

مدل سازی جذب دی اکسید کربن با محلول آبی پیرازین / پتاسیم

کربنات با استفاده از شبکه های عصبی MLP، RBF

فاطمه بهمن زادگان^۱، احد قائمی^{*۲}

۱- دانشجوی 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 مقاله، تاثیر شرایط عملیاتی و محلول آبی بر نرخ جذب دی اکسید کربن با استفاده از روش سطح پاسخ و شبکه عصبی مدل سازی شد. ورودی های شبکه شامل دما، فشار، میزان درصد پیرازین و پتاسیم کربنات به عنوان حلال و شار انتقال جرم دی اکسید کربن بعنوان خروجی در نظر گرفته شد. از نتایج یادگیری شبکه MLP با سه لایه پنهان و به ترتیب تعداد ۱۰، ۴۰ و ۱۰ نورون در هر لایه و تابع آموزش لونیبرگ مارکوات، MSE و R^2 به ترتیب برابر با ۰/۰۰۱۸۶۱۶ و ۰/۹۹۹۲۴ بدست آمد. شبکه RBF نیز توانست MSE و R^2 به ترتیب برابر با ۰/۰۰۰۰۴ و ۰/۹۹۸۴۹ بعد از ۲۰۰ اپوک دست یابد. به طور کلی شبکه MLP نتایج بهتری را نشان داد زیرا در مدت زمان کمتری توانست نتیجه با دقت بالایی ارائه دهد.

کلمات کلیدی: جذب واکنش دار، پیرازین، پتاسیم کربنات، دی اکسید کربن، شبکه عصبی، شبکه پرسپترون

چندلایه، شبکه پایه شعاعی

۱- مقدمه

انتشار گازهای گلخانه‌ای و افزایش نقش آن‌ها در گرم شدن کره زمین تبدیل به یک مسئله مهم شده که باعث نگرانی‌های زیادی در سال‌های اخیر شده است. از جمله گازهای گلخانه‌ای شناخته شده، دی‌اکسیدکربن حاصل از احتراق سوخت‌های فسیلی می‌باشد که ۹۶ درصد از تولید گازهای گلخانه‌ای در کل را به خود اختصاص داده است [۱]. فرآیندهای مختلفی برای جذب دی‌اکسیدکربن توسعه یافته‌اند. این فرآیندها شامل جذب با استفاده از حلال [۲]، جذب سطحی [۳]، غشایی [۴] و سرما سازی [۵] است. یکی از کارآمدترین فناوری‌ها برای جذب گازهای اسیدی استفاده از فرآیند جذب واکنشی توسط حلال است که در حال حاضر برای جداسازی دی‌اکسیدکربن در فرآیند تولید آمونیاک و تصفیه گاز طبیعی استفاده می‌شود. قائمی و همکاران از آمونیاک برای جذب دی‌اکسیدکربن استفاده کردند و انتقال جرم دی‌اکسیدکربن را مدل سازی کردند [۲]. در پژوهش دیگری، رستگار و همکاران به بررسی جذب واکنش دار دی‌اکسیدکربن توسط محلول پتاسیم هیدروکسید پرداختند. آنها در بازه دمای ۲۵-۶۵ درجه سلسیوس و فشار ۲ بار میزان جذب دی‌اکسیدکربن را بررسی کردند. نتایج نشان داد شرایط بهینه دمای ۳۵ درجه و فشار ۴ بار بود که میزان افزایش جذب ۳۲ درصدی دی‌اکسیدکربن را در پی داشت [۶].

استفاده از روش سطح پاسخ^۱ (RSM) برای بهینه‌سازی فرآیند جذب دی‌اکسیدکربن در سال‌های اخیر مورد توجه قرار گرفته است [۷، ۸]. پاشایی و همکاران تأثیر شرایط عملیاتی مختلف را بر عملکرد هیدرودینامیکی و انتقال جرم بر سامانه حاوی آب و پپیرازین برای جذب دی‌اکسیدکربن مورد بررسی قرار دادند. در این مقاله برای بهینه‌سازی فرآیند، از روش سطح پاسخ و طراحی مرکب مرکزی^۲ (CCD) با روش حداقل مربعات خطا استفاده شد. سپس داده‌ها با استفاده از تحلیل واریانس تجزیه و تحلیل شدند و مدل با R^2 برابر با ۰/۹۹ نتایج مطلوبی را نشان داد [۹]. در تحقیق دیگری بهروزی و همکاران از ترکیب مخلوطی آبی متیل دی اتانول آمین^۳ (MDEA) برای جذب دی‌اکسیدکربن استفاده کردند. آزمایش‌ها بر اساس روش RSM تحت شرایط عملیاتی محدوده فشار ۲ تا ۸ بار، محدوده دمایی ۲۰ تا ۷۰ درجه سلسیوس و محدوده غلظت MDEA ۱۰ تا ۲۰ درصد وزنی طراحی شدند. نتایج نشان داد که با افزایش فشار اولیه از ۳/۵ به ۸ بار، جذب تعادلی دی‌اکسیدکربن ۱۷/۸ درصد افزایش می‌یابد. بر اساس روش CCD و RSM، یک رابطه جدید برای جذب دی‌اکسیدکربن با ضریب همبستگی ۰/۹۹۴، به عنوان تابعی از متغیرهای مستقل به دست آمد [۱۰]. در سال‌های اخیر استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی^۴ (ANN) نیز به منظور مدل سازی و پیش بینی فرآیندها مورد توجه قرار گرفته اند [۱۱-۱۳]. در فرآیندهای جذب گاز دی‌اکسیدکربن توسط حلال از دو جنبه

1 Response Surface Methodology

2 Central Composite Design

3 Methyl-diethanolamine

4 Artificial Neural Networks

پیش‌بینی متغیرهای هیدرودینامیکی [۱۴] و همچنین انتقال جرم [۱۵] تحقیقات گسترده‌ای صورت گرفته است. پاشایی و همکاران برای مدل‌سازی و بهینه‌سازی فرآیند جذب دی‌اکسیدکربن از شبکه‌های عصبی پرسپترون چندلایه (MLP) و پایه شعاعی (RBF) استفاده کردند که حداقل میزان خطا برای MLP و RBF برای شار انتقال جرم به ترتیب ۰/۰۰۰۱۹ و ۰/۰۰۰۴۸ بود [۱۶]. در مطالعه دیگری ظفری و همکاران به مدل‌سازی و بهینه‌سازی شار انتقال جرم دی‌اکسیدکربن در ترکیبی از آمین‌های پپیرازین^۳ (PZ) و مونو اتانول آمین^۴ (MEA) با استفاده از ANN و RSM پرداختند. در این پژوهش اعداد بدون بعد تولید شده توسط روش پای باکینگهام، به عنوان ورودی شبکه‌های عصبی مصنوعی و RSM استفاده شدند. شبکه‌های عصبی مصنوعی بهینه شده و ساختاری با کمترین خطا و بیشترین تطابق با داده‌های تجربی به دست آمدند. هر دو مدل ANN و RSM پیش‌بینی قابل قبولی از داده‌های تجربی را با حداکثر مقدار R^2 به ترتیب ۰/۹۹۷۴ و ۰/۹۷۲۳ نشان دادند. با توجه به میانگین مربعات خطای ۰/۰۰۰۵۴، ANN برای توسعه مدل‌های شبیه‌سازی جذب در این مقاله معرفی شد [۱۷]. سایر فعالیت‌های انجام شده در این حوزه در جدول ۱ آورده شده است:

جدول ۱. مدل‌های شبکه عصبی برای جذب دی‌اکسید کربن

Table 1. Neural network models for carbon dioxide absorption

تحقیق	شبکه‌های مورد استفاده	معیارها	مرجع
نوروز بهاری و همکاران (۲۰۱۵)	MLP	$R^2 = 0.9977$ $MSE = 0.0006$	[۱۸]
گارگ ^۵ و همکاران (۲۰۱۷)	MLP	$R^2 = 0.9930$ $MSE = 0.0020$	[۱۹]
پاکزاد و همکاران (۲۰۲۰)	MLP	$R^2 = 0.9960$ $MSE = 0.0002$	[۲۰]
همتی و همکاران (۲۰۲۰)	MLP-RBF	$R^2 = 0.9990 - 0.9960$ $MSE = 0.0001 - 0.0009$	[۲۱]
ظفری و همکاران (۲۰۲۳)	MLP-RBF	$R^2 = 0.9914 - 0.9974$ $MSE = 0.0005 - 0.0010$	[۱۷]
خوش‌رفتار و همکاران (۲۰۲۳)	MLP	$R^2 = 0.9994$ $MSE = 0.0001$	[۲۲]
نوروزیان و همکاران (۲۰۲۳)	MLP-RBF	$R^2 = 0.998 - 0.999$ $MSE = 0.0001$	[۲۳]
خوش‌رفتار و همکاران (۲۰۲۳)	MLP-RBF	$R^2 = 0.99902 - 0.99936$ $MSE = 0.00665 - 0.21669$	[۲۴]

با توجه به نتایج به دست آمده از مقالات قبل، روش مدل‌سازی و بهینه‌سازی با استفاده از ANN و RSM بسیار اثرگذار بوده، لذا تحقیقات در این زمینه کمک شایانی به انتخاب محلول‌های آمینی برای جذب بیشینه دی‌اکسیدکربن خواهد کرد. لذا در این

¹ Multi-Layer Perceptron

² Radial Basic Function

³ Piperazine

⁴ Monoethanolamine

⁵ Garg et al.

