



در بافت سرطانی استفاده کردند.

روش‌های بهینه‌سازی جدید مانند روش الگوریتم ژنتیک، شبکه عصبی و یادگیری ماشین<sup>۱</sup> نیز در سالهای اخیر مورد توجه محققین قرار گرفته است که در زیر به برخی موارد استفاده از این روش‌ها در حل مسائل وارون گرمایی می‌پردازیم.

رودنسکی و همکاران [۳] برای نخستین بار از الگوریتم ژنتیک برای تخمین ضریب انتقال گرمای همرفت مجهول استفاده کردند. در مطالعه آن‌ها از مرتب‌سازی مرحله اول تیخونوف برای کاهش خطای حاصل از نویز داده‌ها بر نتایج حل وارون استفاده کردند. با توجه به اینکه در نسخه‌های اولیه، الگوریتم ژنتیک در حل مسائل وارون کند عمل می‌کرد تلاش برای اصلاح الگوریتم ژنتیک جهت کاهش خطا و افزایش سرعت حل تا سالهای اخیر نیز ادامه داشته است. ایمانی و همکاران [۴] از الگوریتم ژنتیک نخبه‌گرای اصلاح شده برای حل مسئله تخمین خواص گرمایی مجهول وابسته به دمای ماده استفاده کردند. اخیراً، مزیدی شریف‌آبادی و همکاران [۵] با استفاده از الگوریتم ژنتیک اصلاح شده مسئله وارون تخمین شار گرمایی مجهول را مورد مطالعه قرار دادند.

روش شبکه عصبی از دیگر روش‌های بهینه‌یابی است که در سالهای اخیر برای حل مسائل وارون گرمایی مورد استفاده قرار گرفته است. از جمله به این موارد می‌توان اشاره کرد. دنگ و هوانگ [۶] از روش شبکه عصبی برای حل مسائل مستقیم و وارون گرمایی یک‌بعدی و دوبعدی استفاده کردند. فاموری و همکاران [۷] روش ترکیبی شبکه عصبی با الگوریتم ژنتیک نخبه‌گرای اصلاح شده را برای حل مسئله وارون گرمایی جهت تخمین رسانایی گرمایی و گرمای ویژه مجهول وابسته به دمای ماده مورد مطالعه قرار دادند. قدیمی و همکاران [۸] از روش شبکه عصبی مصنوعی و روش تخمین تابع برای تخمین برخط شار گرمایی ایجاد شده در لنت ترمز لوکوموتیو استفاده کردند.

استفاده از روش‌های یادگیری ماشین نیز جز تازه‌ترین روش‌های مورد استفاده در حل مسائل وارون است. تمدن-جهرمی و همکاران [۹] پتانسیل روش یادگیری عمیق ماشین را در حل مسائل وارون گرمایی خطی و غیرخطی مورد مطالعه قرار دادند.

یکی از روش‌های جستجو که تاکنون کارایی آن در حل مسائل وارون گرمایی آزموده نشده است روش رگرسیون می‌باشد. در رگرسیون، مسئله شامل داده‌های  $(x, y)$  است که در آن  $x$  مختصات نقطه‌ای در فضای چندبعدی اندازه‌گیری است و  $y$  یک عدد حقیقی است. متغیر  $y$  معمولاً متغیر پاسخ یا وابسته نامیده می‌شود. بردار متغیر  $x$  در مراجع مختلف با عناوینی مثل متغیرهای مستقل، متغیرهای پیش‌بینی‌کننده و غیره نامیده می‌شوند. در اینجا اصطلاح  $x$  به عنوان بردار دماهای اندازه‌گیری شده توسط حسگر و  $y$  به عنوان پارامتر مجهول مسئله وارون (شار گرمایی، ضریب انتقال گرمای همرفت و ...) به کار برده می‌شوند. در واقع ما به دنبال تخمین روابط بین متغیرهای خروجی و مجموعه‌ای از متغیرهای ورودی مستقل با یادگیری خودکار از مجموعه‌ای از مشاهدات مرتبط هستیم [۱۰]. در داده‌کاوی با تحلیل رگرسیونی، با داشتن تعدادی نمونه برای آموزش دادن الگوریتم مورد

نظر که هر کدام با متغیرهای ورودی و خروجی معینی مشخص می‌شوند، هدف نهایی تقریب زدن رابطه عملکردی بین آن‌ها است. پس از تخمین رابطه عملکردی می‌توان برای پیش‌بینی سطح متغیر خروجی برای آزمایش‌ها و اندازه‌گیری‌های جدید که هنوز محقق نشده‌اند استفاده کرد. به‌طور کلی، تجزیه و تحلیل رگرسیون می‌تواند تحت دو شرایط مفید باشد:

۱) زمانی که فرآیند مورد نظر مثل یک جعبه سیاه است، یعنی دانش محدودی از مکانیسم اساسی سیستم وجود دارد. در این مورد، تحلیل رگرسیون می‌تواند متغیرهای خروجی را به‌طور دقیق و بدون نیاز به دانستن جزئیات مکانیسم درونی پیچیده به متغیرهای ورودی مربوطه کند (بای و همکاران، ۲۰۱۴ [۱۱]؛ ونکاتش و همکاران، ۲۰۱۴ [۱۲]؛ کورتز و همکاران، ۲۰۰۹ [۱۳]؛ دیویس و ایراپرتیتو، ۲۰۰۸ [۱۴]). اغلب اوقات، کاربر مایل است علیرغم مجهول بودن ماهیت روابط درونی سیستم، بینش‌های ارزشمندی را در مورد رابطه عملکردی زیربنایی واقعی رابطه بین متغیرهای مستقل و پاسخ به دست آورد. اینجاست که تفسیرپذیری روش رگرسیون برای سیستم‌های با ماهیت جعبه سیاه اهمیت پیدا می‌کند.

۲) زمانی که مدل شبیه‌سازی دقیق متغیرهای ورودی را به متغیرهای خروجی معمولاً از طریق برخی روابط پیچیده مرتبط می‌کند. در این گونه مواقع حتی ممکن است متغیرهای میانی شناخته‌شده باشند، اما بسیار پیچیده و پرهزینه است که به‌طور جامع در زمان اندک و قابل قبولی کل محاسبات انجام شود. در این مورد، تجزیه و تحلیل رگرسیون قادر است رفتار کلی سیستم را با توابع بسیار ساده‌تر تقریب زده و در عین حال سطح مطلوبی از دقت را حفظ کند، بنابراین محاسبات می‌تواند ارزان‌تر انجام گیرد، [۱۵]–[۱۸]؛ مثلاً مواردی که با سخت افزار بسیار ساده باید پاسخ سیستم به‌صورت برخط باشد. در طول سال‌های گذشته، تحلیل رگرسیون به عنوان یک ابزار قدرتمند در طیف گسترده‌ای از کاربردها، از جمله بررسی فرآیند جذب گاز کربنیک [۱۹]، [۲۰] و تخمین خاصیت ترمودینامیکی مایعات یونی [۲۱]، [۲۲] مورد استفاده قرار گرفته است.

