



Prediction of Carbon Dioxide Equilibrium Solubility in Solution of Triethanolamine + Piperazine + Water using Artificial Neural Network Modeling

Z. Khoshraftar¹, A. Ghaemi^{2*}

1- Postdoctoral Researcher of Chemical Engineering, Iran University of Science and Technology

2- Professor of Chemical Engineering, Iran University of Science and Technology

E-mail: aghaemi@iust.ac.ir

Abstract

In this study, we developed artificial neural network-based model for prediction of equilibrium solubility of carbon dioxide in the amine solvent system of (triethanolamine + piperazine + water) for the purpose of carbon dioxide uptake. In the MLP model, the solubility data (CO₂ loading in the amine solution) were investigated as functions of CO₂ partial pressure, system temperature, and amine composition. The Levenberg–Marquardt back-propagation (LMP) algorithm was used to predict the partial pressure of carbon dioxide. The final ratio of training, validation, and test datasets was approximately 70:15:15. The optimum multilayer perceptron (MLP) structure in Levenberg-Marquardt algorithm for CO₂ partial pressure is created with 20 neurons in the first hidden layer and 10 neurons in the second hidden layer. There was a 0.99546 correlation coefficient between the experimental results and the artificial neural network (ANN) calculations, demonstrating excellent compatibility between them. The best validation performance was 0.0043497 from epoch 13. In general, the results show that the applied model can provide an accurate prediction of partial pressure or solubility for different operating conditions.

Received: 27 July 2022

Accepted: 2 November 2022

Page Number: 78-97

Keywords:

Artificial Neural Network,
Solubility of Carbon
Dioxide,
Blended Amines,
Triethanolamine,
Piperazine

Please Cite this Article Using:

Khoshraftar, Z., & Ghaemi, A. (2023). Prediction of Carbon Dioxide Equilibrium Solubility in Solution of Triethanolamine + Piperazine + Water using Artificial Neural Network Modeling. *Iranian Chemical Engineering Journal*, 22(129), 78-97, [In Persian].



پیش‌بینی حلالیت تعادل دی‌اکسید کربن در محلول تری‌اتانول آمین + پیپرازین + آب با استفاده از مدل‌سازی شبکه عصبی مصنوعی

زهره خوش‌رفتار^۱، احد قائمی^{۲*}

۱- پژوهشگر پسا دکتری مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران

۲- استاد مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران

پیام نگار: aghaemi@iust.ac.ir

چکیده

در این مطالعه، مدل مبتنی بر هوش مصنوعی برای پیش‌بینی حلالیت تعادلی دی‌اکسید کربن در سامانه حلال آمین (تری‌اتانول آمین + پیپرازین + آب) با هدف جذب دی‌اکسید کربن ایجاد شده است. در مدل پرسپترون چندلایه، داده‌های حلالیت (بارگذاری دی‌اکسید کربن در محلول آمین) به‌عنوان تابعی از فشار جزئی دی‌اکسید کربن، دمای سامانه و ترکیب آمین بررسی شد. الگوریتم لونیبرگ-مارکوارت پس‌انتشار برای پیش‌بینی فشار جزئی دی‌اکسید کربن استفاده شد. نسبت نهایی آموزشی، اعتبارسنجی و مجموعه داده‌های آزمایشی تقریباً ۷۰:۱۵:۱۵ بود. ساختار بهینه پرسپترون چندلایه (MLP) در الگوریتم لونیبرگ-مارکوارت برای فشار جزئی دی‌اکسید کربن با ۲۰ نورون در اولین لایه پنهان و ۱۰ نورون در لایه پنهان دوم ایجاد شده است. ضریب همبستگی ۰/۹۹۵ بین نتایج تجربی و محاسبات شبکه عصبی مصنوعی وجود دارد که سازگاری عالی بین آن‌ها را نشان می‌دهد. بهترین عملکرد اعتبارسنجی ۰/۰۴۳۴۹۷ از دوره ۱۳ بود. به‌طور کلی، نتایج نشان می‌دهد که مدل اعمال شده می‌تواند پیش‌بینی دقیقی از فشار جزئی و یا حلالیت برای شرایط مختلف عملیاتی ارائه دهد.

کلیدواژه‌ها:

شبکه عصبی مصنوعی،
حلالیت دی‌اکسید کربن،
آمین‌های مخلوط،
تری‌اتانول آمین،
پیپرازین

* تهران، دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی، نفت و گاز

استناد به مقاله:

خوش‌رفتار، زهره، و قائمی، احد. (۱۴۰۲). پیش‌بینی حلالیت تعادل دی‌اکسید کربن در محلول تری‌اتانول آمین + پیپرازین + آب با استفاده از مدل‌سازی شبکه عصبی مصنوعی. نشریه مهندسی شیمی ایران، ۲۲(۱۲۹)، ۹۷-۷۸.

۱. مقدمه

مهم‌ترین موضوعی که امروزه توجه بسیاری از دانشمندان را به خود معطوف کرده، گرمایش زمین به سبب انتشار گازهای گلخانه‌ای از جمله دی‌اکسید کربن است که جهان را در آستانه یک فاجعه بزرگ انسانی و زیست‌محیطی قرار داده است [۴-۱]. این گاز بیشتر از سوختن سوخت فسیلی مانند زغال سنگ، گاز طبیعی و نفت حاصل می‌شود. فعالیت‌های انسانی دلیل عمده افزایش غلظت CO_2 در هواکره است که افزایش غلظت گازهای گلخانه‌ای مانند CO_2 در هواکره یک هشدار جهانی است. احتراق سوخت‌های فسیلی از جمله صنایع زغال سنگ، نفت و گاز طبیعی بیش از ۸۰ درصد از دی‌اکسید کربن موجود در جو را تشکیل می‌دهد که تقریباً ۳۲ Gt در سال تولید می‌شود که با افزایش سطح فعلی تا سال ۲۰۵۰ پیش‌بینی می‌شود که سه برابر رشد کند [۶، ۵، ۳]. انتشار گازهای گلخانه‌ای انسانی منجر به افزایش دمای حداقل ۵-۳ درجه سلسیوس تا پایان این قرن و افزایش ۹۵ سانتی‌متری سطح دریا می‌شود [۷]. حل این مسئله مستلزم کاهش قابل توجه سطح دی‌اکسید کربن در جو است. جذب، استفاده و ذخیره کربن می‌تواند نقش مهمی در حل مسئله تغییرات آب و هوایی جهانی ایفا کند [۸]. در حال حاضر، کشورهایی که عامل بیشترین درصد انتشار دی‌اکسید کربن ناشی از احتراق سوخت فسیلی هستند، عبارت‌اند از: چین (۲۸٪)، ایالات متحده (۱۵٪)، اتحادیه اروپا (۹/۹٪)، هند (۶/۴٪) و روسیه (۴/۵٪) [۵]. تا به امروز، اکثریت قریب به اتفاق مطالعات جذب و ذخیره کربن بر توسعه فناوری‌های نوین برای جذب کربن از نیروگاه‌های زغال سنگ متمرکز شده است که از این نظر ۲۷ درصد از انرژی جهانی و ۴۴ درصد از انتشار دی‌اکسید کربن مربوط به انرژی انسانی را تشکیل می‌دهد [۹].

جذب شیمیایی با آلکانو آمین‌ها تنها فناوری است که برای حذف پس احتراق در مقیاس صنعتی استفاده می‌شود [۱۰]. آمین‌ها انتخاب‌پذیر، برگشت‌پذیر، نسبتاً غیر فرار و ارزان و دارای واکنش‌پذیری بالا هستند [۱۱]. در فرایندهای تصفیه گاز صنعتی، محلول‌های آبی آلکانو آمین به‌طور گسترده‌ای برای حذف گازهای اسیدی مانند CO_2 و H_2S ، تری‌اتانول آمین، یک آمین سوم، که یکی از اولین آمین‌های مورد استفاده برای چنین کاربردهایی است،

استفاده شده است. اگرچه متیل دی‌اتانول آمین (MDEA) و مونو اتانول آمین (MEA) جایگزین آن شده؛ اما کاربرد آن در حذف گاز اسیدی همچنان توصیه می‌شود [۱۴-۱۲]. مطالعاتی در مورد تأثیر پیرازین بر میزان جذب دی‌اکسید کربن هنگام مخلوط شدن در محلول‌های آبی آلکانو آمین انجام و مشخص شده است که پیرازین نسبت به مونو اتانول آمین (MEA)، ۲- آمینو-۲- متیل-۱- پروپانول (AMP) و دی‌متیل اتانول آمین (DMEA) سرعت واکنش بیشتری با دی‌اکسید کربن دارد [۱۵].

