقال حرارت کمک می کنند. تحقیقات اخیر نشان داده اند که به کارگیری مواد نرم و انعطاف پذیر در طراحی میکروکانال ها می تواند به بهبود عملکرد انتقال حرارت منجر شود. با استفاده از مدل سازی های عددی و شبیه سازی های آزمایشی، این رویکردها نشان داده اند که برهمکنش سیال-سازه می تواند به افزایش ضریب انتقال حرارت به طور قابل توجهی کمک کند (Zhao et al., 2023). به طور کلی، طراحی میکروکانال ها با در نظر گرفتن

میکروکانال ها به عنوان ساختارهای میکروسکوپی با ابعاد کوچک، در سال های اخیر به طور گسترده ای در صنایع مختلف و پژوهش های علمی مورد توجه قرار گرفته اند. این کانال ها به دلیل نسبت سطح به حجم بالا و توانایی انتقال حرارت مؤثر، در سیستم های خنک کننده الکترونیکی، میکروپمپ ها، جداسازی بیولوژیکی و آزمایشگاه های روی تراشه کاربرد دارند (Dixit & Ghosh, 2015). در این زمینه، میکروکانال ها به دلیل طراحی بهینه و امکان کنترل دقیق بر روی فرآیندهای فیزیکی و شیمیایی، توانسته اند به عنوان یک راه حل مؤثر برای چالش های موجود در انتقال حرارت و سیال ها شناخته شوند (Kose et al., 2022).

بهینه سازی عملکرد میکروکانال ها به عنوان یک زمینه تحقیقاتی مهم، می تواند به بهبود کارایی سیستم های مختلف منجر شود. عوامل متعددی مانند هندسه کانال، نوع سیال، و شرایط عملیاتی می توانند تأثیر زیادی بر روی انتقال حرارت و افت فشار در این سیستم ها داشته باشند (Zhuang et al., 2020). به عنوان مثال، هندسه های غیرمتعارف، نظیر میکروکانال های با مقاطع عرضی متفاوت، می توانند به طور قابل توجهی بهبود در انتقال حرارت و کاهش افت فشار را فراهم کنند (Hetsroni et al., 2005). روش های بهینه سازی متنوعی برای بهبود عملکرد میکروکانال ها وجود دارد، از جمله شبیه سازی های عددی، تحلیل های تجربی، و الگوریتم های بهینه سازی. استفاده از نرم افزارهای شبیه سازی مانند ANSYS و COMSOL به پژوهشگران این امکان را می دهد تا رفتار جریان و انتقال حرارت را به دقت بررسی کنند و پارامترهای مؤثر بر عملکرد میکروکانال ها را شناسایی کنند (Khan & Fartaj, 2011). علاوه بر این، با بهره گیری از تکنیک های آماری و یادگیری ماشین، می توان به تحلیل دقیق تری از داده های آزمایشی و بهینه سازی طراحی میکروکانال ها

در این مقاله از روش ALE استفاده شده است (Donea et al., 2004). معادلات بخش سیال به صورت زیر است:

پیوستگی:

$$\nabla \cdot U = 0 \quad (1)$$

مومنتم:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + ((U - U_m) \cdot \nabla)U = \nu \nabla^2 U - \frac{1}{\rho} \nabla p \quad (2)$$

انرژی:

$$\frac{\partial T}{\partial t} + (U - U_m) \cdot \nabla T = \alpha \nabla^2 T \quad (3)$$

U نمایانگر بردار سرعت سیال، U_m نمایانگر سرعت مش، P نمایانگر فشار جریان سیال، T دما، ρ چگالی سیال، ν ویسکوزیته سینماتیکی، α پخش حرارتی و t نشان دهنده زمان است.

۲.۱.۲ دامنه سازه

از طرف دیگر معادلات بخش سازه به صورت:

$$\rho_s \frac{\partial^2 d}{\partial t^2} = \nabla \cdot FS \quad (4)$$

که d جابجایی سازه، F تانسور تغییر شکل، S نشان دهنده تانسور تنش دوم Piola-Kirchhoff بصورت زیر تعریف شده است:

$$F = I + \nabla d$$

$$S = 2 \frac{\partial W}{\partial C}$$

I تانسور واحد، W تابع چگالی انرژی و C تانسور تغییرات Cauchy-Green است.

۲.۱.۳ شرایط اولیه و مرزی

شرایط اولیه مسأله به صورت زیر تعریف می شود:

$$U(x, y, 0) = 0, P(x, y, 0) = 0, T(x, y, 0) = 293.15K, d(x, y, 0) = 0$$

دمای دیواره کانال $T_w = 360K$ ، پروفیل سرعت توسعه یافته به صورت:

$$U_{in} = 4\bar{U} \left(\frac{y}{H} \right) (H - y) \quad (5)$$

\bar{U} سرعت میانگین سیال در ورودی کانال است. عدد رینولدز، عدد ناسلت، عدد ناسلت میانگین و ضریب اصطکاک به ترتیب به صورت زیر می باشند:

$$Re = \frac{U D_h}{\nu} \quad (6)$$

$$Nu = \frac{h D_h}{k_f} \quad (7)$$

$$\bar{Nu} = \frac{1}{L} \int_0^L Nu(x, t) dx \quad (8)$$

$$\bar{Nu} = \frac{1}{L} \int_0^L \bar{Nu}(x) dx \quad (9)$$

$$f = \frac{2 D_h \Delta P}{\rho U^2 L} \quad (10)$$

۲.۲ شبکه مسأله

انتخاب شبکه در شبیه‌سازی‌های دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) اهمیت زیادی دارد، زیرا دقت نتایج را مستقیماً تحت تأثیر قرار می‌دهد. در این مطالعه، برای بررسی حساسیت شبکه، چهار شبکه مختلف به کار رفته است. جدول ۲ تعداد سلول‌ها و مقادیر میانگین عدد ناسلت و افت فشار را برای شبکه‌های مختلف در سرعت رینولدز ۶۰۰ برای یک میکروکانال با دیواره الاستیک نشان می‌دهد. نتایج نشان می‌دهند که تفاوت ناچیزی در میانگین عدد نوسلت (۰.۰۰۰۶۲٪) و افت فشار (۰.۰۰۴۴۵٪) بین شبکه‌های سوم (با ۷۳،۰۰۰

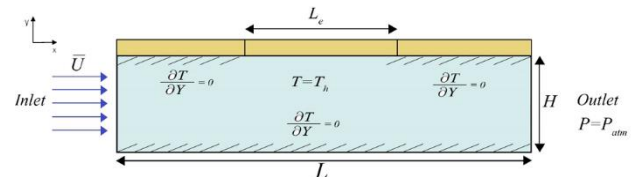
برهمکنش‌های سیال-سازه می‌تواند به عنوان یک استراتژی کلیدی در بهینه‌سازی عملکرد سیستم‌های خنک‌کننده و میکروفلوئیدیک مطرح شود.

با وجود پیشرفت‌های قابل توجه در طراحی و بهینه‌سازی میکروکانال‌ها، هنوز هم ضعف‌هایی در زمینه عملکرد میکروکانال‌های با دیواره الاستیک وجود دارد که نیاز به بررسی دقیق‌تری دارد. این گپ‌ها شامل عدم شناخت کامل تأثیر تغییرات هندسی دیواره‌ها بر رفتار جریان و انتقال حرارت و همچنین عدم وجود مدل‌های دقیق برای پیش‌بینی عملکرد این سیستم‌ها است. در این پژوهش، به بررسی این گپ‌ها پرداخته و رویکردهایی برای بهینه‌سازی عملکرد میکروکانال‌های با دیواره الاستیک ارائه می‌شود. با مدل‌سازی برهمکنش‌های پیچیده بین سیال و دیواره‌ها، به شناسایی پارامترهای کلیدی مؤثر بر انتقال حرارت پرداخت. علاوه بر این، یک رابطه جدید برای نسبت عملکرد حرارتی به دست آمده است که می‌تواند به عنوان ابزاری مفید برای مهندسان و محققان در طراحی و بهینه‌سازی میکروکانال‌ها استفاده شود. این همبستگی، رابطه‌ای را بین عدد ناسلت و پارامترهای مختلف هندسی و عملیاتی فراهم می‌آورد و امکان پیش‌بینی دقیق‌تر عملکرد میکروکانال‌ها را فراهم می‌سازد. نتایج این پژوهش می‌تواند به بهبود درک از رفتار میکروکانال‌های با دیواره الاستیک و افزایش کارایی سیستم‌های خنک‌کننده و میکروفلوئیدیک کمک کند.

۲ شرح مسأله

برای بهینه‌سازی میکروکانال با دیواره الاستیک فرضیات زیر را در نظر گرفته شده است:

۱. خواص ثابت سیال
۲. جریان سیال دو بعدی، ناپایا، تراکم ناپذیر، توسعه یافته با رژیم جریان آرام
۳. میکروکانال دارای عرض ۳ میلی‌متر و عرض ۱ میلی‌متر است.
۴. دیواره بالایی میکروکانال الاستیک است.
۵. تمامی دیواره‌ها عایق است بجز ۱ میلی‌متر از میانه دیواره بالایی شکل ۱ شماتیک میکروکانال را نشان می‌دهد. طول کانال با L ، طول بخش الاستیک با L_e و عرض H را نشان می‌دهد. دیواره بالایی از جنس پلی پروپیلن است که خواص آن در جدول ۱ نشان داده شده است.



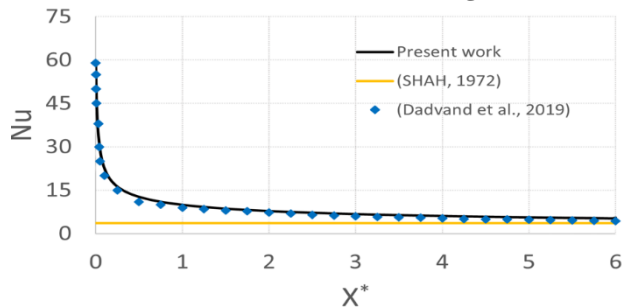
شکل ۱. شماتیک کلی میکروکانال با دیواره الاستیک

جدول ۱. خواص پروپیلن (Turek & Hron, 2006).

خاصیت	نماد	مقدار	واحد
چگالی	ρ_s	۱۱۰۰	Kg/m ³
مدول	E_s	۹۵۸	Pa
یانگ	ν_s	۰.۴۲	-
پواسون	C_p	۷۰	J/(Kg.K)
ظرفیت گرمایی	k_s	۰.۲	W/(m.K)
ضریب هدایت گرمایی			

۲.۱ معادلات حاکم
۲.۱.۱ دامنه سیال

قابلیت اطمینان مدل محاسباتی را برای تحلیل جابجایی اجباری حرارت در میکروکانال تأیید می‌کند.