اخیراً کریزوسا و همکاران [۲۳] با مرور مدل‌های پیوسته بهینه‌سازی خطی و عدد صحیح برای ساخت مدل‌های رگرسیون خوشه‌ای، پیشنهاد کردند که استفاده از مدل‌های بهینه‌سازی در ساخت این مدل‌های منجر به مدل‌هایی با خوانایی و تفسیرپذیری بیشتر می‌گردد. پرادو و همکاران [۲۴] نیز برای مسائلی که تعداد زیادی متغیر ورودی در تخمین متغیر خروجی نقش دارند یک الگوریتم پیشنهاد دادند تا با استفاده از احتمالات پسین بیز بتوان دقت نتایج را بهبود داد. مروری بر منابع موجود در زمینه استفاده از روش وارون در مسائل انتقال گرما جهت تخمین شرایط مرزی و یا مقادیر اولیه مجهول نشان داد که استفاده از روش رگرسیون خطی در حل مسائل وارون گرمایی تاکنون مورد استفاده قرار نگرفته است. بنابراین در این تحقیق روش رگرسیون خوشه‌ای جهت حل مسائل وارون گرمایی معرفی شده است. کارایی روش رگرسیون خوشه‌ای جهت تخمین ضریب انتقال گرمای همرفت با اندازه‌گیری دمای سطح یک میله مسی مورد بررسی قرار گرفته است. از حل مستقیم جهت تولید داده‌های اندازه‌گیری استفاده شده و برای بررسی حساسیت روش ارائه شده به خطاهای اندازه‌گیری، نویز تصادفی با توزیع نرمال با میانگین و انحراف معیار به ترتیب صفر و

<sup>1</sup> Machine learning

محیط، ضریب انتقال گرمای همرفت، حجم میله، سطح جانبی میله، چگالی، گرمای ویژه و زمان هستند. چگالی و گرمای ویژه مس به ترتیب ۳۸۳/۱ ژول بر کیلوگرم بر درجه سلسیوس و ۸۹۵۴ کیلوگرم بر مترمکعب هستند. ضریب انتقال گرمای همرفت به صورت زیر به دست می‌آید [۲۶].

$$h = \frac{\overline{Nu} \times k}{d} \quad (2)$$

که در آن  $k$  و  $d$  به ترتیب رسانایی گرمایی هوا و قطر میله هستند.  $\overline{Nu}$  متوسط عدد ناسلت در اطراف میله از رابطه چرچیل-چو [۲۶]. به صورت زیر به دست می‌آید:

$$\overline{Nu}^{1/2} = 0.6 + 0.387 \left[ \frac{Gr \times Pr}{1 + (0.559/Pr)^{9/16}} \right]^{1/6} \quad (3)$$

که در آن

$$Gr = \frac{g\beta(T - T_{\infty})d^3}{\nu^2} \quad (4)$$

$$\beta = \frac{1}{T_f} \quad (5)$$

در معادلات بالا  $Pr$ ،  $g$  و  $\nu$  به ترتیب عدد پرانتل برای هوا، شتاب گرانش زمین و لزجت سینماتیکی هوا هستند و  $T_f$  متوسط دمای مطلق لایه مرزی است که به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$T_f = 273 + \frac{T + T_{\infty}}{2} \quad (6)$$

عدد پرانتل، رسانایی گرمایی و لزجت سینماتیکی هوا در محدوده دمایی ۲۹۰ الی ۳۸۰ درجه کلون در جدول ۱ داده شده است. به منظور تولید داده‌های اندازه‌گیری جهت حل وارون معادله حل مستقیم با گام زمانی ۱ ثانیه و تا زمان ۲۵۰۰ ثانیه به شرح زیر حل شد.

**گام ۱.** ضریب انتقال گرمای همرفت از معادله (۲) محاسبه می‌شود.

**گام ۲.** دمای  $T$  در زمان  $t_1 = t_0 + dt$  با حل معادله دیفرانسیل حاکم (معادله ۱) با استفاده از ضریب انتقال گرما محاسبه شده در مرحله قبل به دست می‌آید.

جدول ۱- عدد پرانتل، رسانایی گرمایی و لزجت سینماتیکی هوا [۲۶]

| دما (K) | عدد پرانتل | رسانایی گرمایی (W/m.K) | لزجت سینماتیکی ( $10^6$ m <sup>2</sup> /s) |
|---------|------------|------------------------|--------------------------------------------|
| ۲۹۰     | ۰/۷۰۹      | ۰/۰۲۵۵                 | ۱۴/۶۱                                      |
| ۳۰۰     | ۰/۷۰۷      | ۰/۰۲۶۳۹                | ۱۵/۷                                       |
| ۳۲۰     | ۰/۷۰۵      | ۰/۰۲۷۸۶                | ۱۷/۵۹                                      |
| ۳۴۰     | ۰/۷۰۳      | ۰/۰۲۹۳                 | ۱۹/۵۶                                      |
| ۳۶۰     | ۰/۷۰۱      | ۰/۰۳۰۷۲                | ۲۱/۶                                       |
| ۳۸۰     | ۰/۷۰۰      | ۰/۰۳۲۱                 | ۲۳/۷۲                                      |

**گام ۳.** با دمای  $T$  به دست آمده ضریب انتقال گرمای همرفت متوسط محاسبه می‌شود.

**گام ۴.** مراحل ۱ تا ۳ تکرار می‌شود تا زمانی که مقدار  $T$  به مقدار معینی همگرا گردد.

**گام ۵.** دمای  $T$  به عنوان شرایط اولیه در نظر گرفته می‌شود و برای گام زمانی بعدی مراحل ۱ تا ۴ را تکرار می‌شوند.

## ۲-۲- مسئله مستقیم انتقال گرمای کونج در آب

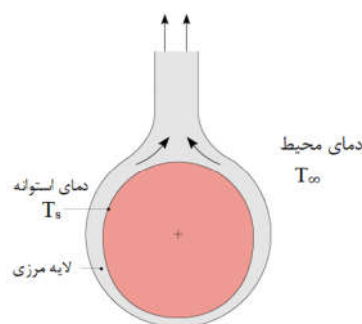
معادله حاکم بر این مسئله نیز همانند مسئله ۱ بصورت ظرفیت

۱ درجه سلسیوس به داده‌ها اضافه شده‌اند. خطاهای روش جدید با روش تخمین تابع بک<sup>۱</sup> [۲۵] و روش شبکه عصبی مقایسه شدند.

## ۲- تعریف مسائل مورد مطالعه در این تحقیق

در این تحقیق، دو مسئله انتقال گرمای همرفت مورد مطالعه قرار گرفته است که هدف تعیین ضریب انتقال گرمای همرفت مجهول در آنهاست.

**مسئله ۱:** یک استوانه از جنس مس خالص به شعاع ۵ میلی‌متر که نسبت طول به قطر بالایی دارد و دمای آن تا دمای ۱۰۰ درجه سلسیوس در داخل یک کوره بالا برده شده است. این استوانه ناگهان در داخل هوای آزاد با دمای ۲۵ درجه و به صورت افقی قرار داده شده و به وسیله جابجایی آزاد خنک می‌شود. شکل ۱ طرحواره‌ای از هندسه مسئله را نشان می‌دهد. با اندازه‌گیری دمای گذرای سطح استوانه قرار است ضریب انتقال گرمای همرفت ناشی از حرکت هوا در اطراف استوانه تخمین زده شود. با توجه به وابستگی ضریب انتقال گرمای همرفت به دما و تغییر دمای سطح با زمان، این ضریب با زمان تغییر می‌کند و نسبت به پارامتر اندازه‌گیری (دما) رابطه غیرخطی دارد.



شکل ۱- طرحواره‌ای دوبعدی از هندسه مسئله

**مسئله ۲:** استوانه مسی از جنس مس خالص به شعاع ۱۰ میلی‌متر تا دمای ۸۵۰ درجه سلسیوس در داخل یک کوره گرم و ناگهان در داخل یک سیال با دمای ۲۵ درجه کونج می‌شود. با اندازه‌گیری دمای گذرای سطح استوانه قرار است ضریب انتقال گرمای همرفت در سطح مشترک استوانه و آب تخمین زده شود.

