

## پیش‌بینی شار انتقال جرم CO<sub>2</sub> در محلول‌های آمین با استفاده از شبکه‌های عصبی

ادریس اعتماد، احد قائمی\*، منصور شیروانی

تهران، دانشگاه علم و صنعت ایران، دانشکده مهندسی شیمی، آزمایشگاه طراحی فرایند

پیام نگار: aghaemi@iust.ac.ir

### چکیده

در این تحقیق، برای پیش‌بینی شار انتقال جرم کربن دی‌اکسید در محلول پپیرازین از شبکه پرسپترون چند لایه استفاده شده است. پارامترهای موثر بر شار انتقال جرم کربن دی‌اکسید شامل غلظت کربن دی‌اکسید در سطح مشترک و در بالک مایع، ضریب بارگذاری، نسبت ضریب نفوذ کربن دی‌اکسید فاز گاز به مایع، نسبت فشار جزئی کربن دی‌اکسید به فشار کل، نسبت ضخامت فیلمی فاز گاز به مایع و پارامتر فیلم، به عنوان متغیرهای ورودی و شار انتقال جرم کربن دی‌اکسید به عنوان متغیر خروجی شبکه انتخاب شدند. برای آموزش، آزمون و ارزیابی شبکه عصبی پرسپترون چند لایه از داده‌های تجربی ارائه شده در مقالات بهره گرفته شده است. تعداد داده‌های تجربی به کار رفته، ۱۰۴ داده و محدوده غلظت پپیرازین ۲ تا ۸ مولال بوده است. نتایج پیش‌بینی شبکه پرسپترون نشان داد که متوسط خطا برای شار انتقال جرم کربن دی‌اکسید ۸/۶۱ درصد است. نتایج شبکه‌های عصبی با نتایج دیگر محققان نیز مقایسه شد و نتایج نشان داد که شبکه عصبی شار انتقال جرم کربن دی‌اکسید را با دقت و سرعت بیشتری محاسبه می‌کند.

**کلیدواژه‌ها:** شار انتقال جرم، کربن دی‌اکسید، پپیرازین، شبکه عصبی، پرسپترون

### ۱- مقدمه

می‌دانند. محلول‌های آمین با جذب کربن دی‌اکسید، کربامات یا بی‌کربونات تشکیل می‌دهند و ظرفیت جذب آنها به خواص فیزیکی-شیمیایی آمین و شرایط عملیاتی فرایند (مانند دما و فشار جزئی کربن دی‌اکسید) بستگی دارد. در میان حلال‌های متعدد آمینی، بیشترین موارد مورد مطالعه شامل مونو اتانول آمین (MEA) (آمین نوع اول)، دی اتانول آمین (DEA) (نوع دوم)، متیل دی اتانول آمین (MDEA) (نوع سوم) و ۲-آمینو-۲-متیل-۱-پروپانول (AMP) (آمین با ممانعت فضایی) هستند. مزیت آمین نوع اول و دوم در واکنش‌پذیری پدیده آنهاست اما عیب و ایراد آنها محدود بودن ظرفیت جذب و هزینه‌گزار احیای حلال است.

کربن دی‌اکسید یکی از مهم‌ترین گازهای گلخانه‌ای است که صنایع شیمیایی و واحدهای صنعتی تولید می‌کنند. به خاطر مسائل و مشکلاتی که کربن دی‌اکسید برای محیط زیست به وجود می‌آورد، تولید این گاز از صنایع شیمیایی، باید کاهش یابد. روش‌های مختلفی برای کاهش و حذف کربن دی‌اکسید مطرح شده‌اند که از دیدگاه عملی و کارایی، فرایند جذب واکنش‌دار کربن دی‌اکسید روش عملی و بسیار موثری از کار درآمده است. فناوری حذف کربن دی‌اکسید بر مبنای حلال آمین، را پرسامدترین کاربرد روش تجاری و مؤثرترین روش اقتصادی برای حذف کربن دی‌اکسید

شده که روش فاکتور افزایش برای سیستم‌های الکترولیتی و چند واکنشی مناسب نباشد. بنابراین، در این تحقیق هدف ارائه یک روش کلی و عمومی برای کلیه فرایندهای جذب واکنش‌دار به منظور محاسبه دقیق شار انتقال جرم است. این روش از نوع گاز و نوع محلول مستقل است. برای این کار، با مطالعه متغیرهای موثر بر شار انتقال جرم، با بهره‌گیری از نظریهٔ باگینکهام اعداد بدون بعد موثر بر شار انتقال جرم به دست آمده و به عنوان ورودی و خروجی‌های شبکه‌های عصبی انتخاب شدند.