شبکه‌های عصبی^۱ در درجه اول برای پیش‌بینی نتیجه و رفتار سامانه‌ها، طراحی فرایندهای مختلف و تجزیه و تحلیل فرایندهای موجود استفاده می‌شود [۱۶]. شبکه عصبی مصنوعی یکی از ابزارها و شاخه‌های حیاتی هوش مصنوعی است که به رایانه‌ها اجازه می‌دهد که رفتار و عملکرد سامانه عصبی انسان را براساس داده‌های تجربی بازتولید کنند [۱۷]. در ساختار شبکه عصبی مصنوعی کلاسیک، می‌توان پیش‌بینی را پس از چندین بار تکرار (اجرای رایانه) به وسیله چندین نورون در لایه‌ها انجام داد. به تازگی به دلیل توانایی آن‌ها در استفاده از الگوریتم‌های یادگیری و ارزیابی روابط بین متغیرهای ورودی و خروجی، از ANN برای پیش‌بینی پاسخ‌های سامانه‌های مختلف استفاده شده است [۱۸]. اولین برتری شبکه‌های عصبی این است که منجر به تجزیه و تحلیل بصری مؤثر می‌شود. سایر برتری‌های شبکه کارایی، یادگیری مستمر، بازیابی داده‌ها، سرعت و دقت است. شبکه‌های عصبی مصنوعی توانایی یادگیری و مدل‌سازی روابط غیرخطی و پیچیده را دارند که بسیار مهم است؛ زیرا در شرایط واقعی، بسیاری از روابط بین ورودی‌ها و خروجی‌ها غیرخطی و هم‌چنین پیچیده است. کاستی‌های شبکه: ۱- وابسته به داده‌های مورد استفاده و شرایط عملیاتی است. ۲- شبکه‌های عصبی مصنوعی به قدرت محاسباتی زیادی نیاز دارند. ۳- آموزش شبکه‌های عصبی به داده‌های زیادی نیاز دارد. ۴- آماده‌سازی داده‌ها برای مدل‌های شبکه عصبی نیاز به توجه دقیق دارد. ۵- الگوریتم‌های پیچیده از کاستی‌های پیش‌بینی شده شبکه‌های عصبی هستند [۱۹].

یک پایگاه داده با شرایط فشار و دمای گسترده و ترکیب غلظت تری‌اتانول آمین و پیرازین برای پیاده‌سازی مدل‌ها در نظر گرفته

1. Artificial Neural Networks (ANN)

جدول ۱. داده‌های جمع‌آوری شده در مورد حلالیت CO₂ در محلول‌های آبی TEA + PZ.

Table 1. Data collected on the solubility of CO₂ in TEA + PZ aqueous solutions.

TEA (Kmol.m ⁻³)	PZ (Kmol.m ⁻³)	Temperature (K)	CO ₂ Loading (mol/mol)	CO ₂ partial pressure (kPa)
2-3	0-1.5	313.2-353.2	0.045-0.861	1.01-153.4

۲-۱ نظریه شبکه عصبی مصنوعی

روش شبکه عصبی از ساختار مغز و اعصاب انسان پیروی می‌کند و شاید محبوب‌ترین روش در بین طبقه‌بندی شبکه در دو دهه گذشته باشد [۲۱]. شبکه عصبی یک مدل ریاضی یا محاسباتی است که جنبه‌های ساختاری یا عملکردی شبکه‌های عصبی بیولوژیکی را شبیه‌سازی می‌کند [۲۲]. در گذشته شبکه عصبی برای دانشمندان بسیار جذاب بوده است. در واقع، مطالعات روی این شبکه از اوایل دهه ۱۹۴۰ آغاز شد. ساختار شبکه‌های عصبی مصنوعی برای تجزیه و تحلیل و طبقه‌بندی داده‌ها برای موضوعات مختلف در دهه ۱۹۴۰ استفاده شد. یکی از برتری‌های شبکه عصبی، زمان محاسباتی کمتر برای حل مسائل پیچیده است. اگر رابطه‌ای بین داده‌ها وجود نداشته باشد، از شبکه‌های عصبی مصنوعی برای یافتن ارتباط بین آن‌ها براساس الگوبرداری از شبکه‌های عصبی انسانی استفاده می‌شود. از ویژگی‌های شبکه عصبی می‌توان به پردازش موازی (سرعت بالا)، تعمیم‌پذیری، محاسبات غیرخطی، ارتباط داده‌های ورودی و خروجی، سازگاری، پاسخ به داده‌های نویز، تحمل خطا^۲ و یادگیری اشاره کرد [۲۳]. کوچک‌ترین واحد پردازش داده‌ها یک نورون است. نورون یک واحد محاسباتی است که ورودی و خروجی آن اعداد هستند. تعدادی سیگنال، وارد یک سلول می‌شود و آن‌ها را جمع‌آوری می‌کند. در شبکه‌های عصبی، هدف به‌دست آوردن مقادیر مناسب وزن (W) برای توابع (f) داده شده است. ابتدا هر ورودی (Xi) در وزن مربوطه (W) ضرب می‌شود، سپس تمام مقادیر با هم جمع می‌شوند و مقدار آستانه به مجموع

شده است. پیش‌بینی داده‌های حلالیت تعادلی در سامانه‌های آمین ترکیبی آبی به‌عنوان تابعی از فشار جزئی دی‌اکسیدکربن تا ۱۵۳ کیلوپاسکال، دمای سامانه ۳۱۳/۲، ۳۳۳/۲، و ۳۵۲/۲ (کلوین) و ترکیب آمین با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی مدل پرسپترون چندلایه^۱ برای اولین بار بررسی شدند. مدل‌های ANN با معماری‌های مختلف ساخته و دقت پیش‌بینی در برابر داده‌های تجربی ارزیابی شد تا یک پیکربندی بهینه برای ANN پیشنهاد شود. الگوریتم لونیبرگ-مارکوارت^۲ برای اهداف آموزشی استفاده شد؛ زیرا پرکاربردترین الگوریتم آموزشی و هم‌چنین سریع‌ترین است.

۲-۲ جمع‌آوری مجموعه‌ای از داده‌های حلالیت CO₂

برای ساخت شبکه مصنوعی باید تعداد کافی نقطه داده از مقالات حلالیت دی‌اکسیدکربن در عملیات با شرایط متفاوت به‌دست آید. از یک مقاله برای جمع‌آوری ۱۶۳ نقطه داده در مورد حلالیت CO₂ در سامانه حلال آمین (تری‌اتانول آمین + پیرازین + آب) استفاده شده است [۲۰]. اطلاعات پایگاه داده جمع‌آوری شده برای سامانه TEA + PZ + CO₂ در جدول (۱) خلاصه شده است. کل داده‌های جمع‌آوری شده در جدول (۱) فایل پیوست موجود است. مجموعه آموزشی شامل ۱۱۵ نقطه داده (۷۰ درصد از نقاط داده جمع‌آوری شده)، مجموعه تست شامل ۲۴ نقطه داده و مجموعه اعتبارسنجی شامل ۲۴ نقطه داده (نقاط داده باقی‌مانده) است. مجموعه داده‌های آموزشی برای به‌دست آوردن وزن‌ها و بایاس‌ها برای تولید مقدار مورد نظر (متغیر خروجی، فشار جزئی CO₂ در این مطالعه) و مجموعه داده‌های اعتبارسنجی برای جلوگیری از برآزش بیش از حد استفاده شد. مجموعه داده‌های تست برای ارزیابی عملکرد پیش‌بینی شبکه به‌دست آمده در برابر داده‌های دیده نشده، استفاده شد. انتخاب داده‌های اعتبارسنجی و آزمون به‌صورت تصادفی انجام شد. نسبت نهایی آموزش، اعتبارسنجی و مجموعه داده‌های آزمایشی تقریباً ۱۵:۱۵:۷۰ بود.

قانون هنری که فشار جزئی دی‌اکسیدکربن را به غلظت دی‌اکسیدکربن محلول فیزیکی در حلال مرتبط می‌کند، به‌صورت معادله (۱) ارائه شده است:

$$P_{CO_2} = H_{CO_2} [CO_2] \quad (1)$$

1. Multi Layer Perceptron (MLP)
2. Levenberg Marquardt Algorithm

3. Fault tolerance

مقادیر اضافه می‌شود. الگوریتم‌های آموزشی بر روی ورودی‌ها و مجموعه داده‌های هدف برای تعیین فرایند یادگیری اعمال می‌شوند. یک نورون k را می‌توان به صورت ریاضی با دو معادله (۲) و (۳) توصیف کرد [۲۴]:

$$y_k = f(u_k + b_k) \quad (2)$$

$$u_k = \sum_{i=1}^N w_{ki} x_i \quad (3)$$

خروجی نورون به عنوان یک ترکیب خطی بین سیگنال‌های ورودی، یک اصطلاح بایاس، یک تابع فعال‌سازی و سیگنال خروجی تعریف می‌شود، که در آن $X_1, X_2, X_3, \dots, X_n$ سیگنال‌های ورودی، w_1, w_2, \dots, w_{kn} وزن‌های اتصال را نشان می‌دهد که وزن‌های ورودی هستند، u_k خروجی خطی ترکیب خطی، b_k عبارت بایاس و f تابع فعال‌سازی است. نورون‌ها مسئول تولید y_k به عنوان سیگنال خروجی هستند. توابع فرم انتقال معمولاً رمپ، خطی و پله‌ای یا سیگموئیدی هستند. سلول‌های عصبی به هم متصل می‌شوند و لایه‌ای از نورون‌ها را تشکیل می‌دهند. یک یا چند لایه نورون، به شبکه ساختار می‌دهد.