## ۲-۱- مسئله مستقیم انتقال گرمای همرفت آزاد در هوا

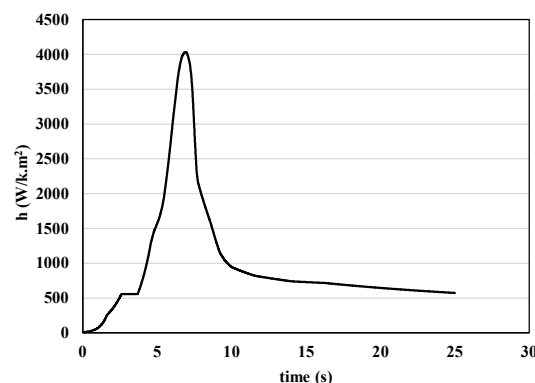
در این تحقیق از توزیع دما داخل استوانه و از معادلات ظرفیت کلی برای محاسبه دمای سطح میله استفاده شده است. به دلیل اینکه انتقال گرما از طریق تابش در مقایسه با انتقال گرمای همرفت قابل چشم‌پوشی است از آثار انتقال گرمای تابشی صرف نظر شده است. بنابراین معادله حاکم بر مسئله مستقیم را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\rho c \frac{dT}{dt} = -hA(T - T_{\infty}) \quad (1)$$

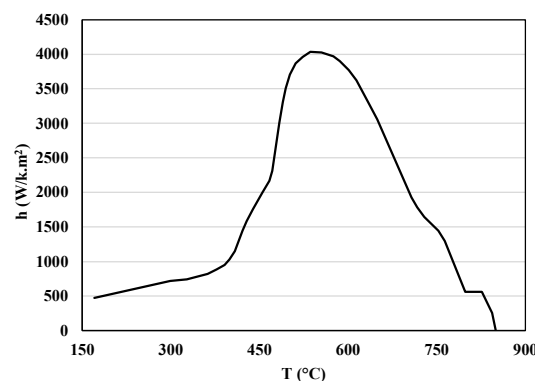
که در آن  $T$ ،  $T_{\infty}$ ،  $h$ ،  $A$ ،  $\rho$  و  $c$  به ترتیب دمای سطح میله، دمای

<sup>۱</sup> Beck

کلی (معادله ۱) در نظر گرفته شده است با این تفاوت که ضریب انتقال گرما،  $h$  بجای معادله ۲ از نمودار شکل ۲ قرار داده شده است. شکل ۲ تغییرات ضریب انتقال گرما بر حسب زمان را برای مسئله ۲ نشان می‌دهد که شکل نمودار با توجه به نتایج تجربی [۲۷] بدست آمده است. شکل ۳ نمودار تغییرات ضریب انتقال گرما در سطح یک قطعه استوانه‌ای کونج شده در یک سیال را نسبت به دمای سطح آن را نشان می‌دهد. با استفاده از یک برنامه کامپیوتری و با توجه داده‌های شکل ۳ با گام زمانی ۰/۰۱ ثانیه و مدت زمان کل ۲۵ ثانیه، دما و ضریب انتقال گرما نسبت به زمان محاسبه شدند که ضریب انتقال گرما در شکل ۲ نشان داده شده است. حاصلجمع دماهای محاسبه شده با نوز بعنوان دمای اندازه گیری شده ورودی به حل وارون مورد استفاده قرار گرفته است.



شکل ۲- تغییرات ضریب انتقال گرما نسبت به زمان در مسئله ۲



شکل ۳- تغییرات ضریب انتقال گرما نسبت به دمای قطعه کونج شده [۲۷]

### ۳- حل وارون گرمایی

#### ۳-۱- تخمین ضریب همرفت با استفاده از روش تخمین

##### تابع متوالی SFS

جواب تحلیلی معادله دیفرانسیل حاکم (معادله ۱) به صورت زیر می‌توان نوشت.

$$\frac{T - T_{\infty}}{T_0 - T_{\infty}} = \exp\left(-\frac{4h}{dpc}t\right) \quad (۷)$$

با مشتق گیری از معادله بالا نسبت به ضریب جابجایی  $h$  ضریب

حساسیت به صورت زیر محاسبه می‌گردد:

$$Z = \frac{\partial T}{\partial h} = -(T_0 - T_{\infty}) \left(\frac{4t}{dpc}\right) \exp\left(-\frac{4h}{dpc}t\right) \quad (۸)$$

تخمین گر ضریب انتقال گرما به صورت زیر می‌توان نوشت [۲۵]:

$$h_m = h_m^* + \frac{\sum_{i=1}^r [Y_{m+i-1} - T_{m+i-1}(h_m^*)] Z_{m+i-1}(h_m^*)}{\sum_{i=1}^r [Z_{m+i-1}(h_m^*)]^2} \quad (۹)$$

مراحل تخمین ضریب انتقال گرما با استفاده از معادلات بالا به صورت زیر است:

**گام ۱.** در گام زمانی اول  $m = 1$  قرار داده و مقداری برای  $h_m^*$  حدس زده می‌شود.

**گام ۲.** توزیع دما و ضریب حساسیت  $Z$  تا  $r$  زمان بعدی با استفاده از معادلات (۷) و (۸) به دست می‌آیند.

**گام ۳.** دما و ضریب حساسیت به دست آمده در معادله (۴) جایگذاری  $h_m^*$  و محاسبه می‌شود.

**گام ۴.**  $h_m^*$  محاسبه شده به عنوان حدس اولیه در نظر گرفته و مراحل ۱ تا ۳ زمانی تکرار می‌شود که

$$\left| \frac{h_m - h_m^*}{h_m^*} \right| < \delta \quad (۱۰)$$

که در این تحقیق  $\delta = 0.0001$  در نظر گرفته شده است.

**گام ۵.** دمای محاسبه شده توسط  $h_m$  بعنوان شرایط اولیه  $T_0$  در معادلات (۷) و (۸) قرار داده می‌شود. حل یک گام زمانی به جلو برده و مراحل بالا تا انتهای بازه زمانی تکرار می‌شوند.

### ۳-۲- تخمین ضریب همرفت با استفاده از روش

#### رگرسیون خوشه‌ای

رگرسیون خوشه‌ای یا درخت رگرسیون<sup>۱</sup> نوعی ابزار یادگیری ماشینی است که می‌تواند دقت پیش‌بینی خوب و تفسیر آسان را برآورده کند و بنابراین در تحقیقات اخیر مورد توجه قرار گرفته است. درخت رگرسیون از یک نمودار یا مدل درختی برای بیان مدل برازش شده روی داده‌ها استفاده می‌کند. این مدل در یک فرایند تکراری ایجاد می‌شود به طوری که در هر تکرار، یک گره که شامل تعدادی مشاهده است را بر اساس قوانین خاصی به دو گره فرزند تقسیم می‌کند. فرایند تقسیم یک گره والد به گره‌های فرزند زمانی متوقف می‌شود که گره پایانی باشد یعنی تعداد مشاهدات قرار گرفته در آن کمتر از یک حد آستانه از پیش تعیین شده باشد. حداقل تعداد مشاهدات مجاز در هر گره والد یا به اختصار حد آستانه تفکیک<sup>۲</sup> برای هر مسئله و هر مجموعه داده با سعی و خطا تعیین می‌گردد. برای به دست آوردن مقادیر پیش بینی برای متغیرهای خروجی متناسب با مشاهدات جدید، میانگین داده‌های موجود در هر گره پایانی تنظیم می‌شود.

الگوریتم درخت رگرسیونی RT در هر تکرار برای تقسیم نمونه‌ها به دو گره فرزند، یک متغیر ورودی و یک نقطه شکست را با جستجوی کامل روی که داده‌های موجود در گره والد انجام می‌دهد. با شروع از مجموعه کل داده‌های موجود (گره ریشه)، یک افزاز دودویی برای هر گره انجام می‌شود. این فرایند تکرارپذیر تا زمانی که تقسیم بیشتر ممکن باشد یا معیارهای پایان مشخصی برآورده شود ادامه می‌یابد. در

<sup>۱</sup> regression tree

<sup>۲</sup> threshold

**گام ۱.** با یک گره منفرد که دربرگیرنده تمام نقاط داده است شروع کن.

**گام ۲.** به ازای هر متغیر  $z$ ام درون گره جاری:

همه  $n$  نقطه داده (در گره اول برابر کل تعداد داده‌ها) موجود در گره جاری  $c$  را بر حسب مقدار متغیر  $z$ ام شان مرتب کن. سپس به ازای هر نقطه داده  $k$ ام، مقدار  $S_{kj}$  (خطای تفکیک بر اساس مقدار  $z$ امین متغیر نقطه داده  $k$ ام) را محاسبه کن:

$$S_{kj} = \sum_{x_{ij} \leq x_{kj}} (y_i - \bar{y}_k)^2 + \sum_{x_{ij} > x_{kj}} (y_i - \bar{y}_{k'})^2 \quad (11)$$

که در آن

$$\bar{y}_k = \frac{1}{k} \sum_{x_{ij} \leq x_{kj}} y_i \quad (12)$$

و

$$\bar{y}_{k'} = \frac{1}{n-k} \sum_{x_{ij} > x_{kj}} y_i \quad (13)$$

هستند.