شکل ۳. مقایسه بین عدد ناسلت کار حاضر با کارهای پیشین

$$X^* = x/H$$

۳.۲ بهینه سازی چندهدفه میکروکانال با دیواره الاستیک

ین بخش به طراحی جدیدی از میکروکانال می‌پردازد که شامل یک سطح ارتجاعی نوسانی است. هدف از این تحقیق بررسی تأثیر این نوع تعامل ساختاری-سیالی (FSI) بر عملکرد انتقال حرارت است. تمرکز اصلی بر درک تأثیر فرکانس و دامنه سطح نوسانی بر انتقال حرارت می‌باشد. سطح ارتجاعی با فرکانس نوسان (f) و دامنه (Ae) مشخص می‌شود. نسبت دامنه به عرض کانال در محدوده‌ای از ۰.۰۵ تا ۰.۳۳ تغییر داده می‌شود. تأثیر فرکانس بر عملکرد انتقال حرارت از طریق عدد بدون بعد استروهال (Strouhal number) مطالعه می‌شود. عدد استروهال به‌عنوان حاصلضرب فرکانس و طول ویژگی تقسیم بر سرعت سیال تعریف می‌شود ($St=f \cdot U/D_H$) فرکانس در بازه ۰.۱۲۵ تا ۱ هرتز بررسی می‌شود. علاوه بر این، تأثیر عدد پراتنل (Pr) بر میانگین زمانی عدد ناسلت که دمای ورودی از ۲۷۹.۷۵ تا ۳۰۰ کلون تغییر می‌کند، مورد بررسی قرار می‌گیرد. عدد پراتنل نمایانگر اهمیت نسبی انتشار مومنتوم (به دلیل ویسکوزیته) و انتشار حرارتی (به دلیل هدایت حرارتی) در یک سیال است. عدد پراتنل یک عامل بدون بعد حیاتی در تحلیل انتقال حرارت است که بینش‌هایی در مورد رفتار سیال و توانایی آن در انتقال حرارت به‌طور مؤثر فراهم می‌آورد. طراحی آزمایش و تحلیل داده‌ها نیز با استفاده از نرم‌افزار Design Expert انجام شده است. از طراحی مرکب مرکزی (CCD) برای ایجاد ماتریس آزمایشی استفاده شده است که اطمینان می‌دهد فضای آزمایشی به‌طور جامع بررسی شود و امکان ارزیابی اثرات خطی و درجه دوم متغیرهای مستقل بر پاسخ فراهم آید. جدول ۳ متغیرهای فرآیندی و داده‌های CFD مربوطه Nu_{CFD} را ارائه می‌دهد. متغیرهای مستقل در بازه‌های زیر تغییر می‌کنند: عدد رینولدز (Re) از ۱۰ تا ۱۵۰۰، عدد پراتنل (Pr) از ۰.۷۱۷۱۸ تا ۰.۷۱۸۶۸، فرکانس از ۰.۱۲۵ تا ۱ هرتز و دامنه بدون بعد (Ae/H) از ۰.۰۵ تا ۰.۳۳.

یک رابطه دارای ضریب تعیین (R^2) بسیار عالی به مقدار ۰.۹۸۸ و خطای نسبی میانگین ۱.۷٪ داده شده است. این مقدار R^2 نشان می‌دهد که مدل ۹۸.۸٪ از تغییرات داده‌ها را توضیح می‌دهد. به عبارت دیگر، مدل بسیار خوب قادر است رابطه میان متغیرها را شبیه‌سازی کرده و می‌تواند به‌طور قابل اعتماد برای پیش‌بینی در دامنه داده‌هایی که برای توسعه آن استفاده شده‌اند، به کار رود. بنابراین، معادله (۱۱) می‌تواند برای برآورد نسبت عملکرد حرارتی در شرایط مشابه برای طراحی‌ها و تحلیل‌های آینده استفاده شود.

$$TPR = 101.99(Re^{-0.0412} Pr^{13.023} f^{0.0015} \frac{Ae}{H})^{-0.0114}$$

(۱۱)

سلول) و چهارم (با ۱۳۰,۰۰۰ سلول) وجود دارد؛ از این رو، شبکه سوم با ۷۳,۰۰۰ سلول برای ادامه شبیه‌سازی‌ها مناسب تشخیص داده شد.

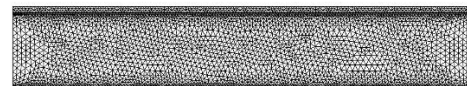
شکل ۲ شبکه محاسباتی را در ناحیه FSI (قسمت میانی صفحه بالایی) نشان می‌دهد که از ترکیبی از عناصر مثلثی و چهارضلعی تشکیل شده است. در این ناحیه، به منظور ثبت دقیق اثرات لایه مرزی، وضوح شبکه در نزدیکی دیواره بالاتر است (شکل ۲ الف). همچنین، در شبیه‌سازی‌های ALE (روش‌های شبکه متحرک)، شبکه اطراف جسم جامد همراه با حرکت آن تغییر شکل می‌دهد که در شکل ۲ ب نشان داده شده است.

جدول ۲. میانگین زمانی و مکانی عدد ناسلت و افت فشار برای

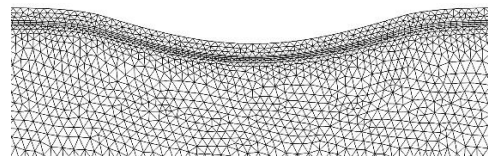
$$Re=600 \text{ و } \frac{Ae}{H}=0.19 \text{ و } f=0.5 \text{ Hz}$$

#	مورد ۱	مورد ۲	مورد ۳	مورد ۴
تعداد	۱۱۲۵	۲۵۵	۷۳۰۰	۱۳۰۰
تعداد سلول	۰	۵۷	۰	۰
\bar{Nu}	۷۹.۱۱	۰.۱۱	۹۳.۱۱	۹۳.۱۱
	۶۷۵	۸۷۲	۲۰۳	۱۲۹
ΔP (pa)	۲۱.۹۳	۰.۲۱	۴۷.۲۲	۴۸.۲۲
		۹۷		

الف



ب



شکل ۲. مش مسأله الف) مش غیرهمشکل کل میکروکانال ب) شبکه

دیواره مسأله حین نوسان

۳ نتایج و بحث

۳.۱ اعتبارسنجی

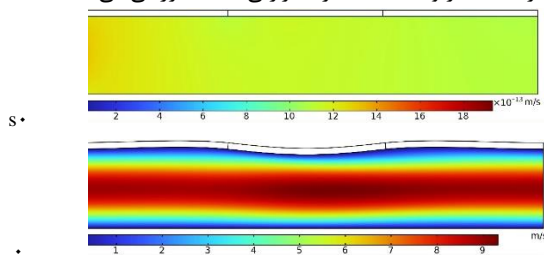
در این بخش، برای اعتبارسنجی مدل محاسباتی، یک میکروکانال با ابعاد مشابه مطالعات (Dadvand et al., 2019) و با استفاده از آب به‌عنوان سیال بررسی شده است. سطح بالای میکروکانال در دمای ثابت ۳۰۰ کلون نگه‌داشته می‌شود و سیال با پروفایل جریان خطی توسعه‌یافته وارد کانال می‌شود. نتایج مدل جریان جبرانی میکروکانال با نتایج مدل عددی (Dadvand et al., 2019) و مدل‌های ارائه‌شده توسط (SHAH, 1972) مقایسه شده است. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که تغییرات عدد ناسلت (Nu) در امتداد میکروکانال، در شبیه‌سازی حاضر و در مطالعات قبلی مشابه است. این کاهش در Nu به دلیل کاهش تفاوت دمایی بین دیواره و سیال در طول جریان است. همچنین، نتایج شبیه‌سازی حاضر به مقدار محدود $Nu=3.66$ که توسط (SHAH, 1972) برای حالت کاملاً توسعه‌یافته پیشنهاد شده است، نزدیک می‌شود، که نشان‌دهنده همگرایی خوب مدل است. توافق نتایج شبیه‌سازی با مطالعات قبلی، دقت و

جدول ۳. متغیرهای فرآیندی و داده های دینامیک سیالات محاسباتی

Re	Pr	St	Ae/H	\overline{Nu}_{CFD}
755	0.71769	4.311800E-05	0.19	12.85188
1127.5	0.71724	4.281800E-05	0.26	14.94868
382.5	0.71721	4.207270E-05	0.12	9.68844
382.5	0.71718	1.262180E-04	0.26	10.12041
382.5	0.71816	1.291660E-04	0.12	9.5283
755	0.71868	4.414620E-05	0.19	12.63693
1127.5	0.7182	1.460620E-05	0.26	14.702
755	0.71774	8.623660E-05	0.19	11.43521
755	0.7177	4.311830E-05	0.33	13.42861
382.5	0.71718	4.207270E-05	0.26	10.12005
755	0.71772	4.311830E-05	0.05	11.95798
1127.5	0.7182	4.381860E-05	0.26	14.70243
382.5	0.71721	1.262180E-04	0.12	9.6885
382.5	0.71816	4.305520E-05	0.12	9.52824
1500	0.71773	2.170330E-05	0.19	16.47874
382.5	0.71813	4.305520E-05	0.26	9.95328
1127.5	0.71822	4.381860E-05	0.12	14.02903
755	0.71835	4.311830E-05	0.19	12.85188
10	0.71835	3.302730E-03	0.19	1.79343
1127.5	0.71725	4.281800E-05	0.12	14.26576
1127.5	0.71724	1.427270E-05	0.26	14.94827
1127.5	0.71822	1.460620E-05	0.12	14.02895
1127.5	0.71725	1.427270E-05	0.12	14.26568
755	0.71769	1.050160E-05	0.19	12.90835
382.5	0.71813	1.291660E-04	0.26	9.95364
755	0.71729	4.211550E-05	0.19	13.06396

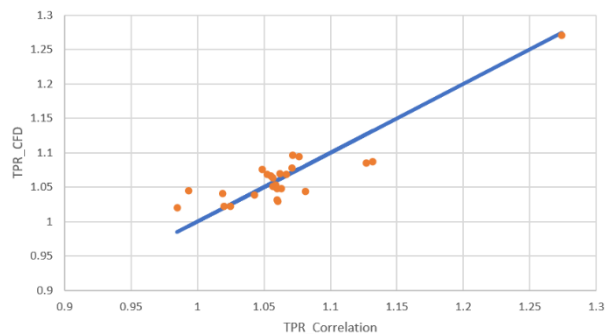
که در آن TPR نسبت عملکرد حرارتی است و به ترتیب f_o و Nu_o عدد ناسلت و عامل اصطکاک میکروکانال با دیواره ثابت به عنوان مینا هستند. این معیار نشان می‌دهد که یک طراحی زمانی قابل قبول است که نسبت آن بیشتر از یک باشد. به عبارت دیگر، افزایش عدد ناسلت که نشان‌دهنده بهبود انتقال حرارت است، باید بیشتر از افزایش افت فشار نسبت به مینا باشد. به عبارت دیگر، مزایای عملکردی بهبود انتقال حرارت باید هزینه‌های انرژی اضافی ناشی از افزایش افت فشار را جبران کند. همانطور که قبلاً ذکر شد، در بخش بهینه‌سازی، تمرکز بر بهبود انتقال حرارت بود.