۲-۲ شبکه عصبی پرسپترون چندلایه

شبکه‌های عصبی مصنوعی پارادایم‌های هوشمندی هستند که هدفشان شناسایی روابط پیچیده بین متغیرهای مختلف و ارائه آن‌ها به عنوان سامانه‌های ساده برای استفاده است. روش طراحی شبکه‌های عصبی مصنوعی، برای پردازش اطلاعات و شناسایی روابط از فرایند یادگیری انسان و درک نورون‌های بیولوژیکی الهام گرفته است. شبکه‌های عصبی مصنوعی از واحدهای زیادی به نام «نورون‌ها» تشکیل شده‌اند که در زیر سه طبقه از لایه‌ها ساخته شده‌اند: لایه‌های ورودی، مخفی و خروجی. لایه‌های ورودی و خروجی به ترتیب مربوط به لایه‌هایی هستند که ورودی‌ها از آن‌ها معرفی و خروجی‌ها تحویل داده می‌شوند. بنا بر این، تعداد نورون‌های متناظر آن‌ها با تعداد ورودی‌ها و خروجی‌های توصیف‌کننده سامانه، به ترتیب یکسان است. لایه‌های پنهان نقش حیاتی دارند؛ زیرا فرایند یادگیری در داخل آن‌ها عمدتاً با تبدیل

ورودی‌ها به سامانه‌های غیرخطی با ابعاد بالا با استفاده از توابع فعال‌سازی انجام می‌شود [۲۵، ۲۶].

در این مطالعه، مدل پرسپترون چندلایه از ۴ لایه، شامل یک لایه ورودی، دو لایه پنهان و یک لایه خروجی تشکیل شده که در شکل (۱) نشان داده شده است. لایه ورودی از چهار نورون تشکیل شده است. لایه خروجی از یک نورون تشکیل شده است. ۲۰ نورون لایه دوم و ۱۰ نورون لایه سوم را تشکیل می‌دهند. انتخاب تعداد لایه‌های پنهان و تعداد نورون‌ها برای قراردادن در هر لایه، بر دقت پیش‌بینی مدل و زمان آموزش تأثیر دارد [۲۷].

۳-۲ برنامه کاری برای طراحی مدل

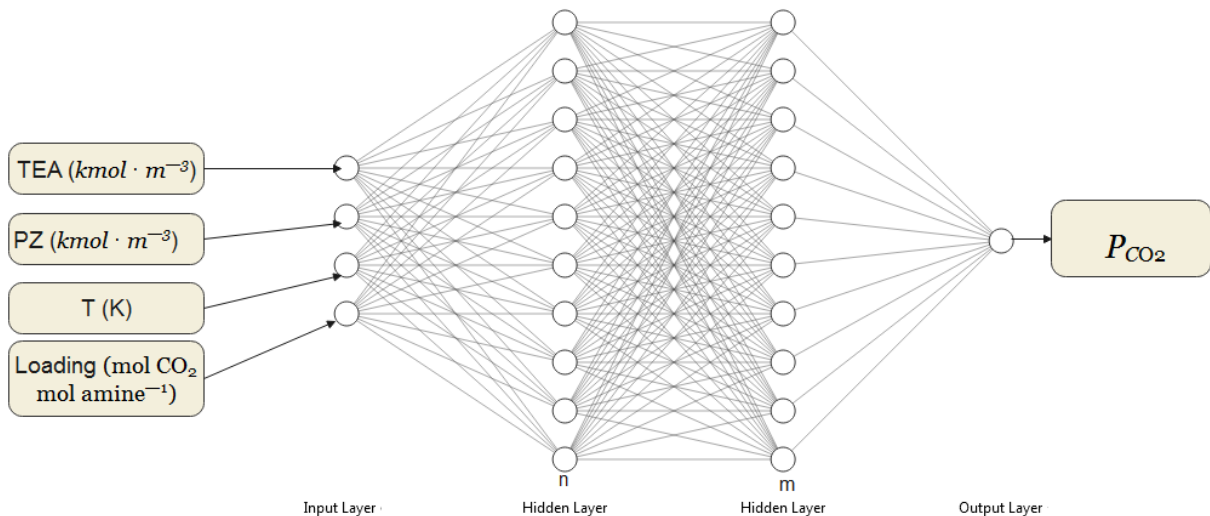
ابتدا باید مشخصه‌های ورودی مانند غلظت تری‌اتانول آمین و پیپرازین، دما و حلالیت دی‌اکسید کربن و مشخصه خروجی شامل فشار جزئی، شناسایی و جمع‌آوری شوند. الگوریتم یادگیری پس‌انتشار شبکه‌های عصبی مصنوعی مبتنی بر پرسپترون چندلایه برای مدل‌سازی در متلب استفاده شد. روش ANN فرض می‌کند که فشار و دما متغیرهای ورودی برای تعیین دقیق فشار جزئی هستند. بارگذاری CO_2 به عنوان متغیر ورودی نشان‌دهنده غلظت CO_2 در یک محلول است. بارگذاری دی‌اکسید کربن به عنوان نسبت مولکول‌های دی‌اکسید کربن به گروه‌های قلیایی تعیین می‌شود [۲۸]. این اطلاعات به شرح معادله (۴) ارائه می‌شود:

$$S = f(TEA, PZ, T, Loading) \quad (4)$$

مرحله دوم، نرمال کردن داده‌های ورودی و خروجی برای شبکه است. با ورودی‌های زیاد، نابرابری در وزن‌ها، شیب‌ها و احتمالاً آموزش آهسته نتیجه می‌شود. برای جلوگیری از این امر، داده‌های ورودی و خروجی برای توابع انتقال سیگموئیدی و هایپربولیک با استفاده از تابع mapminmax نرمال شده، که منجر به مقادیر ورودی و خروجی در محدوده (-1, +1) برای دو تابع می‌شود. Mapminmax به عنوان معادله (۵) ارائه شده است.

$$X_{norm} = 2 \left(\frac{X_i - X_{min}}{X_{max} - X_{min}} \right) - 1 \quad (5)$$

1. Feed-Forward Artificial Neural Networks
2. Loading



شکل ۱. معماری مدل پرسپترون چندلایه.

Figure 1 The architecture of the MLP model.

پس‌انتشار (لونبرگ - مارکوارت)، گرادینان مزدوج مقیاس‌شده^۲ و منظم‌سازی بی‌بی^۳ برای یافتن بهترین الگوریتم برای ANN استفاده شد. برخی معیارهای آماری برای ارزیابی دقت و عملکرد مدل براساس شبکه‌های عصبی مصنوعی از جمله میانگین مربعات خطا و ضریب همبستگی استفاده شد. با توجه به این محاسبات، MSE و R² با معادلات (۶) و (۷) حساب شد [۳۰، ۳۱]:

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (Y_{predicted} - Y_{real})^2 \quad (6)$$

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (Y_{predicted} - Y_{real})^2}{\sum_{i=1}^N (Y_{predicted} - Y_{mean})^2} \quad (7)$$

برای توقف شبکه، از روش‌های میانگین مجذور خطا، زمان و تعداد مراحل تکرار استفاده می‌شود [۳۲]. هنگامی که خطا، یعنی تفاوت بین خروجی مورد نظر و خروجی مورد انتظار کمتر از مقدار آستانه یا تعداد تکرارها یا دوره‌ها بالاتر از مقدار آستانه باشد، آموزش شبکه عصبی متوقف می‌شود. در این مطالعه، میانگین مجذور خطاها برای توقف شبکه استفاده شده است. برای محاسبه MSE، تفاوت بین پیش‌بینی‌های مدل خود و حقیقت پایه را در نظر می‌گیریم، آن را مربع می‌کنیم و آن را در کل مجموعه داده میانگین می‌گیریم.