**گام ۳.** کمترین مقدار  $S_{kj}$  را پیدا کن و نقاط داده گره جاری را به دو گروه افراز کن. هر افراز را به عنوان یک گره فرزند نام‌گذاری کن.

**گام ۴.** اگر گرهی باقی‌مانده که تعداد نقاط داده درون آن بیشتر از حداقل تعداد مشاهدات مجاز است، آن را گره جاری قرار بده و برو به گام ۲. در غیر این صورت توقف کن.

در اینجا منظور از مقدار  $x_{ij}$ ، دمای قرائت‌شده توسط حسگر در لحظه  $i$  و  $(j-1)$  پله زمانی بعدتر است. چون در این تحقیق ما از دمای نقطه قرائت و  $r$  پله زمانی پس از آن برای تخمین ضریب انتقال گرمای همرفت به عنوان  $y_i$  در پله زمانی  $i$ ام استفاده می‌کنیم بنابراین  $j = 1, 2, \dots, r+1$  است؛ که در روش تخمین تابع متوالی پارامتر مرتب‌سازی نامیده می‌شود.

در این تحقیق به‌منظور توسعه الگوریتمی کاربردی‌تر، تابع رگرسیون خوشه‌ای توسعه داده شده با کمک داده‌های حاصل از حل مستقیم استفاده شده است؛ اما از آنجا که در مرحله اجرا و پیاده‌سازی الگوریتم لازم است که الگوریتم در مواجهه با داده‌های اندازه‌گیری شده توسط حسگر قادر به ارائه بهترین جواب‌ها باشد، در ارزیابی کارایی الگوریتم نیز از داده‌های آلوده‌شده با خطای نرمال استفاده می‌شود. برای تعدیل اثر خطای حسگر، قبل از شروع محاسبات یک یا دو بار فیلتر میانگین متحرک روی داده‌های قرائت‌شده اعمال می‌گردد. برای یک بار اعمال فیلتر میانگین متحرک داریم:

$$x'_t = \frac{1}{T} \sum_{i=-T}^T (x_{t+i}) \quad (14)$$

و برای دو بار اعمال فیلتر میانگین متحرک داریم:

$$x''_t = \frac{1}{T} \sum_{i=-T}^T (x'_{t+i}) \quad (15)$$

که در آن  $n = 2T + 1$  طول گام میانگین‌گیری است.

## ۴- نتایج

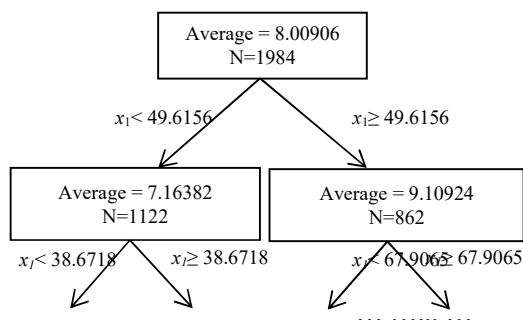
### ۴-۱- نتایج روش تخمین تابع متوالی SFS برای مسئله ۱

شکل ۵ توزیع دمای استوانه را نشان می‌دهد که از حل معادله مستقیم به دست آمده است. علاوه بر این، دمای محاسبه شده به همراه

هر گره، بهترین تقسیم با جستجوی جامع تعیین می‌شود، یعنی تمام شکاف‌های ممکن روی تک‌تک متغیرهای ورودی و در طول تک‌تک نقاط که بر اساس آن متغیر ورودی مورد نظر مرتب شده‌اند، آزمایش می‌شوند؛ و گزینه‌ای که حداقل انحراف از میانگین خوشه‌های حاصل را بدهد انتخاب می‌شود.

در این مقاله ما یک الگوریتم درخت رگرسیون را توسعه می‌دهیم که مشاهدات را به‌صورت سلسله مراتبی به یک ساختار درخت مانند تقسیم می‌کند. سپس میانگین مقدار متغیر پاسخ روی مشاهدات را در هر گره پایانی بررسی می‌کنیم. درختان رگرسیون به دلیل ساختار ساده و سهولتی که می‌توان از داده‌ها به دست آورد، ابزارهای مفیدی برای پشتیبانی تصمیم و تجزیه و تحلیل پیش‌بینی‌کننده هستند. درخت رگرسیون حاصل شبیه یک طرح خوشه‌بندی سلسله مراتبی است. هر گره بر اساس آستانه‌ای برای مقدار یک متغیر متمایز (بعد) مشاهدات به دو شاخه تقسیم می‌شود. شکل ۴ یک درخت باینری نمونه را نشان می‌دهد. هر گره والد ممکن است به دو گره فرزند یا دو گره پایانی (برگ) تقسیم شود.

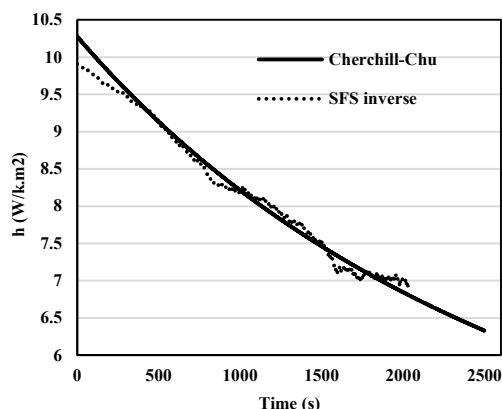
ایجاد یک مدل RT شامل انتخاب متغیرهای ورودی و تقسیم نقاط داده بر اساس آن متغیرها است تا زمانی که یک درخت مناسب ساخته شود. انتخاب متغیر ورودی برای استفاده و تقسیم یا نقطه برش خاص این‌گونه است که هدف به حداقل رساندن یک تابع خطا مانند میانگین مربعات خطا (MSE)، ریشه میانگین مربعات خطا (RMSE) یا میانگین خطای مطلق (MAE) کل حالت‌های ممکن بررسی و بهترین حالت انتخاب می‌شود. ساخت درخت با استفاده از یک معیار توقف از پیش تعریف شده، مانند عمق درخت یا حداقل تعداد نمونه‌های آموزشی اختصاص داده شده به هر والد یا گره برگ درخت، به پایان می‌رسد.



شکل ۴- طرح‌های از یک تقسیم باینری نمونه بر روی مشاهدات تحقیق

ایجاد یک درخت رگرسیون باینری یک فرآیند بازگشتی برای تقسیم نمونه‌های ورودی است. در این روش عددی، در هر گره، تمام نمونه‌های گره با توجه به هر یک از متغیرها (ابعاد) مرتب می‌شوند و نقطه تقسیم به‌طور فزاینده‌ای از طریق مقادیر متغیرهای مورد نظر لغزش می‌یابد. بهترین نقطه تقسیم جایی است که تابع خطا به حداقل مقدار خود برسد. همه متغیرهای ورودی و همه نقاط تقسیم ممکن ارزیابی می‌شوند و بهترین آن‌ها انتخاب می‌شود.

شبیه‌کد الگوریتم ساخت درخت رگرسیون مورد استفاده در این تحقیق به‌صورت زیر بیان می‌شود:



شکل ۷- ضریب انتقال گرمای همرفت محاسبه شده از معادله تجربی و تخمین زده شده با روش تخمین تابع متوالی بر حسب زمان.