شرایط بهینه حرارتی در عدد رینولدز (Re) معادل ۱۰، عدد پراوندتل (Pr) معادل ۰.۷۱۸۶۸، فرکانس (f) معادل ۰.۱۲۵ هرتز، و دامنه (Ae) معادل ۰.۱۶۵ میلی متر شناسایی شد. با این حال، تأثیر پارامترهای مورد مطالعه بر افت فشار برای بهینه‌سازی چندهدفه تحلیل نشده است. این مطالعه به‌طور خاص تأثیر دامنه را بر افت فشار و نسبت عملکرد حرارتی (TPR) بررسی می‌کند.



س۵

در شکل ۴. مقایسه بین معادله (۱۱) و داده های بدست آمده از شبیه سازی گرفته است. این تصویر نشان می‌دهد که رابطه ارائه شده مطابقت قابل قبولی با داده های CFD دارد.



شکل ۴. مقایسه بین معادله نسبت عملکرد حرارتی (۱۱) کورولیشن با

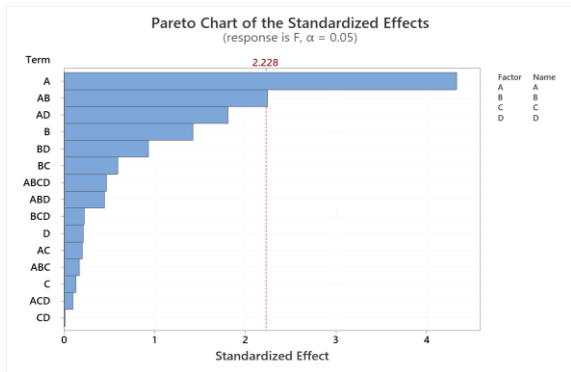
داده های CFD

۳.۳ عملکرد کلی میکروکانال با دیواره نوسانی

برای درک بهتر مزایای استفاده از دیواره‌های نوسانی، از یک معیار عملکرد شناخته شده، یعنی نسبت عدد ناسلت میانگین به عامل اصطکاک یا افت فشار، استفاده می‌شود:

$$TPR = \frac{Nu/Nu_o}{(f/f_o)^{1/3}} \quad (12)$$

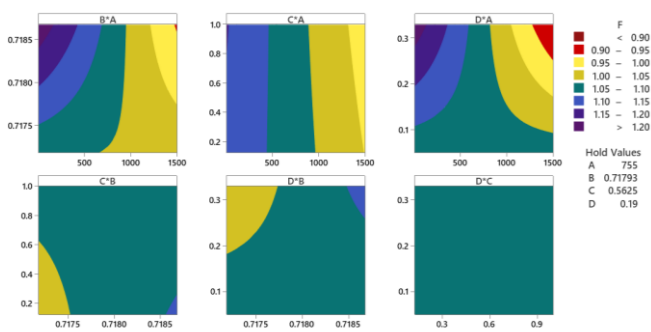
(۱۲)



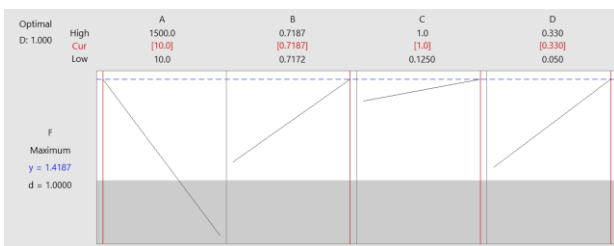
شکل ۷. مقایسه بین تاثیر ضرایب مختلف مسأله بر روی عدد ناسلت Nu
(A=Re, B=Pr, C=St, D=A_v/H)

در شکل های ۷ و ۸، تاثیر هر کدام از پارامترهای موثر در مسأله و ضریب تاثیر گروهی آنها را بر روی انتقال حرارت نشان می دهد. همانگونه که مشاهده می شود عدد رینولدز دارای بیشترین تاثیر در انتقال است. اما افزایش عدد رینولدز همراه با هزینه های انرژی و اقتصادی است، از این رو سعی می شود با تغییرات در هندسه مسأله موجب افزایش آشفستگی جریان شد و انتقال حرارت از میکروکانال را بهبود بخشید.

Contour Plots of F

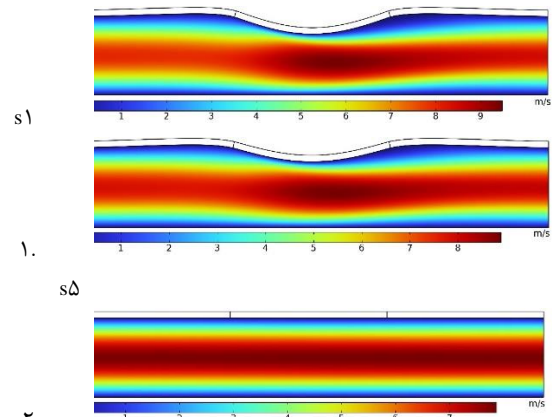


شکل ۸. کانتورهای مربوط به تاثیر همزمان پارامترهای موثر در مسأله



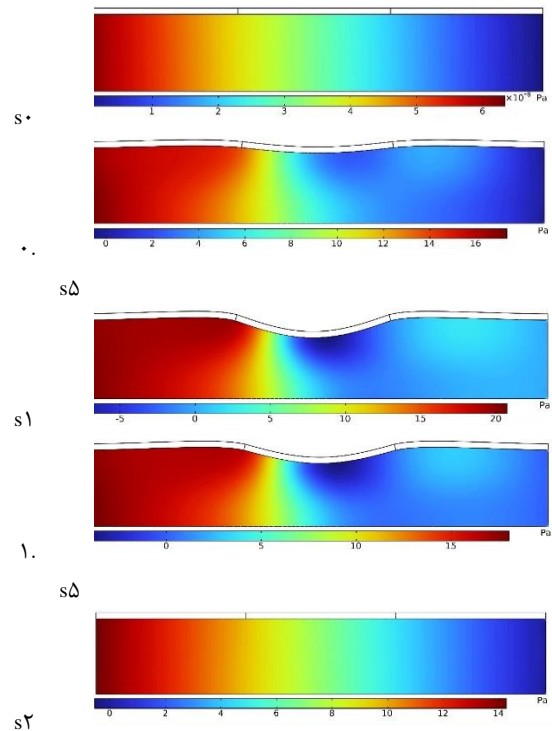
شکل ۹. نتایج بهینه سازی دو هدفه میکروکانال با دیواره الاستیک
(A=Re, B=Pr, C=St, D=A_v/H)

در شکل ۹. نتایج حاصل از بهینه سازی نشان داده شده است. هدف از این بهینه سازی، بیشینه سازی انتقال حرارت و کمینه سازی افت فشار در میکروکانال است. با توجه به نتایج بهینه سازی می توان دریافت که مدل در اعداد رینولدز پایین دارای انتقال حرارت بیشتر و افت فشار کمتر است، که این موضوع منجر به افزایش نسبت عملکرد حرارتی میکروکانال تحت این شرایط می شود. با بررسی دیگر پارامترهای موثر در مسأله می توان دریافت که دامنه دیواره الاستیک تاثیر بسزایی در افزایش انتقال حرارت در میکروکانال دارد که با ترکیب آن با اعداد رینولدز پایین می توان عدد ناسلت را افزایش داد بدون اینکه افت فشار در طول کانال افزایش یابد. همچنین دوره تناوب دیواره الاستیک نشان دهنده مدت زمان طی کردن سیکل دیواره الاستیک است. با افزایش دامنه دیواره الاستیک سطح مقطع عبوری جریان کاهش می یابد و منجر به افزایش سرعت جریان در آن مقطع می شود، این افزایش سرعت به



شکل ۵. کانتورهای سرعت در زمان مختلف در

$$Re = 600 \text{ و } A_v/H = 0.19 \text{ و } f = 0.5 \text{ Hz}$$



شکل ۶. کانتورهای فشار در زمان مختلف در

$$Re = 600 \text{ و } A_v/H = 0.19 \text{ و } f = 0.5 \text{ Hz}$$

در شکل های ۵ و ۶، کانتورهای فشار و سرعت در زمان های متفاوت را نشان می دهند. در این شکل ها نحوه سازوکار دیواره الاستیک و چگونگی تغییرات آن با زمان نشان داده شده است. با افزایش فرکانس دیواره الاستیک تعداد نوسان دیواره در یک ثانیه افزایش می یابد، و با افزایش دامنه دیواره الاستیک سطح مقطع عبوری جریان کاهش می یابد که باعث افزایش سرعت و افت فشار در راستای دیواره می شود.

passive oscillation of a flexible vortex generator. *Chemical Engineering Science*, 207, 556-580.

Dixit, T., & Ghosh, I. (2015). Review of micro-and mini-channel heat sinks and heat exchangers for single phase fluids. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 41, 1298-1311.

Donea, J., Huerta, A., Ponthot, J. P., & Rodríguez-Ferran, A. (2004). Arbitrary L agrangian-E ulerian Methods. *Encyclopedia of computational mechanics*.

Gao, Q., Lizarazo-Adarme, J., Paul, B. K., & Haapala, K. R. (2016). An economic and environmental assessment model for microchannel device manufacturing: part 1-Methodology. *Journal of cleaner production*, 120, 135-145.

Hetsroni, G., Mosyak, A., Pogrebnyak, E., & Yarín, L. (2005). Heat transfer in micro-channels: Comparison of experiments with theory and numerical results. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 48(25-26), 5580-5601.

Khan, M. G., & Fartaj, A. (2011). A review on microchannel heat exchangers and potential applications. *International journal of energy research*, 35(7), 553-582.

Kose, H. A., Yildizeli, A., & Cadirci, S. (2022). Parametric study and optimization of microchannel heat sinks with various shapes. *Applied Thermal Engineering*, 211, 118368.

SHAH, R. K. (1972). *Laminar flow forced convection heat transfer and flow friction in straight and curved ducts--a summary of analytical solutions*. Stanford University.

Turek, S., & Hron, J. (2006). *Proposal for numerical benchmarking of fluid-structure interaction between an elastic object and laminar incompressible flow*. Springer.

Wen, J., Li, K., Wang, C., Zhang, X., & Wang, S. (2019). Optimization investigation on configuration parameters of sine wavy fin in plate-fin heat exchanger based on fluid structure interaction analysis. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 131, 385-402.

Zăvoianu, A.-C., Lughofer, E., Pollak, R., Meyer-Heye, P., Eitzinger, C., & Radauer, T. (2017). Multi-objective knowledge-based strategy for process parameter optimization in micro-fluidic chip production. 2017 IEEE Symposium Series on Computational Intelligence (SSCI).

Zhao, L., Yu, K., Wu, W., He, Y., Dong, H., & Wang, J. (2023). Effects of elastic micropillar array on the hydrothermal characteristics of a microchannel heat sink. *Thermal Science and Engineering Progress*, 46, 102223.

Zhuang, D., Yang, Y., Ding, G., Du, X., & Hu, Z. (2020). Optimization of microchannel heat sink with rhombus fractal-like units for electronic chip cooling. *International Journal of Refrigeration*, 116, 108-118.

فرکانس یا دوره تناوب و دامنه سطح الاستیک بستگی دارد که با بهینه سازی انجام شده می توان با صرفه جویی انرژی بیشترین بازده را از نظر حرارتی از آن بهره مند شد.