تحقیق، مدلسازی فرآیند جذب واکنشدار دی‌اکسیدکربن توسط محلول نوآورانه کربنات پتاسیم و پیرازین انجام شده است تا اثر پارامترهای موثر بر جذب مورد ارزیابی قرار گیرد. ابتدا داده‌ها به منظور بهینه‌سازی، وارد نرم افزار طراحی آزمایش شده، آنالیز صورت گرفته و سپس با استفاده از شبکه عصبی به مدل‌سازی فرآیند جذب پرداخته شد.

۲- مروری بر مدلسازی‌های انجام شده

۲-۱- استفاده از روش سطح پاسخ در نرم افزار طراحی آزمایش

روش RSM از تکنیک‌های آماری برای بهینه‌سازی پاسخ‌ها با تنظیم متغیرها در یک طرح آزمایشی استفاده می‌کند. با برازش یک مدل ریاضی بر داده‌های تجربی، RSM امکان پیش‌بینی و بهینه‌سازی متغیرهای پاسخ را فراهم می‌کند. تجزیه و تحلیل آماری در تفسیر رابطه بین متغیرها و تصمیم‌گیری آگاهانه بسیار مهم است. اولین مرحله در تجزیه و تحلیل آماری شامل برازش یک مدل سطح پاسخ به داده‌ها با تخمین ضرایب رگرسیون و تعیین اهمیت هر عبارت است. تجزیه و تحلیل واریانس^۱ (ANOVA) به شناسایی عوامل تأثیرگذار و تعامل‌های آن‌ها کمک می‌کند. ANOVA در مدل RSM برای ارزیابی کیفیت مدل انتخاب شده، استفاده می‌شود. این تکنیک شامل انتخاب ورودی‌های مستقل و کاهش اندازه داده است که مرحله پردازش را ساده می‌کند. مدل‌سازی پاسخ‌ها بدون هیچ‌گونه استنتاج انجام می‌شود. رمزگذاری ورودی‌های X در شرایط طراحی برای پیش پردازش مفید است. این ورودی‌ها را می‌توان به راحتی به مقادیر واقعی تبدیل کرد، در حالی که خروجی‌ها شامل داده‌های مشاهده شده است. با بررسی مقادیر P و F می‌توان اهمیت مدل‌ها را تعیین کرد. مقادیر بالاتر F نشان دهنده اعتبار مدل است که با استفاده از معادله‌های (۱) و **(Error! Reference source not found.)** محاسبه می‌شود.

$$F_0 = \frac{MS_R}{MS_E} \quad (1)$$

$$MS_E = \frac{SS_E}{n - P}, \quad (2)$$

معادله‌های (۳) و (۴) SS_R و SS_E را تخمین می‌زند، که در آن SS_E مخفف مجموع مربعات خطاها و SS_R مخفف مجموع مربعات رگرسیون است.

$$SS_R = \sum (\hat{Y}_i - \bar{Y})^2 \quad (3)$$

$$SS_E = \sum (Y_i - \hat{Y}_i)^2 \quad (4)$$

¹ Analysis of Variance

متغیرهای \bar{Y}_i و Y_i به ترتیب میانگین و مقدار واقعی یک پاسخ را نشان می‌دهند. علاوه بر این، \hat{Y}_i مقدار پیش‌بینی شده پاسخ است که از مدل رگرسیون به دست می‌آید. به عبارت دیگر، \bar{Y}_i و Y_i میانگین و ارزش واقعی یک پاسخ را نشان می‌دهند، در حالی که \hat{Y}_i مقدار پیش‌بینی شده توسط مدل رگرسیون است [۲۵].

در حوزه تحلیل رگرسیون، R^2 تعدیل‌شده نسخه‌ای اصلاح‌شده از ضریب تعیین متعارف (R^2) ظاهر می‌شود. تفاوت اصلی آن در لحاظ کردن تعداد پیش‌بینی‌کننده‌های استفاده‌شده در مدل است، که این ویژگی ارزیابی دقیق‌تری از برازش مدل ارائه می‌دهد. برخلاف R^2 ، R^2 تعدیل‌شده به مدل‌هایی که شامل پیش‌بینی‌کننده‌های اضافی غیرمؤثر هستند، امتیاز کمتری می‌دهد. افزایش مقدار R^2 تعدیل‌شده نشان‌دهنده برازش بهتر مدل است و در عین حال بر سادگی مدل تأکید دارد، چرا که از ورود متغیرهای غیرضروری جلوگیری می‌کند [۲۶].

R^2 پیش‌بینی‌شده نقش مهمی در ارزیابی قدرت پیش‌بینی یک مدل رگرسیون، به‌ویژه در زمینه روش‌شناسی سطح پاسخ، ایفا می‌کند. این معیار نشان می‌دهد چه بخشی از واریانس متغیر پاسخ را می‌توان با استفاده از پیش‌بینی‌کننده‌های خارج از داده‌های مشاهده‌شده، مانند مقادیری که از طریق برون‌یابی به دست می‌آیند، توضیح داد. R^2 پیش‌بینی‌شده بالاتر بر مهارت مدل در پیش‌بینی فراتر از محدوده‌های منطقه آزمایشی تأکید می‌کند و در نتیجه قابلیت اطمینان پیش‌بینی‌ها را در مناطق ناشناخته بررسی می‌کند [۲۶].

$$R^2 = \frac{SS_R}{SS_{Total}} - 1 \quad (5)$$

$$R^2_{adj} = \frac{(n-1)(R^2-1)}{n-k-1} - 1 \quad (6)$$

معادلات (۵) و (۶) مربوط به R^2 و R^2 تعدیل‌شده است که n ، تعداد کل مشاهدات و k تعداد متغیرهای مستقل (پیش‌بینی‌کننده‌ها) در مدل است.

۲-۲- مدلسازی با استفاده از شبکه‌های عصبی

طراحی و توسعه سیستم‌های هوشمند و خودمختار از دیرباز یکی از اهداف کلیدی علوم و مهندسی بوده است. شبکه‌های عصبی مصنوعی، به‌عنوان ابزاری قدرتمند در این زمینه، طی دهه‌های گذشته جایگاه ویژه‌ای در حل مسائل پیچیده پیدا کرده‌اند. اگرچه مطالعات اولیه در مورد ANN بیش از ۵۰ سال پیش آغاز شد، تحقیقات عمیق‌تر از دهه ۱۹۹۰ به این فناوری شتاب بیشتری بخشید. این ابزار به دلیل توانایی خود در شبیه‌سازی و پیش‌بینی فرآیندهای پیچیده، کاربردهای گسترده‌ای در زمینه‌های مختلف، به‌ویژه مهندسی شیمی، پیدا کرده است. در مهندسی شیمی، شبکه‌های عصبی مصنوعی برای بهینه‌سازی فرآیندها و

طراحی سیستم‌های کارآمد استفاده می‌شوند. یکی از حوزه‌های برجسته این کاربردها، جذب دی‌اکسید کربن است. استفاده از محلول‌های آمینی برای جذب CO₂ از جریان‌های گازی، از جمله فرآیندهایی است که با کمک ANN بهبود یافته است. شبکه‌های عصبی مصنوعی می‌توانند رفتار سیستم‌های جذب را با دقت بالا مدل‌سازی کرده و اثر پارامترهایی مانند غلظت محلول آمینی، دما، فشار و زمان تماس را پیش‌بینی کنند. این قابلیت باعث می‌شود که فرآیند جذب CO₂ با کارایی بیشتری طراحی شده و مصرف انرژی کاهش یابد. برای مثال، ANN می‌تواند در شناسایی محلول‌های آمینی بهینه برای جذب حداکثری CO₂ مورد استفاده قرار گیرد، یا تأثیر ترکیبات مختلف محلول را بر میزان جذب و نرخ بازسازی بررسی کند [۱۶].