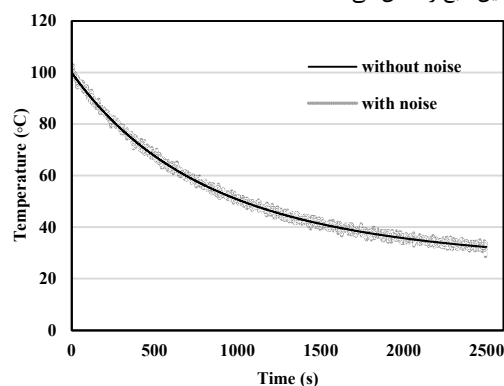
#### ۴-۲- نتایج روش رگرسیون خوشه‌ای برای مسئله ۱

شکل ۸ جذر میانگین مربعات خطای ضریب انتقال گرمای همرفت تخمین زده شده با حل مسئله وارون به کمک روش رگرسیون خوشه‌ای را در شرایط مختلف فیلتر کردن داده‌های نویز دار قبل از حل وارون بر حسب پارامتر مرتب‌سازی نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل ۸ می‌توان دید، با افزایش توان فیلتر داده‌های نویز دار خطای روش کاهش محسوسی می‌یابد و همچنین با افزایش پارامتر مرتب‌سازی خطا اندکی کاهش می‌یابد که برای حالت‌هایی که فیلتر کمتری بر روی داده‌ها انجام شده این کاهش محسوس‌تر است. با مقایسه شکل ۶ و ۸ می‌توان مشاهده کرد که خطای روش رگرسیون خطی به اندازه روش تخمین تابع متوالی به پارامتر مرتب‌سازی حساس نیست و خطای روش رگرسیون خطی در هر حالت کمتر از روش تخمین تابع متوالی است؛ بنابراین استفاده از روش رگرسیون خطی دو مزیت را به دنبال خواهد داشت که یکی خطای کمتر و دومی تخمین پارامتر مجهول با تأخیر زمانی بسیار کمتر خواهد بود.

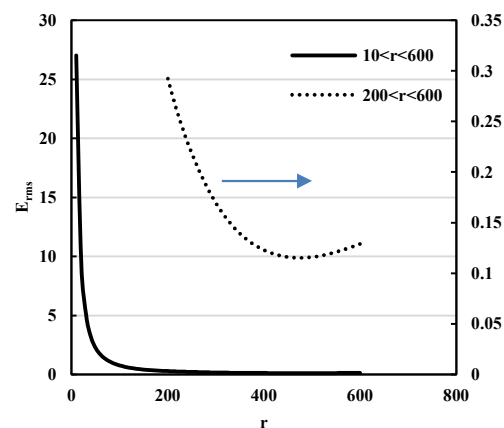
مقادیر خطا در جدول ۲ برای حالت‌های مختلف نیز آمده است. برای مقایسه روش رگرسیون درختی با روش شبکه عصبی، تخمین ضریب انتقال گرمای همرفت برای مسئله فوق با استفاده از شبکه عصبی نیز انجام شده است. خطای شبکه عصبی در حالتی که از داده‌های اندازه‌گیری شده در ۲۰ گام زمانی بعدی با داده‌های دو بار فیلتر شده برابر ۰/۰۲۱۷ است که خطای روش رگرسیون درختی در شرایط مشابه برابر ۰/۰۱۹۵ و کمتر از خطای روش شبکه عصبی است. شکل ۹ مقادیر تخمین زده شده توسط روش رگرسیون درختی و محاسبه شده با معادله تجربی ضریب انتقال گرمای همرفت را با داده‌های بدون فیلتر را نشان می‌دهد. شکل ۹ الف نشان می‌دهد که خطای روش رگرسیون درختی بیشتر از نوع خطای واریانس بوده و با حرکت به سمت انتهای بازه زمانی نوسانات مقادیر تخمین زده شده افزایش می‌یابد. با توجه به اینکه انحراف معیار نویز داده‌های اندازه‌گیری شده که برای تخمین ضریب انتقال گرما استفاده شده‌اند در کل بازه زمانی یکسان و برابر ۱ درجه سلسیوس بوده است با نزدیک شدن به انتهای بازه زمانی به دلیل کاهش دمای استوانه نسبت خطای نویز به دمای اندازه‌گیری شده افزایش می‌یابد و در نتیجه نوسانات جواب حل وارون نیز بیشتر شده است. مقایسه شکل ۹ الف و ۹ ب نشان می‌دهد

نویز با انحراف معیار ۱ درجه سلسیوس نیز در نمودار شکل ۵ نشان داده شده است که در این تحقیق به‌عنوان دمای اندازه‌گیری شده در حل وارون استفاده شده است.

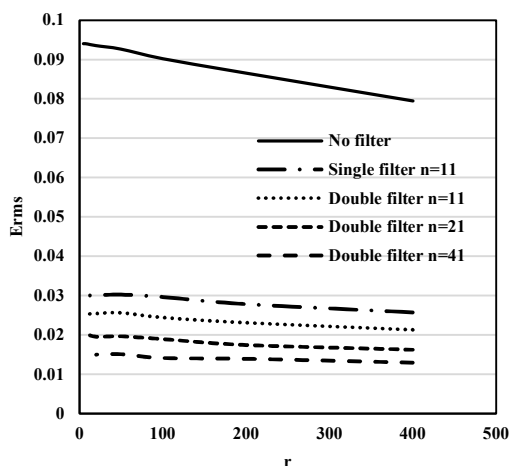
به‌منظور رسیدن به یک نتیجه دلخواه با روش تخمین تابع، پارامتر مرتب‌سازی بهینه باید تعیین گردد. شکل ۶ جذر میانگین مربعات خطای این روش بر حسب پارامتر مرتب‌سازی را نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود خطا با افزایش پارامتر مرتب‌سازی ابتدا بشدت کاهش می‌یابد و سپس شیب این تغییرات کاهش می‌یابد. با توجه به اینکه مرتب‌سازی باعث کاهش خطای واریانس و افزایش خطای بایاس می‌شود معمولاً یک مقدار بهینه برای این پارامتر وجود دارد که در آن کل خطا به حداقل مقدار می‌رسد. برای مشاهده بهتر این مقدار بهینه در شکل ۶ نمودار تغییرات خطا بر حسب پارامتر مرتب‌سازی از ۲۰۰ تا ۶۰۰ (نمودار نقطه‌چین) با وضوح بیشتر محور عمودی (محور سمت راست نمودار) علاوه بر نمودار کل بازه (نمودار با خط پر) نشان داده شده است. با توجه به نمودار تغییرات خطا در شکل ۶ می‌توان مقدار بهینه پارامتر مرتب‌سازی را برابر ۴۷۰ تعیین کرد. شکل ۷ ضریب انتقال گرما جابجای آزاد اطراف میله محاسبه شده با معادله تجربی چرچیل-چو و تخمین زده شده با روش تخمین تابع را نشان می‌دهد.



شکل ۵- دمای محاسبه شده استوانه با حل مستقیم و دمای نویز دار بر حسب زمان.



شکل ۶- جذر میانگین مربعات خطا بر حسب پارامتر مرتب‌سازی.



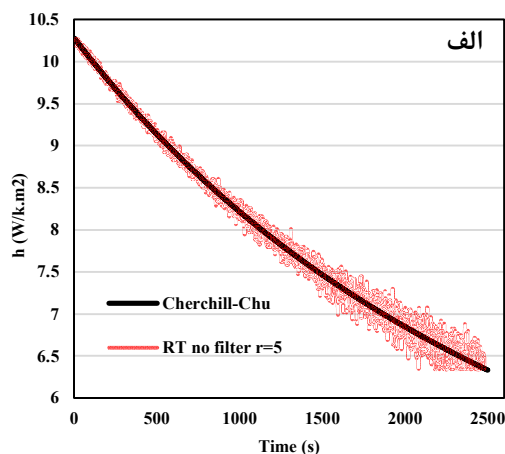
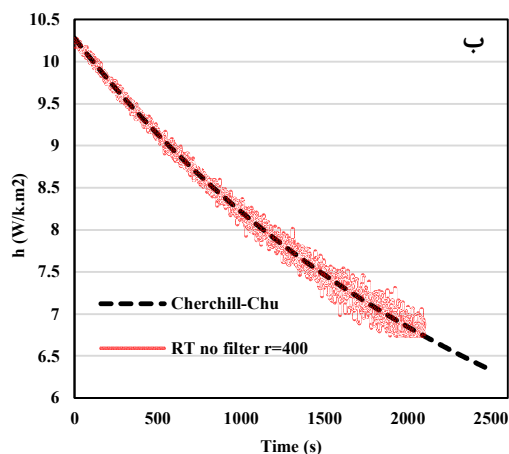
شکل ۸- جذر میانگین مربعات خطا بر حسب پارامتر مرتب‌سازی با داده‌های فیلتر شده و بدون فیلتر.