## ۲- انتقال جرم همراه با واکنش شیمیایی

در فرایندهای جذب، عمل جذب به دو صورت جذب فیزیکی و جذب همراه با واکنش شیمیایی انجام می‌شود. برای محاسبه شار انتقال جرم در جذب شیمیایی، اثر واکنش شیمیایی بر انتقال جرم از طریق عامل تقویت<sup>۷</sup> اعمال می‌شود. عامل تقویت عبارت است از نسبت شار انتقال گاز از سطح مشترک در خلال انجام واکنش، نسبت به حالتی که واکنشی اتفاق نمی‌افتد در حالتی که شرایط هیدرودینامیکی و نیروی محرکه در هر دو حالت یکسان باشد. به بیانی دیگر، عامل تقویت، اثر واکنش را در انتقال جرم ملحوظ می‌کند و نمایانگر افزایش سرعت انتقال جرم ناشی از واکنش شیمیایی است. بیان ریاضی شار انتقال جرم از این قرار است [۱۱]:

$$N_A = E * k_i (c_i^* - c_b) \quad (1)$$

که E عامل تقویت است و این عامل می‌تواند بر حسب سرعت واکنش معادل یک یا بزرگتر از یک باشد. در محلول‌های آمین، مهم‌ترین بحث در این زمینه، یافتن رابطه‌ای دقیق برای عامل تقویت است. از آنجا که این عامل تابع پارامترهای مختلف است، واضح است که هر چه پیچیدگی واکنش و فرایند بیشتر شود ارائه رابطه عامل تقویت نیز پیچیده تر و طبعاً دشوارتر خواهد شد. روابط متعددی به منظور محاسبه عامل تقویت ارائه شده است که هر کدام فقط محدود به شرایط خاص آن مسئله بوده، ضمن این که هیچ کدام دقیق نیستند. افرادی چون ون کروپلنز<sup>۸</sup> [۱۳-۱۲]، دکورسی<sup>۹</sup> [۱۶-۱۴]، جوفو شن<sup>۱</sup> [۱۷]، استیچل مایر<sup>۲</sup> [۱۸] و مامون<sup>۳</sup> [۱۹] روابط مختلفی را در این زمینه ارائه داده‌اند که تعدادی از این

در مقابل، قدرت آمین‌های با ممانعت فضایی و آمین‌های نوع سوم به ظرفیت جذب زیاد، هزینه‌ی کم احیا و میزان کم خوردگی است. امروزه، کاربرد آمین‌های نوع سوم کاربرد بیشتری یافته است، اما یکی از اشکالات اساسی این نوع آمین، سرعت پایین واکنش آنهاست. از عیبهای آمین با ممانعت فضایی، تشکیل رسوب در غلظت‌های بالاست [۲]. برای حصول به حلال‌هایی با کارایی بهتر نسبت به آمین‌های مرسوم و در دسترس، تحقیقات به سمت آزمایش و سنتز آمین‌های جدید پیش رفته و تلاش‌های چشمگیری در این زمینه به عمل آمده است. در سال‌های اخیر، گونه‌های مختلفی از آمین‌ها به منظور حذف کربن دی‌اکسید توسط محققین مختلف پیشنهاد شده است. تونی وان وتیکول<sup>۱</sup> و همکاران [۳]، هارتونو<sup>۲</sup> و همکاران [۴]، پاول<sup>۳</sup> و همکاران [۵]، سما<sup>۴</sup> و همکاران [۶]، نامی<sup>۵</sup> و همکاران [۷]، پورچرون<sup>۶</sup> و همکاران [۸] هر کدام آمین‌هایی با قابلیت‌های متفاوتی ارائه داده‌اند. یکی از محلول‌هایی که اخیراً مورد استقبال قرار گرفته محلول پیرازین است. این آمین یک آمین نوع دوم از نوع حلقوی به شمار می‌رود. این آمین، به دلیل ساختار شیمیایی‌اش از سرعت واکنش بسیار بالایی برخوردار است و همین ویژگی سبب گرایش بسیاری به این حلال و ترکیبات آن شده است [۹]. به علاوه، فراریت این حلال در محدوده دمایی ۴۰ درجه سلسیوس بین ۱۰ تا ۱۹ ppm است و تجزیه گرمایی آن تا دمای ۱۵۰ درجه سلسیوس ناچیز است [۱۰].

مهم‌ترین مسئله در جذب کربن دی‌اکسید توسط آمین‌ها، محاسبه شار انتقال جرم است. در این فرایندها، واکنش‌های شیمیایی در فازها باعث افزایش شار انتقال جرم می‌شود. غالباً برای اعمال اثر واکنش‌ها از عوامل افزایش انتقال جرم استفاده می‌شود [۱۱-۱۹]. معایب این روش عبارتند از: اعمال اثر واکنش اصلی و عدم اعمال اثر واکنش‌های دیگر، استفاده از شرایط مرزی و اولیه ساده و غیر واقعی، ساده سازی در دسترسی به عاملی که باعث افزایش خطای محاسبه شار انتقال جرم می‌شود. نیز، این روش برای سیستم‌های چند واکنشی و چند جزئی قابل کاربرد نیست و برای شرایط عملیاتی محدودی به کار گرفته می‌شود. این عوامل باعث

1. Tontiwachwuthikul et al.
2. Hartono et al.
3. Paul et al.
4. Sema et al.
5. Naami et al.
6. Porcheron et al.

7. Enhancement Factor  
8. Van Krevelens  
9. Decoursey

باعث افزایش انتقال جرم کربن دی اکسید می شود که اگر در محاسبه شار انتقال جرم از عامل تقویت استفاده شود، خطای فاحشی اتفاق خواهد افتاد. از این رو در تحقیق حاضر برای اعمال اثر تمامی واکنش ها از پارامتر فیلم استفاده شده است. با ارائه معایب روش عامل تقویت، استفاده از یک روش عملی و دقیق تر ضروری به نظر می رسد، زیرا با محاسبه دقیق شار انتقال جرم ابعاد ستون های جذب به دقت محاسبه می شوند. بنابراین در این تحقیق برای محاسبه دقیق شار انتقال جرم کربن دی اکسید از شبکه های عصبی بهره برده شده است.

