

شبیه سازی داده های آزمایشگاهی مربوط به جذب دی اکسید کربن از هوا با حلال سود به کمک شبکه های عصبی مصنوعی*

فهمیه درخشان فرد^(۱) اکبر شاهسونند^(۲) فروغ ستوده^(۳)

چکیده در این مقاله عملکرد تعمیم شبکه های عصبی مصنوعی RBF و MLP به کمک مجموعه داده های تجربی به دست آمده از یک برج جذب آکنده در مقیاس آزمایشگاهی، مقایسه گردیدند. داده های آزمایشگاهی از یک برج آکنده به قطر ۱۱ سانتی متر و به طول ۱/۸ متر که از حلقه های راشیگ ۰/۲۵ اینچی پر شده، به دست آمده است. در این سیستم جذب، برای جاداسازی دی اکسید کربن از هوا از دبی ها و غلظت های مختلف سود (NaOH) به عنوان حلال بهره گرفته شده است. جهت آموزش شبکه های عصبی، از دو شیوه نوین و مطمئن که در مقالات قبلی توسط مولفین ارائه گردیده اند، استفاده شده است [1-2]. در مقالات مذکور، روش جامعی جهت محاسبه مقدار بهینه گستردگی توابع گاوسین آیزوتروپیک همراه با الگوریتم ویژه ای برای آموزش شبکه های MLP ارائه شده اند. نتایج این مطالعه مشخص می نماید که شبکه های عصبی RBF به دلیل دارا بودن مبانی علمی مستحکم تر و همچنین قابلیت فیلتر نمودن نویز، از عملکرد مناسب تری برخوردار هستند. اگرچه بسیاری از نتایج به دست آمده از داده های آزمایشی مطابق روند معمول و قابل انتظار می باشد، اما در برخی موارد نیز نتایج به دست آمده از آزمایشات کمی غیر منتظره بودند که با توجه به تکرار پدیده های مربوطه در شرایط مختلف، به نظر نمی رسد که این گونه نتایج ناشی از خطای آزمایشات باشند. برای مثال میزان درصد جذب دی اکسید کربن به گونه های متفاوتی در نرمالیه های مختلف حلال عمل می نماید که می تواند از حیث برخی کاربردهای عملی بسیار مورد توجه قرار گیرد.

واژه های کلیدی شبکه های RBF و MLP، جذب، عملیات واحد، بهینه سازی، بستر آکنده.

Simulations of Experimental Data of CO₂ Absorption from Air by NaOH Solutions in a Packed Column Using Artificial Neural Network

F. Derakhshan Fard

A. Shahsavand

F. Sotudeh

Abstract The generalization performances of the Back Propagation Multi-Layer Perceptron (BPMLP) and the Radial Basis Function (RBF) neural networks were compared together by resorting to several sets of the experimental data collected from a pilot scale packed absorption column. The experimental data were obtained from an 11cm diameter packed tower filled with 1.8 meter ¹/₄ inch ceramic Rashig rings. The column was used for separation of carbon dioxide from air using various concentrations and flow rates of NaOH solution. Two efficient and reliable in-house algorithms were employed for optimal training of both neural networks. A robust procedure was exploited in these articles to predict the optimal widths of isotropic Gaussian basis functions for RBF networks [1]. Another in-house algorithm was also used to train the MLP networks more rapidly and efficiently in comparison with the conventional procedures [2]. The simulation results indicated that the RBF networks can perform more adequately than MLP networks on filtering out the noise and provide more reliable generalization performances because of their more solid theoretical background. Although most of the collected experimental results were just as we expected them, however, some results were out of the traditional trend. The numerous repetitions of these measurements prove that they can not occur due to random measurement errors. For example, absorbed percentage of carbon dioxide in various caustic solutions with different normality followed a peculiar trend which may prove fruitful in some special application.

Key Words RBF Networks, MLP Networks, Absorption, Unit Operation, Optimization, Packed Beds.

* نسخه ی اول مقاله در تاریخ ۸۹/۳/۱۷ و نسخه ی نهایی آن در تاریخ ۸۹/۵/۱۲ به دفتر نشریه رسیده است.

(۱) کارشناسی ارشد، مهندسی شیمی، گرایش فرآوری و انتقال گاز، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد

(۲) استادیار، گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد

(۳) نویسنده ی مسئول، کارشناسی، مهندسی شیمی، گرایش صنایع گاز، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد

شبه سازی داده های آزمایشگاهی مربوط به جذب ...

مقدمه

اگرچه اخیراً روش های نوینی مانند جذب سطحی و استفاده از غشاهای گوناگون برای جداکردن سولفید هیدروژن و دی اکسید کربن از گاز طبیعی در مقیاس آزمایشگاهی ارائه گردیده اند [3-7]، لیکن هنوز استفاده از فرآیند جذب با حلال، به دلیل سهولت کاربرد و شرایط عملیاتی مناسب از اهمیت کاربردی خاصی برخوردار می باشد [8-10]. علاوه بر این، روش مذکور می تواند برای محدوده وسیعی از دبی گازها و نیز غلظت های متنوعی از انواع ناخالصی های موجود در گاز ورودی به فرآیند، مورد استفاده قرار گیرد. این در حالی است که روش هایی مانند جذب سطحی معمولاً برای غلظت های کم ناخالصی در گاز ورودی مناسب بوده و سیستم های غشایی نیز به دلیل محدودیت های موجود در انتخاب پذیری آنها، عموماً قادر به تصفیه گاز تا حد مجاز و مورد نظر (مثلاً ۵ ppm) برای سولفید هیدروژن) نمی باشند.

علی رغم کاربرد زیاد برج های سینی دار در فرآیند شیرین سازی گاز طبیعی، استفاده از برج های آکنده نیز به دلیل مزایای عملیاتی مختلف مانند سطح انتقال جرم بسیار وسیع و افت فشار ناچیز روز به روز گسترش بیشتری در صنایع نفت و گاز می یابند. ضمناً به دلیل وقوع روزافزون پدیده گلخانه ای (global warming)، جداسازی دی اکسید کربن از هوا نقش مهم تری در صیانت از محیط زیست ایفا می نماید.

در سال ۱۹۹۹ میلادی Shyu و Lin جذب دی اکسید کربن از نیتروژن را با استفاده از محلول های MEA و MDEA در برج پر شده، تحت شرایط عملیاتی مختلف مورد بررسی قرار دادند. مدل تئوری دو پارامتری برای توضیح رفتار جذب دی اکسید کربن ارائه شده و سپس با داده های آزمایشی تایید گردید. آنها نتیجه گرفتند که با افزایش بار جذب (از طریق افزایش غلظت دی اکسید کربن ورودی یا دبی جریان گاز)، زمان تماس کاهش می یابد. همچنین افزایش

غلظت آمین موجب تسهیل جذب فراوان دی اکسید کربن می شود [11].

در سال ۲۰۰۲ میلادی، سلطان و همکاران یک مدل تئوری برای بررسی تاثیر پارامترهای عملیاتی مختلف در خصوص عملکرد یک برج پر شده احیاء ارائه نموده و در آن از داده های آزمایشگاهی سرعت تبخیر آب از محلول $CaCl_2$ استفاده کردند. آنها با ذکر مثال های مختلف نتیجه گرفتند که سرعت تبخیر آب با افزایش سرعت جریان و نیز افزایش دمای هوا و محلول افزایش می یابد [12].

در سال ۲۰۰۴ میلادی Brett Schneider و همکاران با استفاده از یک مدل انتقال جرم و حرارت غیر تعادلی، جذب شیمیایی آمونیاک، دی اکسید کربن و سولفید هیدروژن را در یک محلول آبی شامل هیدروکسید سدیم، مونواتانول آمین و متیل دی اتانول آمین بررسی نمودند. واکنش شیمیایی و تأثیر آن بر انتقال جرم در سیستم های الکترولیتی مذکور نیز بررسی شده و پارامتر هیدرولیکی مربوطه بر اساس استانداردهای مناسب محاسبه گردید. همچنین عملکرد مدل انتقال جرم ارائه شده با داده های آزمایشگاهی مورد ارزیابی قرار گرفت [13].