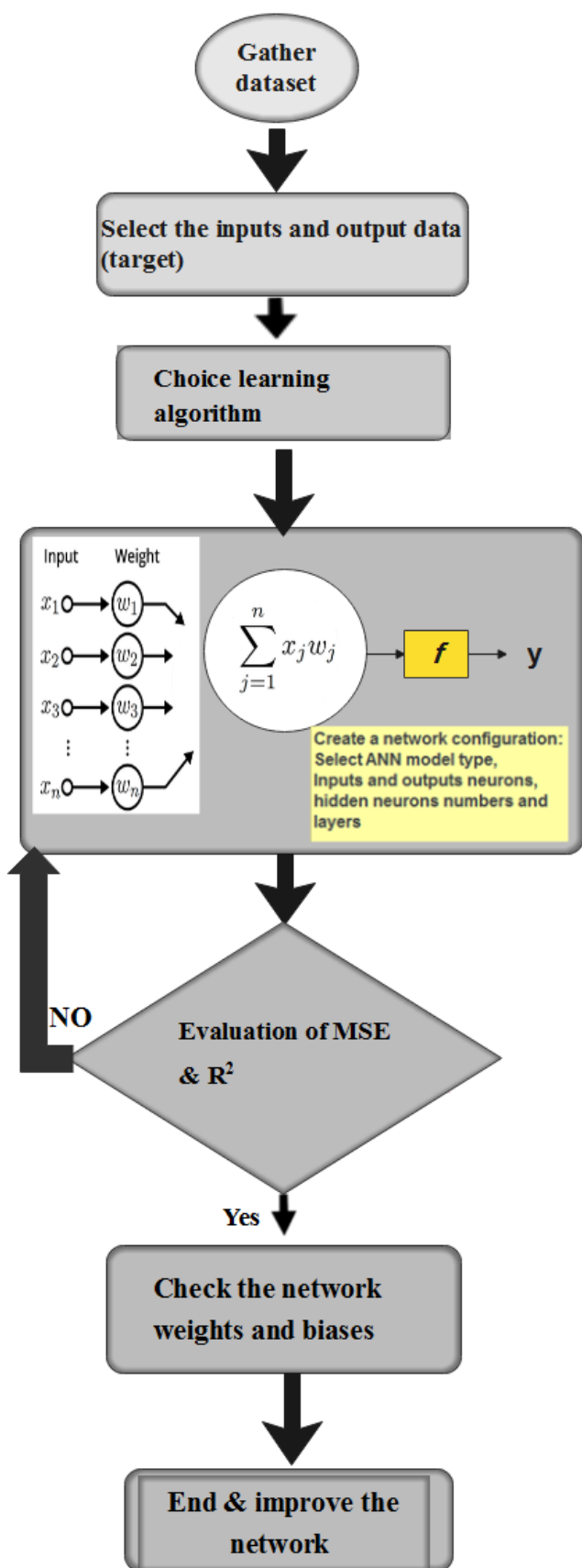
فرض کنید که Xi متغیر ورودی یا خروجی X است، Xmin و Xmax حداقل و حداکثر مقادیر متغیر X هستند [۲۹]. خروجی‌های شبکه مورد نظر باید براساس تابع غیرخطی مقیاس شوند؛ زیرا شبکه از یک تابع غیرخطی با خروجی محدود (بین ۱- و ۱) ایجاد شده است. عملکرد مدل آموزش‌دیده شده با معیارهای آماری، شامل مجذور ضریب همبستگی چندگانه^۱ (R²) و میانگین مربع خطا، برای مقایسه خروجی‌های مدل با مجموعه داده‌ها، ارزیابی می‌شود. در مرحله آخر بهترین الگوی شبکه انتخاب می‌شود و مدل توسعه می‌یابد. در طول توسعه مدل پرسپترون چندلایه، چندین پیکربندی ارزیابی می‌شود و عملکرد شبکه با تغییر تعداد لایه‌های پنهان، تعداد نورون‌های لایه‌های پنهان و الگوریتم آموزش شبکه، بهینه‌سازی می‌شود تا بهترین شبکه به دست آید. پیش‌بینی مشخصه‌های خروجی در نهایت، زمانی که خطای بهینه‌شده از ورودی‌های آموزش‌دیده آزمایش شده به دست آمد، الگوریتم آموزش به پایان می‌رسد. چرخه کار برای فرایند طراحی مدل شبکه عصبی مصنوعی یکپارچه در شکل (۲) نشان داده شده است.

۳. بحث و نتایج

سه الگوریتم یادگیری مختلف از الگوریتم‌های پرسپترون چندلایه

2. Scaled Conjugate Gradient (SGG)
3. Bayesian Regularization

1. Square of the Coefficient of Multiple Correlation



شکل ۲. نمودار جریان بهینه‌سازی شبکه ANN.

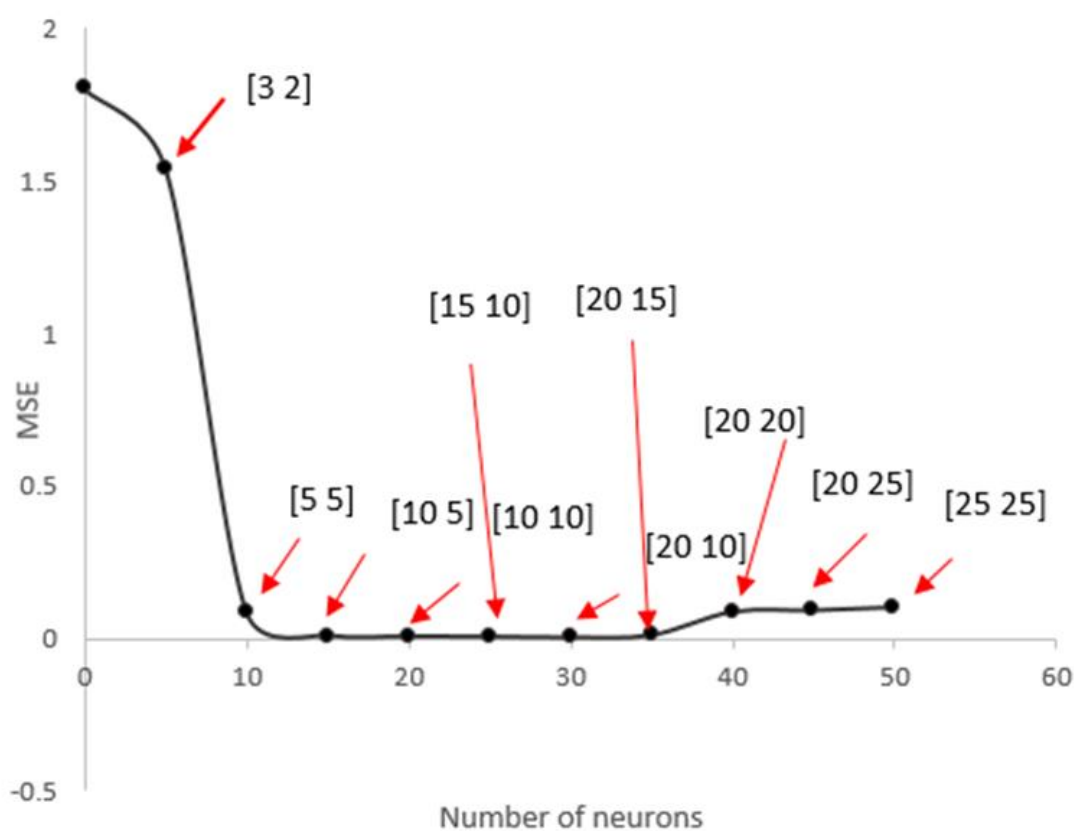
Figure 2. ANN network optimization flowchart.

سیگموئید و Purlin به‌ترتیب برای لایه‌های پنهان و خروجی انتخاب شدند. برای تعیین ساختار مناسب MLP در هر مورد، از شگرد سعی و خطا استفاده شد. طبق جدول (۲) فشار جزئی دی‌اکسیدکربن با الگوریتم‌های لونیگ-مارکوارت کمترین مقادیر MSE را نشان می‌دهد. تعداد بهینه نورون‌ها براساس حداقل مقدار خطا، در طول فرایند آموزش الگوریتم و حداکثر مقدار R^2 انتخاب شد. شکل (۳) تعداد نورون‌ها را در MLP نشان می‌دهد که از ۱ تا ۵۰ متغیر است. الگوریتم فوق با ۳۰ نورون به‌عنوان بهترین مدل پرسپترون چندلایه انتخاب شد. ۳۰ نورون شامل مجموع نورون‌ها در لایه پنهان اول و دوم است که به‌ترتیب شامل ۲۰ و ۱۰ نورون است.

MSE برای اطمینان از این‌که مدل آموزش‌دیده هیچ پیش‌بینی پرت با خطاهای بزرگ ندارد، عالی است؛ زیرا MSE به‌دلیل قسمت مربعی تابع، وزن بیشتری روی این خطاها می‌گذارد. اگر مدل یک پیش‌بینی خیلی بد انجام دهد، قسمت مربعی تابع خطا را بزرگ‌تر می‌کند که نقطه ضعف این مدل است. با این حال، در بسیاری از موارد عملی، به این موارد پرت اهمیت نمی‌دهیم و بیشتر به‌دنبال مدلی کامل هستیم که به‌اندازه کافی در اکثریت خوب عمل کند.