۴ نتایج

این مقاله یک مدل در حال توسعه برای یک میکروکانال با دیواره الاستیک را برای افزایش انتقال حرارت و کاهش افت فشار ارائه داده است. اعتبار سنجی کار حاضر با کارهای پیشین نشان دهنده دقت شبیه سازی است. ۲۵ مورد آزمایش انجام شده نشان دهنده تاثیر فرکانس و دامنه دیواره الاستیک بر روی نسبت عملکرد حرارتی است. نسبت عملکرد حرارتی یک رابطه غیرخطی با فرکانس دیواره الاستیک دارد و عدد ناسلت با دامنه دیواره الاستیک یک رابطه مستقیم دارد. برهمکنش هایی بین افت فشار و دامنه الاستیک وجود دارد که نیاز به بررسی در مطالعات آتی دارد. یک رابطه جدید نیز برای نسبت عملکرد حرارتی ارائه شده است که می تواند رفتار این ضریب را به ازای پارامترهای موثر در مسأله را پیش بینی کند. هدف اصلی این مقاله بهینه سازی چندهدفه میکروکانال با دیواره الاستیک در حال نوسان در یک دامنه و فرکانس قابل تغییر بوده که با ارائه نقطه بهینه همراه شده است به نحوی که بیشینه عدد ناسلت و کمینه افت فشار یا بیشترین نسبت عملکرد حرارتی را دارا باشیم. نقطه بهینه بدست آمده عبارت است از $Re=10$, $f=0.125$ Hz, $Ae=0.165$ mm, $T_{in}=279.75$ که این نقطه دارای نسبت عملکرد $TPR=1.3294$ می باشد، که نسبت عملکرد حرارتی محاسباتی شده $TPR=1.295$ می باشد که دارای مطابقت قابل قبولی است.

مطالعات آتی بایستی هندسه های پیچیده تر با دیواره الاستیک را بررسی کرده و تاثیر آن را بر روی مختصه های انتقال حرارت و افت فشار را نشان دهند. همچنین می توان تاثیر همزمان دیواره الاستیک با مولدهای گرداب همچنین، تاثیر همزمان دیواره الاستیک با مواد متخلخل را بررسی کرد.

۵ منابع

Chakraborty, D., Prakash, J. R., Friend, J., & Yeo, L. (2012). Fluid-structure interaction in deformable microchannels. *Physics of Fluids*, 24(10).

Dadvand, A., Hosseini, S., Aghebatandish, S., & Khoo, B. C. (2019). Enhancement of heat and mass transfer in a microchannel via

Prediction of density, solubility parameter and diffusion coefficient of acetic acid in n-butyl acetate using molecular dynamics simulation

Hojatollah Moradi ^{1,*} and Hedayat Azizpour ¹

¹ School of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, University of Tehran, I.R. Iran

E-mails: hojatollah.moradi@ut.ac.ir ; h.azizpour@ut.ac.ir

* Corresponding Author

Abstract

In this study, molecular dynamics simulation was used to predict the density, solubility parameter, and molecular diffusion coefficient of acetic acid in n-butyl acetate. The solubility parameters of acetic acid and n-butyl acetate were predicted and compared using four force fields COMPASS, Dreiding, Universal and Cvff. The highest accuracy for predicting the solubility parameter of acetic acid and n-butyl acetate molecules was obtained by the COMPASS force field with an error percentage of 0.92 and 2.43%, respectively. To predict the density of molecules, 100 molecules with a duration of 100 ps were used. With increasing simulation time and the number of molecules, the simulation calculation time increased due to increased intermolecular interactions and had little effect on the density prediction. Also, the diffusion coefficient of acetic acid in n-butyl acetate in the temperature range of 293.15-303.15 K and atmospheric pressure was predicted using molecular dynamics simulations. As the temperature increases, due to the increase in the size of the box, the atoms move faster, causing an increase in the molecular diffusion coefficient. Finally, using the results of molecular dynamics simulation, the Arrhenius behavior of the molecular diffusion coefficient was investigated and the results were compared with the Wilk-Chang, Scheibel, and Reddy-Doraiswamy equations.

Keywords

Molecular dynamics simulation, Solubility parameter, Molecular diffusion coefficient, Acetic acid, n-butyl acetate.

پیش‌بینی چگالی، پارامتر حلالیت و ضریب نفوذ استیک اسید در n-بوتیل استات با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی

حجت اله مرادی^{۱*} و هدایت عزیزپور^۱

دانشکده مهندسی شیمی، دانشکده‌گان فنی، دانشگاه تهران، ایران

ایمیل نویسنده‌گان: hajjatollah.moradi@ut.ac.ir ، h.azizpour@ut.ac.ir

چکیده

در این مطالعه از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی برای پیش‌بینی چگالی، پارامتر حلالیت و ضریب نفوذ مولکولی استیک اسید در n-بوتیل استات استفاده شد. پارامتر حلالیت استیک اسید و n-بوتیل استات با استفاده از چهار میدان نیروی COMPASS، Dreiding، Universal و Cvff، پیش‌بینی و با هم مقایسه شدند. بیشترین دقت برای پیش‌بینی پارامتر حلالیت مولکول‌های استیک اسید و n-بوتیل استات توسط میدان نیروی COMPASS به ترتیب با درصد خطای ۰/۹۲ و ۲/۴۳٪ به دست آمد. برای پیش‌بینی چگالی از ۱۰۰ مولکول و همچنین مدت زمان ۱۰۰ ps استفاده شد. با افزایش زمان شبیه‌سازی و همچنین تعداد مولکول‌ها، زمان محاسبات شبیه‌سازی به دلیل افزایش برهمکنش‌های بین مولکولی افزایش یافته که تاثیر چندانی بر روی پیش‌بینی چگالی ندارند. همچنین ضریب نفوذ استیک اسید در n-بوتیل استات در محدوده دمایی ۳۰۳/۱۵ K - ۲۹۳/۱۵ K و فشار اتمسفری با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پیش‌بینی شد. با افزایش دما، به دلیل افزایش اندازه جعبه، اتم‌ها سریعتر حرکت کرده و سبب افزایش ضریب نفوذ مولکولی می‌شود. در پایان با استفاده از نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، رفتار آرنیوسی ضریب نفوذ مولکولی را بررسی کرده و نتایج حاصل با معادلات ویلک-چانگ، شایبل و ردی-دوراسیسوا نیز مقایسه گردید.

کلمات کلیدی

شبیه‌سازی دینامیک مولکولی، پارامتر حلالیت، ضریب نفوذ مولکولی، استیک اسید، n-بوتیل استات.

نام نویسنده مسئول: حجت اله مرادی

ایمیل نویسنده مسئول: hajjatollah.moradi@ut.ac.ir

تاریخ ارسال مقاله: ۱۴۰۳/۱۲/۱۸

تاریخ(های) اصلاح مقاله: ۱۴۰۴/۰۱/۱۹

تاریخ پذیرش مقاله: ۱۴۰۴/۰۱/۲۰

۱- مقدمه

احتمال اختلاط ناپذیر بودن آنها بیشتر است. هنگامی که پارامتر حلالیت حلال و حل شونده به هم نزدیک باشند، به دلیل اینکه انرژی برهمکنش غیرپیوندی در هنگام اختلاط به تعادل می‌رسند، که از نظر ترمودینامیک با هم مخلوط و در هم حل می‌شوند [۴]. پارامتر حلالیت یک حلال را می‌توان از روش‌های مختلف مانند اندازه‌گیری تجربی، استفاده از معادلات تجربی یا از طریق روش‌های شبیه‌سازی مولکولی محاسبه کرد. اما با توجه به اینکه معادلات تجربی کمی در این زمینه وجود داشته و یا اینکه بررسی نتایج تجربی در دماها و برای حلال‌های مختلف بسیار وقت‌گیر و پرهزینه می‌باشد، استفاده از روش‌های دینامیک مولکولی در دو دهه اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته شده است [۵-۱۴].

ژانگ^۲ و همکارانش [۱۵]، پارامتر حلالیت حلال فوق بحرانی دی اکسید کربن و فوق بحرانی دی اکسید کربن با کمک حلال^۴ را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی بررسی کردند. نتایج محاسبه شده نشان می‌دهد که پارامتر حلالیت حلال SC-CO₂ خالص و پارامتر حلالیت SC-CO₂ همراه حلال، هر دو با افزایش دما کاهش و با افزایش فشار افزایش و با افزایش چگالی آنها به صورت خطی افزایش می‌یابند. در مطالعه‌ای دیگر سیستلا^۵ و همکارانش [۱۶]، تعدادی

اسید استیک در صنایع نساجی، دارویی، رنگ‌سازی و سایر صنایع تولید می‌شود و از طریق فاضلاب وارد محیط زیست می‌شود. بازیافت اسید استیک از فاضلاب باعث صرفه‌جویی و همچنین جلوگیری از آلودگی محیط زیست می‌شود [۱]. زمانی که غلظت اسید استیک بسیار کم باشد، بازیابی آنها بسیار دشوار است. برای استخراج اسید استیک می‌توان از روش‌های جداسازی مانند جذب، استخراج، تقطیر استفاده کرد [۲]. استخراج مایع-مایع زمانی مورد استفاده قرار می‌گیرد که روش‌های مستقیم مانند تقطیر و تبلور^۱ قابل استفاده نباشند یا بسیار پرهزینه باشند.

برای استخراج اسید استیک می‌توان از حلال‌های مختلفی مانند تولوئن، بنزن، کربن تترا کلراید، n-بوتانول یا n-بوتیل استات استفاده نمود. اما انتخاب یک یا دو حلال مناسب برای این کار بسیار وقت‌گیر و هزینه‌بردار است بنابراین بایستی از نتایج تجربی دیگران استفاده نمود که ممکن است برای سیستم شیمیایی مورد نظر کار تجربی انجام گرفته نشده باشد. بنابراین در استخراج مایع-مایع، انتخاب حلال مناسب تاثیر زیادی بر روی هزینه‌های فرآیند استخراج دارد.

یک روش ساده برای انتخاب حلال مناسب، استفاده از مفهوم قطبیت^۲ و پارامتر حلالیت اجزاء است [۳]. هر چه اختلاف قطبیت بین دو مایع بیشتر باشد،

^۴ SC-CO₂-cosolvent

^۵ Sistla et al.

^۱ Crystallization

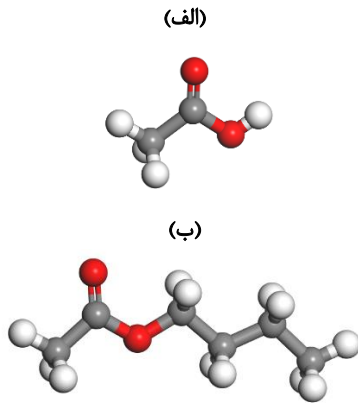
^۲ Polarity

^۳ Zhang et al.