در سال ۲۰۰۴ میلادی Sharma و همکاران از یک شبکه عصبی مصنوعی که به روش انتشار رو به عقب (back propagation) مورد آموزش قرار گرفته بود، برای بررسی خطا در اندازه گیری های تجربی در خصوص یک برج تقطیر پر شده آب-آمونیاک استفاده نمودند. شبکه گزارش شده عملکرد رضایت بخشی در خصوص آشکارسازی خطای آزمایشات ارائه نمود. در این سیستم، اهمیت نسبی متغیرهای ورودی مختلف بر پارامترهای خروجی گوناگون با استفاده از دسته بندی ضرایب وزنی مناسب مدنظر قرار گرفت. نتایج شبه سازی مؤید آن بود که دمای محصولات فوقانی و تحتانی برج و نیز ترکیب جریان فوقانی در محدوده داده شده تقریباً مستقل از تغییرات دبی و ترکیب

مورد بررسی قرار گرفته است [17].

در این مقاله عملکرد شبکه های عصبی مصنوعی MLP و RBF در خصوص پیش بینی پارامترهای مختلف از طریق آموزش شبکه های مذکور با داده های جمع آوری شده از یک برج آکنده در مقیاس آزمایشگاهی مورد مقایسه قرار می گیرند. داده های به کار گرفته شده مورد اشاره برای آموزش شبکه های عصبی مذکور حاصل آزمایشات متعددی است که در طی آن از غلظت های مختلف حلال سود برای جذب دی اکسید کربن از هوا استفاده شده است. هم چنین در ضمایم انتهای مقاله، به مرور کلی شبکه های عصبی پرداخته شده و شبکه های MLP و RBF به اختصار مورد بررسی قرار می گیرند.

توضیح سیستم آزمایشگاهی مورد استفاده

به منظور جمع آوری داده های آزمایشگاهی جداسازی دی اکسید کربن از هوا توسط سود، از یک سیستم جذب گاز در مقیاس پیلوت استفاده شده است که حاوی دو برج آکنده از حلقه های راشیگ (به صورت سری) می باشد. شکل (۱) نشانگر نمودار جریان و نمای شماتیکی تجهیزات اصلی و جانبی موجود در سیستم مذکور می باشد. برج آکنده مورد استفاده متشکل از دو ستون به قطر داخلی ۴/۵ اینچ می باشد که هرکدام با حلقه های راشیگ سرمایی به اندازه یک چهارم اینچ و تا ارتفاع ۹۰ سانتی متر پر شده اند.

به منظور اطمینان از توزیع مناسب مایع بر روی آکنه ها، از یک باز پخش کننده مایع بین دو قسمت پر شده استفاده شده است. هوای ورودی به برج توسط یک کمپرسور ۱۵ کیلو واتی از محیط فراهم شده و پس از اندازه گیری به کمک دبی سنج هوا (صفر تا دویست لیتر بر دقیقه) با دی اکسید کربن مخلوط می شود. از یک سیلندر بزرگ پنجاه لیتری به منظور فراهم آوردن دی اکسید کربن مورد نیاز استفاده شده است. جریان CO₂ پس از گذشتن از دبی سنج دی اکسید کربن (صفر تا بیست لیتر بر دقیقه) و مخلوط

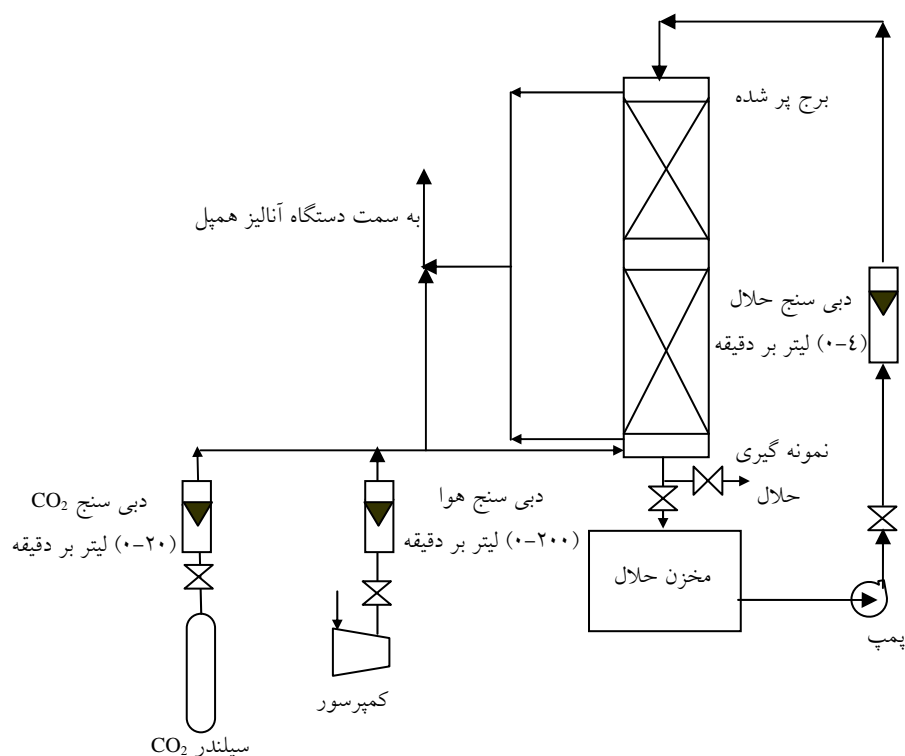
خوراک و نیز سرعت بخار (vapor) می باشند [14]. در سال ۲۰۰۶ میلادی Liua و همکاران، مدل انتقال جرم پیچیده ای (CMT) را برای شبیه سازی فرایند جذب شیمیایی در یک برج آکنده پیشنهاد نمودند. مدل ارائه شده مذکور، قادر به در نظر گرفتن اثرات حرارتی در محاسبه توزیع دما، غلظت و سرعت بود. همچنین این مدل تلفیقی از دینامیک سیال محاسباتی (CFD) و انتقال حرارت محاسباتی (CHT) را ارائه نمود. پیش بینی های مدل مذکور با داده های آزمایشگاهی به دست آمده از یک برج پر شده با آکنه های تصادفی نیم اینچی (با قطر داخلی ۰/۱ متر و ارتفاع ۷ متر) مطابقت داشت. از برج فوق برای جذب شیمیایی دی اکسید کربن از هوا توسط محلول آبی MEA در فشار کلی ۱۰۳/۱۵ کیلو پاسکال استفاده گردید. مجموعه داده های دیگری نیز برای برج پر شده (قطر داخلی ۱/۹ متر و ارتفاع ۲۶/۶ متر) که به حالت تصادفی با حلقه های فولاد زنگ نزن دو اینچی پر شده، ارائه گردیده است. جذب شیمیایی دی اکسید کربن از گاز طبیعی با حلال MEA انجام شده است. آنها استدلال کردند از آنجا که ضریب نفوذ انتقال جرم متلاطم (Dt) در مسیر محوری و شعاعی تغییر می کند نظریه متداول ثابت فرض نمودن مقدار ضریب مذکور (Dt) در طول کل برج، حتی برای برج های پر شده با اندازه کوچک نیز قابل تردید است [15].