که با افزایش پارامتر مرتب‌سازی تغییری در شدت نوسان و خطای روش رگرسیون در هر نقطه ایجاد نشده است و دلیل کاهش خطا حذف مقادیر تخمین زده‌شده انتهایی است که خطای بیشتری دارند.

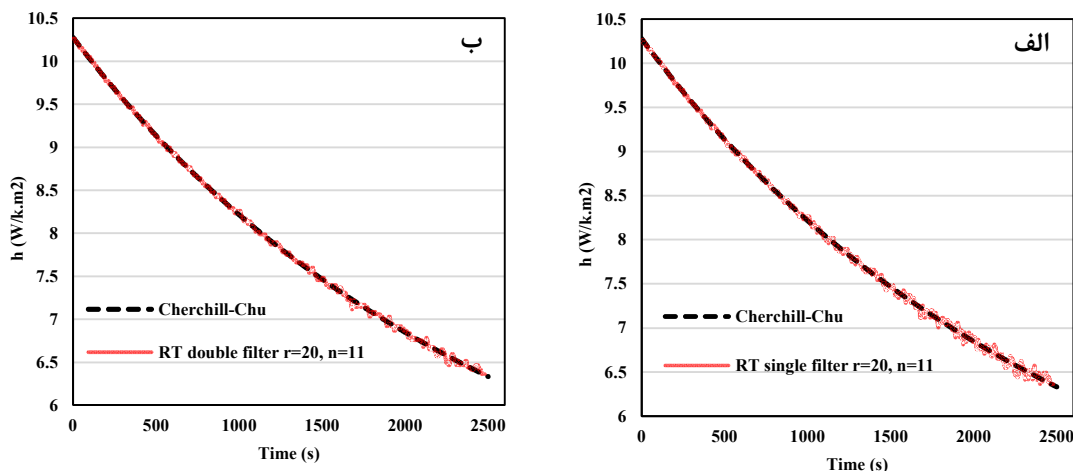
شکل ۱۰ مقادیر تخمین زده‌شده توسط روش رگرسیون درختی و محاسبه شده با معادله تجربی ضریب انتقال گرمای همرفت با داده‌های فیلتر شده را نشان می‌دهد. مقایسه شکل ۹ و ۱۰ نشان می‌دهد که یک‌بار فیلتر کردن نوسانات مقادیر تخمین زده‌شده را تا حد زیادی کاهش می‌دهد که این کاهش خطای شدید در شکل ۶ نیز مشهود است. مقایسه شکل ۱۰ الف و ب نیز تأثیر دو بار فیلتر کردن نویز داده‌های ورودی بر نتایج حل وارون را نشان می‌دهد. شکل ۱۱ تأثیر افزایش طول گام میانگین‌گیری جهت فیلتر کردن داده‌های دمایی اندازه‌گیری شده بر نتایج حل وارون با روش رگرسیون خطی را نشان می‌دهد. مقایسه شکل‌های ۱۰ اب، ۱۱ الف و ۱۱ ب نشان می‌دهد با افزایش طول گام میانگین‌گیری، نوسان مقادیر ضریب انتقال گرما تخمین زده‌شده کاهش می‌یابد.

جدول ۲- جذر میانگین مربعات خطای تخمین ضریب انتقال گرمای همرفت

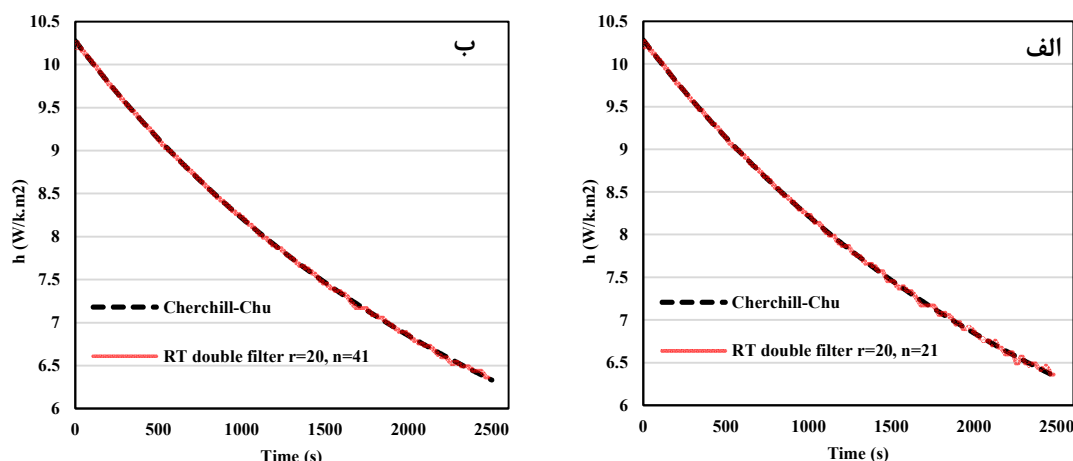
| پارامتر مرتب‌سازی | بدون فیلتر | یک‌بار فیلتر<br>$n = 11$ | دو بار فیلتر<br>$n = 11$ | رگرسیون درختی            |                          | تخمین تابع متوالی | شبکه عصبی                |
|-------------------|------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------|--------------------------|
|                   |            |                          |                          | دو بار فیلتر<br>$n = 21$ | دو بار فیلتر<br>$n = 41$ | بدون فیلتر        | دو بار فیلتر<br>$n = 21$ |
| ۵                 | ۰/۰۹۴      | ۰/۰۲۹۸                   | ۰/۰۲۵۳                   | -                        | -                        | -                 | -                        |
| ۱۰                | ۰/۰۹۳۹     | ۰/۰۳                     | ۰/۰۲۵۳                   | ۰/۰۲۰۱                   | -                        | ۲۷/۰۳             | -                        |
| ۲۰                | ۰/۰۹۳۵     | ۰/۰۳                     | ۰/۰۲۵۴                   | ۰/۰۱۹۵                   | ۰/۰۱۵                    | ۹/۳۳              | ۰/۰۲۱۷                   |
| ۵۰                | ۰/۰۹۲۶     | ۰/۰۳۰۲                   | ۰/۰۲۵۶                   | ۰/۰۱۹۶                   | ۰/۰۱۵۱                   | ۲/۲۲              | -                        |
| ۱۰۰               | ۰/۰۹۰۲     | ۰/۰۲۹۶                   | ۰/۰۲۴۴                   | ۰/۰۱۸۹                   | ۰/۰۱۴۱                   | ۰/۷۶              | -                        |
| ۲۰۰               | ۰/۰۸۶۵     | ۰/۰۲۷۸                   | ۰/۰۲۳۱                   | ۰/۰۱۷۴                   | ۰/۰۱۳۹                   | ۰/۲۸              | -                        |
| ۴۰۰               | ۰/۰۷۹۴     | ۰/۰۲۵۷                   | ۰/۰۲۱۳                   | ۰/۰۱۶۲                   | ۰/۰۱۲۹                   | ۰/۱۲۳۱            | -                        |



شکل ۹- ضریب انتقال گرمای همرفت محاسبه شده از معادله تجربی و تخمین زده‌شده با روش رگرسیون خوشه‌ای بر حسب زمان با داده‌های بدون فیلتر با پارامتر مرتب‌سازی الف) ۵ و ب) ۴۰۰.