روابط در جدول (۱) ارائه شده است. روابط ارائه شده برای شرایط خاصی بوده و در دستیابی به عاملهای موجود ساده سازی های زیادی در شرایط مرزی انجام شده است و این امر باعث ایجاد خطا در محاسبه شار انتقال جرم می شود. موضوع مهم تر از این قرار است که در بهره گیری از عامل تقویت، فقط یک واکنش اصلی در نظر گرفته شده و اثر بقیه واکنش ها اعمال نمی شود. مثلاً در واکنش کربن دی اکسید در محلول های آمین واکنش های کربن دی اکسید با آب و یون هیدرواکسید در نظر گرفته نمی شود. در سیستم جذب کربن دی اکسید با پیپرازین واکنش های متعددی اتفاق می افتد که

جدول ۱. روابط استفاده شده برای محاسبه عامل تقویت انتقال جرم جذب کربن دی اکسید

معادله	سال	مرجع	محقق
$E_A = \frac{Ha}{\tanh(Ha)} \left[ 1 - \frac{C_{A,b}}{C_{A,i}} \frac{1}{\cosh(Ha)} \right], Ha = \frac{\sqrt{kD_A}}{K_L}$	۱۹۴۸	[۱۲]	ون کرویلنز
$E = \sqrt{\frac{D_{CO_2}}{D_{amine}} + \frac{[amine]}{z[CO_2]_i} \sqrt{\frac{D_{amine}}{D_{CO_2}}}}$	۱۹۸۴	[۳]	شارما و همکاران
$E = \frac{-\phi_{CO_2}^2}{2(E_{CO_2,\infty}-1)} + \sqrt{\left( \frac{\phi_{CO_2}^4}{4(E_{CO_2,\infty}-1)^2} + \frac{E_{CO_2,\infty}\phi_{CO_2}^2}{(E_{CO_2,\infty}-1)} + 1 \right)}$ $\phi_{CO_2} = \frac{\sqrt{D_{CO_2}k_{am}[NH_3]}}{k_1}, E_{CO_2,\infty} = \sqrt{\frac{D_{CO_2}}{D_{NH_3}}} + \frac{[NH_3]}{2[CO_2]^*} \sqrt{\frac{D_{NH_3}}{D_{CO_2}}}$	۱۹۹۹	[۱۷]	جوفو شن
$E_{CO_2} = \frac{(K_1 K_{CO_2} + 1) \sqrt{(1 + Ha_1^2 K_{CO_2} (K_1 K_{CO_2} + 1) / K_1 K_{CO_2})}}{K_1 K_{CO_2} + \sqrt{(1 + Ha_1^2 K_{CO_2} (K_1 K_{CO_2} + 1) / K_1 K_{CO_2})}}$ $Ha_1 K_{CO_2} = \frac{\sqrt{k_{OH} [OH^-]_b D_{CO_2}}}{k_{CO_2}}, K_1 K_{CO_2} = \frac{[HCO_3^-]_b}{[CO_2]_b}$ $Ha_2 K_{CO_2} = \frac{\sqrt{k_{NH_2COO} [NH_3]_b D_{CO_2}}}{k_{CO_2}}, K_2 K_{CO_2} = \frac{[NH_2COO^-]_b}{[CO_2]_b}$ $E_{CO_2} = \sqrt{E_1 K_{CO_2} + E_2 K_{CO_2}^2 - 1}$	۱۹۹۸	[۲۰]	هوگن دورن
$E_A = \sqrt{1 + \frac{K_{obs} D_{CO_2}}{k_l^2}}, K_{obs} = k_{AEEA} [AEEA]^2 + k_{H_2O} [AEEA] [H_2O]$	۲۰۰۵	[۱۹]	مامون

1. Jui-Fu Shen
2. J. Stichlmair
3. Mamun
4. Hoogendoorn et al.

$$\alpha = \frac{C_{CO_2}}{C_{pz}} \quad (3)$$

با بهره‌گیری از مدل پیترز، غلظت مولکولی و یونی اجزاء محاسبه شده است. این پارامتر بیانگر اثر غلظت اجزاء است که هر چه این پارامتر کوچکتر باشد، جذب بیشتر است و در مقادیر بزرگ‌تر مقدار جذب کم می‌شود. پارامتر M، پارامتر فیلم است که برای اعمال اثر واکنش‌های شیمیایی در انتقال جرم استفاده می‌شود [21].

$$M^2 = \frac{D_L \times \sum_{i=1}^4 r_{i,CO_2}}{k_L^2 [CO_2]^*} \quad (4)$$

برای محاسبه غلظت اجزای مولکولی و یونی در فاز محلول از مدل ترمودینامیکی پیترز استفاده شده است. محدوده شرایط عملیاتی فرایند جذب در جدول (2) درج شده است [1].