در طی دو دهه گذشته، بسیاری از شرکت ها و مؤسسات تحقیقاتی، طراحی مربوط به برخی روش های آموزش شبکه های عصبی را مورد بررسی قرار داده اند [16]. با وجود کاربرد گسترده شبکه های عصبی در الکترونیک، عمران و مهندسی کنترل این پدیده تا سال ۱۹۹۰ برای بیشتر مهندسان شیمی ناشناخته ماند. تلاش جدی در کاربرد شبکه های عصبی برای شبیه سازی در شیمی، بیوشیمی و فرایندهای معدنی از اواخر سال ۱۹۸۹ آغاز گردید. بسیاری از کاربردهای شبکه های عصبی مصنوعی در جای دیگری

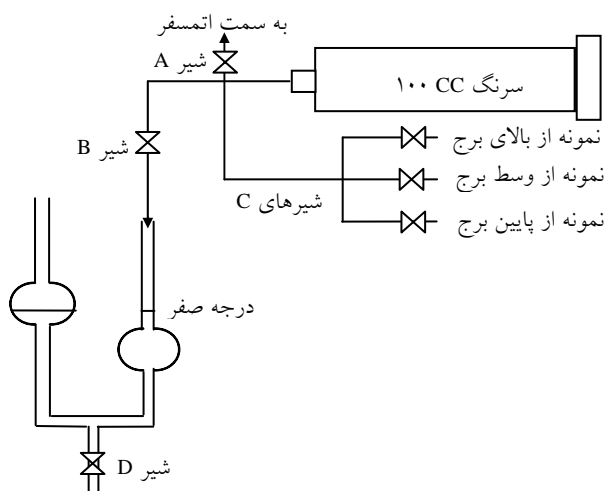
شبیه سازی داده های آزمایشگاهی مربوط به جذب ...

اندازه گیری افت فشار جهت بررسی هیدرولیک برج از مانومتر و به منظور تعیین غلظت دی اکسید کربن موجود در نقاط مختلف جریان گاز از دستگاه همپل استفاده شده است.

شدن با هوا وارد انتهای برج می شود. در قسمت بالا و پایین برج محل هایی برای نمونه گیری از گاز و اندازه گیری افت فشار قرار دارد که امکان غلظت سنجی و بررسی هیدرولیک برج را فراهم می کند. برای



شکل ۱ نمودار جریان شماتیک سیستم جذب گاز مورد استفاده



شکل ۲ نمای شماتیکی دستگاه همپل

اندازه گیری می بایست تصحیح لازم برای حجم لوله‌ها و اتصالات بین سرنگ تا مایع سود نیز انجام گردد.

تهیه داده های آزمایشگاهی

پس از کالیبراسیون دستگاه آنالیزگر همپل، غلظت دی اکسید کربن گاز ورودی و خروجی در شرایط عملیاتی متفاوت، اندازه گیری و ثبت شده است. متغیرهای عملیاتی آزمایش عبارت از دبی و غلظت های جریان های گاز و مایع می باشند.

از نوسانات ناچیز دما در طول هر آزمایش صرف نظر شده و در تمامی محاسبات، دمای متوسط از طریق معدل گیری بین شرایط ابتدایی و نهایی مورد استفاده قرار گرفته است. همچنین در کلیه آزمایشات، فشار گاز ورودی به برج به فشار بارومتريک نزدیک بوده است.

داده های جمع آوری شده از سیستم جذب آزمایشگاهی برج پر شده برای محلول سود در آب به عنوان حلال و مخلوط هوا و دی اکسید کربن در شرایط عملیاتی متفاوت در شکل های (۳- الف) تا (۳- د) گزارش شده اند. برای محاسبه خطا، ابتدا پارامتر مورد نظر در یک شرایط مشخص برای چندین بار اندازه گیری گردید ($y_1, y_2, y_3, \dots, y_n$) و سپس به کمک معادله زیر مقدار معدل پارامتر مذکور (\bar{y}) محاسبه شد.

$$\bar{y} = \frac{\sum_{i=1}^n y_i}{n} \quad (1)$$

سپس داده های تجربی به دست آمده در معادله (۲) قرار گرفته و انحراف معیار استاندارد برای آنها محاسبه گردید. معمولاً میزان گستردگی (دامنه) خطای (Error bar) موجود برای اندازه گیری های مکرر مذکور برابر جذر مقدار انحراف معیار استاندارد در نظر گرفته می شود.

$$\sigma^2 = \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}{n-1} \quad (2)$$

با توجه به اهمیت موضوع، سعی گردیده است

مطابق شکل (۲)، دستگاه موسوم به همپل برای آنالیز جریان گازهای ورودی و خروجی برج جذب آکنده، مورد استفاده قرار گرفت. ابتدا مقدار مناسبی از سود یک نرمال (ویا بیشتر) در محفظه دستگاه ریخته می شود تا ارتفاع سود در بازوی سمت راست (در حالت باز بودن آن به آتمسفر) در نقطه صفر تنظیم گردد. سپس با بستن شیرهای A و B نسبت به باز نمودن یکی از شیرهای C و اخذ ۱۰۰ سانتی متر مکعب نمونه مورد نظر اقدام می شود. به منظور اطمینان از انجام مناسب نمونه برداری، پیشنهاد می گردد ابتدا چند بار با بستن شیرهای C و باز نمودن شیر A نسبت به تخلیه گاز به محیط آتمسفر اقدام شده و سپس با بستن شیر A و باز نمودن یکی از شیرهای C نمونه گیری انجام شود. این عمل تا هنگامی تکرار می شود که تمامی گاز مانده در مسیر نمونه گیری به محیط آتمسفر تخلیه گردد.

پس از اخذ نمونه مورد نظر و اطمینان از بسته بودن شیرهای A، B و C برای یک لحظه شیر A باز می شود تا فشار نمونه به فشار آتمسفریک برسد. سپس شیر A بسته شده و شیر B باز می گردد. با فشردن تدریجی پیستون سرنگ، نمونه گاز اخذ شده به آرامی به داخل محلول سود تزریق شده و سپس با بازگرداندن تدریجی پیستون به جای اولیه خود، گاز به درون سرنگ باز می گردد. بدیهی است که به دلیل حل شدن دی اکسید کربن موجود در نمونه گازی درون سود، حجم گاز نمونه تقلیل یافته و پس از برگشت کامل پیستون به جای اولیه، سطح سود در داخل بازوی سمت راست بالا می آید. پس از ثابت ماندن سطح مایع مذکور در دو مرتبه متوالی خالی و پر کردن سرنگ، نسبت به خواندن حجم مایع موجود در بازوی سمت راست اقدام می شود. بدیهی است که حجم مذکور مبین حجم دی اکسید کربن موجود در نمونه اخذ شده می باشد. به منظور اطمینان از دقت

تشبیه سازی داده های آزمایشگاهی مربوط به جذب ...

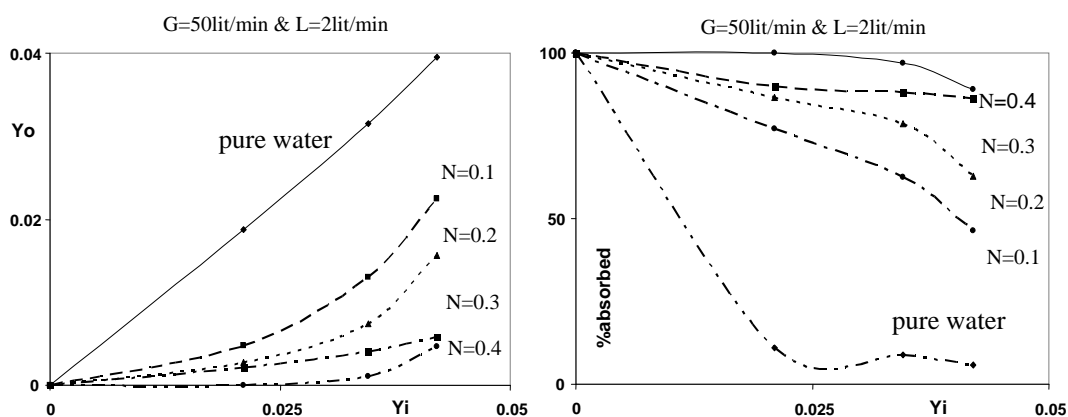
آوردن هریک از ارقام مندرج در این جدول، پنج آزمایش در یک نقطه عملیاتی (در دبی های گاز و حلال یکسان) انجام گردیده است. واضح است که مقادیر خطای مذکور در برگیرنده تمامی خطاهای ابزارها و تجهیزات اندازه گیری می باشد. در تمامی شکل های (۳-الف) تا (۳-د)، درصد جذب به صورت زیر تعریف می شود:

در تمامی نمودارهای مربوط به مقادیر حاصل از آزمایشات، از گستردگی (دامنه) خطا استفاده شود. بدیهی است که آگاهی از این اطلاع مهم، کمک ارزشمندی در جهت درک بهتر فرآیند و اطمینان بیشتر نسبت به داده های اخذ شده ارائه می نماید. جدول (۱) نمایانگر مقادیر (دامنه) خطای محاسبه شده از معادله (۲) برای حالات مختلف می باشد. برای به دست