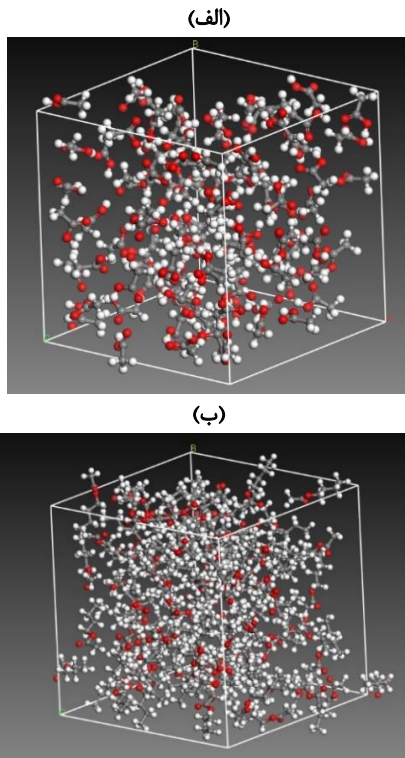
برای مقایسه نتایج تجربی و شبیه‌سازی شده از درصد خطا (معادله ۱) استفاده شد.

$$\text{Error (\%)} = 100 \times \left| \frac{y^{exp} - y^{MD}}{y^{exp}} \right| \quad (1)$$

که در آن y^{exp} مقدار تجربی و y^{MD} مقدار شبیه‌سازی می‌باشد.



شکل ۱: ساختار شیمیایی الف) استیک اسید، ب) n-بوتیل استات



شکل ۲: سل آمورف الف) استیک اسید، ب) n-بوتیل استات در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm

۲-۱- پارامتر حلالیت

پارامتر حلالیت (δ) در سال ۱۹۱۶ توسط هیلدبراند^۶ [۱۸]، ارائه گردید و در سال ۱۹۳۱ توسط اسکاچارد^۷ [۱۹] توسعه داده شد. پارامتر حلالیت هیلدبراند، به صورت ریشه مربع دانسیته انرژی چسبندگی تعریف می‌شود

مایعات یونی^۱ را برای جذب کربن دی اکسید و جداسازی آن از مخلوط گاز دودکش بر اساس پارامتر حلالیت هیلدبراند غربال کردند. پارامترهای حلالیت مایعات یونی با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و با نرم‌افزار Materials Studio محاسبه شد. از تمام مایعات یونی مورد مطالعه، مقادیر پارامتر حلالیت مایعات یونی مبتنی بر کاتیون فسفونیوم^۲ (۲۰/۷ MPa^{0.5} - ۱۸/۳) و مایعات یونی حاوی آنیون تریستری فلوروفسفات^۳ (۲۰/۵ MPa^{0.5} - ۱۸/۳) به دی اکسید کربن نزدیکتر است (۱۷/۸۵ MPa^{0.5})، و به طور قابل توجهی از گازهای دودکش دیگر مانند CH₄، N₂ و H₂ فاصله دارند. بنابراین، با استفاده از مایعات یونی مبتنی بر آنیون فلئوردار و کاتیون فسفونیوم، می‌توان دی اکسید کربن بیشتری از گازهای دودکش جدا کند. در مطالعه‌ای که روجاس و همکارانش^۴ [۶] بر روی استخراج بنزن از دودکان با استفاده از حلال‌های قطبی و مایعات یونی انجام دادند، بر اساس تجزیه و تحلیل پروفایل‌های چگالی (رسم چگالی بنزن در جهت Z)، به این نتیجه رسیدند که تمام حلال‌های قطبی مورد مطالعه در این کار قادر به جذب بنزن هستند، در حالی که دودکان در این حلال‌ها اختلاط‌ناپذیر می‌باشد.

در این مطالعه، برای پیش‌بینی پارامتر حلالیت استیک اسید و n-بوتیل استات ابتدا میدان نیروی و تعداد مولکول‌های بهینه را به دست خواهیم آورد. سپس با استفاده از میدان نیروی مناسب ضریب نفوذ مولکولی استیک اسید در n-بوتیل استات در غلظت ۳ wt% و در محدوده دمایی ۳۰۳/۱۵ K - ۲۹۳/۱۵ K محاسبه و با معادلات ویلک-چانگ، شایبل و ردی-دوراسیسوا مقایسه می‌شود. سپس با نتایج به دست آمده از شبیه‌سازی، رفتار آرنیوسی ضریب نفوذ مولکولی را بررسی کرده و ضریب نفوذ مولکولی را در محدوده دمایی ۳۵۳/۱۵ K - ۲۹۳/۱۵ پیش‌بینی و بررسی خواهد شد.

۲- تئوری

شکل ۱، ساختار شیمیایی استیک اسید و n-بوتیل استات را نشان می‌دهد. برای استفاده از این مولکول‌ها ابتدا با ساختار آنها را بهینه کرده تا پایدارترین ساختار را ایجاد کنند و از مولکول‌های بهینه در ساخت سل آمورف (جعبه) استفاده شود. برای بهینه کردن مولکول‌ها از میدان نیروی COMPASS^۵ استفاده شد. برای برهم کنش‌های الکترواستاتیک و van der Waals به ترتیب از روش جمع Ewald با دقت ۰/۰۱ kcal/mol و از روش جمع Atom based با فاصله قطع^۶ ۱۲/۵ Å استفاده شد [۱۷]. شکل سه بعدی جعبه استیک اسید و n-بوتیل استات را در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm، در شکل ۲ نشان داده شده است. پیش‌بینی چگالی برای محاسبه پارامتر حلالیت و ضریب نفوذ مولکولی بسیار مهم می‌باشد، به همین دلیل برای هر دما و فشاری ابتدا چگالی را با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی محاسبه کرده سپس با چگالی به دست آمده، سل آمورف را برای محاسبه پارامتر حلالیت و ضریب نفوذ مولکولی ساخته می‌شود. برای پیش‌بینی چگالی از هنگرد هم-دما-هم-فشار^۷ با گام زمانی^۸ ۱ fs استفاده می‌شود. همچنین در محاسبه چگالی از ترموستات Velocity scale و باروستات Berendsen استفاده خواهد شد.

⁶ Cut off

⁷ Isothermal-Isobaric ensemble

⁸ Timesteps

⁹ Hilderbrand

¹⁰ Scatchard

¹ Ionic liquids

² Phosphonium cation

³ Tristrifluorophosphate anion

⁴ Rojas et al.

⁵ Condensed-phase Optimized Molecular Potentials for Atomistic Simulation Studies

$$D = \frac{1}{6N_a} \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^{N_a} \langle [r_i(t) - r_i(0)]^2 \rangle \quad (4)$$

که در آن N_a تعداد اتم‌های پخش شده در سیستم و $r_i(t)$ بردار جابجایی مولکول i در زمان t می‌باشد. جهت محاسبه ضریب نفوذ نمودار MSD بر حسب زمان را رسم کرده و بهترین خطی ($MSD = a \times t + b$) که از این نقاط می‌گذرد را رسم کرده، که با استفاده از معادله ۵ ضریب نفوذ را محاسبه می‌کنیم [۲۸]:

$$D = \frac{a}{6} \quad (5)$$

چون قسمت ابتدایی MSD به حرکت بدون برخورد ماده حل شده اشاره دارد و با زمان رفتار خطی ندارد بایستی از محاسبه ضریب نفوذ حذف شود [۲۹]. برای رسم نمودار MSD بر حسب زمان، پس از ساخت سل آمورف و بهینه‌سازی هندسی آن، سل در محدوده دمایی K ۲۰۰-۴۰۰ بهینه می‌شود. سپس برای رسیدن به حالت تعادل، در ابتدا هنگرد کانونی [۳۰-۳۲] به مدت ۵۰ ps بر روی سیستم توسط ترموستات Velocity Scale اعمال خواهد شد. و در نهایت هنگرد کانونی کوچک^۹ [۳۰، ۳۱، ۳۳] بر روی سیستم اعمال می‌شود تا به حالت تعادل برسد. همچنین ضریب نفوذ استیک اسید در n-بوتیل استات با استفاده از معادلات ویلک-چانگ^{۱۰} [۳۴] (معادله ۶)، شایبل^{۱۱} [۳۵] (معادله ۷) و ردی-دوراسیسوا^{۱۲} [۳۶] (معادله ۸) محاسبه و با نتایج شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و تجربی مقایسه گردید.

$$D_{AB} = \frac{117 \cdot 3 \times 10^{-18} (\phi M_B)^{1/2} T}{\mu V_A^{0.6}} \quad (6)$$

$$D_{AB} = 8 \cdot 2 \times 10^{-8} \left[1 + \left(\frac{3V_B}{V_A} \right)^{2/3} \right] \left[\frac{T}{\mu_{AB} V_A^{1/3}} \right] \quad (7)$$

$$D_{AB} = 10 \times 10^{-8} \left[\frac{T}{\mu_B} \right] \left[\frac{M_B^{1/2}}{V_A^{1/3} V_B^{1/3}} \right] \quad \text{for } \frac{V_B}{V_A} < 1.5 \quad (8)$$

$$D_{AB} = 8 \cdot 5 \times 10^{-8} \left[\frac{T}{\mu_B} \right] \left[\frac{M_B^{1/2}}{V_A^{1/3} V_B^{1/3}} \right] \quad \text{for } \frac{V_B}{V_A} > 1.5$$

۳- نتایج

۳-۱- انتخاب میدان نیروی مناسب برای پارامتر حلالیت

برای انتخاب میدان نیروی مناسب برای ادامه شبیه‌سازی و همچنین اعتبارسنجی نتایج حاصل از شبیه‌سازی، ابتدا پارامتر حلالیت استیک اسید و n-بوتیل استات را با استفاده از چهار میدان نیروی Dreiding، COMPASS، Universal و CFF^{۱۳}، با تعداد مولکول‌های ثابت (۱۰۰ مولکول) در دمای K ۲۹۸/۱۵ و فشار ۱ atm، محاسبه و با نتایج تجربی [۳۷] مقایسه گردید. در جدول ۱، می‌توان نتایج حاصل از شبیه‌سازی پارامتر حلالیت استیک اسید و n-بوتیل استات برای چهار میدان نیروی مختلف را مشاهده کرد. همانطور که از جدول ۱، می‌توان مشاهده کرد میدان نیروی COMPASS پارامتر حلالیت را برای هر دو مولکول استیک اسید و n-بوتیل استات با بیشترین دقت پیش‌بینی کرده است. درصد خطای پارامتر حلالیت به دست آمده برای استیک اسید و n-بوتیل استات به ترتیب ۰/۹۲ و ۲/۴۳٪ به دست آمد. بنابراین در ادامه شبیه

(معادله ۲):

$$\delta = \sqrt{\frac{E}{V_m}} = \left(\frac{\Delta H_v - RT}{V_m} \right)^{0.5} \quad (2)$$

انرژی چسبندگی (E)، انرژی مورد نیاز برای شکستن تعامل بین مولکول‌ها می‌باشد. که در آن، V_m حجم مولی (ml/mol)، ΔH_v آنتالپی مولی تبخیر^۱ (J/mol)، R ثابت گازها (J/mol.K) و T دما (K) می‌باشد.