جدول 2. شرایط عملیاتی فرایند جذب کربن دی اکسید [1]

غلظت حلال (مولالیت)	بارگذاری (C <sub>CO2</sub> /C <sub>pz</sub> )	فشار جزئی دی اکسید کربن (pa)	فشار (psig)	دما (°C)
۲-۱۲	۰.۲۲۶-۰.۴۱۲	۱۸-۶۶۳۳۰	۲۰-۷۰	۴۰-۱۰۰

#### ۴- طراحی هندسه شبکه عصبی برای پیش‌بینی شار انتقال جرم

ساختار اساسی هر شبکه عصبی چند لایه (لایه ورودی، پنهان، خروجی) از واحد نرون (یاخته عصبی) تشکیل شده که هر واحد نرون بدون این که هیچ گونه پیوندی با نرون‌های موجود در لایه‌ی مشابه داشته باشد، با نرون‌های لایه‌های همسایه کاملاً مرتبط‌اند. الگوی شبکه عصبی، دستگاه عصبی انسان است و در واقع تقلیدی از مغز و شبکه اعصاب انسان به‌شمار می‌آید. در این شبکه سعی بر این است که ساختاری تهیه شود که همانند مغز، توان یادگیری، قدرت تعمیم‌دهی و تصمیم‌گیری داشته باشد. در این گونه ساختارها هدف این است که با معرفی عملکرد یک سیستم دینامیکی، مدل را

با توجه به پیشرفت سریع و کاربرد موفقیت آمیز و پرمایه شبکه‌های عصبی در جنبه‌های مختلف علوم و مهندسی، مدلی بر مبنای ANN<sup>۱</sup> می‌تواند جایگزین مناسبی برای غلبه بر محدودیت‌ها و پیچیدگی‌های یک فرایند و توانایی آن در حل مسائل خطی و غیر خطی، به‌شمار آید. پژوهشگرانی چون هسو<sup>۲</sup> و همکاران (۱۹۹۵)، لیک<sup>۳</sup> و همکاران (۱۹۹۶)، چن<sup>۴</sup> و همکاران (۱۹۹۸)، پیچه<sup>۵</sup> و همکاران (۲۰۰۱)، بیواتوو<sup>۶</sup> و همکاران (۲۰۰۳)، هوسکن<sup>۷</sup> و همکاران (۲۰۰۵)، استادنمایر<sup>۸</sup> و همکاران (۲۰۰۱) از این شبکه برای حل مسائل پیچیده بهره برده‌اند.

#### ۳- پارامترهای موثر بر شار انتقال جرم کربن دی اکسید

در محاسبه شار انتقال جرم کربن دی اکسید در محلول‌های آمین، متغیرهای فرایند عواملی چون فشار جزئی، فشار کل، ضرایب نفوذ اجزاء در فازها، غلظت اجزاء در محلول و سرعت واکنش‌های شیمیایی در فازها و ضرایب انتقال جرم را دربر می‌گیرند. با بهره‌گیری از روش بی بعد سازی پای-باکینگهام<sup>۹</sup>، متغیرهای بدون بعد از این قرار محاسبه شدند:

$$\frac{N_A}{k_L(C^* - C)} = f\left(\frac{P_{CO_2}}{P}, \frac{D_g}{D_L}, \frac{\delta_g}{\delta_L}, M, \alpha\right) \quad (2)$$

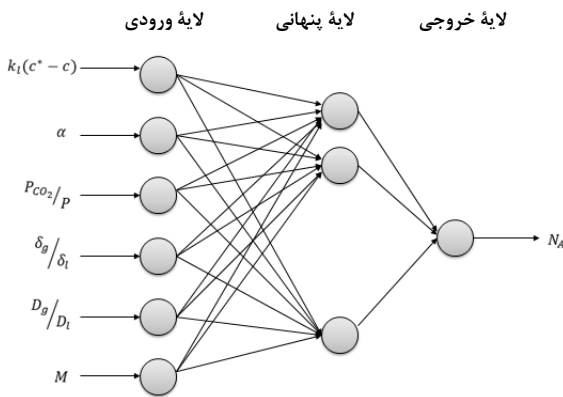
این متغیرها اعداد بدون بعد فرایند هستند که در محاسبه شار انتقال جرم موثرند. متغیرهای ورودی شبکه از این قرارند:

$$\frac{P_{CO_2}}{P}, \frac{D_g}{D_L}, \frac{\delta_g}{\delta_L}, M, k_L(C^* - C), \alpha$$

عدد  $\alpha$  بیانگر نسبت کل غلظت کربن دی اکسید به غلظت آمین است. این پارامتر را پارامتر بارگیری می‌گویند که از این قرار تعریف می‌شود:

1. Artificial Neural Network
2. Hsu et al.
3. Lek et al.
4. Chen et al.
5. Piche et al.
6. Byvatov et al.
7. Huesken et al.
8. Staudenmayer et al.
9. Pi-Buckingham

انتقال جرم و کارایی فرایند جذب در یک ستون جذب تأثیر می‌گذارد. دما در مدل شبکه عصبی گنجانده نشده است. در هر صورت، اثر دما بر کارایی انتقال جرم در قالب عبارتهای بارگذاری آمین، ضریب نفوذ کربن دی اکسید و پارامتر فیلم در نظر گرفته شده است. این پارامترها با تغییر پارامترها می‌کنند. در این تحقیق از یک شبکه سه لایه‌ای (یک لایه ورودی، یک لایه پنهان و یک لایه خروجی) که در شکل (۱) آمده، استفاده شده است. تمامی داده‌ها بین صفر و یک بهنجار<sup>۱</sup> شده‌اند تا از یکنواختی توزیع داده‌های ورودی و خروجی اطمینان حاصل شود. این روش یکی از عمده روش‌های مرسوم استفاده شده برای پیش پردازش داده‌هاست، بخصوص زمانی که متغیرهای مختلف دارای مرتبه بزرگی<sup>۲</sup> متفاوتی باشند [۲۳].