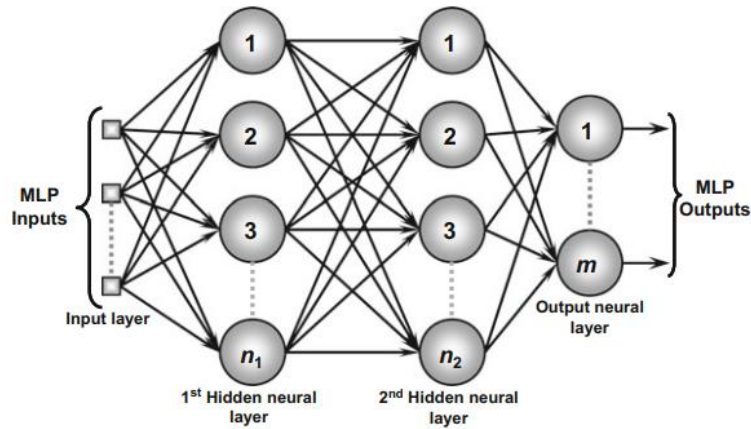
۲-۱-۲- شبکه MLP

شبکه پرسپترون چند لایه حداقل دو لایه عصبی دارند و نورون‌های آن‌ها بین لایه‌های میانی و خروجی توزیع شده‌اند. شبکه‌های MLP همچنین به دلیل کاربرد گسترده‌ای در چندین مسئله از حوزه‌های دانش مختلف شناخته شده‌اند و همچنین یکی از متنوع‌ترین معماری‌ها از نظر کاربردی بودن محسوب می‌شوند [۲۷].

در قلب پردازش داده‌ها در شبکه، نورون قرار دارد که به عنوان واحد محاسباتی اساسی که ورودی‌های عددی را می‌پذیرد و خروجی‌های عددی تولید می‌کند، عمل می‌کند. اتصالات درون شبکه به خروجی یک نورون اجازه می‌دهد تا به عنوان ورودی برای نورون دیگر عمل کند، با هر اتصال وزنی که اهمیت نسبی آن را منعکس می‌کند. یک نورون واحد ممکن است چندین متغیر ورودی و اتصالات خروجی را در خود جای دهد. مجموع وزن دار تحت یک فرآیند انتقال فعال سازی برای تولید خروجی قرار می‌گیرد و به دنبال آن یک مقدار آستانه یا مقدار برش برای مجموع اعمال می‌شود. این فرآیند در معادله (۵) برای داده‌های ورودی نشان داده شده است.

$$net = \left(\sum_{i=1}^N \omega_i x_i \right) + b \quad (5)$$

شبکه‌های MLP متعلق به معماری پیشخور چند لایه هستند که آموزش آن با یک فرآیند نظارت شده انجام می‌شود. همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، جریان اطلاعات درون شبکه از لایه ورودی شروع می‌شود، از لایه‌های میانی عبور می‌کند و با لایه عصبی خروجی به پایان می‌رسد. همچنین، شبکه‌های MLP معمولی هیچ بازخوردی از مقادیر تولید شده توسط لایه عصبی خروجی یا لایه‌های عصبی میانی ندارند.



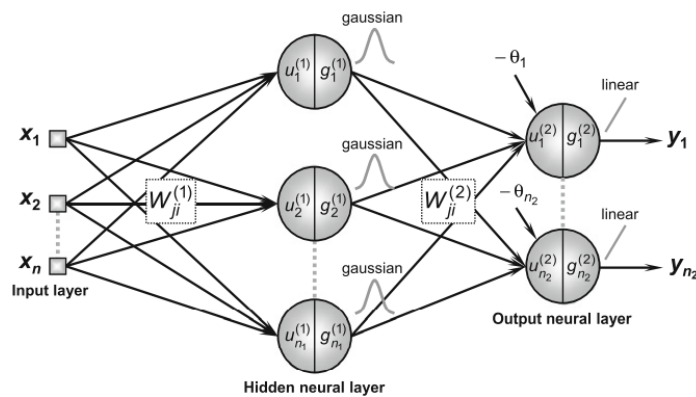
شکل ۱. شبکه پرسپترون چند لایه [۲۸]

Figure 1. Multi-layer perceptron network [28]

شبکه‌های MLP متعلق به معماری پیشخور چند لایه هستند که آموزش آن با یک فرآیند نظارت شده انجام می‌شود. همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، جریان اطلاعات درون شبکه از لایه ورودی شروع می‌شود، از لایه‌های میانی عبور می‌کند و با لایه عصبی خروجی به پایان می‌رسد. همچنین، شبکه‌های MLP معمولی هیچ بازخوردی از مقادیر تولید شده توسط لایه عصبی خروجی یا لایه‌های عصبی میانی ندارند.

۲-۲-۲- شبکه RBF

شبکه‌های تابع پایه شعاعی، که معمولاً به عنوان RBF شناخته می‌شوند، می‌توانند تقریباً در هر نوع مسئله‌ای که توسط MLP حل می‌شود، از جمله مواردی که شامل برازش منحنی و طبقه‌بندی الگو هستند، استفاده شوند. متفاوت تر از شبکه‌های MLP، که می‌توانند از چندین لایه میانی تشکیل شوند، ساختار RBF تنها از یک لایه میانی تشکیل شده است که در آن تابع فعال سازی، گاوسی است و در شکل ۲ نشان داده شده است.



شکل ۲. شبکه پایه شعاعی [۲۸]

Figure 2. Radial base function network [28]

در شبکه RBF تک تک نورون‌های پنهان در شبکه، فاصله یا بعد هندسی بین بردار خروجی و وزن‌ها را ارزیابی می‌کنند. معادله (۶) عملکرد لایه خروجی را در شبکه الگوریتم RBF، که بر ترکیب کننده‌های خطی متکی است، روشن می‌کند.

$$f(x) = \sum_{i=1}^N w_{ij} G(\|x - c_i\| * b) \quad (6)$$

N نشان‌دهنده تعداد مجموعه داده‌های آموزشی، W وزن مرتبط با هر نورون پنهان، X نشان دهنده بردار ورودی، C نشان دهنده نقاط مرکزی و b نشان دهنده سوگیری است. استفاده از یک معادله، معادله (۶) تعیین پاسخ متمرکز را از نقطه پنهان تسهیل می‌کند.

$$G(\|x - c_i\| * b) = \exp\left(-\frac{1}{2\sigma_i^2} (\|x - c_i\| * b)^2\right) \quad (7)$$

σ_i نشان دهنده گسترش تابع است. محدوده توصیف شده نشان دهنده وسعت فضای ورودی است که نورون RBF می‌تواند به آن واکنش نشان دهد.

یکی از ویژگی‌های اصلی شبکه‌های RBF، استراتژی تمرینی است که برای تنظیم وزن هر دو لایه عصبی آن‌ها استفاده می‌شود. همانطور که در شکل ۲ نشان داده شده است، یکی دیگر از ویژگی‌های متمایز کننده این معماری شبکه، تابع فعال سازی است که توسط نورون‌های لایه میانی استفاده می‌شود، که همیشه تابع پایه شعاعی مانند گاوسی است. نیز به معماری پیشخور چند لایه تعلق دارند که آموزش آن تحت نظارت است. از شکل ۲ می‌توان دریافت که اطلاعاتی که در ساختار آن جریان دارد از لایه ورودی شروع می‌شود، به لایه میانی (نورون‌ها با تابع فعال‌سازی گاوسی) انتشار می‌یابد و به لایه عصبی خروجی (نورون‌هایی با تابع فعال‌سازی خطی) ختم می‌شود.

۲-۲-۳- توابع آموزشی

توابع آموزشی مختلفی وجود دارد که برای آموزش یک شبکه استفاده می‌شود. در این تحقیق، سه تابع آموزش شبکه عصبی مقایسه خواهند شد. این توابع آموزشی عبارتند از: گرادیان مزدوج^۱، لونیگ-مارکوارت^۲ و تنظیم بی‌زین^۳.