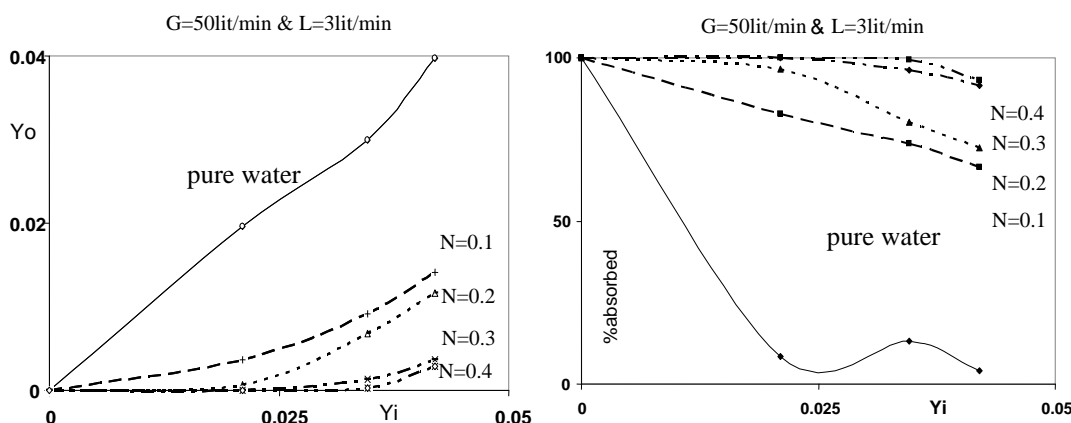
کسر مولی تصحیح شده CO_2 در گاز خروجی - کسر مولی تصحیح شده CO_2 در گاز ورودی

= درصد جذب

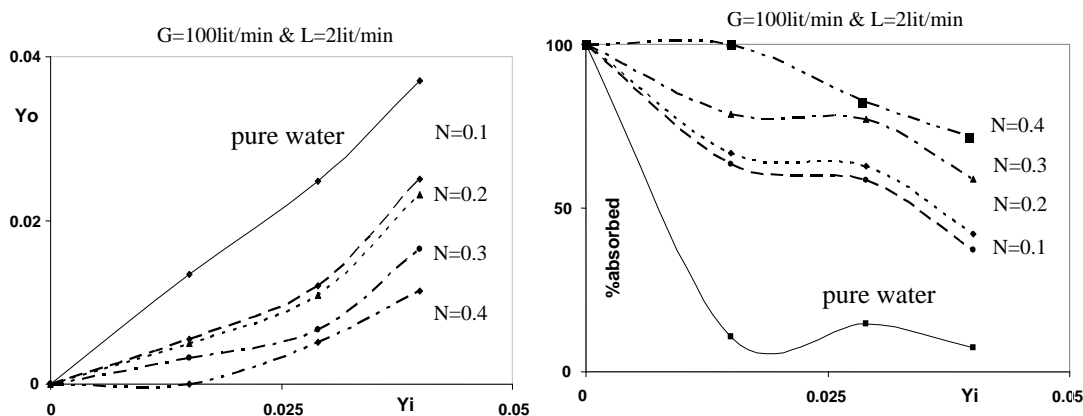
کسر مولی تصحیح شده CO_2 در گاز ورودی



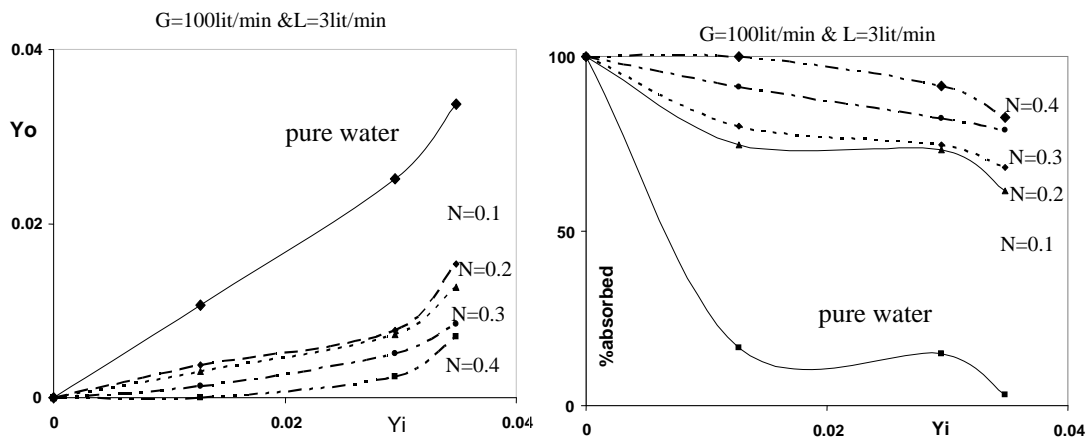
شکل ۳- الف داده های آزمایشگاهی محلول سود در آب (دبی هوا ۵۰ لیتربردقیقه، دبی حلال ۲ لیتربردقیقه)



شکل ۳- ب داده های آزمایشگاهی محلول سود در آب (دبی هوا ۵۰ لیتربردقیقه، دبی حلال ۳ لیتربردقیقه)



شکل ۳- ج داده های آزمایشگاهی محلول سود در آب (دبی هوا ۱۰۰ لیتربردقیقه، دبی حلال ۲ لیتربردقیقه)



شکل ۳- د داده های آزمایشگاهی محلول سود در آب (دبی هوا ۱۰۰ لیتربردقیقه، دبی حلال ۳ لیتربردقیقه)

جدول ۱ مقادیر (دامنه) خطای محاسبه شده برای شرایط عملیاتی مختلف

۱۰۰	۱۰۰	۱۰۰	۵۰	۵۰	۵۰	دبی گاز (لیتر در دقیقه)	پارامترهای عملیاتی
۴	۳	۲	۴	۳	۲	دبی حلال (لیتر در دقیقه)	
۴/۷۸	۵/۷۴	۶/۳۰	۶/۲۷	۶/۳۲	۱۱/۲۰	خطای محاسبه شده در غلظت دی اکسید کربن در گاز خروجی از برج (※ ۱۰ ^۴)	

برج کاهش یافته و درصد جذب مربوطه افزایش می یابد. همچنین مشاهده می شود که با افزایش دبی فاز مایع (حلال) در غلظت ثابت از گاز ورودی، به علت ظرفیت بیشتر حلال، مقدار کسر مولی دی اکسید کربن

براساس شکل های فوق، با افزایش نرمالیتة سود در حلال ورودی به برج آکنده، برای تمامی موارد، به دلیل افزایش حلالیت دی اکسید کربن در حلال مورد نظر، میزان کسر مولی آن در گاز خروجی از انتهای

شبیه سازی داده های آزمایشگاهی مربوط به جذب ...

بهینه سازی داخلی برای انتخاب گسترده ای از ایزوتروپیک (σ) استفاده می شود. از معیار leave one out cross validation (LOOCV or CV in brief) مقدار بهینه پارامتر رگولاریزاسیون استفاده شده است. در مقابل، عملکرد شبکه های MLP به طور کامل به انتخاب مقادیر اولیه ضرایب وزنی سینابتیک آنها بستگی دارد. در شبیه سازیهای انجام شده در این مقاله، ابتدا مقادیر اولیه متفاوتی برای سینابتیک ها به کار گرفته شده و سپس از بین آنها بهترین نتیجه برای پاسخ نهایی انتخاب گردیده است.