۱-۳ بهینه‌سازی تعداد نورون‌ها با استفاده از پرسپترون چندلایه

توابع مختلف فعال‌سازی عصبی برای کار فعلی اعمال و توابع انتقال



شکل ۳. تعداد بهینه نورون‌ها با استفاده از MLP.
Figure 3. Optimum number of neurons, using MLP.

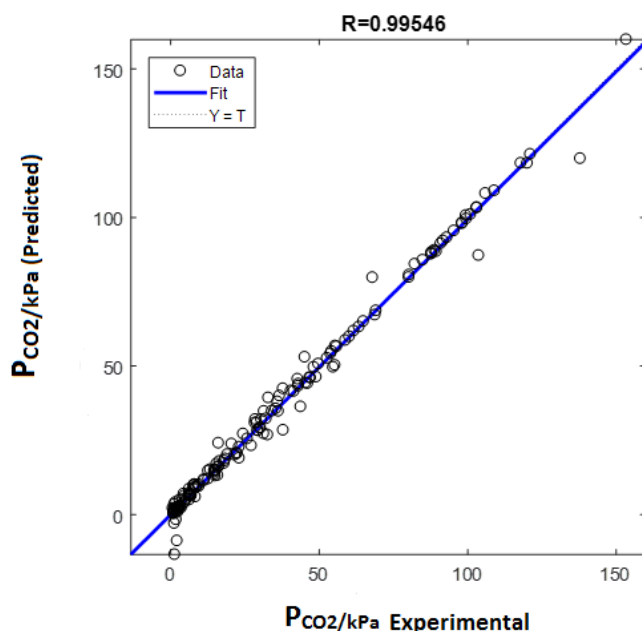
جدول ۲. محاسبه مقدار R^2 و مقدار حداقل میانگین مربعات خطا برای هر الگوریتم.

Table 2. Calculating the R^2 value and MSE value for each algorithm.

Backpropagation algorithm	Function	R^2	MSE	Epoch	Hidden layer
MLP-SCG ¹	Trainscg	0.83714	2.6293	32	[20 10]
MLP-BR ²	Trainbr	0.99417	0.0088851	300	[20 10]
MLP-LMA ³	Trainlm	0.99546	0.0062044	43	[20 10]

ضریب همبستگی ۰/۹۹۵۴۶ بود. مدل ANN می‌تواند به‌طور مؤثر فشار جزئی دی‌اکسیدکربن را پیش‌بینی کند. شکل (۵) هم‌چنین یک ارتباط دقیق نزدیک بین مدل MLP خروجی‌های ANN و مقادیر هدف از مجموعه داده حلالیت تعادل دی‌اکسیدکربن در سامانه حلال آمین (تری‌اتانول آمین + پیپرازین + آب) آماده‌شده را نشان می‌دهد. براساس نمودار عملکرد، شبکه به سطح اعتبارسنجی مطلوبی دست می‌یابد (شکل (۶)).

بهترین طرح از راه آزمون و خطا، انتخاب معماری با کمترین خطا و بهترین رگرسیون یافت شد. داده‌های نرمال‌شده، پیش‌بینی و تجربی مدل پرسپترون چندلایه در شکل (۴) برآزش شد. در شکل (۴) مطابقت خوبی بین نتایج شبیه‌سازی شده و مشخصه‌های تجربی فشار جزئی دی‌اکسیدکربن با استفاده از مدل MLP وجود دارد. نتایج تجربی و مقادیر خروجی مدل شبکه عصبی در شکل (۵) نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که برای کل مجموعه داده‌ها



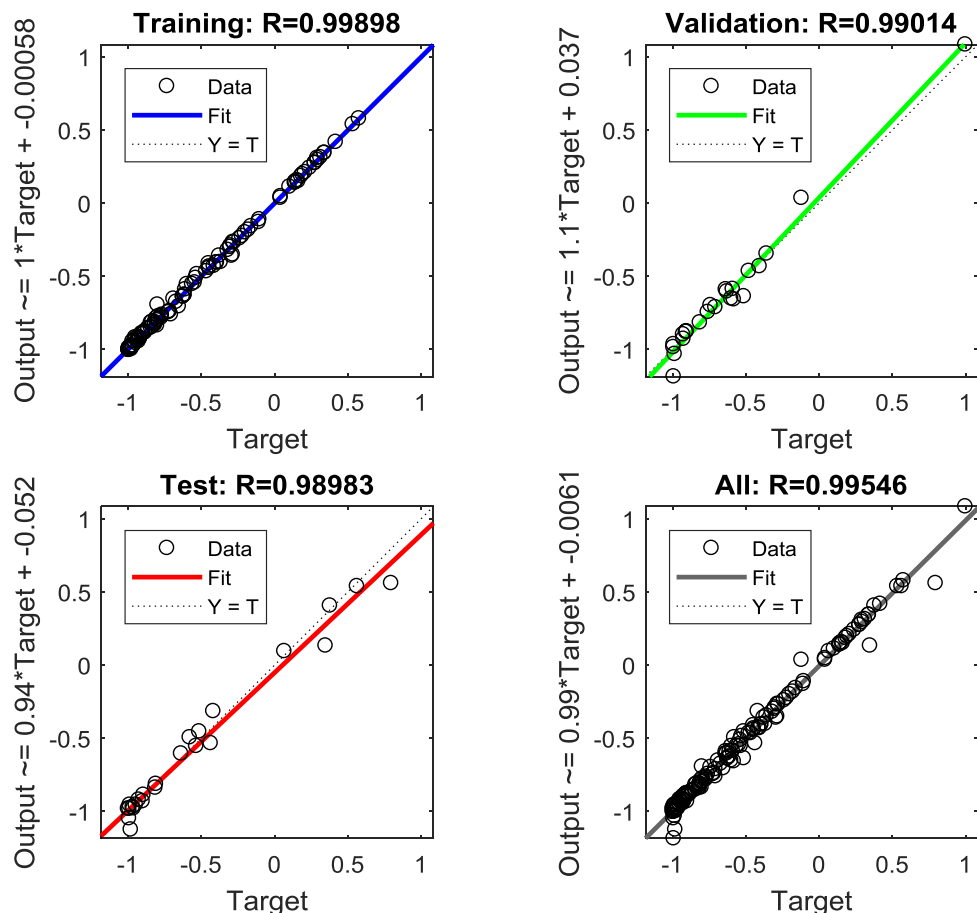
شکل ۴. نمودار محلول‌های پیش‌بینی‌شده ۲-۳ کیلو مول بر متر مکعب تری‌اتانول آمین + ۰/۵-۱/۵ کیلو مول بر متر مکعب محلول پیپرازین.

Figure 4. Plot of the predicted aqueous (2.0-3.0 kmol.m⁻³) TEA + (0.5-1.5 kmol.m⁻³) PZ solutions.

1. Scaled Conjugate Gradient

2. Bayesian regularization

3. Levenberg-Marquardt Algorithm



شکل ۵. نمودار پراکندگی در هر مدل‌سازی (آموزش، اعتبارسنجی، آزمایش و همه) با ضریب مقادیر تعیین.

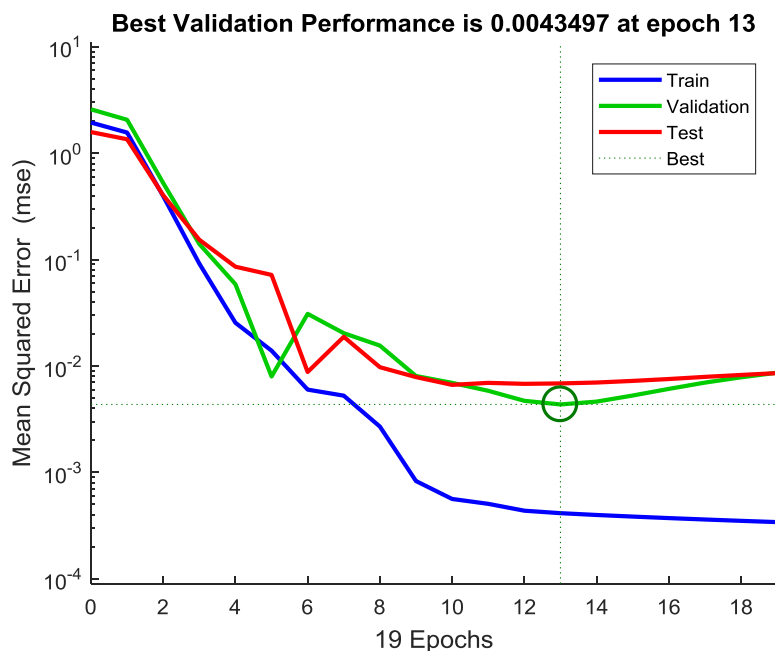
Figure 5. Scatter diagram at each modelling (training, validation, testing and all) with the coefficient of determination values.

باشد که در این تحقیق برابر با 0.043497 است. منظور از MSE بسیار کوچک (نزدیک به صفر) این است که خروجی‌های مورد نظر و خروجی‌های ANN برای مجموعه آموزشی به یکدیگر بسیار نزدیک شده‌اند.