۲-۲-۴- میانگین مربعات خطا^۴ (MSE)

1 trainseg

2 trainlm

3 trainbr

4 Mean Squared Error

MSE میانگین مربعات خطا، همچنین می‌تواند به عنوان یک تابع ضرر در نظر گرفته شود که باید کاهش یابد و اغلب در برنامه‌های یادگیری ماشین در دنیای واقعی استفاده می‌شود.

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (Y_{predicted} - Y_{real})^2 \quad (8)$$

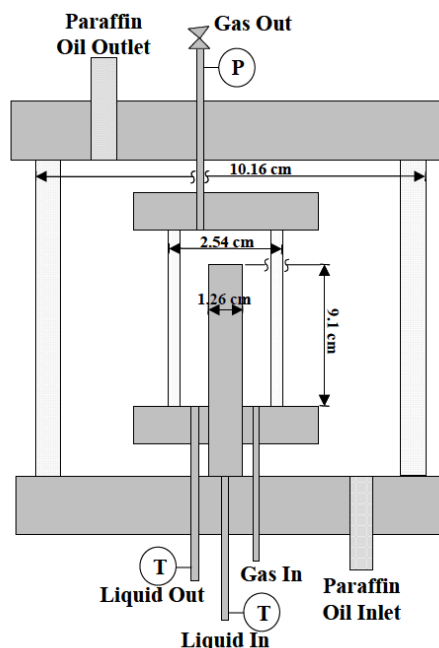
ضریب تعیین برازش (R^2) مدل را با نتایج علمی ارزیابی می‌کند. هر چه ضریب تعیین برازش (R^2) به ۱ نزدیک‌تر باشد، پیش‌بینی‌های داده‌های تجربی بالاتر است. R^2 در معادله (۸) محاسبه می‌شود:

$$R^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{(Y_{predicted} - Y_{real})^2}{(Y_{predicted} - Y_{mean})^2} \quad (9)$$

۳- معرفی فرآیند

در فرآیند جذب گاز-مایع، یک جریان گاز حاوی آلاینده CO_2 از پایین وارد یک برج جذب می‌شود. CO_2 حذف شده و گاز تصفیه شده از بالای ستون خارج می‌شود. یک حلال بدون CO_2 وارد قسمت بالایی برج جذب می‌شود و در حالت جریان متقابل با فاز گاز در تماس می‌گیرد. CO_2 جذب شده و حلال غنی از CO_2 از برج جذب خارج می‌شود. سپس حلال در یک مبدل جریان متقابل پیش گرم و به بالای برج دفع کننده پمپ می‌شود. یک جریان غنی از دی‌اکسیدکربن بازیابی شده و گرما در فرآیند دفع از جریان حلال گرفته می‌شود. همچنین قبل از استفاده از حلال در فرآیند جذب، باید دمای آن در یک خنک کننده کاهش یابد [۹].

در این تحقیق برای جذب دی‌اکسیدکربن یک ترکیب نوآورانه از کربنات پتاسیم و پیرازین را به عنوان حلال برای حذف CO_2 از گاز دودکش حاصل از احتراق در یک فرآیند جذب واکنش‌دار استفاده شده است. اضافه کردن پتاسیم به آمین، غلظت یون‌های کربنات CO_3^{2-} و بی کربنات HCO_3^- را در محلول افزایش می‌دهد [۲۹].



شکل ۳. شماتیکی از دستگاه تست جذب دی‌اکسیدکربن [۳۰]

Figure 3. Schematic of carbon dioxide absorption test device [30]

در این تحقیق از یک ستون دیواره مرطوب برای انجام تمام آزمایش‌های تعادل بخار-مایع و نرخ جذب CO_2 استفاده شد. ستون دیواره مرطوب که در شکل نشان داده شده است، این ستون از یک لوله فولادی ضد زنگ به طول ۹/۱ سانتی متر با قطر ۱/۲۶ سانتی متر تشکیل شده است. کل سطح تماس، ۳۸/۵۲ سانتی متر مربع، مساحت طولی لوله، ۳۶/۰۳ سانتی متر مربع محاسبه شده است و مساحت بالای ستون (به دلیل شکل فیلم مایع، نیمکره در نظر گرفته می شود) ۲/۴۹ سانتی متر مربع می باشد. ستون توسط یک سیلندر شیشه ای با دیواره ضخیم با قطر خارجی ۲/۵۴ سانتی متر مربع محصور شده است تا محفظه تماس گاز و مایع را فراهم کند. قطر هیدرولیکی (قطر بیرونی منهای قطر داخلی) محفظه ۰/۴۴ سانتی متر است. که سطح مقطع را برای جریان گاز ۱/۳ سانتی متر مربع ایجاد می کند. این محفظه در داخل یک استوانه شیشه ای با قطر بیرونی ۱۰/۱۶ سانتی متر قرار دارد که به عنوان یک محفظه عایق با سیال انتقال حرارت در گردش عمل می کند.

۴- مدلسازی و بهینه سازی فرآیند

۴-۱- مدلسازی با استفاده از روش RSM

ابتدا داده‌های تجربی جذب CO_2 در مخلوط‌های K/PZ از مرجع مورد نظر انتخاب شد [۳۰]. میزان جذب CO_2 در یک ستون دیواره مرطوب در ۳/۶-۰/۴۵ مول پیپرازین و ۱/۳-۰ مول کربنات پتاسیم در دمای ۲۵-۱۱۰ درجه سانتی گراد اندازه گیری شد. جدول ۲ پارامترهای ورودی و خروجی در نرم افزار طراحی آزمایش را نشان می‌دهد. با وارد کردن داده‌های پژوهش در نرم افزار طراحی آزمایش،

براساس مقادیر R^2 و p ، مدل Sixth و Cubic برای رگرسیون پیشنهاد شدند. تجزیه و تحلیل پارامترهای ورودی و مدل درجه دوم با استفاده از ANOVA اهمیت آن‌ها را مشخص کرد. در مدل درجه ششم، هر عبارت از نظر معناداری با استفاده از p -value ارزیابی شد و تجزیه و تحلیل احتمال p -value با سطح اطمینان ۹۵٪ انجام شد. به عبارت دیگر، عبارات با p -value کمتر یا مساوی ۰/۰۵ ناچیز در نظر گرفته می‌شوند. F -value بالاتر برای ترم‌های مدل که تأثیر قابل توجهی بر پاسخ نشان می‌دهند، نشان‌دهنده اهمیت آن‌ها است.

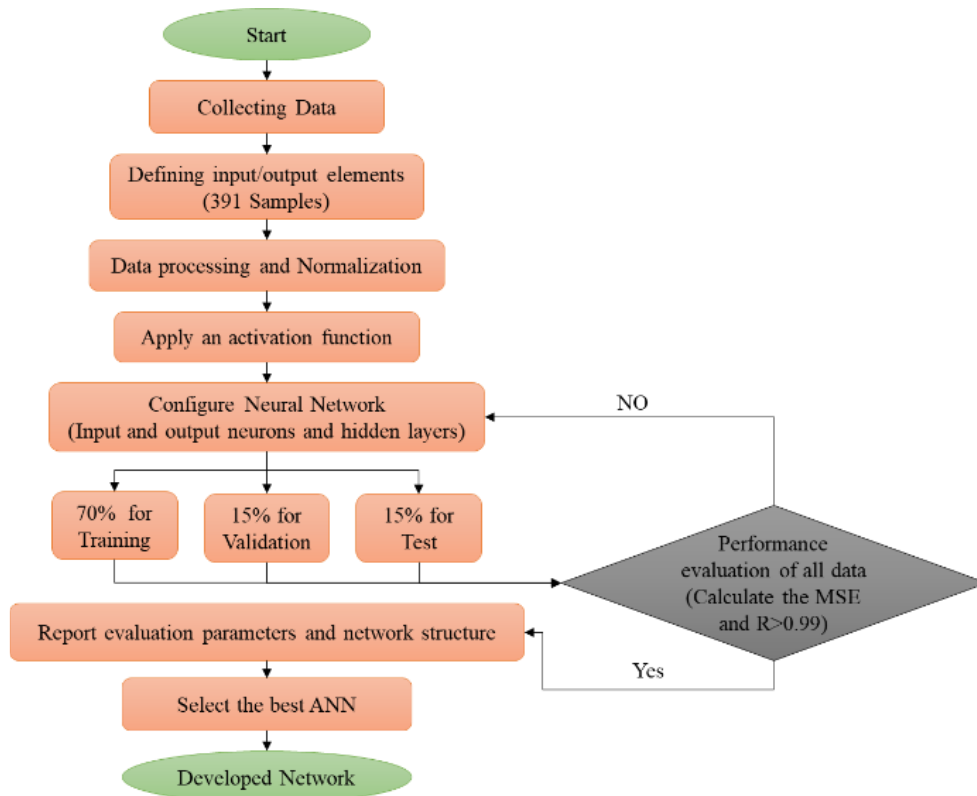
جدول ۲. ورودی و خروجی‌های فرآیند جذب دی‌اکسید کربن