شکل ۱۰- ضریب انتقال گرمای همرفت محاسبه شده از معادله تجربی و تخمین زده شده با روش رگرسیون خوشه‌ای بر حسب زمان با پارامتر مرتب‌سازی ۲۰ و داده‌های الف) یک‌بار فیلتر  $n = 11$  و ب) دو بار فیلتر  $n = 11$ .



شکل ۱۱- ضریب انتقال گرمای همرفت محاسبه شده از معادله تجربی و تخمین زده شده با روش رگرسیون خوشه‌ای بر حسب زمان با پارامتر مرتب‌سازی ۲۰ و داده‌های الف) دو بار فیلتر  $n = 21$  و ب) دو بار فیلتر  $n = 41$ .

### ۴-۳- مقایسه نتایج روش رگرسیون خوشه‌ای با سایر روشها برای مسئله ۲

شکل ۱۲ نمودارهای ضریب انتقال گرما تخمین زده شده توسط روش تخمین تابع متوالی و مقادیر فرض شده این ضریب را بر حسب زمان نشان می‌دهد. پس از مقایسه تغییرات خطای این روش بر حسب مقدار  $r$  بهینه برای این مسئله برابر ۳۷ بدست آمده است که نتایج نشان داده شده در شکل ۱۲ با این مقدار بهینه بدست آمده‌اند. همانطور که در این شکل مشاهده می‌شود روش تخمین تابع متوالی در تخمین ضریب انتقال گرمای حداکثر و شکل قله نمودار خطا دارد و نیز در قسمت انتهایی نمودار ضریب انتقال گرمای نسبت به زمان که تغییرات این ضریب تقریباً خطی است نویز موجود در داده‌ها در تخمین ضریب انتقال گرما تشدید شده است.

ضریب انتقال گرمای تخمین زده شده با روش شبکه عصبی بر حسب زمان در شکل ۱۳ با مقادیر فرض شده برای این ضریب مقایسه شده‌اند. همانطور که در این شکل مشاهده می‌شود روش شبکه عصبی

در تخمین حداکثر ضریب انتقال گرما و قله نمودار موفق عمل کرده است ولی در ابتدا و انتهای خطی نمودار باعث تشدید نویزهای موجود در داده‌های اولیه شده است.

در شکل ۱۴ نمودارهای ضریب انتقال گرمای تخمین زده شده توسط روش رگرسیون خوشه‌ای و مقادیر فرض شده این ضریب بر حسب نشان داده شده‌اند. مقایسه شکل ۱۴ با شکل‌های ۱۲ و ۱۳ دقت بالای روش رگرسیون خطی نسبت به دو روش دیگر را برای حل مسئله ۲ نیز نشان می‌دهد همانطور که داده‌های جدول ۲ خطای کمتر این روشها را نسبت به دو روش دیگر برای حل وارون مسئله ۱ نشان داد. مقادیر جذر میانگین مربعات خطای بدست آمده برای روشهای رگرسیون خوشه‌ای، تخمین تابع متوالی و شبکه عصبی به ترتیب برابر ۸/۸۴۴، ۵۴/۰۹ و ۷۱/۶۳۴ هستند که مطابقت کامل با شکل‌های ۱۲ تا ۱۴ دارد. بنابراین در شرایط مسئله ۲ نیز حل وارون با استفاده از روش رگرسیون خوشه‌ای موجب کاهش خطا و افزایش دقت تخمین پارامتر مجهول گردید.



## ۵- نتیجه گیری

در این تحقیق برای اولین بار روش رگرسیون درختی جهت حل مسئله وارون تخمین ضریب انتقال گرمای همرفت آزاد اطراف استوانه به کمک دمای اندازه گیری شده استوانه استفاده شد و نتایج زیر به دست آمد:

- روش رگرسیون درختی در مقایسه با روش تخمین تابع متوالی خطای کمتری دارد و نوع خطای روش رگرسیون درختی از نوع خطای واریانس است که نتایج تخمین زده شده حول نتایج واقعی نوسان می کنند. در مطالعه موردی اول این مقاله خطای روش رگرسیون درختی به ترتیب ۹/۵۴ و ۱/۶۸ برابر کمتر از روش های تخمین تابع متوالی و شبکه عصبی بدست آمد. در حالیکه در مسئله دوم نیز خطای روش حاضر به ترتیب ۶/۳۹ و ۸ برابر کمتر از روش های تخمین تابع و شبکه عصبی است.

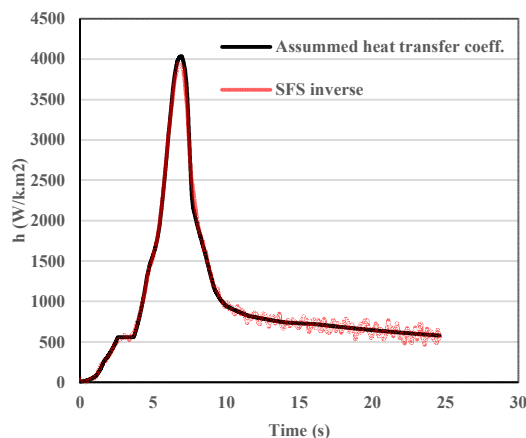
- در روش تخمین تابع متوالی با افزایش پارامتر مرتب سازی، خطای واریانس کاهش و خطای بایاس افزایش می یابد و خطا بشدت به مقدار این پارامتر وابسته است. ولی در روش رگرسیون درختی پارامتر مرتب سازی یا تعداد داده های دمایی اندازه گیری شده مورد استفاده جهت حل مسئله وارون تأثیری زیادی در میزان خطا ندارد و این روش برای تخمین پارامتر مجهول به صورت آنلاین مزیت بیشتری دارد.

- در واقع می توان گفت مدل برازش شده توسط رگرسیون خوشه ای فقط از پارامتر دمای لحظه ای جسم استفاده می کند. یعنی علی رغم در دسترس بودن اطلاعات دما برای نقطه های زمانی دیگر، این روش فقط از اطلاعات دمای لحظه ای قرائت شده توسط حسگر استفاده می کند؛ که این مهم ترین ویژگی و مزیت مدل مبتنی بر رگرسیون خوشه ای است که امکان استفاده از آن به عنوان یک روش برخط را فراهم می آورد.

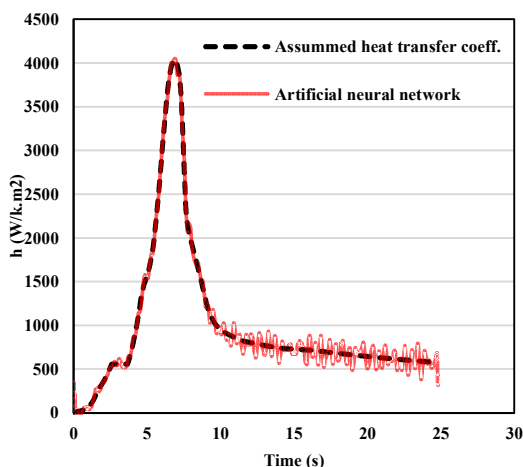
- فیلتر کردن داده های دمایی نویددار تأثیر زیادی بر خطای ایجاد شده در حل مسئله وارون دارد و افزایش دفعات فیلتر کردن و طول گام میانگین گیری باعث کاهش خطای تخمین پارامتر مجهول خواهد شد. - مقایسه روش های رگرسیون درختی با روش شبکه عصبی نیز نشان داد که در شرایط برابر روش رگرسیون درختی خطای کمتری دارد و پتانسیل استفاده در حل مسائل وارون گرمایی پیچیده را دارد. البته با توجه به جدید بودن استفاده از این روش در حل مسائل وارون گرمایی نیاز به تحقیقات بیشتر و آزمایش این روش در مسائل مختلف وجود دارد.