شکل ۱. ساختار شبکه عصبی مصنوعی به کار رفته برای شار انتقال جرم

تابع انتقال تنسینگ<sup>۳</sup> که پیوسته، مشتق پذیر و به صورت یکنواخت افزایشی است، به عنوان تابع بین لایه های ورودی-پنهان و تابع انتقال بین لایه های پنهان-خروجی تابع پیورلین<sup>۴</sup> در نظر گرفته شده است. در این تحقیق، از کل داده های موجود (۱۰۴)، ۷۰ داده برای آموزش و ۳۴ داده برای آزمون شبکه استفاده شده است. معماری بهینه شبکه دارای ۶ و ۱۷ نرون، به ترتیب، در لایه ورودی و لایه پنهان (با حدس و خطا) و یک نرون در لایه خروجی با بسامد ۵۰۰ است. برای بدست آوردن تعداد نرون های لایه‌های پنهان در شبکه بهینه، از میانگین مجذور خطاها (MSE) یا میانگین خطای مطلق (MAE) استفاده شده است.

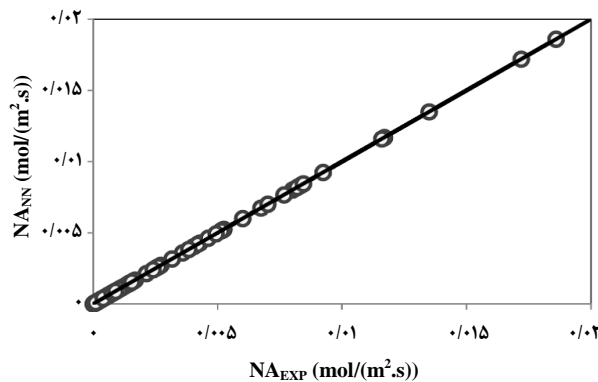
1. Normalized
2. Order of Magnitude
3. Tansing
4. Purelin

آموزش دهند، نحوه عملکرد سیستم را در حافظه مدل ذخیره و از آن برای مواردی که قبلاً با آن مواجه نشده استفاده شود. به دلیل توانایی این شبکه‌ها در مدل‌سازی فرآیندهای بسیار پیچیده که تعداد عوامل تأثیر گذار در آن‌ها زیاد بوده، امکان بهره‌گیری از آن در علوم مهندسی کاربرد رو به رشدی دارد. مهم‌ترین بخش هر شبکه عصبی، نرون است. نرون‌ها یاخته‌های تشکیل دهنده دستگاه اعصاب انسان هستند. هر شبکه عصبی از لایه‌های ورودی، پنهان و خروجی تشکیل شده است. در هر لایه یک یا چند نرون وجود دارد. هر یک از نرون‌های لایه ورودی در مقداری وزنی ضرب می‌شود. مقدار این وزن، تعیین کننده تأثیر هر متغیر بر میزان عملکرد لایه ورودی است. هر نرون از دو بخش تشکیل شده است. در بخش نخست، مجموع وزنی مقادیر ورودی محاسبه می‌شود. این تابع ریاضی اصطلاحاً تابع آستانه یا تابع انتقال نامیده می‌شود که عملکرد آن شبیه یک صافی غیر خطی است و موجب می‌شود تا خروجی نرون در یک محدوده عددی خاص قرار بگیرد. مهم‌ترین موضوع در مدل‌های شبکه عصبی، انتخاب ورودی‌های مناسب به مدل برای رسیدن به خروجی‌های مورد نظر است. علاوه بر آن، ساختار شبکه های عصبی و نحوه انتخاب پیوند بین نرون‌ها و وزنی که هر نرون به خود اختصاص خواهد داد، از اهمیت بالایی برخوردار است. ساختار هر شبکه عصبی متشکل از تعداد لایه‌ها، تعداد نرون‌ها در هر لایه، نحوه پیوند لایه‌ها با هم، روش آموزش شبکه و نحوه توزیع پارامترهاست [۲۲].

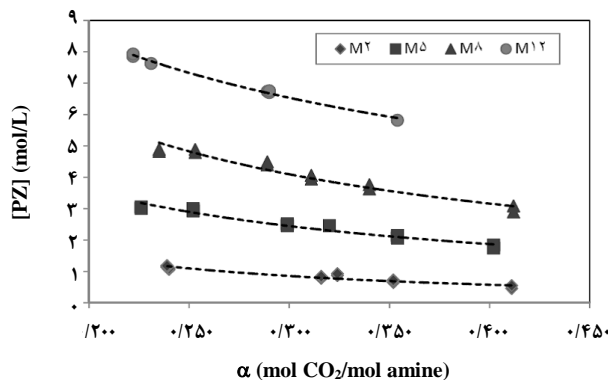
## ۵- انتخاب متغیر های ورودی شبکه عصبی

در تحقیق حاضر برای تشکیل دادن مدل شبکه عصبی به منظور پیش بینی مقدار شار انتقال جرم (متغیر خروجی)،  $(N_A)$ ، پارامترهای مؤثر بر شار انتقال جرم  $(k_1(c^* - c), \alpha, P_{CO_2}/P, \delta_g/\delta_l, D_g/D_l, M)$  به عنوان متغیرهای ورودی شبکه انتخاب شدند. این پارامترها بر مبنای پارامترهای مؤثر بر شار انتقال جرم استوارند که با استفاده از نظریهٔ باکینگهام به دست آمده‌اند. مثلاً، اگر جذب به صورت عدد بی بعدی می‌بود، پارامتر فیلم خوبه خود از محاسبات حذف می‌شد. از آنجا که جذب شیمیایی کربن دی اکسید یک فرایند گرمازا است، از این رو دما با پیشرفت واکنش، افزایش می‌یابد. غالباً دما به صورت مستقیم بر