Table 2. Inputs and outputs of carbon dioxide absorption process

درجه اهمیت	حد بالا	حد پایین	نوع متغیر	نام متغیر
۳	۱۱۱/۷	۳۷/۹	ورودی	دما
۳	۰/۷۶۱	۰/۲۶۲	ورودی	درصد بارگذاری
۳	۶۰۰۵۶	۸	ورودی	فشار بالک دی‌اکسیدکربن
۳	۳۶۷۱۴	۰	ورودی	فشار جزئی دی‌اکسیدکربن
۳	۳۱۲۸۵۰۰۰۰	۱۰۰۰۰۰	خروجی	شار خروجی دی‌اکسیدکربن

۴-۲- مدلسازی با استفاده از شبکه عصبی

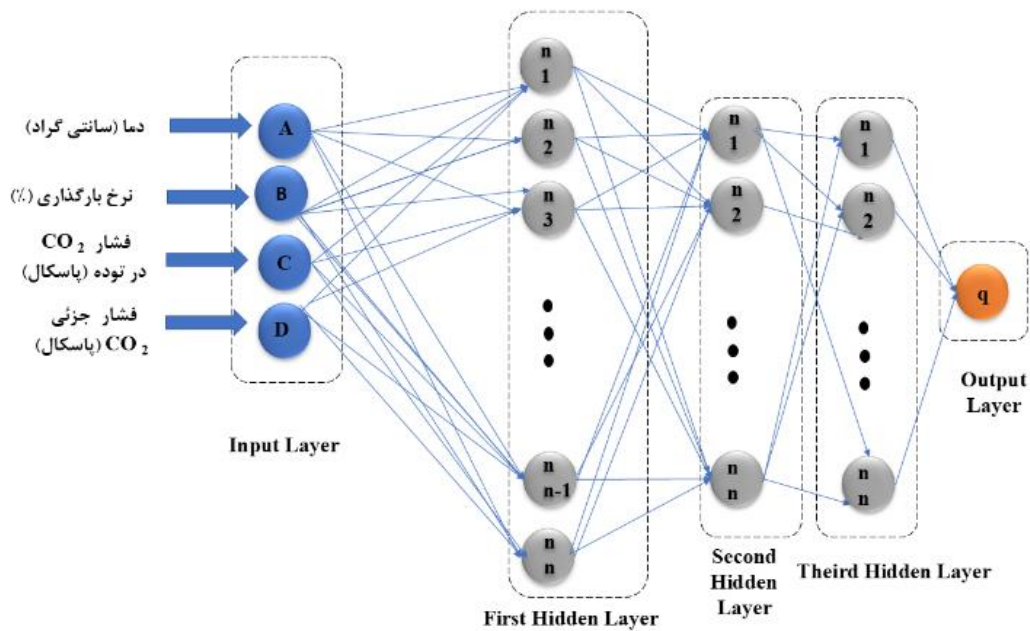
از دو شبکه MLP و RBF برای مدلسازی فرآیند جذب دی‌اکسیدکربن با استفاده از محلول پیرازین با پتاسیم کربنات استفاده شد. داده‌ها برای مدلسازی فرآیند جذب دی‌اکسیدکربن مورد استفاده قرار گرفت. در شبکه ANN، الگوریتم فرآیند به صورت شکل ۳ است. این الگوریتم از مراحل بسیاری تشکیل شده است. مرحله اول شامل شناسایی و جمع‌آوری داده‌ها است. مرحله بعدی وارد کردن داده‌ها به شبکه به عنوان ورودی و خروجی است.



شکل ۳. الگوریتم آموزش شبکه ANN

Figure 4. ANN network training algorithm

در شکل ۴ داده‌های ورودی‌ها، خروجی و ساختار شبکه MLP نشان داده شده است.



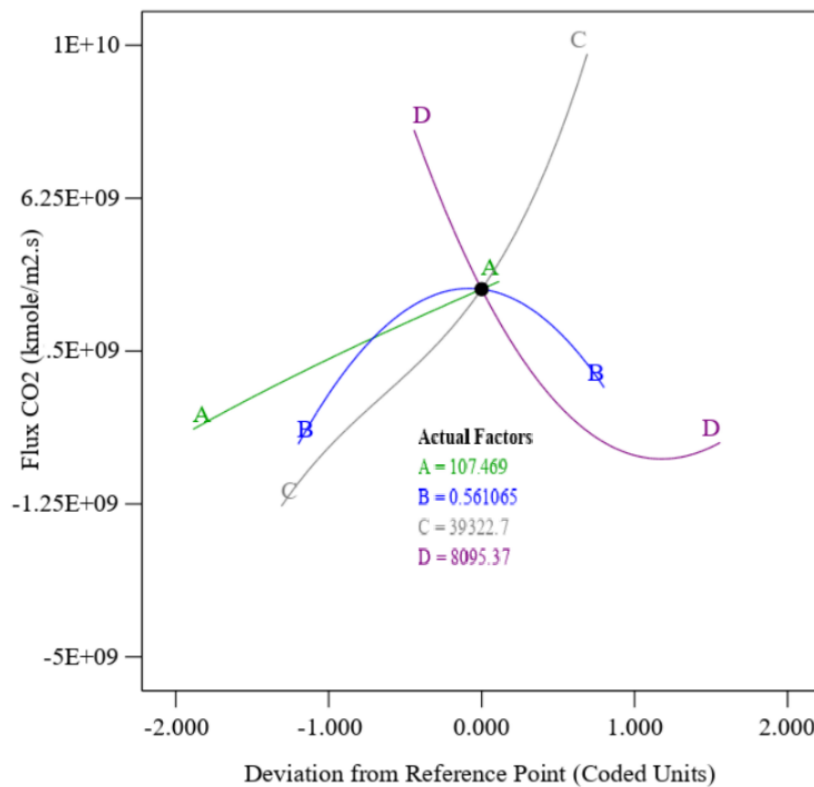
شکل ۴. ساختار شبکه MLP مورد استفاده در فرآیند

Figure 5. MLP network structure used in the process

۵- نتایج و بحث

۵-۱- نتایج حاصل از RSM

بعد از ورود داده‌های ورودی و خروجی به نرم افزار طراحی آزمایش، داده‌ها تحلیل شدند و نمودار تاثیر پارامترها در شکل ۶ نشان داده شده است، شیب هر کدام از پارامترها تاثیرگذاری هر پارامتر را نشان می‌دهد. یعنی هرچه شیب بیشتر باشد، میزان اثرگذاری آن پارامتر بر خروجی بیشتر خواهد بود.



شکل ۶. تاثیر پارامترهای ورودی بر خروجی

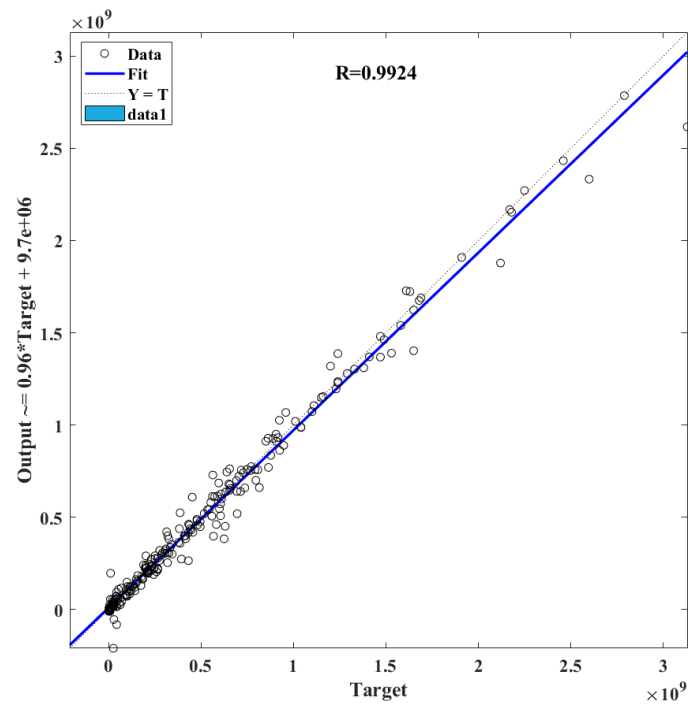
Figure 6. The effect of input parameters on output

سپس نتایج حاصل R^2 پیش بینی شده برابر با ۰/۹۷۸۷ و R^2 تعدیل شده برابر با ۰/۹۸۴۸ بوده که این نتایج نشان می‌دهد که تحلیل روی داده‌ها به خوبی صورت گرفته است.