از بین دبی های مختلف هوا و حلال، یک نمونه (دبی ۵۰ لیتر بر دقیقه هوا و دبی ۲ لیتر بر دقیقه حلال) جهت بررسی انتخاب شده است. عملکرد یادآوری شبکه MLP تا حدی قابل قبول می باشد در حالی که تعمیم نامناسبی دارد. بر خلاف شبکه MLP، عملکرد یادآوری و تعمیم شبکه های RBF بسیار مناسب است. در شکل (۴) عملکرد یادآوری و تعمیم شبکه های MLP و RBF نشان داده شده است، همانطور که در بالا اشاره شد عملکرد یادآوری شبکه MLP قابل قبول بوده ولی به دلیل خاصیت انعطاف پذیری MLP، عملکرد تعمیم آن دچار پدیده over fitting شده و غلظت منفی که از نظر فیزیکی بدون مفهوم است را حاصل می کند. چنانچه مشاهده می گردد در مورد شبکه RBF عملکرد یادآوری و تعمیم مناسب می باشد.

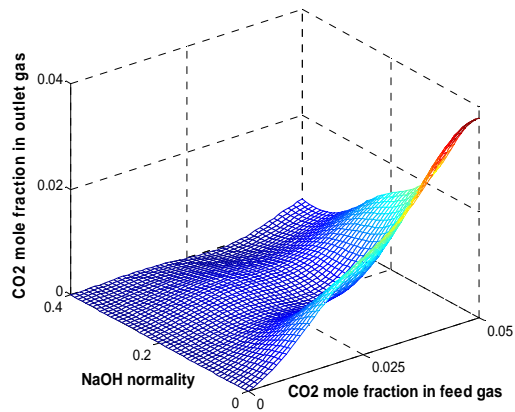
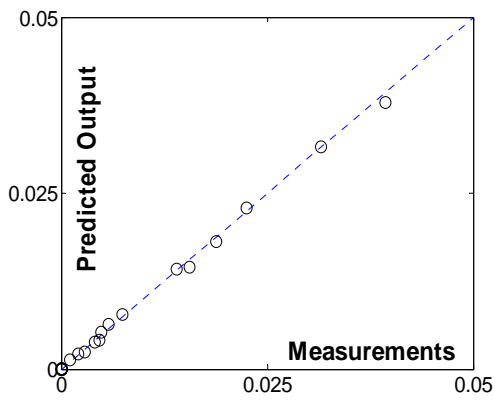
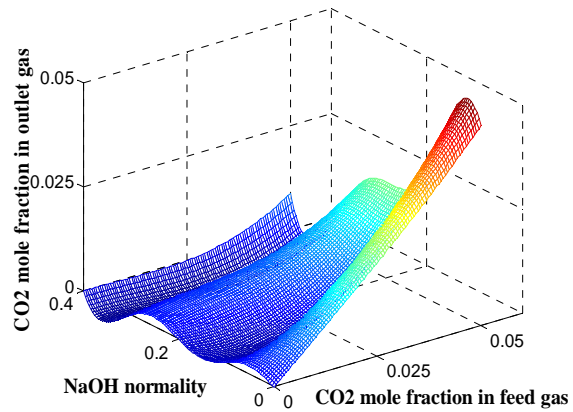
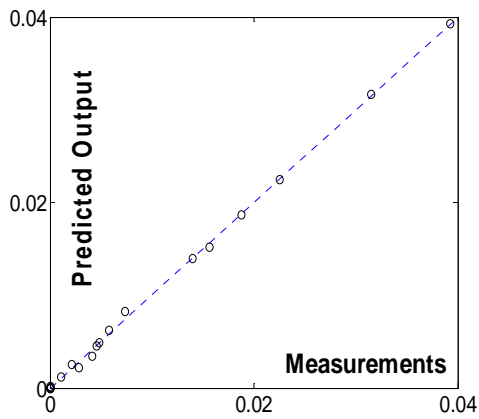
در همان شرایطی قبلی (دبی هوای ۵۰ لیتر بر دقیقه و دبی حلال ۲ لیتر بر دقیقه) درصد جذب دی اکسید کربن بر حسب غلظت گاز ورودی و کسر وزنی حلال در آب در شکل (۵) ارائه گردیده است. نتایج نشان می دهد که عملکرد یادآوری شبکه MLP مناسب بوده ولی عملکرد تعمیم آن قابل قبول نمی باشد. همچنین عملکرد یادآوری و تعمیم شبکه RBF به دلیل فیلتر کردن نویزها مانند حالت های قبلی مناسب می باشد.

در گاز خروجی کاهش می یابد. ضمناً با افزایش دبی فاز گاز، به دلیل کاهش زمان تماس دو فاز، مقدار کسر مولی دی اکسید کربن موجود در گاز خروجی افزایش پیدا می نماید. از سوی دیگر، درصد جذب در نرمالیتیه های مختلف حلال به گونه های متفاوتی عمل می کند. مثلاً در نرمالیتیه های بسیار پایین، با افزایش دبی حلال درصد جذب کاهش می یابد. این امر که برخلاف انتظار بوده و تقریباً در تمامی اشکال (۳-الف) تا (۳-د) و نیز بسیاری از نتایج موجود دیگر، که به دلیل محدودیت صفحات در این مقاله ارائه نشده اند، مرتباً تکرار می شود نمی تواند ناشی از خطای اندازه گیری باشد. در نرمالیتیه های بالاتر، با افزایش دبی حلال و در نتیجه، ظرفیت بالاتر آن، درصد جذب بیشتر می شود. همچنین به صورت مشابه، در نرمالیتیه های بسیار پایین، با افزایش دبی گاز، علیرغم کاهش زمان تماس، به دلیل افزایش مقدار دی اکسید کربن ورودی به برج، درصد جذب افزایش می یابد. ضمناً در نرمالیتیه های بالاتر، با افزایش دبی گاز و به علت تاثیر بیشتر کاهش زمان تماس، درصد جذب کاهش می یابد.

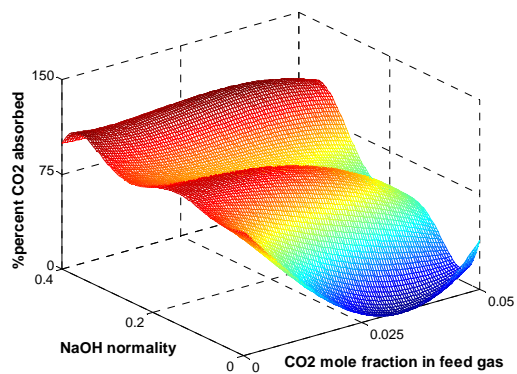
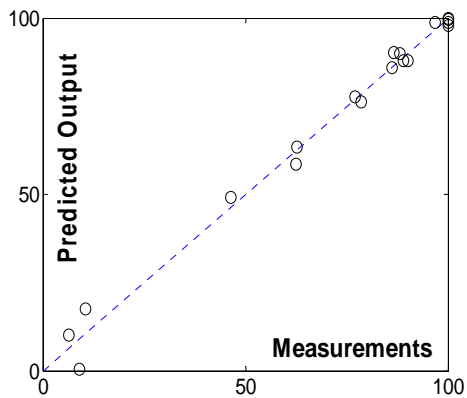
نتایج شبیه سازی با شبکه های عصبی مصنوعی (ANN)

با توجه به این که در شبکه های RBF تعداد نورون ها با تعداد داده های آزمایشگاهی برابر است، لذا برای مقایسه بهتر با شبکه های MLP، در تمامی موارد تعداد نورون های شبکه MLP نیز با داده های آزمایشگاهی برابر گرفته می شوند. جزئیات مربوط به شبکه های مذکور در ضمایم انتهای مقاله به تفصیل مورد بررسی قرار گرفته اند.