هانسن^۲ [۲۰]، روش پارامتر هیلدبراند را به سه جزء پارامتر حلالیت پراکندگی^۳ (δ_d)، پارامتر حلالیت قطبی^۴ (δ_p) و پارامتر حلالیت پیوند هیدروژنی^۵ (δ_h) تقسیم کرد، که به عنوان پارامتر حلالیت سه بعدی شناخته می‌شود (معادله ۳):

$$\delta_t^2 = \delta_d^2 + \delta_p^2 + \delta_h^2 \quad (3)$$

اختلاف پارامتر حلالیت کل (δ_t) بین دو ترکیب ($\Delta \delta_t$) برای ارزیابی قابلیت اختلاط بین حلال و حل شونده استفاده می‌شود [۲۲]. گرینهاگ^۶ و همکارانش [۲۳] نشان دادند ترکیباتی که $\Delta \delta < 7 (MPa)^{0.5}$ باشد، به احتمال زیاد قابل اختلاط هستند، در حالیکه $\Delta \delta > 10 (MPa)^{0.5}$ نشان دهنده سیستم‌های غیر قابل اختلاط می‌باشند. همچنین فورستر^۷ و همکارانش [۲۴] نشان دادند ترکیباتی که $\Delta \delta < 2 (MPa)^{0.5}$ باشد با هم مخلوط می‌شوند به همین دلیل در سال‌های اخیر، توجه به پارامتر حلالیت هانسن برای انتخاب حلال مناسب افزایش یافته است.

محاسبه پارامتر حلالیت هانسن قبل از انجام آزمایش، به صرفه‌جویی در منابع و جلوگیری از هدر رفت حلال کمک می‌کند. روش‌های مختلف تجربی و نظری برای تخمین پارامتر حلالیت وجود دارد. با توجه به وقت‌گیر و پرهزینه بودن آزمایش‌ها برای محاسبه پارامتر حلالیت هانسن، در دو دهه گذشته از روش‌های شبیه‌سازی مانند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی به دلیل به دست آمدن نتایج قابل اعتماد و نداشتن مشکلات ذکر شده بسیار مورد توجه محققان قرار گرفته است [۱۵، ۱۶، ۲۵].

برای محاسبه پارامتر حلالیت با استفاده از نرم‌افزار Materials Studio، پس از ساخت سل آمورف در دما و فشار مورد نظر، برای به تعادل رسیدن شبیه‌سازی، به ترتیب از هنگرد کانونی (NVT) و هنگرد هم-دما-هم-فشار (NPT) [۱۷] با زمان شبیه‌سازی ۳۰ ps و گام زمانی ۱ fs [۱۵، ۱۷] استفاده شد. همچنین در همه شبیه‌سازی‌ها برای محاسبه پارامتر حلالیت هانسن از Velocity Scale و باروستات Berendsen استفاده شد [۱۵].

۲-۲- ضریب نفوذ

برای محاسبه ضریب نفوذ مولکولی، از معادله ۴ ضریب جابجایی مربع^۸ استفاده شد [۲۷]:

⁸ Mean Square Displacement (MSD)

⁹ Micro-Canonical ensemble

¹⁰ Wilke-chang

¹¹ Scheibel

¹² Reddy and Doraiswamy

¹³ Consistent Valence Force Field

¹ Molar enthalpy of vaporization

² Hansen

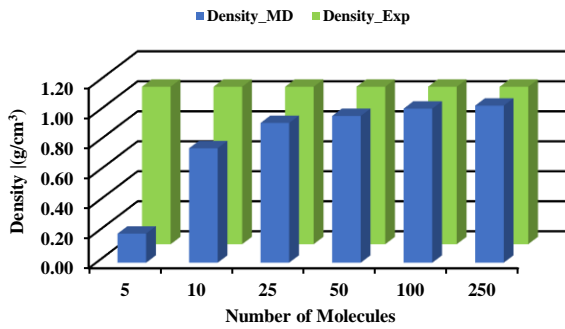
³ Dispersion

⁴ Polar

⁵ Hydrogen-bonding

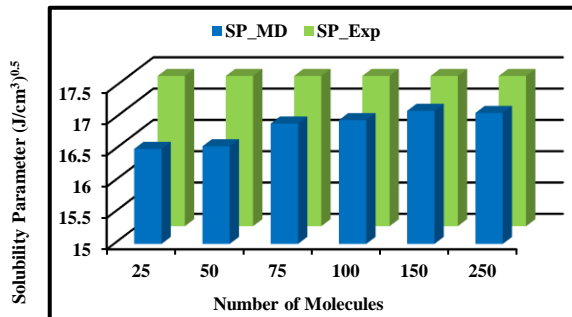
⁶ Greenhalgh et al.

⁷ Forster et al.



شکل ۳: تاثیر تعداد مولکول بر روی چگالی استیک اسید در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm

شکل ۴، تاثیر تعداد مولکولها بر روی پارامتر حلالیت n-بوتیل استات را نشان می‌دهد. در این قسمت از ۲۵ تا ۲۵۰ مولکول استفاده شد (از میدان نیروی COMPASS در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm استفاده شد). مانند تاثیر تعداد مولکول بر روی چگالی استیک اسید با افزایش تعداد مولکولها، خطای نتایج شبیه‌سازی با نتایج تجربی کاهش یافته اما زمان شبیه‌سازی به دلیل افزایش تعداد مولکولها نیز افزایش یافت. در این شبیه‌سازی درصد خطا برای ۱۰۰ و ۲۵۰ مولکول به ترتیب ۲/۴۳ و ۱/۷۷٪ به دست آمد. با توجه به نتایج به دست آمده برای چگالی استیک اسید و پارامتر حلالیت n-بوتیل استات، ۱۰۰ مولکول به عنوان تعداد مولکول بهینه در نظر گرفته شد و با افزایش بیشتر تعداد مولکولها یا ابعاد سل تاثیر زیادی بر روی چگالی و پارامتر حلالیت نداشته و تنها زمان شبیه‌سازی افزایش می‌یابد.



شکل ۴: تاثیر تعداد مولکول بر روی پارامتر حلالیت n-بوتیل استات در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm

۳-۳- تاثیر زمان شبیه‌سازی بر روی چگالی

در شکل ۵، تغییرات چگالی بر حسب زمان شبیه‌سازی تا ۱۰۰ ps، برای استیک اسید (۴-الف) و n-بوتیل استات (۴-ب) در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm نشان داده شده است. برای پیش‌بینی چگالی از میدان نیروی COMPASS و تعداد ۱۰۰ مولکول استفاده شد. با افزایش زمان شبیه‌سازی از ۱۰۰ ps به ۲۰۰ ps، چگالی پیش‌بینی شده به مقدار واقعی نزدیکتر شده (مقدار خطای چگالی پیش‌بینی شده در ۱۰۰ ps و ۲۰۰ ps به ترتیب ۲/۵ و ۱/۵٪ به دست آمد)، و با افزایش بیشتر زمان شبیه‌سازی منحنی چگالی به صورت خط راست درآمده و فقط تعداد محاسبات افزایش یافته، که تاثیر زیادی بر روی چگالی پیش‌بینی شده ندارد، به همین دلیل در ادامه شبیه‌سازیها برای پیش-بینی چگالی از مدت زمان ۱۰۰ ps استفاده می‌شود.

سازیها از میدان نیروی COMPASS استفاده خواهد شد.

با توجه به اینکه در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm، اختلاف پارامتر حلالیت استیک اسید و n-بوتیل استات $(J/cm^3)^{0.5}$ می‌باشد می‌توان به این نتیجه رسید که در این دما و فشار استیک اسید و n-بوتیل استات با هم قابل اختلاط می‌باشند. با توجه به اینکه استیک اسید خاصیت قطبی و غیرقطبی دارد و به دلیل گروه متیل در حلال‌های غیرقطبی نیز قابل اختلاط می‌باشد [۳۸].

جدول ۱- مقایسه میدان نیروهای مختلف برای پیش‌بینی پارامتر حلالیت استیک اسید و n-بوتیل استات، با ۱۰۰ مولکول و در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm

استیک اسید			
درصد خطا (%)	شبیه‌سازی $(J/cm^3)^{0.5}$	تجربی $(J/cm^3)^{0.5}$ [۳۷]	
۰/۹۲	۲۱/۲	۲۱/۴	COMPASS
۸/۴۶	۲۳/۲		Dreiding
۱۰/۷۹	۱۹/۱		Universal
۲۵/۹۷	۲۶/۹		Cvff
n-بوتیل استات			
۲/۴۳	۱۷	۱۷/۴	COMPASS
۱۸/۰۶	۱۴/۳		Dreiding
۱۳/۴۷	۱۹/۷		Universal
۸/۳۷	۱۵/۹		Cvff

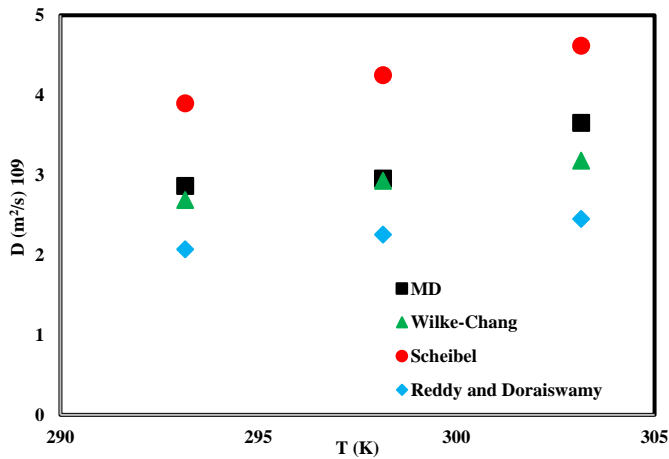
۳-۲- تاثیر تعداد مولکولها بر روی چگالی و پارامتر حلالیت

برای بررسی و یافتن تعداد مولکولهای (ابعاد سل) مناسب بر روی چگالی و پارامتر حلالیت در ادامه شبیه‌سازی از میدان نیروی COMPASS در دمای ۲۹۸/۱۵ K و فشار ۱ atm استفاده شد. زمان شبیه‌سازی برای پیش‌بینی چگالی استیک اسید ۱۰۰ ps در نظر گرفته شد. شکل ۳، تاثیر تعداد مولکول (از ۵ تا ۲۵۰ مولکول استیک اسید) را بر روی چگالی استیک اسید نشان می‌دهد. همانطور که از شکل ۳ می‌توان مشاهده کرد، با افزایش تعداد مولکولها چگالی پیش‌بینی شده افزایش و به مقدار تجربی نزدیک می‌شود. در تعداد مولکولهای کمتر از ۵۰، حجم سل بسیار بیشتر از مقدار واقعی می‌باشد، به همین دلیل چگالی پیش‌بینی شده کمتر از مقدار واقعی می‌باشد. اما با افزایش تعداد مولکولها (از ۵۰ تا ۲۵۰) درصد خطا کاهش یافت. درصد خطای چگالی برای ۱۰۰ مولکول ۲/۱۶٪ به دست آمد، همچنین درصد خطا برای ۲۵۰ مولکول، ۰/۲۴٪ می‌باشد. با افزایش تعداد مولکولها درصد خطا کاهش یافته، اما مدت زمان محاسبات شبیه‌سازی افزایش می‌یابد (نسبت زمان شبیه‌سازی برای تعداد ۲۵۰ مولکول نسبت به ۱۰۰ مولکول حدود ۴/۳ برابر می‌باشد). برای پیش‌بینی چگالی استیک اسید با ۱۰۰ و ۲۵۰ مولکول به ترتیب ۲۱ و ۹۱ دقیقه زمان لازم می‌باشد. افزایش زمان شبیه‌سازی به دلیل افزایش تعداد مولکولها و برهمکنش‌های بین مولکولی می‌باشد. با توجه به اینکه هم زمان محاسبه چگالی و هم مقدار خطای به دست آمده برای ۱۰۰ مولکول بسیار پایین می‌باشد بنابراین در ادامه شبیه‌سازی می‌توان از تعداد ۱۰۰ مولکول استفاده شود.