۵-۲- نتایج حاصل از شبکه MLP

در شبیه‌سازی با استفاده از ANN، لایه‌ها در MLP از سه نوع لایه ورودی، لایه‌های پنهان و لایه خروجی تشکیل شده‌اند. در این پژوهش برای مدل MLP چهار ورودی و یک خروجی وجود دارد. بعد از اجرای شبکه MLP، نمودارها، خروجی‌ها و نتایج شبکه برای توابع یادگیری مختلف و تعداد لایه‌ها و نرون‌های مشخص را نشان می‌دهد. دقت نتایج شبکه و مقایسه داده‌های واقعی با مقدار پیش بینی کاملاً قابل قبول است. شبکه عصبی دارای خطای پایینی است که شبکه به خوبی آموزش دیده و

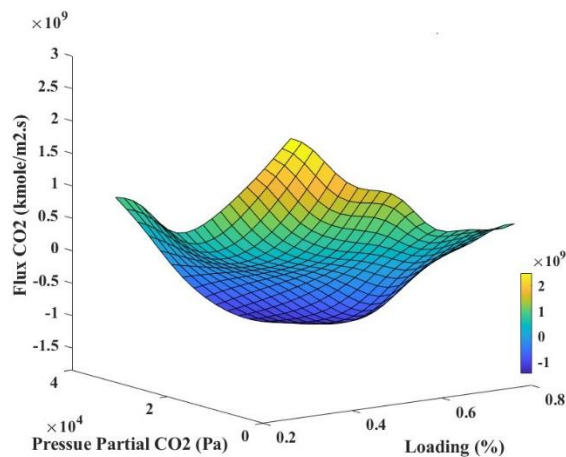
می‌تواند شار انتقال جرم را بر اساس متغیرهای ورودی محاسبه کند. با توجه به شکل نتایج برای تابع یادگیری Trainlm بهتر از Trainbr و Trainscg بود؛ به طوری که مقدار R^2 بهتر (۰/۹۹۲۴) و همچنین MSE پایین تری داشت.



شکل ۷. نمودار رگرسیون شبکه MLP

Figure 7. MLP network regression diagram

نمودار سه بعدی نمودار سه بعدی شار انتقال جرم برحسب نرخ بارگذاری و فشار جزئی دی‌اکسیدکربن در شبکه MLP در شکل ۸ نشان داده شده است. این نمودار نشان می‌دهد با افزایش نرخ بارگذاری و افزایش فشار دی‌اکسیدکربن، شار انتقال جرم به طور کلی افزایش می‌یابد.



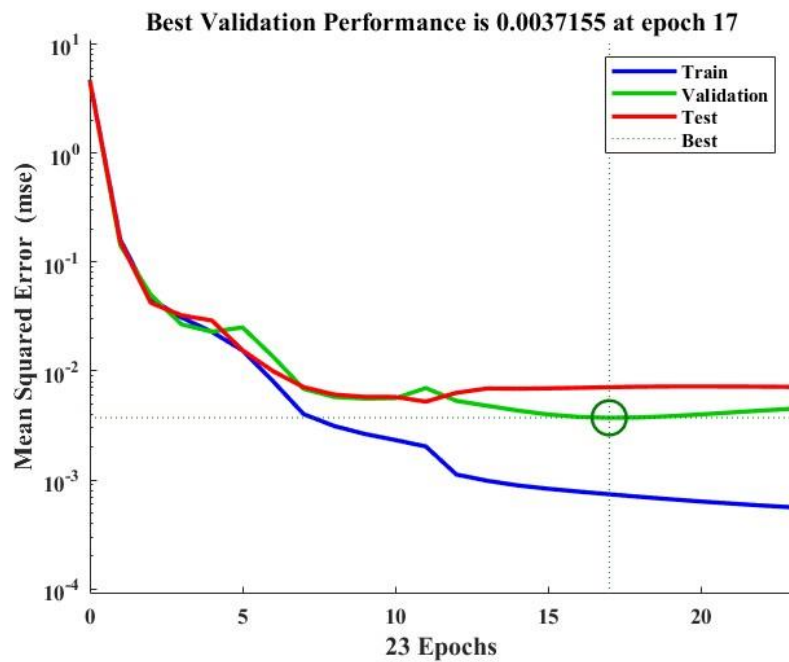
شکل ۸. نمودار سه بعدی شار انتقال جرم برحسب نرخ بارگذاری و فشار جزئی دی‌اکسیدکربن در شبکه MLP

Figure 8. Three-dimensional diagram of mass transfer flux in terms of loading rate and partial pressure of carbon dioxide in the MLP network

جدول ۳. نتایج یادگیری شبکه MLP با تعداد لایه و نورون‌های مشخص با توابع یادگیری مختلف

Table 3. MLP network learning results with the number of layers and specific neurons with different learning functions

Run	Hidden layer			Train function	R	MSE		Epoch
	1	3	2		Kmole/m ² .s	Net	New data	
1	10	40	10	Trainlm	0.99308	0.0018616	0.00178	13
2	10	40	10	Trainbr	-1.47E-15	0.13443	0.32563	36
3	10	40	10	Trainscg	0.6221	0.082737	0.19907	13



شکل ۹. نمودار MSE بر حسب تعداد دوره

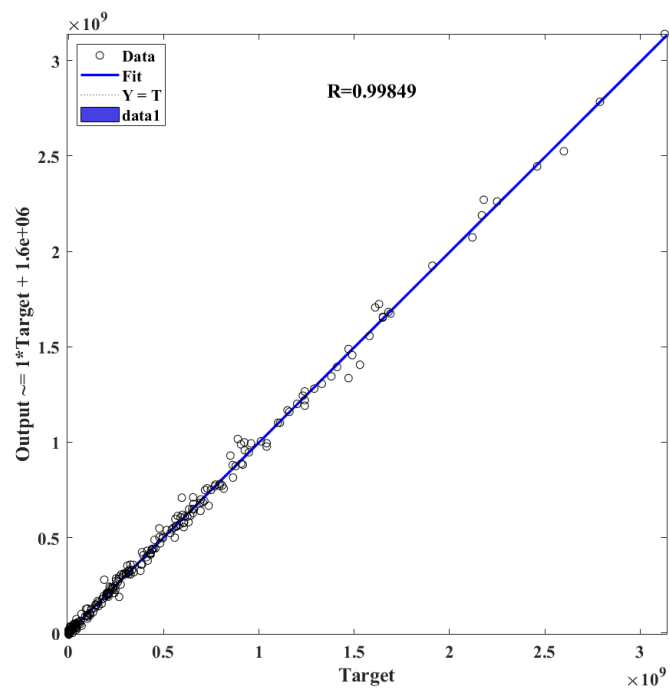
Figure 9. Plot of MSE by number of epochs

نتایج یادگیری شبکه MLP با سه لایه پنهان و به ترتیب تعداد ۱۰، ۴۰ و ۱۰ نورون در هر لایه و تابع آموزش لونیبرگ مارکوات، MSE برابر با ۰/۰۰۱۸۶۱۶ بدست آمد که در شکل ۹ و جدول ۳ نشان داده شده است.