## ۶- مراجع

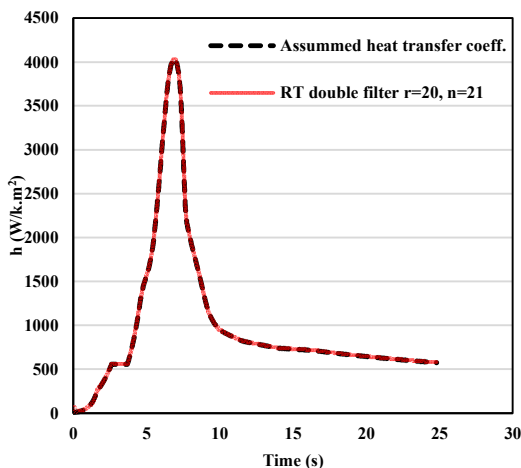
- [1] Norouzifard V. and Hamed M., A three-dimensional heat conduction inverse procedure to investigate tool-chip thermal interaction in machining process, *Int. J. Adv. Manuf. Technol.*, Vol. 74, No. 9-12, pp. 1637-1648, 2014.
- [2] طهرانی م. ش.، شاهرمان م. م.، کیهانی م. ج. و محمدیون م.، تخمین توان منبع گرمایی مورد نیاز جهت گرما درمانی تومور سینه با استفاده از روش معکوس. *مجله مهندسی مکانیک دانشگاه تبریز*، د. ۵۰، ش. ۳، ص ۱۲۵-۱۳۴، ۱۳۹۹.
- [3] Raudenský M., Woodbury K. A., Kral J., and Brezina T., GENETIC ALGORITHM IN SOLUTION OF INVERSE HEAT CONDUCTION PROBLEMS, *Numer. Heat Transf., Part B Fundam. An Int. J. Comput. Methodol.*, Vol. 28, No. 3, pp. 293-306, 1995.



شکل ۱۲- ضریب انتقال گرمای همرفت فرض شده و تخمین زده شده با روش تخمین تابع متوالی بر حسب زمان با پارامتر مرتب سازی بهینه  $r=37$



شکل ۱۳- ضریب انتقال گرمای همرفت فرض شده و تخمین زده شده با روش شبکه عصبی بر حسب زمان و داده های دو بار فیلتر  $n=21$



شکل ۱۴- ضریب انتقال گرمای همرفت فرض شده و تخمین زده شده با روش رگرسیون خوشه ای بر حسب زمان با پارامتر مرتب سازی ۲۰ و داده های دو بار فیلتر  $n=21$

- Vol. 31, No. 3, Apr. 2021.
- [25] Osman A. M. and Beck J. V., Investigation of transient heat transfer coefficients in quenching experiments, *J. Heat Transfer*, Vol. 112, No. 4, pp. 843–848, 1990.
- [26] Incropera A. S., DeWitt F. P., Bergman D. P., and Lavine T. L., *Fundamentals of heat and mass transfer*, 6th ed. Wiley, New York, 1996.
- [27] Buczek A. and Telejko T., Investigation of heat transfer coefficient during quenching in various cooling agents, *Int. J. Heat Fluid Flow*, Vol. 44, pp. 358–364, 2013.
- [4] Imani A., Ranjbar A. A., and Esmkhani M., Simultaneous estimation of temperature-dependent thermal conductivity and heat capacity based on modified genetic algorithm, *Inverse Probl. Sci. Eng.*, Vol. 14, No. 7, pp. 767–783, 2006.
- [5] Mazidi Sharfabad M., Alizadeh M., and Nourpour L., The Modification of the Conventional Genetic Algorithm for Solving Inverse Heat Transfer Problems, *Modares Mech. Eng.*, Vol. 17, No. 11, pp. 408–418 (in Persian), 2018.
- [6] Deng S. and Hwang Y., Applying neural networks to the solution of forward and inverse heat conduction problems, *Int. J. Heat Mass Transf.*, Vol. 49, No. 25–26, pp. 4732–4750, 2006.
- [7] Famouri M., Jannatabadi M., and Ardakani H. T. F., Simultaneous estimations of temperature-dependent thermal conductivity and heat capacity using a time efficient novel strategy based on MEGA-NN, *Appl. Soft Comput. J.*, Vol. 13, No. 1, pp. 201–210, 2013.
- [8] Ghadimi B., Kowsary F., and Khorami M., Heat flux on-line estimation in a locomotive brake disc using artificial neural networks, *Int. J. Therm. Sci.*, Vol. 90, pp. 203–213, 2015.
- [9] Tamaddon-Jahromi H. R., Chakshu N. K., Sazonov I., Evans L. M., Thomas H., and Nithiarasu P., Data-driven inverse modelling through neural network (deep learning) and computational heat transfer, *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.*, Vol. 369, Sep. 2020.
- [10] Sen A. K. and Srivastava M. S., *Regression Analysis: Theory, Methods, and Applications*. Springer, New York, 2012.
- [11] Bai Y., Wang P., Li C., Xie J., and Wang Y., A multi-scale relevance vector regression approach for daily urban water demand forecasting, *J. Hydrol.*, Vol. 517, pp. 236–245, Sep. 2014.
- [12] Venkatesh K., Ravi V., Prinzie A., and Van Den Poel D., Cash demand forecasting in ATMs by clustering and neural networks, *Eur. J. Oper. Res.*, Vol. 232, No. 2, pp. 383–392, 2014.
- [13] Cortez P., Cerdeira A., Almeida F., Matos T., and Reis J., Modeling wine preferences by data mining from physicochemical properties, *Decis. Support Syst.*, Vol. 47, No. 4, pp. 547–553, Nov. 2009.
- [14] Davis E. and Ierapetritou M., A kriging-based approach to MINLP containing black-box models and noise, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 47, No. 16, pp. 6101–6125, Aug. 2008.
- [15] Caballero J. A. and Grossmann I. E., An algorithm for the use of surrogate models in modular flowsheet optimization, *AIChE J.*, Vol. 54, No. 10, pp. 2633–2650, Oct. 2008.
- [16] Beck J., Friedrich D., Brandani S., Guillas S., and Fraga E. S., Surrogate based Optimisation for Design of Pressure Swing Adsorption Systems, *Computer Aided Chemical Engineering*, Vol. 30, pp. 1217–1221, 2012.
- [17] Viana F. A. C., Simpson T. W., Balabanov V., and Toropov V., Metamodeling in multidisciplinary design optimization: How far have we really come?, *AIAA Journal*, Vol. 52, No. 4, pp. 670–690, 2014.
- [18] Henao C. A. and Maravelias C. T., Surrogate-based superstructure optimization framework, *AIChE J.*, Vol. 57, No. 5, pp. 1216–1232, May 2011.
- [19] Zhang Y. and Sahinidis N. V., Uncertainty quantification in CO<sub>2</sub> sequestration using surrogate models from polynomial chaos expansion, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 52, No. 9, pp. 3121–3132, Mar. 2013.
- [20] Nuchitprasittichai A. and Cremaschi S., An algorithm to determine sample sizes for optimization with artificial neural networks, *AIChE J.*, Vol. 59, No. 3, pp. 805–812, Mar. 2013.
- [21] Chen Q. L., Wu K. J., and He C. H., Thermal conductivity of ionic liquids at atmospheric pressure: Database, analysis, and prediction using a topological index method, *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 53, No. 17, pp. 7224–7232, Apr. 2014.
- [22] Wu K. J., Chen Q. L., and He C. H., Speed of sound of ionic liquids: Database, estimation, and its application for thermal conductivity prediction, *AIChE J.*, Vol. 60, No. 3, pp. 1120–1131, Mar. 2014.
- [23] Carrizosa E., Molero-Río C., and Romero Morales D., Mathematical optimization in classification and regression trees, *TOP*, Vol. 29, No. 1, pp. 5–33, Apr. 2021.
- [24] Prado E. B., Moral R. A., and Parnell A. C., Bayesian additive regression trees with model trees, *Stat. Comput.*,