جدول ۲: پیش‌بینی ضریب نفوذ استیک اسید در n-بوتیل استات در دماهای ۲۹۳/۱۵،

۲۹۸/۱۵ و ۳۰۳/۱۵ K

ضریب نفوذ $10^{-9} (m^2/s)$	دما (K)
۲/۸۷	۲۹۳/۱۵
۲/۹۶	۲۹۸/۱۵
۳/۶۵	۳۰۳/۱۵



شکل ۶: تغییرات ضریب نفوذ استیک اسید در n-بوتیل استات بر حسب دما و مقایسه با معادلات ۸-۶

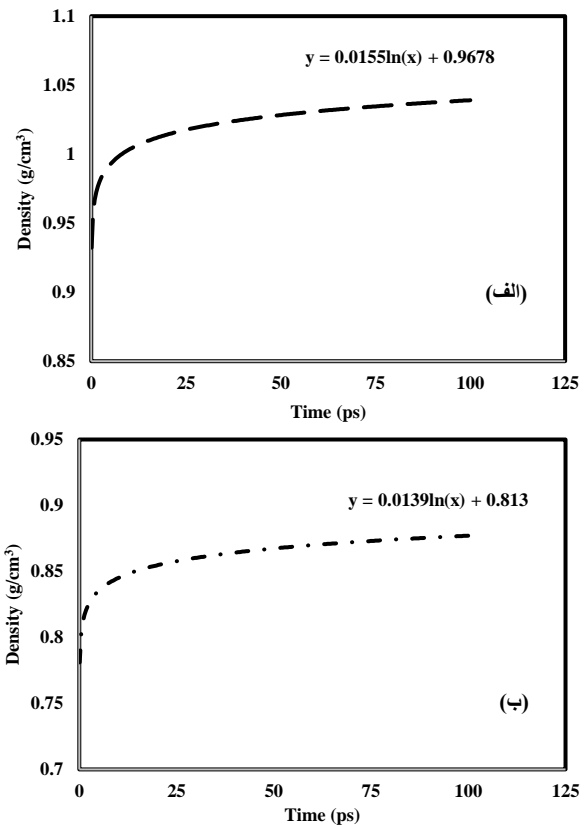
۳-۵ رفتار آرنیوس ضریب نفوذ مولکولی

در یک محدوده دمایی خاص، ضریب نفوذ اغلب دارای یک رفتار آرنیوسی می‌باشد [۴۰، ۴۱]. معادله آرنیوس برای ضریب انتشار به صورت زیر نشان داده شده است (معادله ۹):

$$D = D_0 \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (9)$$

که در آن D_0 ، نشان دهنده ضریب پیش‌نمایی^۲ است و E_a انرژی فعال‌سازی برای نفوذ^۳ می‌باشد. انرژی فعال‌سازی را می‌توان به عنوان انرژی مورد نیاز برای عبور یک مولکول از پوسته حل‌پذیری تفسیر کرد [۴۲]. شکل ۷، نمودار آرنیوسی ضریب نفوذ در فشار اتمسفری و محدوده‌ی دمایی K ۲۹۸/۱۵-۳۰۳/۱۵ برای نفوذ استیک اسید در n-بوتیل استات را نشان می‌دهد. مقادیر D_0 و E_a/R به ترتیب $10^{-9} m^2/s \times 2/1493$ و $2149/3 K$ به دست آمد.

تغییرات ضریب نفوذ مولکولی استیک اسید در n-بوتیل استات بر حسب دما (محدوده‌ی دمایی K ۲۹۸/۱۵-۳۵۳/۱۵) برای معادله آرنیوسی و معادلات ویلک-چانگ، شایبل و رددی-دوراسیسوا در شکل ۸ آورده شده است. همانطور که می‌توان از شکل ۸ مشاهده نمود با افزایش دما به دلیل افزایش فاصله بین-مولکولی، ضریب نفوذ مولکولی برای همه معادلات افزایش می‌یابد. ضریب نفوذ مولکولی به دست آمده از معادله آرنیوسی در دماهای بالا به نتایج حاصل از معادله شایبل نزدیک می‌باشد در حالیکه این نتایج مانند شبیه‌سازی دینامیک مولکولی در دماهای پایین به نتایج به دست آمده از معادله ویلک-چانگ نزدیک می‌باشد.



شکل ۵: نمودار تغییرات چگالی (الف) استیک اسید، (ب) n-بوتیل استات، در دمای K ۲۹۸/۱۵ و فشار ۱ atm

۳-۴ محاسبه ضریب نفوذ استیک اسید در n-بوتیل استات

ضریب نفوذ استیک اسید در n-بوتیل استات در سه دمای ۲۹۳/۱۵، ۲۹۸/۱۵ و ۳۰۳/۱۵ K و فشار اتمسفری با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی پیش‌بینی شد. غلظت استیک اسید در n-بوتیل استات برای محاسبه ضریب نفوذ ثابت و برابر ۳ wt% در نظر گرفته شد. همچنین از میدان نیروی COMPASS استفاده شد. برای ساخت سل آمورف از مولکول‌های بهینه شده استیک اسید و n-بوتیل استات استفاده شد. پس از ساخت سل و بهینه‌سازی هندسی، سل آمورف در محدوده دمایی K ۲۰۰-۴۰۰ بهینه شد. سپس برای رسیدن به حالت تعادل و پیش‌بینی ضریب نفوذ به ترتیب هنگرد کانونی^۱ (NVT) و مجموعه کانونی کوچک (NVE) بر روی سیستم اعمال شد. شکل ۶، نمودار تغییرات ضریب نفوذ بر حسب دما را برای شبیه‌سازی دینامیک مولکولی و همچنین روابط تجربی نشان می‌دهد. همانطور که از شکل ۶ مشاهده می‌شود، نتایج به دست آمده برای ضریب نفوذ مولکولی از رابطه Wilke-Chang در دماهای پایین بسیار به نتایج شبیه‌سازی دینامیکی نزدیک می‌باشد. با افزایش دما ضریب نفوذ پیش‌بینی شده توسط دینامیک مولکولی و روابط تجربی افزایش می‌یابد. با افزایش ضریب نفوذ در واقع شیب نمودار MSD بر حسب زمان شبیه‌سازی افزایش می‌یابد. در واقع با افزایش دما، اندازه جعبه افزایش یافته و اتم‌ها سریعتر حرکت می‌کنند و سبب افزایش ضریب نفوذ مولکولی می‌شود [۳۹]. ضریب نفوذ مولکولی به دست آمده با استفاده از شبیه‌سازی دینامیک مولکولی حاصل متوسط هندسی ۱۰۰ اجرای مختلف برای هر دما می‌باشد.

³ Activation Energy of Diffusion

¹ Canonical ensemble

² Pre-exponential factor

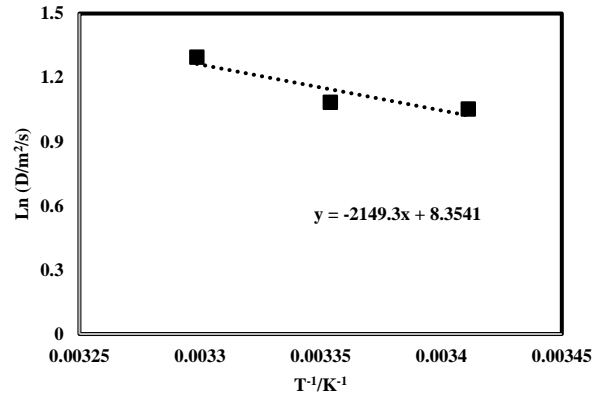
در میدان نیروی، دما و فشار ثابت، تاثیر تعداد مولکولها (ابعاد سل) بر روی پیش بینی چگالی استیک اسید (از ۵ تا ۲۵۰ مولکول استیک اسید) و پارامتر حلالیت n -بوتیل استات (از ۲۵ تا ۲۵۰ مولکول) مقایسه گردید. تعداد مولکول-های بهینه برای پیش بینی چگالی و پارامتر حلالیت ۱۰۰ مولکول به دست آمد. با افزایش بیشتر تعداد مولکولها علاوه بر اینکه دقت پیش بینی زیاد تغییر نمی-کرد بلکه زمان محاسبات به دلیل افزایش تعداد مولکولها و برهمکنش های بین مولکولی بسیار افزایش یافت. نسبت زمان محاسبات شبیه سازی برای پیش بینی چگالی استیک اسید، برای تعداد ۲۵۰ مولکول نسبت به ۱۰۰ مولکول حدود ۴/۳ برابر شد. ضریب نفوذ استیک اسید در n -بوتیل استات در محدوده دمایی $۳۰۳/۱۵\text{ K} - ۲۹۳/۱۵\text{ K}$ با استفاده از شبیه سازی دینامیک مولکولی پیش بینی و با معادلات ویلک-چانگ، شایبل و ردی-دوراسیسوا مقایسه شد.

ضریب نفوذ مولکولی از رابطه ویلک-چانگ در محدوده دمایی $۳۰۳/۱۵\text{ K} - ۲۹۳/۱۵\text{ K}$ بسیار به نتایج شبیه سازی دینامیکی نزدیک بود. ضریب نفوذ مولکولی با افزایش دما به دلیل افزایش فاصله بین مولکولی، افزایش یافت. همچنین رفتار آرنیوسی ضریب نفوذ مولکولی با استفاده از نتایج شبیه سازی به دست آمد و ضریب نفوذ مولکولی در محدوده دمایی $۳۵۳/۱۵\text{ K} - ۲۹۳/۱۵\text{ K}$ با استفاده از معادله آرنیوسی محاسبه شد و با معادلات ویلک-چانگ، شایبل و ردی-دوراسیسوا نیز مقایسه گردید. ضریب نفوذ مولکولی برای معادله آرنیوسی در دماهای بالا به نتایج حاصل از معادله شایبل نزدیک بود در حالی که در دماهای پایین مانند شبیه سازی دینامیک مولکولی به نتایج به دست آمده از معادله ویلک-چانگ نزدیک بود.