۵-۲- نتایج حاصل از شبکه RBF

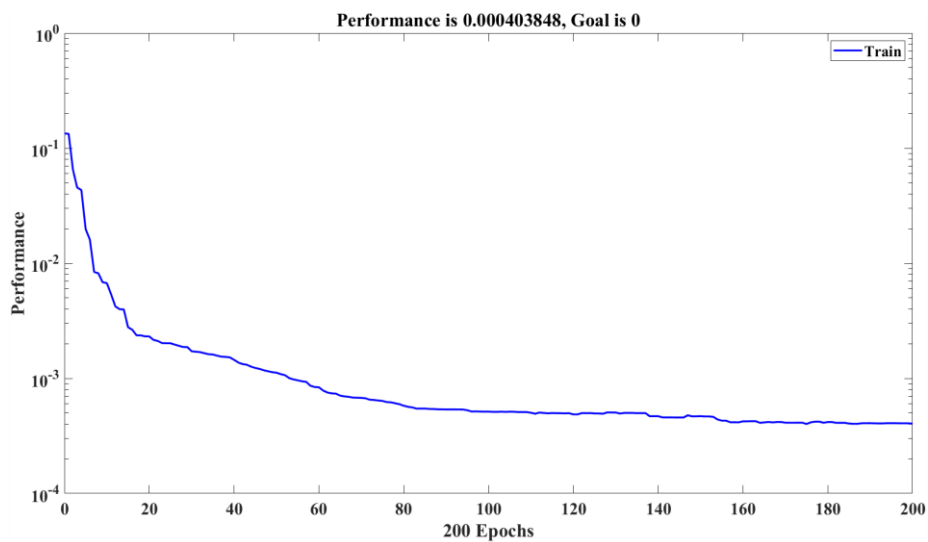
بعد از آموزش صحیح شبکه RBF، این شبکه با ۲۰۰ نورون و Spread برابر با ۴ توانست بهترین نتیجه را نشان دهد که در شکل

و ۱۲ این موضوع مشخص است. شبکه RBF توانست بعد از ۲۰۰ دوره به R^2 برابر با ۰/۹۹۸۴۹ و MSE برابر با ۰/۰۰۰۴ دست یابد.



شکل ۱۱. نمودار رگرسیون شبکه RBF

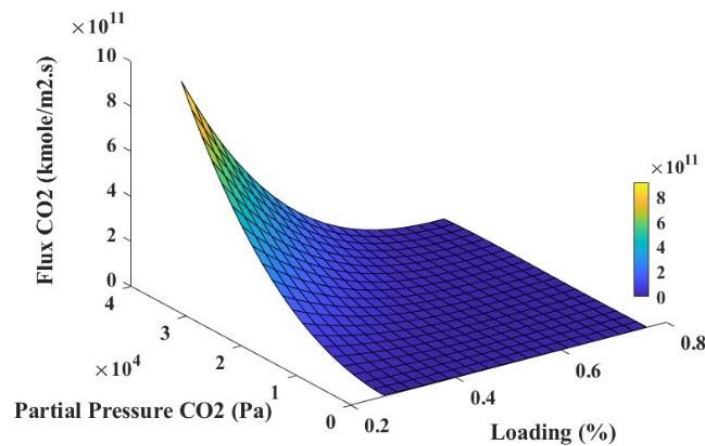
Figure 11. RBF network regression diagram



شکل ۱۲. نمودار عملکرد شبکه RBF

Figure 12. RBF network performance diagram

نمودار سه بعدی در شکل نمودار شار انتقال جرم برحسب نرخ بارگذاری و فشار جزئی دی‌اکسیدکربن در شبکه RBF در آورده شده است. از مقایسه این نمودار با نمودار مربوط به MLP می‌توان دریافت این شبکه برای مدل‌سازی کاربردی‌تر است.



شکل ۱۳. نمودار سه بعدی شار انتقال جرم برحسب نرخ بارگذاری و فشار جزئی دی‌اکسیدکربن در شبکه RBF

Figure 13. Three-dimensional diagram of mass transfer flux in terms of loading rate and partial pressure of carbon dioxide in the RBF network

۶- نتیجه گیری

در این تحقیق، فرآیند جذب CO_2 با استفاده از حلال حاوی کربنات پتاسیم آبی غلیظ و پیپرازین مدل‌سازی و شبیه‌سازی شد. ابتدا داده‌های موردنظر استخراج و سپس شبیه‌سازی فرآیند با استفاده از روش سطح پاسخ (RSM) و شبکه‌های عصبی مصنوعی MLP و RBF انجام گرفت. پس از اجرای شبکه‌ها و یافتن شبکه بهینه با کمترین خطا، مشخص شد که شبکه MLP با تابع آموزش trainlm و استفاده از تعداد نرون کمتر نسبت به RBF عملکرد بهتری داشت. مقایسه معیارهای عملکرد نشان داد که مقدار MSE برای MLP برابر با 0.0018616 و برای RBF برابر با 0.0004 است، که بیانگر کاهش خطای حدود $78/5$ درصدی در RBF است. باین حال R^2 برای MLP برابر با 0.99924 و برای RBF برابر با 0.99849 بود، و درصد اختلاف آن حدود 0.8 درصد است که نشان‌دهنده دقت پیش‌بینی نزدیک به هم در هر دو روش است. علاوه بر این، با رسم نمودار سه‌بعدی شار انتقال جرم برحسب نرخ بارگذاری و فشار جزئی، مشاهده شد که منحنی MLP به نمودار RSM نزدیک‌تر است و خطای کمتری در تست‌ها نسبت به RBF دارد. این نتایج نشان می‌دهد که اگرچه RBF در کاهش خطا بهتر عمل کرده است، اما MLP به دلیل ساختار بهینه، زمان یادگیری کمتر و نزدیکی به داده‌های تجربی، انتخاب مناسبی برای مدل‌سازی فرآیند جذب CO_2 در این مطالعه بوده است. همچنین، داده‌های پژوهش نشان داد که تاثیر متغیرهای دما و نرخ بارگذاری در شار انتقال جرم مستقیم بوده و فشار بخش توده انتقال جرم تاثیر ناچیزی دارد. در مقابل، فشار جزئی گاز دی‌اکسیدکربن تاثیر معکوس بر شار انتقال جرم دارد.

[1] Mustafa, M. F., Liu, Y., Duan, Z., Guo, H., Xu, S., Wang, H., & Lu, W. (2017). Volatile compounds emission and health risk assessment during composting of organic fraction of municipal solid waste. *Journal of hazardous materials*, 327, 35–43. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2016.11.046>

این یک نمونه از مرجع دهی مقاله است من چند بار است مقاله را می فرستم متاسفانه بدون چک کردن دقیق دوباره می فرستید آیا مراجع شما مطابق فرمت داده شده است. نخیر پس چرا منو اذیت می کنید . چند بار فرستادم به مجله ولی می گوئید من ایرادها را رفع کردم لطفا دقیق کار کنید من واقعا وقت ندارم یک مقاله فارسی را سه چهار بار برگردده به من

۷- مراجع

قائمی، احمد، و همتی، علیرضا. (1400). الگوسازی هم دمای جذب دی اکسیدکربن و سولفید هیدروژن با استفاده از چارچوب [1] *SID*. <https://sid.ir/paper/415838/fa>. های فلزی-آلی. مهندسی شیمی ایران، 20(114)، 22-36

[2] A. Ghaemi, S. Shahhosseini, M.G. Maragheh, Nonequilibrium dynamic modeling of carbon dioxide absorption by partially carbonated ammonia solutions, *Chemical Engineering Journal*, 149 (2009) 110-117. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2008.10.020>

[3] H. Ramezanipour Penchah, A. Ghaemi, H. Ghanadzadeh Gilani, Efficiency increase in hypercrosslinked polymer based on polystyrene in CO₂ adsorption process, *Polymer Bulletin*, (2021) 1-22. <https://doi.org/10.1007/s00289-021-03678-x>

[4] A. Brunetti, F. Scura, G. Barbieri, E. Drioli, Membrane technologies for CO₂ separation, *Journal of Membrane Science*, 359 (2010) 115-125. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2009.11.040>

[5] C. Song, Q. Liu, S. Deng, H. Li, Y. Kitamura, Cryogenic-based CO₂ capture technologies: State-of-the-art developments and current challenges, *Renewable and sustainable energy reviews*, 101 (2019) 265-278. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2018.11.018>

[6] Z. Rastegar, A. Ghaemi, CO₂ absorption into potassium hydroxide aqueous solution: experimental and modeling, *Heat and Mass Transfer*, 58 (2022) 365-381. <https://doi.org/10.1007/s00231-021-03115-9>

[7] M. Ahmadi, F. Bahmanzadegan, M. Qasemnazhand, A. Ghaemi, H. Ramezanipour Penchah, Experimental, RSM modelling, and DFT simulation of CO₂ adsorption on Modified activated carbon with LiOH, *Scientific Reports*, 14 (2024) 13595. <https://doi.org/10.1038/s41598-024-64503-9>