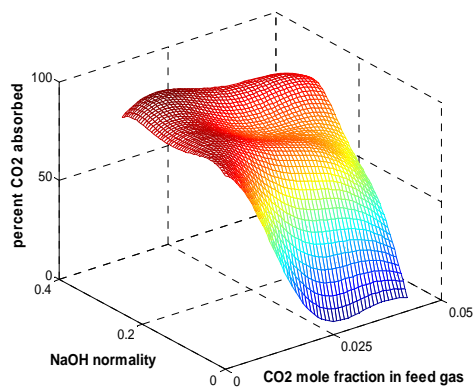
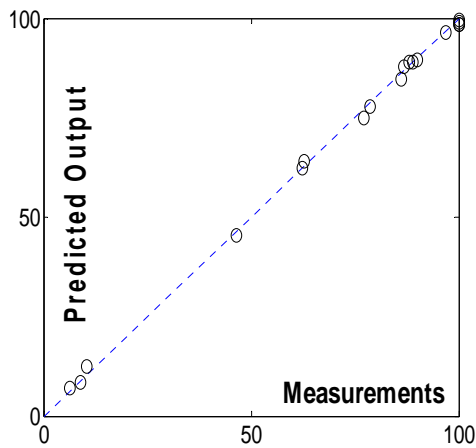
شبکه رگولاریزاسیون نیازی به مقدار اولیه برای پارامترهای خطی و غیر خطی ندارد. شبکه های RBF از همه داده های ورودی به عنوان مراکز، استفاده می کنند. در هر مورد به طور جداگانه از روش



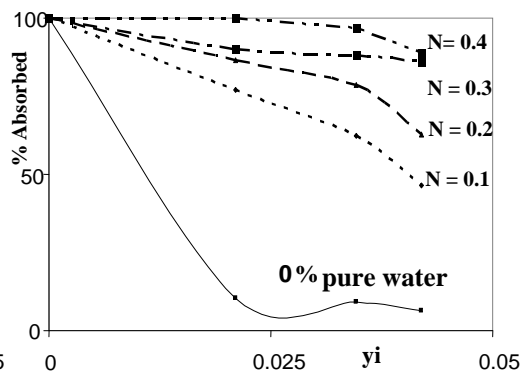
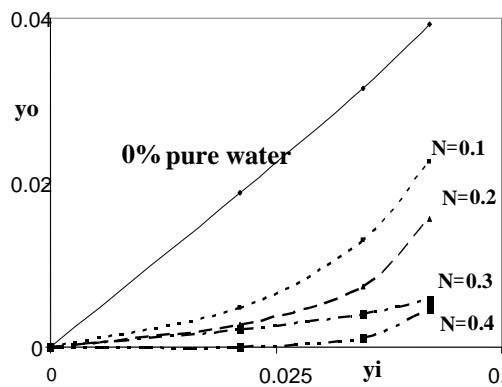
شکل ۴ عملکرد یادآوری و تعمیم شبکه های MLP (بالا) و RBF (پایین) برای غلظت گاز خروجی با استفاده از حلال NaOH ($Q_L=2$ lit/min, $Q_G=50$ lit/min)



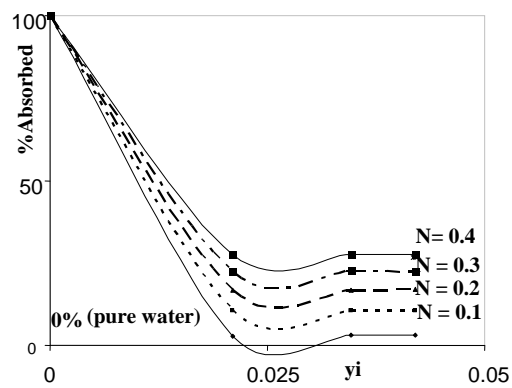
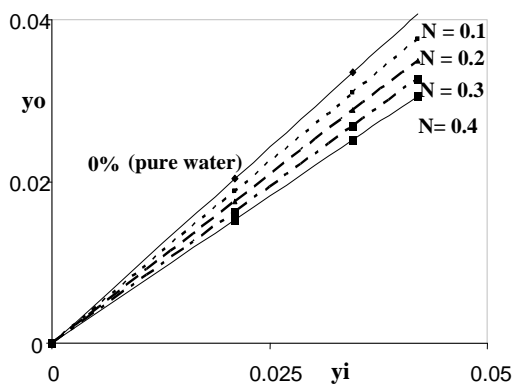
تشبیه سازی داده های آزمایشگاهی مربوط به جذب ...



شکل ۵ عملکرد یادآوری و تعمیم شبکه های MLP (بالا) و RBF (پایین) برای جذب دی اکسید کربن با استفاده از حلال NaOH ($Q_L=2$ lit/min, $Q_G=50$ lit/min)



شکل ۶ نمودار های مربوط به داده های آزمایشگاهی برای حلال سود



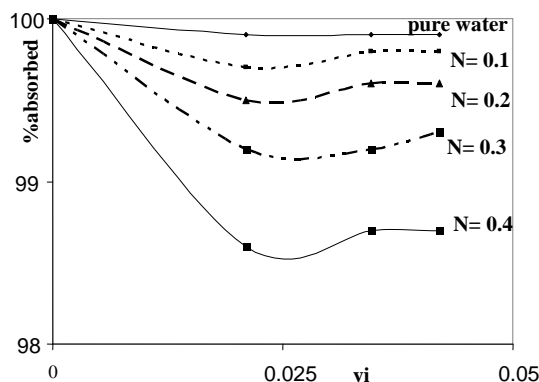
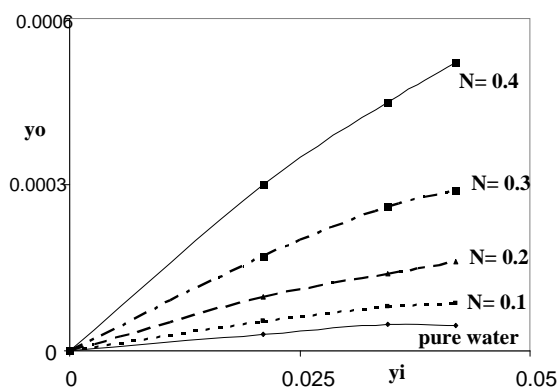
شکل ۷ نتایج تشبیه سازی های انجام شده توسط نرم افزار HYSYS برای حلال سود

برنامه مربوط به ایجاد مقطع در انتهای برنامه نوشته شده در نرم افزار MATLAB اضافه گردیده است. برای سیستم جذب (با دبی حلال ۲ lit/min و دبی گاز ۵۰ lit/min به عنوان نمونه) نتایج به دست آمده از شبکه‌های عصبی مصنوعی به صورت دوبعدی رسم گردیده است و جهت بررسی و مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی و نیز داده‌های نرم افزارهای مختلف (HYSYS و ASPEN) در شکل های (۶) تا (۱۰) ارائه شده اند. در تمامی شکل‌های ارائه شده، نمودارهای سمت راست و چپ به ترتیب نشانگر درصد جذب و غلظت دی اکسید کربن موجود در گاز خروجی از برج آکنده به ازای نرمالیت‌ه‌های مختلف سود می‌باشند.

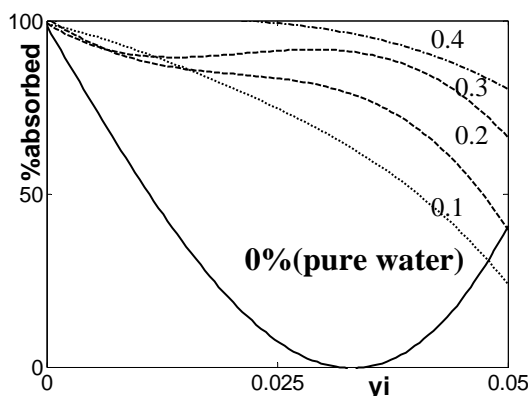
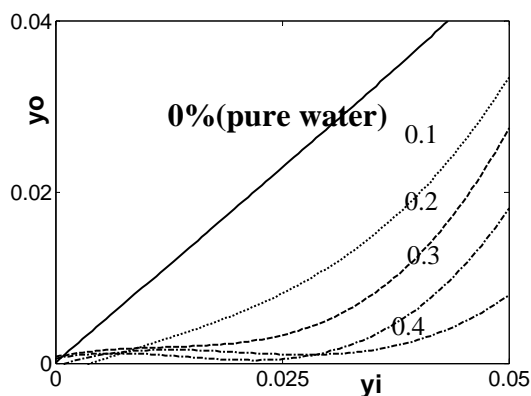
مقایسه نتایج شبیه سازی ANN با داده های