شکل مشاهده می‌کنیم که در یک غلظت ثابت حلال، با کاهش میزان بارگذاری، پیپرازین آزاد در محلول افزایش می‌یابد، زیرا با افزایش بارگذاری در غلظت ثابت، میزان کربن دی‌اکسید جذب شده افزایش پیدا می‌کند که به معنی افزایش شار انتقال جرم است. با افزایش میزان شار انتقال جرم پیپرازین بیشتری در واکنش شرکت می‌کند از این رو پیپرازین آزاد در محلول کاهش می‌یابد. به علاوه، مشاهده می‌شود که با افزایش غلظت کل، پیپرازین آزاد بیشتری در محلول وجود دارد که امری طبیعی است.



شکل ۲. طرح نموداری کارایی شبکه آموزش دیده



شکل ۳. منحنی تغییرات میزان پیپرازین آزاد موجود در فاز مایع برحسب میزان بارگذاری

به منظور سنجش میزان کارایی و بررسی عملکرد نتایج حاصل از مدل شبکه عصبی، در شرایط متفاوت فرایند، شار انتقال جرم محاسبه شده بررسی شده است. در شکل (۴) اثر غلظت در سطح مشترک گاز-مایع و غلظت آمین بر شار انتقال جرم کربن دی‌اکسید ارائه شده است. بنابر نتایج به دست آمده، با افزایش غلظت آمین و نیز غلظت تعادلی، شار انتقال جرم کربن دی‌اکسید

$$MAE = \sum_{k=1}^N (t(k) - a(k))^2 \quad (5)$$

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N e(k)^2 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (t(k) - a(k))^2 \quad (6)$$

برای توقف شبکه، از سه معیار زمان، میانگین مجذور خطاها، و تعداد مراحل تکرار استفاده می‌شود. در این تحقیق، میانگین مجذور خطاها برای توقف شبکه به کار گرفته شده است.

### ۶- تجزیه و تحلیل حساسیت

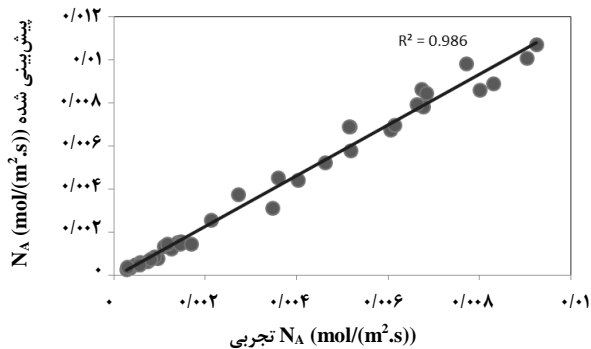
برای بررسی اهمیت هر یک از پارامترها و تأثیر هر یک از آنها بر شار انتقال جرم، منحنی تغییرات هر یک از اعداد بدون بعد برحسب  $N_A/k_L(C^*-C)$  ترسیم و اثر هر کدام جداگانه بررسی شد. بنابر نتایج به دست آمده، فاکتور  $M$  بیشترین تأثیر را بر شار انتقال جرم داشته و بعد از آن بارگذاری و بعد فشار جزئی است. نتایج نشان می‌دهد که با توجه به این که واکنش‌ها در فاز مایع اتفاق می‌افتد، بنابراین پارامترهای مربوط به فاز مایع از بیشترین تأثیر در شار انتقال جرم برخوردار است. البته، پارامترهای دیگر نسبت ضرایب نفوذ و نسبت ضخامت‌های فیلم فازها نیز در شار انتقال جرم مؤثرند ولی تأثیر آنها نسبت به سه پارامتر قبلی کمتر است.

### ۷- بحث و نتایج

هرچند الگوریتم شبکه عصبی ابزاری مناسب برای تخمین متغیر دلخواه در فرایندهای پیچیده است، اما لازمه آن از این قرار است که شبکه به خوبی آموزش دیده باشد؛ در غیر این صورت، شبکه عصبی کارایی نخواهد داشت. در شکل (۲) نتایج آموزش شبکه عصبی بهینه را مشاهده می‌کنید. در این شکل مقادیر شار انتقال جرم تجربی برحسب داده‌های آموزش یافته شبکه عصبی ترسیم شده است. نتایج نشان می‌دهند که شبکه انتخاب شده به خوبی آموزش یافته است.

همان طور که پیشتر گفته شد، در محاسبه غلظت‌های بالک مایع و سطح مشترک، از مدل پیتزر اصلاح شده استفاده شده است. در شکل (۳) منحنی تغییرات مقادیر غلظت پیپرازین آزاد در محلول نسبت به بارگذاری کربن دی‌اکسید نشان داده شده است. در این

نتایج پیش بینی شار انتقال جرم شبکه عصبی با نتایج تجربی آزموده شد و نتایج آن در شکل (۶) نشان داده شده است. در این شکل، ضریب همبستگی ( $R^2$ ) معادل ۰/۹۸۶ محاسبه شده است. این ضریب نشان می‌دهد که شبکه عصبی آموزش دیده شار انتقال جرم را با دقت خوبی پیش بینی می‌کند. متوسط خطای شبکه عصبی ۸/۶۱٪ محاسبه شده است.