با هر تکرار و با افزایش دوره از ۰ تا ۱۹، خطا کاهش می‌یابد و عملکرد شبکه عصبی به حداکثر می‌رسد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، بهترین عملکرد از نظر خطا و هم‌چنین نزدیک‌بودن نمودارهای آموزش و اعتبارسنجی به هم، به‌وسیله سامانه در دوره ۱۳ شناسایی شده است. آموزش در دوره ۱۳ برای داده‌های فشار جزئی که نزدیک به محدوده قابل قبول هستند، متوقف شد. میانگین مربعات خطاهای آموزش و آزمون در شکل (۶) نشان داده شده است.

باتوجه به نتایج اعتبارسنجی، MSE در دوره ۱۳، حداقل عملکرد دوره^۱ به‌معنی آموزش شبکه عصبی با تمام داده‌های آموزشی برای یک چرخه است. در یک دوره، از تمام داده‌ها دقیقاً یک بار استفاده می‌کنیم. یک پاس رو به جلو و یک پاس به عقب با هم به‌عنوان یک پاس حساب می‌شوند. یک دوره از یک یا چند دسته تشکیل شده است، جایی‌که از بخشی از مجموعه داده برای آموزش شبکه عصبی استفاده می‌کنیم. یک «دوره» تعداد دفعاتی را که الگوریتم کل مجموعه داده را می‌بیند، توصیف می‌کند. بنابراین هر بار که الگوریتم تمام نمونه‌ها را در مجموعه داده مشاهده کرد، یک دوره کامل شده است. یک ANN خوب آموزش‌دیده باید دارای MSE بسیار پایین در پایان مرحله آموزش

1. Epoch



شکل ۶. میانگین مربعات خطا در دوره‌های مختلف.

Figure 6. The mean squared error at different epochs.

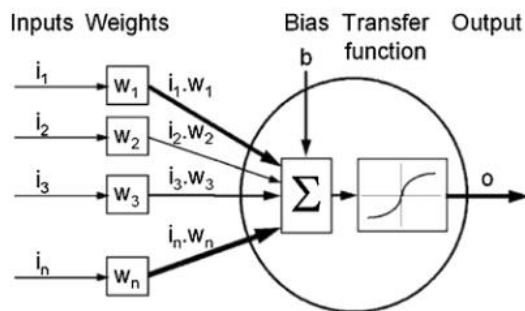
خروجی به دست می‌آید. به همین ترتیب به تعداد نورون‌ها بایاس داریم. لایه پنهان اول و دوم شامل ۲۰ و ۱۰ بایاس است.

۴. نتیجه‌گیری

هدف از این کار، پیش‌بینی داده‌های حلالیت تعادلی در سامانه‌های آمین ترکیبی آبی به‌عنوان تابعی از فشار جزئی دی‌اکسیدکربن تا ۱۵۳ کیلوپاسکال، دمای سامانه ۳۱۳/۲، ۳۳۳/۲، و ۳۵۲/۲ (کلوین) و ترکیب آمین با استفاده از مدل شبکه عصبی مصنوعی است. حداقل مربعات خطا و ضریب همبستگی به‌عنوان مقادیر آماری در این مدل، برای انتخاب بهترین مدل و ارزیابی عملکرد برازش حساب شده است. الگوریتم لونیبرگ-مارکوارت با تابع انتقال سیگموئید مماس در لایه‌های پنهان و تابع انتقال خطی (purelin) در لایه خروجی، بهترین عملکرد را در بین سایر مدل‌های MLP ارائه کرده است. بهترین عملکرد اعتبارسنجی مدل پرسپترون چندلایه، با تعداد بهینه‌سازی شده نورون‌ها، مقدار کلی ضریب همبستگی را ۰/۹۹۵۴۶ و حداقل مربعات خطا ۰/۰۴۳۴۹۷ در دوره ۱۳ داده است. تعداد بهینه نورون‌ها برای دو لایه پنهان ۳۰ است. بین نتایج شبیه‌سازی شده و مشخصه‌های تجربی فشار جزئی دی‌اکسیدکربن با استفاده از مدل پرسپترون چندلایه تطابق خوبی وجود دارد.

براساس وزن بهینه شبکه، جدول (۲) فایل پیوست نتایج مدل پرسپترون چندلایه را برای پیش‌بینی وزن‌ها نشان می‌دهد. در MLP، هر نورون یک‌لایه با اتصالات وزنی به تمام نورون‌های لایه بعدی متصل است. هر لایه ممکن است محاسبات مستقلی را روی داده‌هایی که از لایه قبلی دریافت می‌شود، انجام دهد. در یک شبکه عصبی، هر ورودی از لایه قبلی در یک ضریب وزن تطبیقی ضرب می‌شود که دو لایه را به هم متصل می‌کند. پس از آن، ورودی‌های وزن‌دار جمع می‌شوند (تابع جمع‌بندی) و یک مقدار بایاس اضافه می‌شود. سپس این فعالیت به‌وسیله یک تابع انتقال تغییر می‌کند تا خروجی لایه یا ورودی لایه بعدی تولید شود (شکل (۷)) [۳۳]. در این تحقیق دو لایه پنهان داریم که اولین لایه دارای ۲۰ نورون است که در ورودی‌ها ضرب می‌شود. همان‌طور که در جدول (۲) فایل پیوست پیداست، وزن اولین لایه پنهان به‌صورت ۲۰ سطر و ۴ ستون است. به همین ترتیب وزن دومین لایه پنهان دارای ۱۰ نورون است که در تعداد نورون‌های لایه پنهان اول ضرب می‌شود و به‌صورت ۱۰ سطر و ۲۰ ستون نوشته می‌شود. در نهایت وزن خروجی که شامل یک نورون است در تعداد نورون‌های لایه پنهان مقابل خود که شامل ۱۰ نورون بوده، ضرب می‌شود و وزن لایه

1. Summation Function



شکل ۷. سامانه ورودی-پردازش-خروجی [۳۳].

Figure 7. Input-processing-output system [33].

جدول فایل پیوست

جدول ۱. حالیت دی‌اکسید کربن در تری‌اتانول آمین و پییرازین.

Table 1. The solubility of CO₂ in TEA+PZ.

Number	TEA	PZ	Temp	Loading	Pressure
1	2	0	313.2	0.085	1.62
2	2	0	313.2	0.128	6.56
3	2	0	313.2	0.169	9.56
4	2	0	313.2	0.205	14.98
5	2	0	313.2	0.345	36.27
6	2	0	313.2	0.534	92.98
7	2	0	333.2	0.077	2.6
8	2	0	333.2	0.114	8.58
9	2	0	333.2	0.207	32.91
10	2	0	333.2	0.243	53.88
11	2	0	333.2	0.257	60.17
12	2	0	333.2	0.34	90.97
13	2	0	333.2	0.485	153.4
14	2	0	353.2	0.066	5.42
15	2	0	353.2	0.08	8.05
16	2	0	353.2	0.108	20.56
17	2	0	353.2	0.134	43.01
18	2	0	353.2	0.178	98.14
19	2	0	353.2	0.191	137.9
20	2	0.5	313.2	0.265	0.99
21	2	0.5	313.2	0.305	2.37
22	2	0.5	313.2	0.384	7.83
23	2	0.5	313.2	0.416	12.73
24	2	0.5	313.2	0.486	23.08
25	2	0.5	313.2	0.567	41.49
26	2	0.5	313.2	0.699	87.77
27	2	0.5	333.2	0.215	1.09
28	2	0.5	333.2	0.275	6.3

Number	TEA	PZ	Temp	Loading	Pressure
29	2	0.5	333.2	0.346	16.19
30	2	0.5	333.2	0.368	19.14
31	2	0.5	333.2	0.405	37.91
32	2	0.5	333.2	0.433	43.8
33	2	0.5	333.2	0.553	103.1
34	2	0.5	353.2	0.161	1.01
35	2	0.5	353.2	0.203	3.97
36	2	0.5	353.2	0.245	11.15
37	2	0.5	353.2	0.283	22.45
38	2	0.5	353.2	0.342	43.04
39	2	0.5	353.2	0.399	87.77
40	2	1	313.2	0.474	3.51
41	2	1	313.2	0.545	7.84
42	2	1	313.2	0.603	18.37
43	2	1	313.2	0.645	30.26
44	2	1	313.2	0.74	55.87
45	2	1	313.2	0.827	103
46	2	1	333.2	0.374	2.28
47	2	1	333.2	0.421	7.75
48	2	1	333.2	0.47	18.15
49	2	1	333.2	0.533	30.53
50	2	1	333.2	0.569	45.44
51	2	1	333.2	0.633	67.97
52	2	1	333.2	0.682	117.9
53	2	1	353.2	0.296	2.31
54	2	1	353.2	0.342	4.43
55	2	1	353.2	0.359	8
56	2	1	353.2	0.398	21.59
57	2	1	353.2	0.433	35.44
58	2	1	353.2	0.446	46.12
59	2	1	353.2	0.49	91.73
60	2	1.5	313.2	0.432	1
61	2	1.5	313.2	0.519	3.17
62	2	1.5	313.2	0.598	9.44
63	2	1.5	313.2	0.635	15.28
64	2	1.5	313.2	0.701	25.83
65	2	1.5	313.2	0.785	52.68
66	2	1.5	313.2	0.861	98.13
67	2	1.5	333.2	0.389	1.75
68	2	1.5	333.2	0.46	6.24
69	2	1.5	333.2	0.544	18
70	2	1.5	333.2	0.587	32.67
71	2	1.5	333.2	0.651	54.18
72	2	1.5	333.2	0.691	80.22
73	2	1.5	333.2	0.746	120.1