آزمایشگاهی و با نرم افزار HYSYS و Aspen

اشکال سه بعدی به دست آمده در قسمت قبل از نظر اینکه عملکرد یادآوری و تعمیم شبکه های MLP و RBF را بررسی می کنند بسیار جالب بوده و با استفاده از آنها به راحتی می توان مناسب یا نامناسب بودن شبکه های مذکور را تشخیص داد. ولی این اشکال جهت بررسی و مقایسه با داده های آزمایشگاهی و نرم افزارهای مختلف (HYSYS و ASPEN) مناسب نمی باشند زیرا نتایج بدست آمده از آنها در نمودار های سه بعدی رسم شده و امکان مقایسه آنها با نمودار های دو بعدی وجود ندارد. برای مقایسه نتایج به دست آمده از شبکه های عصبی مصنوعی صورت دو بعدی اشکال بدست آمده مورد نیاز می باشد. برای ایجاد این نمودارها

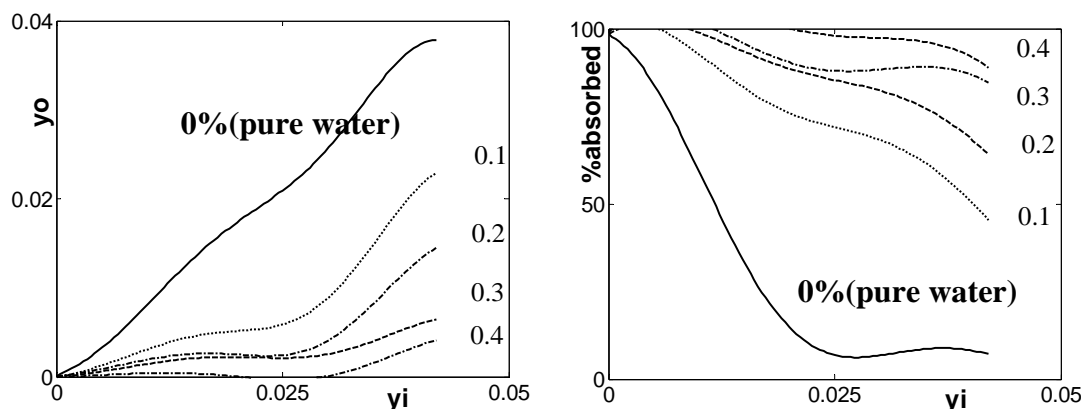


شکل ۸. نتایج شبیه سازی های انجام شده توسط نرم افزار Aspen برای حلال سود



شکل ۹. نتایج شبیه سازی های انجام شده توسط شبکه MLP برای حلال سود

شبیه سازی داده های آزمایشگاهی مربوط به جذب ...



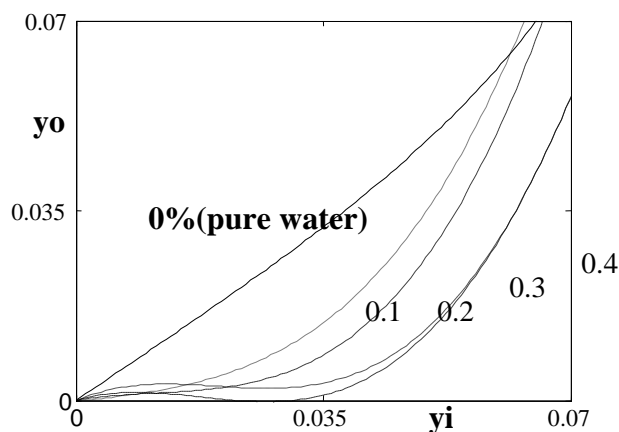
شکل ۱۰ نمودار های مربوط به شبیه سازی با شبکه RBF برای حلال سود

از خود نشان ندهند. این شبکه ها خارج از ناحیه آموزش داده نیز پاسخ می دهند. به عنوان مثال غلظت دی اکسید کربن تا میزان ۰/۰۵ آموزش داده شده است و زمانی که نیاز به غلظت های بیشتر از ۰/۰۵ باشد (مانند غلظت ۰/۰۷ که در شکل (۱۱) نشان داده شده است) شبکه MLP جواب خواهد داد هر چند که ممکن است این جواب قابل قبول نباشد. شبکه RBF خارج از محدوده آموزش داده شده پاسخی ندارد و چنان که در شکل (۱۲) نشان داده شده است پاسخ به سمت صفر میل می کند البته شاید بتوان از نقطه نظر دیگر این خصوصیت را از مزایای شبکه RBF به شمار آورد زیرا در خارج از محدوده تخصص خود پاسخی ارائه نمی کند. جهت بررسی شبیه سازی شبکه های عصبی مصنوعی، عملکرد یادآوری معیار مناسبی نمی باشد زیرا در بعضی موارد عملکرد یادآوری نتایج خوبی حاصل می کند ولی در عین حال از عملکرد تعمیم نامناسبی برخوردار نمی باشد. شبکه RBF به دلیل فیلتر کردن نویزها از عملکرد تعمیم خوبی برخوردار بوده و به همین علت در مقایسه با داده های آزمایشگاهی بهترین شبیه سازی را ارائه می کند. ولی مشکل شبکه های RBF این است که تنها در محدوده آموزش داده شده جواب مناسبی ارائه کرده و در خارج از محدوده آموزشی پاسخ آنها به سمت صفر میل می کند.

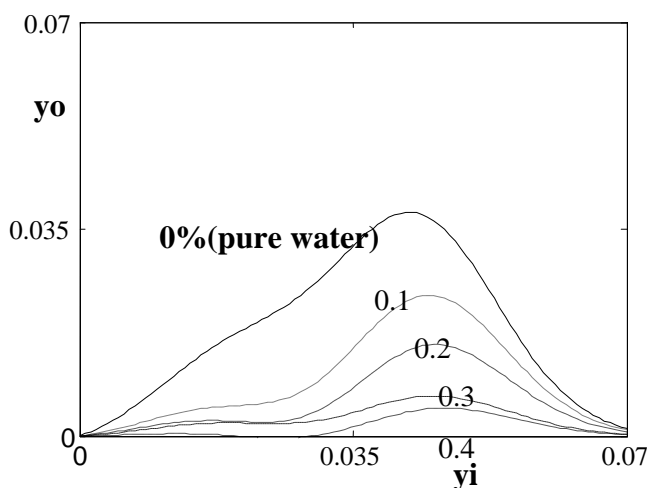
در شبیه سازی با نرم افزار ASPEN برای تمام حالات از مدل ElecNRTL استفاده شده که نتایج حاصل از آن با داده های آزمایشگاهی کاملاً متفاوت می باشد و لازم به ذکر است که به دلیل نزدیکی بیش از اندازه داده ها برای وضوح نمودارها مقیاس آنها تغییر داده شد. در شبیه سازی با نرم افزار HYSYS نیز از مدل های مختلفی استفاده شده است، این نرم افزار هم داده های آزمایشگاهی را پوشش نداده و شبیه سازی مناسبی ارائه نمی نماید.

مقایسه نمودارهای مربوط به شبیه سازی با شبکه های MLP با داده های آزمایشگاهی نشان می دهد که این نمودارها شباهت کمی با داده های آزمایشگاهی دارند (در بیشتر موارد از عملکرد تعمیم مناسبی برخوردار نیستند) این در حالی است که نمودارهای مربوط به شبیه سازی با شبکه های RBF کاملاً شبیه به نمودارهای حاصل از داده های آزمایشگاهی می باشند که دلیل این شباهت به خصوصیات شبکه RBF بازمی گردد که در واقع در تمام موارد از عملکرد تعمیم مناسبی برخوردار بوده و قادر است نویزها را فیلتر کند و شبیه سازی را به نحو مناسبی به انجام رساند.

شبکه های MLP به دلیل انعطاف پذیری بالا در بعضی موارد دچار پدیده over fitting می شوند و این باعث می شود که در این حالت عملکرد تعمیم مناسبی



شکل ۱۱ شبیه سازی با شبکه MLP خارج از محدوده داده های آزمایشگاهی



شکل ۱۲ شبیه سازی با شبکه RBF خارج از محدوده داده های آزمایشگاهی

فرایند جذب در این موارد باشد.