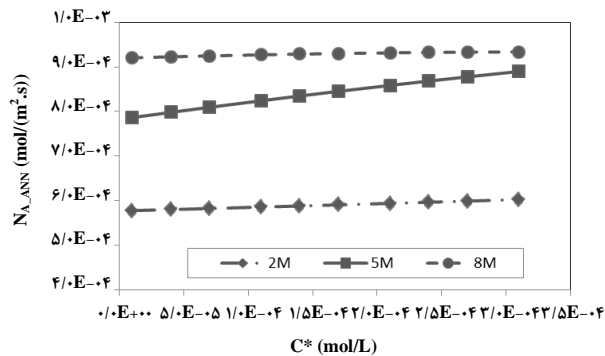
شکل ۶. شار انتقال جرم پیش‌بینی شده توسط شبکه عصبی بر حسب مقادیر تجربی شار انتقال جرم [۱]

در جدول (۳)، شار انتقال جرم محاسبه شده با استفاده از شبکه عصبی با برخی روش‌های ارائه شده بر مبنای فاکتور افزایشی مقایسه شده است. همان طور که مشاهده می‌شود، شبکه عصبی استفاده شده میانگین خطای کمتری نسبت به دیگر روابط ارائه شده دارد.

جدول ۳. درصد انحراف شار انتقال جرم برآورد شده با استفاده از روش‌های مختلف

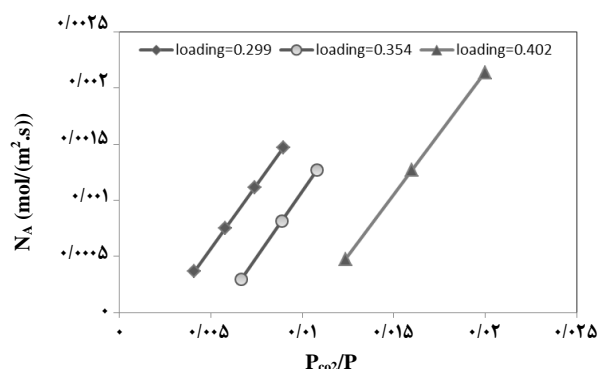
رابطه استفاده شده	سال	درصد خطا
ون کرویلن	۱۹۵۴	۱۲
دکورسی	۱۹۷۴	۱۲
پنگرکار و شارما	۱۹۷۴	۱۰/۱۱
شن و همکاران	۱۹۹۹	۱۴/۹
استیج مایر	۲۰۰۲	۱۰
شبکه عصبی	این تحقیق	۸/۶۱

افزایش می‌یابد. افزایش غلظت آمین و سطح مشترک، باعث شده که مقدار پیپرازین آزاد در محلول بیشتر شود و این اتفاق به افزایش سرعت واکنش و در نهایت شار انتقال جرم منجر می‌شود. مشاهده می‌شود که در غلظت یکسان سطح مشترک، با افزایش غلظت حلال، شار انتقال جرم افزایش می‌یابد که این کاملاً طبیعی است، زیرا افزایش غلظت حلال سبب افزایش ظرفیت جذب حلال می‌شود که همان افزایش نیروی محرکه انتقال جرم است. با افزایش این نیروی محرکه میزان شار نیز زیاد می‌شود.



شکل ۴. اثر غلظت تعادلی کربن دی اکسید روی شار انتقال جرم بدست آمده از شبکه عصبی در غلظت‌های متفاوت

در شکل (۵)، اثر فشار جزئی کربن دی اکسید در فاز گاز و بارگیری بر حسب شار انتقال جرم را مشاهده می‌کنید. نتایج نشان می‌دهند که با افزایش فشار جزئی کربن دی اکسید، شار انتقال جرم آن افزایش می‌یابد. افزایش فشار جزئی کربن دی اکسید باعث افزایش اختلاف غلظت بین سطح مشترک و غلظت کربن دی اکسید در محلول می‌شود که به افزایش شار انتقال جرم می‌انجامد.



شکل ۵. اثر فشار جزئی کربن دی اکسید بر شار انتقال جرم به ازای مقادیر مختلف بارگذاری [۱]