Number	TEA	PZ	Temp	Loading	Pressure
74	2	1.5	353.2	0.335	1.22
75	2	1.5	353.2	0.356	2.91
76	2	1.5	353.2	0.402	6.84
77	2	1.5	353.2	0.446	16.47
78	2	1.5	353.2	0.493	47.08
79	2	1.5	353.2	0.538	87.94
80	3	0	313.2	0.074	2.66
81	3	0	313.2	0.086	4.64
82	3	0	313.2	0.157	13.36
83	3	0	313.2	0.182	22.18
84	3	0	313.2	0.259	37.85
85	3	0	313.2	0.313	61.66
86	3	0	313.2	0.425	106
87	3	0	333.2	0.055	2.37
88	3	0	333.2	0.073	6.26
89	3	0	333.2	0.128	16.11
90	3	0	333.2	0.137	29.34
91	3	0	333.2	0.145	32.14
92	3	0	333.2	0.175	54.74
93	3	0	333.2	0.241	99.41
94	3	0	353.2	0.034	1.43
95	3	0	353.2	0.045	3.05
96	3	0	353.2	0.064	11.31
97	3	0	353.2	0.08	23.09
98	3	0	353.2	0.107	36.01
99	3	0	353.2	0.125	55.43
100	3	0	353.2	0.147	89.44
101	3	0.5	313.2	0.2	1.18
102	3	0.5	313.2	0.239	6.42
103	3	0.5	313.2	0.285	14.78
104	3	0.5	313.2	0.353	28.4
105	3	0.5	313.2	0.386	40.52
106	3	0.5	313.2	0.443	64.91
107	3	0.5	313.2	0.519	109
108	3	0.5	333.2	0.15	1.24
109	3	0.5	333.2	0.196	6.42
110	3	0.5	333.2	0.226	15
111	3	0.5	333.2	0.265	30.01
112	3	0.5	333.2	0.303	48.21
113	3	0.5	333.2	0.329	69.16
114	3	0.5	333.2	0.362	99.55
115	3	0.5	353.2	0.134	1.85
116	3	0.5	353.2	0.165	6.95
117	3	0.5	353.2	0.184	14.84
118	3	0.5	353.2	0.209	24.44

Number	TEA	PZ	Temp	Loading	Pressure
119	3	0.5	353.2	0.226	36.68
120	3	0.5	353.2	0.237	55.31
121	3	0.5	353.2	0.265	84.91
122	3	1	313.2	0.258	1.26
123	3	1	313.2	0.315	6.25
124	3	1	313.2	0.368	14.73
125	3	1	313.2	0.444	29.34
126	3	1	313.2	0.472	34.16
127	3	1	313.2	0.546	58.84
128	3	1	313.2	0.601	95.39
129	3	1	333.2	0.25	2.17
130	3	1	333.2	0.3	8.75
131	3	1	333.2	0.316	15.96
132	3	1	333.2	0.353	28.53
133	3	1	333.2	0.393	45.18
134	3	1	333.2	0.408	63.41
135	3	1	333.2	0.434	103.7
136	3	1	353.2	0.18	0.73
137	3	1	353.2	0.212	2.18
138	3	1	353.2	0.245	4.76
139	3	1	353.2	0.269	15.86
140	3	1	353.2	0.309	31.43
141	3	1	353.2	0.323	49
142	3	1	353.2	0.353	80.29
143	3	1.5	313.2	0.311	1.17
144	3	1.5	313.2	0.342	2.68
145	3	1.5	313.2	0.392	8.32
146	3	1.5	313.2	0.507	31.33
147	3	1.5	313.2	0.562	49.77
148	3	1.5	313.2	0.613	88.87
149	3	1.5	313.2	0.642	121.1
150	3	1.5	333.2	0.258	1.34
151	3	1.5	333.2	0.308	4.77
152	3	1.5	333.2	0.338	12.67
153	3	1.5	333.2	0.362	27.18
154	3	1.5	333.2	0.411	42.77
155	3	1.5	333.2	0.437	68.81
156	3	1.5	333.2	0.462	101
157	3	1.5	353.2	0.249	2.63
158	3	1.5	353.2	0.255	3.59
159	3	1.5	353.2	0.279	6.4
160	3	1.5	353.2	0.308	15.5
161	3	1.5	353.2	0.329	29.05
162	3	1.5	353.2	0.345	46.83
163	3	1.5	353.2	0.373	82.22

جدول ۲. شرح مدل ANN-MLP با الگوریتم لونیبرگ مارکوارت.

Table 2. A description of the ANN-MLP model with the Levenberg Marquardt algorithm.

Neuron	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
w _i : First hidden layer	-2.030	-1.771	1.030	-1.054																
	1.569	1.243	2.320	0.025																
	-1.296	-0.126	2.736	0.202																
	-1.435	0.484	-1.626	-2.579																
	1.514	-1.289	-1.405	1.648																
	-1.205	-0.414	-2.291	1.311																
	-1.766	1.007	-2.146	-1.646																
	-1.275	-1.650	-1.767	1.470																
	2.119	-0.492	0.301	-2.145																
	1.303	2.160	0.904	-1.108																
	1.587	-1.824	1.711	-0.530																
	2.514	-0.820	1.121	-1.702																
	0.619	1.328	-1.611	-2.165																
	2.324	-1.479	0.250	1.066																
	-1.252	2.120	-1.131	-1.676																
	2.420	1.288	1.447	0.133																
	1.880	-1.341	-2.039	-0.915																
	-1.711	0.208	2.165	-0.419																

		w _i		w _i : Output Inverse		b _i		w _i : Second hidden layer		Neuron							
-1.673	1.904	2.337	-2.682	2.883	0.963	-0.226	0.010	-0.021	0.793	-0.053	0.088	-0.117	-0.795	0.425	-0.650	1.614	-1.510
					-0.866	0.492	0.532	-0.364	-0.400	0.127	-0.545	-0.104	-0.524	0.105	-0.679	0.355	1.138
					1.604	0.030	0.244	0.041	0.251	0.595	0.182	0.064	0.232	0.108	0.001	1.340	1.260
					0.181	-0.118	-0.507	-0.080	-0.328	0.254	0.394	-0.330	-1.377	0.533	-0.398	-2.100	1.660
					-0.550	-0.249	0.354	-0.562	0.565	-0.363	0.190	0.768	0.477	-0.306	-0.294		
					0.853	0.230	-0.807	-0.575	-0.189	-0.489	-0.706	0.468	0.556	-0.751	-0.458		
					0.710	-0.351	0.836	0.371	0.094	-0.977	0.453	0.105	-0.774	0.662	-0.557		
					1.317	-0.231	-0.587	-0.599	-0.082	0.012	-0.209	-0.474	-0.321	-0.997	-0.200		
					-0.607	0.108	0.698	-0.538	-0.108	-0.114	0.596	0.463	-1.058	0.598	0.266		
					-0.615	-0.494	0.203	0.238	0.297	-0.729	0.393	0.477	0.340	-0.331	0.077		
						-0.677	0.189	-0.414	-0.311	0.869	0.177	-0.079	-0.160	0.557	-0.378		
						-0.441	0.826	0.709	0.444	-0.032	0.779	0.443	0.761	-0.318	0.909		
						0.449	-0.132	-0.843	-0.229	-0.023	0.431	0.294	-0.915	0.478	0.181		
						-0.447	0.136	-0.129	0.560	0.421	-0.566	0.366	0.529	-0.618	0.037		
						0.574	-0.452	-0.540	0.201	-0.098	0.128	0.368	-0.604	-0.463	0.671		
						0.105	0.178	-0.227	-0.201	0.497	-0.379	-0.413	-0.287	0.055	-0.115		
						0.454	0.000	0.069	0.351	-0.398	-0.495	0.019	-0.782	0.037	0.115		
						-0.250	-0.257	0.073	-0.673	0.093	0.184	0.043	-0.175	0.515	-0.327		
						-0.113	-0.081	0.840	-0.101	-0.557	-0.515	-0.417	-0.365	-0.306	0.027		
						-0.286	-0.431	-1.115	0.301	-0.085	0.343	0.164	0.315	0.073	-0.073		