[8] محسنی، امیرحسین، و قائمی، احد. (1399). مطالعه تجربی جذب کربن دی اکسید در حلال مونواتانول آمین با استفاده از روش *SID*. <https://sid.ir/paper/384960/fa>. سطح پاسخ. مهندسی شیمی ایران، 19(111)، 43-54

- [9] H. Pashaei, A. Ghaemi, M. Nasiri, B. Karami, Experimental modeling and optimization of CO₂ absorption into piperazine solutions using RSM-CCD methodology, ACS omega, 5 (2020) 8432-8448. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b03363>
- [10] A.H. Behroozi, N. Akbarzad, A. Ghaemi, CO₂ reactive absorption into an aqueous blended MDEA and TMS solution: experimental and modeling, International Journal of Environmental Research, 14 (2020) 347-363. <https://doi.org/10.1007/s41742-020-00261-6>
- [11] A. Ghaemi, M.K. Dehnavi, Z. Khoshraftar, Exploring artificial neural network approach and RSM modeling in the prediction of CO₂ capture using carbon molecular sieves, Case Studies in Chemical and Environmental Engineering, 7 (2023) 100310. <https://doi.org/10.1016/j.cscee.2023.100310>
- [12] P. Tabarzadi, A. Ghaemi, Modeling and optimization of CO₂ capture in spray columns via artificial neural networks and response surface methodology, Case Studies in Chemical and Environmental Engineering, (2024) 100783. <https://doi.org/10.1016/j.cscee.2024.100783>
- [13] در محلول های آمین با استفاده CO₂ اعتماد، ادريس، قائمی، احد، و شیروانی، منصور. (1394). پیش بینی شار انتقال جرم [13] در محلول های آمین با استفاده CO₂ اعتماد، ادريس، قائمی، احد، و شیروانی، منصور. (1394). پیش بینی شار انتقال جرم 98-106، (79)14، از شبکه های عصبی. مهندسی شیمی ایران، 14 (79)، 98-106. [SID. https://sid.ir/paper/150780/fa](https://sid.ir/paper/150780/fa)
- [14] K. Naderi, A. Foroughi, A. Ghaemi, Analysis of hydraulic performance in a structured packing column for air/water system: RSM and ANN modeling, Chemical Engineering and Processing-Process Intensification, 193 (2023) 109521. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2023.109521>
- [15] A. Ghaemi, Z. Jafari, E. Etemad, Prediction of CO₂ mass transfer flux in aqueous amine solutions using artificial neural networks, Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering (IJCCE), 39 (2020) 269-280. <https://doi.org/10.30492/ijcce.2018.31858>
- [16] H. Pashaei, H. Mashhadimoslem, A. Ghaemi, Modeling and optimization of CO₂ mass transfer flux into Pz-KOH-CO₂ system using RSM and ANN, Scientific Reports, 13 (2023) 4011. <https://doi.org/10.1038/s41598-023-30856-w>
- [17] P. Zafari, A. Ghaemi, Modeling and optimization of CO₂ capture into mixed MEA-PZ amine solutions using machine learning based on ANN and RSM models, Results in Engineering, 19 (2023) 101279. <https://doi.org/10.1016/j.rineng.2023.101279>
- [18] S. Norouzbahari, S. Shahhosseini, A. Ghaemi, Modeling of CO₂ loading in aqueous solutions of piperazine: Application of an enhanced artificial neural network algorithm, Journal of Natural Gas Science and Engineering, 24 (2015) 18-25. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2015.03.011>
- [19] S. Garg, A.M. Shariff, M.S. Shaikh, B. Lal, H. Suleman, N. Faiqa, Experimental data, thermodynamic and neural network modeling of CO₂ solubility in aqueous sodium salt of l-phenylalanine, Journal of CO₂ Utilization, 19 (2017) 146-156. <https://doi.org/10.1016/j.jcou.2017.03.011>
- [20] P. Pakzad, M. Mofarahi, A.A. Izadpanah, M. Afkhamipour, Experimental data, thermodynamic and neural network modeling of CO₂ absorption capacity for 2-amino-2-

methyl-1-propanol (AMP) + Methanol (MeOH) + H₂O system, *Journal of Natural Gas Science and Engineering*, 73 (2020) 103060. <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2019.103060>

[21] A. Hemmati, A. Ghaemi, M. Asadollahzadeh, RSM and ANN modeling of hold up, slip, and characteristic velocities in standard systems using pulsed disc-and-doughnut contactor column, *Separation Science and Technology*, 56 (2021) 2734-2749. <https://doi.org/10.1080/01496395.2020.1842890>

[22] Z. Khoshraftar, A. Ghaemi, Modeling of CO₂ solubility in piperazine (PZ) and diethanolamine (DEA) solution via machine learning approach and response surface methodology, *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*, 8 (2023) 100457. <https://doi.org/10.1016/j.cscee.2023.100457>

[23] M. Noroozian, S. Shahhosseini, A. Ghaemi, Artificial intelligence and response surface methodology to predict CO₂ capture using piperazine- modified activated alumina, *Environmental Progress & Sustainable Energy*, 42 (2023) e14117. <https://doi.org/10.1002/ep.14117>

[24] Z. Khoshraftar, A. Ghaemi, Modeling and prediction of CO₂ partial pressure in methanol solution using artificial neural networks, *Current Research in Green and Sustainable Chemistry*, 6 (2023) 100364. <https://doi.org/10.1016/j.crgsc.2023.100364>

[25] Z. Khoshraftar, A. Ghaemi, F.S. Taheri, Polyethylenimine-functionalized halloysite nanotube as an adsorbent for CO₂ capture: RSM and ANN methodology, *Current Research in Green and Sustainable Chemistry*, 7 (2023) 100389. <https://doi.org/10.1016/j.crgsc.2023.100389>

[26] Z. Khoshraftar, A. Ghaemi, Prediction of CO₂ solubility in water at high pressure and temperature via deep learning and response surface methodology, *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*, 7 (2023) 100338. <https://doi.org/10.1016/j.cscee.2023.100338>

[27] F. Bahmanzadegan, A. Ghaemi, Exploring the effect of zeolite's structural parameters on the CO₂ capture efficiency using RSM and ANN methodologies, *Case Studies in Chemical and Environmental Engineering*, 9 (2024) 100595. <https://doi.org/10.1016/j.cscee.2023.100595>

[28] R.O. Fernandes, M.C. Tavares, Mitigation of the commutation failure problem in the HVDC multi-infeed scenario in Brazil using synchronized phasor measurement, *Electric Power Systems Research*, 235 (2024) 110829. <https://doi.org/10.1016/j.epsr.2024.110829>

[29] S. Norouzbahari, S. Shahhosseini, A. Ghaemi, Chemical absorption of CO₂ into an aqueous piperazine (PZ) solution: development and validation of a rigorous dynamic rate-based model, *RSC advances*, 6 (2016) 40017-40032. <https://doi.org/10.1039/C5RA27869D>

[30] J.T. Cullinane, Thermodynamics and kinetics of aqueous piperazine with potassium carbonate for carbon dioxide absorption, The University of Texas at Austin 2005. <http://hdl.handle.net/2152/1530>

Modeling of CO₂ Absorption with Aqueous Piperazine/Potassium Carbonate Solution Using MLP and RBF Neural Networks

Fatemeh Bahmanzadegan¹, Ahad Ghaemi^{2*}

1- PhD student of Chemical Engineering, Iran University of Science and Technology

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

Email: aghaemi@iust.ac.ir

Abstract

In this article, the effect of operating conditions and aqueous solution on the CO₂ absorption rate was modeled using response surface methodology (RSM) and artificial neural network (ANN). The network inputs included temperature, pressure, piperazine/potassium carbonate percentage as the solvent, with the mass transfer flux of CO₂ as the output. Multi-Layer Perceptron (MLP) was trained with three hidden layers containing 10, 40, and 10 neurons, respectively, using the Levenberg-Marquardt training function. The MLP with three layers and 60 neurons, trained with the Trainlm learning function, achieved an MSE of 0.0018616 and an R² of 0.99924. Radial Basis Function (RBF) also reached an MSE of 0.0004 and an R² of 0.99849 after 200 epochs. Overall, the MLP network showed better results as it achieved high accuracy in less time.

Keywords: Absorption, Piperazine, Potassium Carbonate, Carbon Dioxide, Neural Network, MLP, RBF.