- CO<sub>2</sub> absorption into aqueous solutions of 4-(Diethyl amino)-2-butanol, mono ethanol amine, and N-methyl diethanol amine", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 51, 6470-6479 (2012).
- [8] Porcheron, F., Gibert, A., Mougine, P., Wender, A., "High throughput screening of CO<sub>2</sub> solubility in aqueous monoamine solutions", *Environmental Science & Technology*, 45, 2486-2492(2011).
- [9] "Piperazine-Why It's Used and How It Works", *The Contactor*, Vol. 2, No. 4, 2008.
- [10] Monoj, K. M., Hemant, K. B., Prachi, V., "Progress and trends in CO<sub>2</sub> capture/separation technologies: A review", *Energy* 46, 431-441(2012).
- [11] Edali, M., Idem, R., Aboudheir, A., "1D and 2D absorption-rate/kinetic modeling and simulation of carbon dioxide absorption into mixed aqueous solutions of MDEA and Pz in a laminar jet apparatus", *International Journal of Greenhouse Gas Control*, 4, 143-151 (2010).
- [12] Van Krevelen, D. W., Hofstijzer, P. J., "Composition and Vapour Pressures of Aqueous Solutions of Ammonia, Carbon Dioxide and Hydrogen Sulfide," *Recueil*, 68, 191-216(1948).
- [13] Van Krevelen, D. W., Hofstijzer, P. J., "Applicability of the results of small-scale experiments to the design of technical apparatus for gas absorption", *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, 32, 60-67(1954).
- [14] Decoursey, W. J., Thring, R. W., "Effects of unequal diffusivities on enhancement factors for reversible and irreversible reaction", *Chemical Engineering Science*, 44, 1715-1721 (1989).
- [15] Decoursey, W. J., "Absorption with chemical reaction: development of a new relation for the danckwerts model", *Chemical Engineering Science*, 29, 1867-1872 (1974).
- [16] Decoursey, W. J., "Enhancement factors for gas absorption with reversible reaction", *Chemical Engineering Science*, 37, 1483-1489 (1982).
- [17] Shen, J. F., Yang, Y. M., Maa, J. R., "Promotion Mechanism for CO<sub>2</sub> absorption into partially carbonated ammonia solutions", *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 32, 378-381 (1999).
- [18] Last, W., Stichlmair, J., "Determination of Mass Transfer Parameters by Means of Chemical Absorption", *Chemical Engineering Technology*, 25, 4 (2002).
- [19] Mamun, S., "Selection and Characterization of New Absorbents for Carbon Dioxide Capture", PH.D Dissertation, Norwegian University of Science and Technology, (2005).
- [20] Hoogendoorn, G. C., Abellon, R. D., Essens, P. J. M., Wesselingh, J. A., "Desorption of volatile electrolytes in a tray column", *Chemical Engineering Research and Design*, 66, 483-502 (1988).

## ۸- نتیجه‌گیری

در این تحقیق پیش‌بینی شار انتقال جرم کربن دی اکسید در محلول پپرازین، با بهره‌گیری از مدل شبکه عصبی مطالعه و بررسی شد. ساختار بهینه شبکه عصبی بر اساس حداقل متوسط خطای MSE اختیار شد. با استفاده از داده‌های تجربی و مدل پیترز، پارامترهای موثر بر شار انتقال جرم محاسبه شد. ورودی‌های شبکه عصبی بر اساس نظریهٔ باکینگهام انتخاب شدند. بر اساس این نظریه، تمامی متغیرهای موثر بر شار انتقال جرم در شبکه عصبی به کار گرفته شد. مقایسه نتایج شبکه عصبی و داده‌های تجربی نشان داد که شبکه عصبی شار انتقال جرم را با دقت زیادی نسبت به سایر روابط ارائه شده پیش‌بینی می‌کند. مدل شبکه عصبی ارائه شده کلی و برای محاسبه شار انتقال جرم دیگر گازها قابل کاربرد است و پیشنهاد می‌شود از این روش برای سیستم‌های مختلف جذب واکنش‌دار گازها استفاده شود.

## مراجع

- [1] Dugass, R. E., "Carbon Dioxide Absorption, Desorption, and Diffusion in Aqueous Piperazine and Monoethanolamine", Ph.D. Dissertation, University of Texas at Austin (2009).
- [2] Kaiyun, F., Guangying, Ch., Teerawat, S., Xu, Z., Zhiwu, L., Raphael, I., Paitoon, T., "Experimental study on mass transfer and prediction using artificial neural network for CO<sub>2</sub> absorption into aqueous DETA", *Chemical Engineering Science* 100 195-202 (2013).
- [3] Paitoon, T., Wee, A. G. H., Idem, R. O., Maneeintr, K., Fan, G. J., Veawab, A., Henni, A., Aroonwilas, A., Chakma, A., "Method for capturing carbon dioxide from gas streams", *World Intellectual Property Organization Patent no. WO, 022437*, (2008).
- [4] Hartono, A., Silva, E. F., Svendsen, H. F., "Kinetics of carbon dioxide absorption in aqueous solution of diethylenetriamine (DETA)", *Chemical Engineering Science* 64, 3205-3213 (2009).
- [5] Paul, S., Ghoshal, A. K., Mandal, B., "Kinetics of absorption of carbon dioxide into aqueous solution of 2-(1-piperazinyl)-ethylamine", *Chemical Engineering Science* 64, 313-321(2009).
- [6] Sema, T., Naami, A., Idem, R., Tontiwachwuthikul, P., "Correlations for equilibrium solubility of carbon dioxide in aqueous 4-(Diethylamino)-2-butanol solutions", *Industrial and Engineering Chemistry Research*, 50, 14008-14015(2011).
- [7] Naami, A., Edali, M., Sema, T., Idem, R., Tontiwachwuthikul, P., "Mass transfer performance of



- [21] Ghaemi, A., Torab-Mostaedi, M., Ghannadi, M., Shahhosseini Sh., "Kinetics and Absorption Rate of CO<sub>2</sub> into Partially Carbonated Ammonia Solutions", Chemical Engineering Communications, 198, 1169–1181 (2011).
- [22] Kaiyun, F., Guangying, Ch., Teerawat, S., Xu, Z., Zhiwu, L., Raphael, I., Paitoon, T., "Experimental study on mass transfer and prediction using artificial neural network for CO<sub>2</sub> absorption into aqueous DETA", Chemical Engineering Science, 100, 195–202 (2013).
- [۲۳] منہاج، م. ب.، مبانی شبکه‌های عصبی (هوش محاسباتی)، مرکز نشر دانشگاه صنعتی امیر کبیر، چاپ سوم، ج ۱، ص ۱۷۲، (۱۳۸۴).