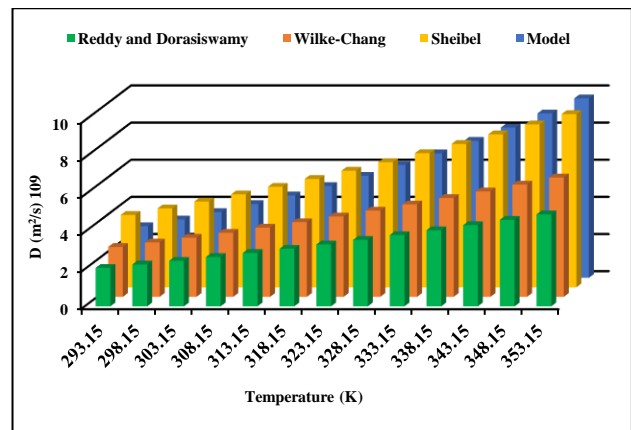
نمادها

D	ضریب نفوذ مولکولی (m^2/s)
E_a	انرژی فعال سازی برای نفوذ (J/mol)
E	انرژی چسبندگی (J/mol)
T	دما (K)
V_m	حجم مولی (ml/mol)
R	ثابت گازها (J/mol.K)
$\Gamma_i(t)$	بردار جابجایی مولکول i در زمان t
y^{exp}	مقدار تجربی
y^{MD}	مقدار شبیه سازی
δ	پارامتر حلالیت ($(\text{J/cm}^3)^{0.5}$)
δ_d	پارامتر حلالیت پراکندگی ($(\text{J/cm}^3)^{0.5}$)
δ_p	پارامتر حلالیت قطبی ($(\text{J/cm}^3)^{0.5}$)
δ_h	پارامتر حلالیت پیوند هیدروژنی ($(\text{J/cm}^3)^{0.5}$)
ΔH_v	آنتالپی مولی تبخیر (J/mol)
N_α	عداد اتم

- Gupta, J., et al., Prediction of solubility parameters and miscibility of pharmaceutical compounds by molecular dynamics simulations. The Journal of Physical Chemistry B, 2011. **115**(9): p. 2014-2023.
- de la Luz, A.P.r., et al., A new force field of formamide and the effect of the dielectric constant on miscibility. Journal of chemical theory and computation, 2015. **11**(6): p. 2792-2800.
- Núñez-Rojas, E., H.M. Flores-Ruiz, and J. Alejandro, Molecular dynamics simulations to separate benzene from hydrocarbons using polar and ionic liquid solvents. Journal of Molecular Liquids, 2018. **249**: p. 591-599.



شکل ۷: نمودار آرنیوسی ضریب نفوذ در فشار اتمسفری و محدوده دمایی $۳۰۳/۱۵ - ۲۹۳/۱۵\text{ K}$



شکل ۸: تغییرات ضریب نفوذ بر حسب دما برای معادله آرنیوسی و معادلات ۶-۸

۴- نتیجه گیری

یکی از پارامترهای اصلی برای پیش بینی پارامترها (چگالی، پارامتر حلالیت و ضریب نفوذ مولکولی) در شبیه سازی دینامیک مولکولی انتخاب میدان نیروی مناسب می باشد. با مقایسه نتایج تجربی و شبیه سازی دینامیک مولکولی پارامتر حلالیت استیک اسید و n -بوتیل استات، میدان نیروی COMPASS در شرایط یکسان (دما و فشار ثابت) بیشترین دقت را در پیش بینی پارامتر حلالیت نسبت به سایر میدان نیروهای Universal, Dreiding, و Cvff داشت. اختلاف پارامتر حلالیت استیک اسید و n -بوتیل استات $\Delta\delta = ۴/۲ (\text{J/cm}^3)^{0.5}$ به دست آمد که با توجه به نتایج به دست آمده توسط گرینهاگ و همکارانش می توان نتیجه گرفت که این دو ترکیب در هم اختلاط پذیر هستند.

مراجع

- Feng, L., et al., Liquid-liquid equilibrium study for the ternary system of Water+ acetic Acid+ 2-octanol. Journal of Chemical & Engineering Data, 2020. **65**(4): p. 1531-1537.
- Huanhuan, Z., et al., A review on recovery technologies of acetic acid from industrial wastewater. Chemical Industry and Engineering Progress, 2015. **34**(06): p. 1768.
- Reichardt, C. and K. Dimroth, Lösungsmittel und empirische Parameter zur Charakterisierung ihrer Polarität, in Lösungen und Lösungsmittel. 1968, Springer. p. 1-73.

29. Zhao, X. and H. Jin, Correlation for self-diffusion coefficients of H₂, CH₄, CO, O₂ and CO₂ in supercritical water from molecular dynamics simulation. *Applied Thermal Engineering*, 2020. **171**: p. 114941.
30. Moradi, H., et al., Prediction of methane diffusion coefficient in water using molecular dynamics simulation. *Heliyon*, 2020. **6**(11): p. e05385.
31. Moradi, H., et al., Effect of Si/Al ratio in the faujasite structure on adsorption of methane and nitrogen: a molecular dynamics study. *Chemical Engineering & Technology*, 2021. **44**(7): p. 1221-1226.
32. Higashi, H. and K. Tamura, Calculation of diffusion coefficient for supercritical carbon dioxide and carbon dioxide+ naphthalene system by molecular dynamics simulation using EPM2 model. *Molecular Simulation*, 2010. **36**(10): p. 772-777.
33. Kadoura, A., A.K. Narayanan Nair, and S. Sun, Molecular dynamics simulations of carbon dioxide, methane, and their mixture in montmorillonite clay hydrates. *The Journal of Physical Chemistry C*, 2016. **120**(23): p. 12517-12529.
34. Wilke, C. and P. Chang, Correlation of diffusion coefficients in dilute solutions. *AIChE journal*, 1955. **1**(2): p. 264-270.
35. Scheibel, E.G., Correspondence. *Liquid Diffusivities. Viscosity of Gases. Industrial & Engineering Chemistry*, 1954. **46**(9): p. 2007-2008.
36. Reddy, K. and L. Doraiswamy, Estimating liquid diffusivity. *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 1967. **6**(1): p. 77-79.
37. Burke, J., *Solubility parameters: theory and application*. 1984.
38. Moradi, H., H. Bahmanyar, and H. Azizpour, Molecular simulation of liquid-liquid extraction of acetic acid and acetone from water in the presence of nanoparticles based on prediction of solubility parameters. *Heliyon*, 2024. **10**(19).
39. Moradi, H., et al., Prediction of methane diffusion coefficient in water using molecular dynamics simulation. *Heliyon*, 2020. **6**(11).
40. Martins, L.F., et al., Prediction of diffusion coefficients of chlorophenols in water by computer simulation. *Fluid Phase Equilibria*, 2015. **396**: p. 9-19.
41. Frank, M.J., J.A. Kuipers, and W.P. van Swaaij, Diffusion coefficients and viscosities of CO₂+ H₂O, CO₂+ CH₃OH, NH₃+ H₂O, and NH₃+ CH₃OH liquid mixtures. *Journal of chemical & engineering data*, 1996. **41**(2): p. 297-302.
42. Pereira, L.A., et al., Diffusion coefficients of fluorinated surfactants in water: experimental results and prediction by computer simulation. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2014. **59**(10): p. 3151-3159.
7. Moradi, H., et al., Molecular dynamics simulation of H₂S adsorption behavior on the surface of activated carbon. *Inorganic Chemistry Communications*, 2020. **118**: p. 108048.
8. Moradi, H., et al., Molecular dynamic simulation of carbon dioxide, methane, and nitrogen adsorption on Faujasite zeolite. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 2022. **43**: p. 70-76.
9. Moradi, H., H. Azizpour, and M. Mohammadi, Study of adsorption of propane and propylene on CHA zeolite in different Si/Al ratios using molecular dynamics simulation. *Powder Technology*, 2023. **419**: p. 118329.
10. Emamian, M., et al., Performance of molecular dynamics simulation for predicting of solvation free energy of neutral solutes in methanol. *Chemical Product and Process Modeling*, 2022. **17**(5): p. 489-497.
11. Moradi, H., et al., Supercritical Methanol and Ethanol Solubility Estimation by Using Molecular Dynamics Simulation. *Chemical Engineering & Technology*, 2023. **46**(10): p. 2167-2174.
12. Moradi, H., et al., Prediction of Water-Methanol Mixture Properties by Molecular Dynamics Simulation. *Chemical Engineering & Technology*, 2023. **46**(9): p. 1950-1956.
13. Moradi, H., et al., Prediction of water adsorption isotherm on 13X zeolite in different temperatures and investigating the effect of non-framework cations using dynamic simulation. *Applied Surface Science Advances*, 2023. **18**: p. 100522.
14. Moradi, H., H. Bahmanyar, and H. Azizpour, Investigation of solvent extraction of acetic acid and acetone from water in the presence of SiO₂ nanoparticles using molecular dynamics simulation. *Journal of Molecular Graphics and Modelling*, 2024. **133**: p. 108871.
15. Zhang, M., et al., Study on the solubility parameter of supercritical carbon dioxide system by molecular dynamics simulation. *Journal of Molecular Liquids*, 2017. **248**: p. 322-329.
16. Sistla, Y.S., L. Jain, and A. Khanna, Validation and prediction of solubility parameters of ionic liquids for CO₂ capture. *Separation and purification technology*, 2012. **97**: p. 51-64.
17. Moradi, H., et al., Enhancement of supercritical carbon dioxide solubility models using molecular simulation data. *Korean Journal of Chemical Engineering*, 2022. **39**(3): p. 717-723.
18. Hildebrand, J.H., *SOLUBILITY*. *Journal of the American Chemical Society*, 1916. **38**(8): p. 1452-1473.
19. Scatchard, G., *Equilibria in Non-electrolyte Solutions in Relation to the Vapor Pressures and Densities of the Components*. *Chemical Reviews*, 1931. **8**(2): p. 321-333.
20. Hansen, C.M., *The three dimensional solubility parameter*. *Danish Technical: Copenhagen*, 1967. **14**.
21. Hansen, C.M., *Hansen solubility parameters: a user's handbook*. 2007: CRC press.
22. Mohammad, M.A., A. Alhalaweh, and S.P. Velaga, Hansen solubility parameter as a tool to predict cocrystal formation. *International journal of pharmaceuticals*, 2011. **407**(1-2): p. 63-71.
23. Greenhalgh, D.J., et al., Solubility parameters as predictors of miscibility in solid dispersions. *Journal of pharmaceutical sciences*, 1999. **88**(11): p. 1182-1190.
24. Forster, A., et al., Selection of excipients for melt extrusion with two poorly water-soluble drugs by solubility parameter calculation and thermal analysis. *International journal of pharmaceuticals*, 2001. **226**(1-2): p. 147-161.
25. Li, C. and A. Strachan, Cohesive energy density and solubility parameter evolution during the curing of thermoset. *Polymer*, 2018. **135**: p. 162-170.
26. Du, Y., et al., Molecular Dynamics Study on the Suitable Compatibility Conditions of a CO₂-Cosolvent-Light Hydrocarbon System by Calculating the Solubility Parameters. *Energy & Fuels*, 2020. **34**(3): p. 3483-3492.
27. Marry, V., et al., Microscopic simulation of structure and dynamics of water and counterions in a monohydrated montmorillonite. *The Journal of chemical physics*, 2002. **117**(7): p. 3454-3463.
28. Zeebe, R.E., On the molecular diffusion coefficients of dissolved CO₂, HCO₃⁻, and CO₃²⁻ and their dependence on isotopic mass. *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 2011. **75**(9): p. 2483-2498.