پیش بینی حلالیت تعادل دی اکسید کربن در محلول تری اتانول آمین...
خوش رفتار و قائمی - صص: ۹۷-۷۸

Neuron	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
	1.584																			
	0.624																			
	0.784																			
	-0.359																			
	-0.431																			
	0.488																			
	0.538																			
	0.511																			
	1.238																			
	-1.114																			
	1.532																			
	1.756																			
	-2.476																			
	-2.869																			
	3.048																			
b2	1.623																			
	-1.272																			
	-0.661																			
	-0.594																			
	-0.068																			

Neuron	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
	0.033																			
	0.775																			
	-0.711																			
	1.140																			
	-1.712																			

وزن بین لایه‌های ورودی و پنهان w_i وزن بین لایه‌های مخفی و خروجی و w_l

مراجع

- [7] Tangang, F. T., Juneng, L., Salimun, E., Sei, K., & Halimatun, M. (2012). Climate change and variability over Malaysia: gaps in science and research information. *Sains Malaysiana*, 41(11), 1355-1366.
- [8] Gao, Y., Li, C., Xia, S., & Ma, P. (2021). The solubility of CO₂ in (hexane+ cyclohexane) and (cyclopentane+ ethylbenzene) and (toluene+ undecane) systems at high pressures. *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 154, 106324.
- [9] Stauffer, P. H., Keating, G. N., Middleton, R. S., Viswanathan, H. S., Berchtold, K. A., Singh, R. P., Rajesh, J. P., & Mancino, A. (2011). Greening coal: breakthroughs and challenges in carbon capture and storage.
- [10] Songolzadeh, M., Soleimani, M., Takht Ravanchi, M., & Songolzadeh, R. (2014). Carbon dioxide separation from flue gases: a technological review emphasizing reduction in greenhouse gas emissions. *The Scientific World Journal*, 2014.
- [11] Ghaemi, A., Qanadzadeh, H., Asgharpour, Z. (2013). Modeling of carbon dioxide solubility in Pz-CO₂-H₂O system. *Iranian Chemical Engineering Journal*, 13, 69-79. [In Persian].
- [12] Li, Y. G., & Mather, A. E. (1996). Correlation and prediction of the solubility of CO₂ and H₂S in aqueous solutions of triethanolamine. *Industrial & engineering chemistry research*, 35(12), 4804-4809.
- [13] Arshad, M. W., Fosbøl, P. L., von Solms, N., Svendsen, H. F., & Thomsen, K. (2014). Equilibrium solubility of CO₂ in alkanolamines. *Energy Procedia*, 51, 217-223.
- [1] Khoshraftar, Z., Ghaemi, A., & Mohseni Sigaroodi, A. H. (2021). The effect of solid adsorbents in Triethanolamine (TEA) solution for enhanced CO₂ absorption rate. *Research on Chemical Intermediates*, 47, 4349-4368.
- [2] Khoshraftar, Z., Ghaemi, A., & Mashhadimoslem, H. (2021). Evaluation of the Silica Gel Adsorbent Potential for Carbon Dioxide Capture: Experimental and Modeling. *Iranian Journal of Chemical Engineering (IJChE)*, 18(4), 64-80.
- [3] Khoshraftar, Z., & Ghaemi, A. (2022). Presence of activated carbon particles from waste walnut shell as a biosorbent in monoethanolamine (MEA) solution to enhance carbon dioxide absorption. *Heliyon*, 8(1).
- [4] Khoshraftar, Z., & Ghaemi, A. (2022). Preparation of Activated Carbon from Entada Africana Guill. & Perr for CO₂ Capture: Artificial Neural Network and Isotherm Modeling. *Journal of Chemical and Petroleum Engineering*, 56(1), 165-180.
- [5] Karimi, M., Shirzad, M., Silva, J. A., & Rodrigues, A. E. (2022). Biomass/Biochar carbon materials for CO₂ capture and sequestration by cyclic adsorption processes: A review and prospects for future directions. *Journal of CO₂ Utilization*, 57, 101890.
- [6] Stuardi, F. M., MacPherson, F., & Leclair, J. (2019). Integrated CO₂ capture and utilization: A priority research direction. *Current Opinion in Green and Sustainable Chemistry*, 16, 71-76.

- [14] Jou, F. Y., Otto, F. D., & Mather, A. E. (1985). Equilibria of H₂S and CO₂ in triethanolamine solutions. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 63(1), 122-125.
- [15] Tan, C. S., & Chen, J. E. (2006). Absorption of carbon dioxide with piperazine and its mixtures in a rotating packed bed. *Separation and purification technology*, 49(2), 174-180.
- [16] Khoshraftar, Z., & Ghaemi, A. (2022). Evaluation of pistachio shells as solid wastes to produce activated carbon for CO₂ capture: isotherm, response surface methodology (RSM) and artificial neural network (ANN) modeling. *Current Research in Green and Sustainable Chemistry*, 5, 100342.
- [17] Bello, V. E., & Olafadehan, O. A. (2021). Comparative investigation of RSM and ANN for multi-response modeling and optimization studies of derived chitosan from *Archachatina marginata* shell. *Alexandria Engineering Journal*, 60(4), 3869-3899.
- [18] Igwegbe, C. A., Onukwuli, O. D., Ighalo, J. O., & Menkiti, M. C. (2021). Bio-coagulation-flocculation (BCF) of municipal solid waste leachate using *Picralima nitida* extract: RSM and ANN modelling. *Current Research in Green and Sustainable Chemistry*, 4, 100078.
- [19] Tu, J. V. (1996). Advantages and disadvantages of using artificial neural networks versus logistic regression for predicting medical outcomes. *Journal of clinical epidemiology*, 49(11), 1225-1231.
- [20] Chung, P. Y., Soriano, A. N., Leron, R. B., & Li, M. H. (2010). Equilibrium solubility of carbon dioxide in the amine solvent system of (triethanolamine+ piperazine+ water). *The Journal of Chemical Thermodynamics*, 42(6), 802-807.
- [21] Esfe, M. H., Motallebi, S. M., & Toghraie, D. (2022). Investigation the effects of different nanoparticles on density and specific heat: Prediction using MLP artificial neural network and response surface methodology. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 645, 128808.
- [22] Dixon, B., & Candade, N. (2008). Multispectral landuse classification using neural networks and support vector machines: one or the other, or both?. *International Journal of Remote Sensing*, 29(4), 1185-1206.
- [23] Mashhadimoslem, H., Ghaemi, A., & Palacios, A. (2020). Analysis of deep learning neural network combined with experiments to develop predictive models for a propane vertical jet fire. *Heliyon*, 6(11).
- [24] Fath, A. H., Madanifar, F., & Abbasi, M. (2020). Implementation of multilayer perceptron (MLP) and radial basis function (RBF) neural networks to predict solution gas-oil ratio of crude oil systems. *Petroleum*, 6(1), 80-91.
- [25] Benamara, C., Nait Amar, M., Gharbi, K., & Hamada, B. (2019). Modeling wax disappearance temperature using advanced intelligent frameworks. *Energy & Fuels*, 33(11), 10959-10968.
- [26] Hemmati-Sarapardeh, A., Amar, M. N., Soltanian, M. R., Dai, Z., & Zhang, X. (2020). Modeling CO₂ solubility in water at high pressure and temperature conditions. *Energy & Fuels*, 34(4), 4761-4776.
- [27] Wei, X., Zou, N., Zeng, L., & Pei, Z. (2022). PolyJet 3D printing: Predicting color by multilayer perceptron neural network. *Annals of 3D Printed Medicine*, 5, 100049.
- [28] Dugas, R. E., & Rochelle, G. T. (2011). CO₂ absorption rate into concentrated aqueous monoethanolamine and piperazine. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 56(5), 2187-2195.
- [29] Okut, H. (2016). Bayesian regularized neural networks for small n big p data. *Artificial neural networks-models and applications*, 28.
- [30] Shekarkar, H., Kathiri N., Mohammadi, T. (2013). Modeling of microfiltration membrane for oil wastewater treatment using Hermia model and neural network. *Journal of Iranian Chemical Engineering*, 76, 4-12, [In Persian].
- [31] Zahedi, G., Kerami, Z. (2008). Simulation of delayed coking unit by artificial neural network. *Journal of Iranian Chemical Engineering*, 38, 1-15, [In Persian].
- [32] Etemad, I., Ghaemi, A., Shirvani, S. (2014). Prediction of CO₂ mass transfer flux in amine solutions using neural networks. *Journal of Iranian Chemical Engineering*, 79, 98-106, [In Persian].
- [33] Ziaee, S. A., Sadrossadat, E., Alavi, A. H., & Mohammadzadeh Shadmehri, D. (2015). Explicit formulation of bearing capacity of shallow foundations on rock masses using artificial neural networks: application and supplementary studies. *Environmental earth sciences*, 73, 3417-3431.