همچنین در این مقاله عملکرد دو گروه ویژه از شبکه های عصبی مصنوعی RBF و MLP (که توسط داده های تجربی جمع آوری شده، آموزش داده شدند) مقایسه گردیدند. شبکه های عصبی از نوع RBF به دلیل دارا بودن مبانی علمی مستحکم تر و همچنین قابلیت فیلتر نمودن نویزها، از عملکرد بسیار بهتری در قیاس با شبکه های MLP برخوردار می باشند.

مطابق انتظار، با افزایش نرمالیت سود و به دلیل افزایش حلالیت دی اکسید کربن، میزان کسر مولی آن در گاز خروجی از برج کاهش یافت که این امر حاکی

نتیجه گیری

داده های تجربی گردآوری شده در این مقاله قادرند به طور قابل ملاحظه ای درک ما را از فرایند جذب در برج های پرشده خصوصاً در ارتباط با جذب دی اکسید کربن از هوا توسط حلال سود افزایش دهند. نتایج حاصل از شبیه سازی به کمک نرم افزارهای HYSYS و ASPEN که قبلاً به آن اشاره شد به خوبی بیانگر این موضوع است که این نرم افزارها در برخی موارد قادر به پیش بینی تغییرات غلظت دی اکسید کربن در طول برج جذب نبوده و از دقت مناسبی برخوردار نمی باشند که این عدم توانایی می تواند ناشی از رفتار پیچیده ی

شبیه سازی داده های آزمایشگاهی مربوط به جذب ...

ممکن است به صورت خطی یا غیر خطی باشد. نورون McCulloch-Pitt و شبکه های Adaline و Perceptron نمونه هایی از تصویر سازی خطی هستند [17]. در تبدیل نوع دوم (local)، از فاصله (افلیدسی) بردار ورودی نسبت به یک نقطه ثابت (مرکز) استفاده می شود. شبکه های Radial basis function نمونه های بسیار معروف مبتنی بر پایه تبدیل ورودی به صورت kernel هستند.

شبکه های عصبی معمولاً بر اساس مسیر سیگنال، به شبکه های پیشرو (Feed-forward) و بازگشتی (Recurrent) تقسیم می شوند. در شبکه های پیش رو سیگنال ها به ترتیب از لایه ورودی، لایه میانی و سپس لایه خروجی به وسیله ارتباطات یک طرفه جریان می یابند. ارتباط نورون ها تنها در جهت رو به جلو و ز یک لایه به لایه های بعدی (به غیر از لایه خودشان) می باشد. خروجی شبکه های پیش رو در هر لحظه فقط تابع ورودی همان لحظه است. به طور کلی دو طبقه بندی متفاوت تک لایه و چند لایه ای در معماری شبکه های پیشرو شناخته شده است [17].

ساده ترین شکل شبکه های پیشرو از یک لایه ورودی (گره های ورودی) که توسط ضرایب وزنی به لایه خروجی (گره های متولی انجام محاسبات) تصویر شده است، ساخته می گردد. در این شبکه ها عموماً هیچ محاسبه ای در لایه ورودی انجام نشده و لایه مذکور به عنوان یک لایه مستقل در نظر گرفته نمی شود. منظور از عبارت تک لایه، اشاره به نورون های لایه خروجی است که تنها محاسبات احتمالی شبکه در آنها انجام می شود. نورون های مذکور به صورت پیشرو به لایه ورودی متصل هستند. حافظه پردازش خطی نمونه ای از اینگونه شبکه های عصبی تک لایه است. شبکه مذکور با یک بردار ورودی و یک بردار خروجی همراه شده و اطلاعات در شبکه معمولاً توسط تصحیحات ایجاد شده بوسیله ضرایب وزنی سیناپتیک از ورودی به خروجی تبدیل می شوند. بدیهی است اینگونه شبکه ها به دلیل آنکه فاقد لایه مخفی هستند، لذا هیچگونه تابع فعالی نداشته

از افزایش درصد جذب می باشد. ضمناً با افزایش دبی حلال که به ظرفیت بالاتر جذب آن را به دنبال دارد، مقدار کسر مولی دی اکسید کربن در گاز خروجی کاهش یافت. از سوی دیگر با افزایش دبی گاز و به دلیل کاهش زمان تماس دوفاز، مقدار کسر مولی دی اکسید کربن در گاز خروجی افزایش یافت. نکته جالب توجه در خصوص میزان درصد جذب می باشد که به گونه های متفاوتی در نرمالیتته های مختلف حلال عمل می نماید. برخلاف انتظار، درصد جذب در نرمالیتته های بسیار پایین، با افزایش دبی حلال کاهش یافت. با توجه به تکرار این امر در بیست آزمایش انجام شده (که بخشی از آنها در این مقاله ذکر شده)، نمی توان این پدیده را ناشی از خطای اندازه گیری تلقی نمود. به همین جهت لازم است تا به منظور ریشه یابی پدیده مذکور، آزمایشات و مطالعات بیشتری در این زمینه انجام شود.

تشکر و قدردانی

در انتها از دانشگاه فردوسی مشهد به خاطر حمایت های مالی و نیز از زحمات بی شائبه جناب آقای میرمحرابی و جناب آقای مهندس واحدی مسئول محترم آزمایشگاه عملیات واحد کمال تشکر و قدردانی به عمل می آید.

ضمیمه الف

مروری بر شبکه های عصبی مصنوعی

به طور کلی شبکه های عصبی مصنوعی شامل چندین ارتباطات نورونی و یک یا چندین لایه میانی است. شبکه های مذکور را می توان از نقطه نظر های مختلفی از جمله، نوع تبدیل ورودی، معماری ساختار شبکه (structure Architecture) و نوع الگوریتم یادگیری طبقه بندی نمود. شبکه های عصبی بر اساس تبدیلی که ارتباط مابین ورودی ها را محاسبه می کند، به صورت projection(non-local) یا kernel(local) به کار برده می شود.

در تبدیل نوع اول (non-local)، تمامی ورودی ها روی یک محور تصویر می شوند. تصویر مذکور

در بیشتر کاربردهای مهندسی، معمولاً تخمین روند اساسی تغییرات خروجی (تابع واقعی مستتر در داده ها) با استفاده از تعداد محدودی داده های ورودی و خروجی، با کمی یا هیچ اطلاعی از شکل تابع واقعی مورد نظر است. این گونه مسائل را معمولاً با نام های هم چون رگرسیون بدون پارامتر (Non-parametric regression) های دارای مفهوم فیزیکی، تقریب تابع، شناسایی سیستم (System identification) یا آموزش قیاسی (Inductive learning) شناخته می شود. این امر در شبکه های عصبی به عنوان آموزش هدایت شده (Supervised learning) نامیده می شود. تابع واقعی پنهان شده در مجموع داده های آزمایشگاهی را می توان به وسیله آموزش شبکه توسط نمونه های که به وسیله یک آموزنده فراهم شده تقریب زد.

مجموعه اطلاعات آموزشی که شامل عناصری از یک یا چند جفت مقادیر متغیر مستقل (ورودی) و متغیر وابسته (خروجی) ساخته شده اند، در یک الگوریتم یادگیری هدایت شده قادرند پارامترهای شبکه را بر اساس تفاوت بین پاسخ اندازه گیری شده $y(x_i)$ و خروجی شبکه $\hat{y}(x_i)$ متناظر با ورودی x_i تنظیم نمایند. در آموزش هدایت شده، یک ناظر مورد نیاز است که سیگنال هدف خروجی $y(x_i)$ را فراهم نماید.

ضمیمه ب

آموزش شبکه های MLP

پایه اولیة شبکه های عصبی Perceptron چند لایه (Multi Layer Perceptron (MLP)) نوروهای مصنوعی هستند که یک عملیات ریاضی ساده بر روی ورودی هایشان عمل می کنند. ورودی نوروها شامل متغیرهای x_1, \dots, x_n و یک عبارت threshold یا (bias) می باشد. هر یک از مقادیر ورودی در ضرایب وزنی (w_i) ضرب شده و حاصل به ترم (bias) اضافه شده و z حاصل می شود. سرانجام تابع فعال ساز معین ϕ ، عملیات ریاضی از پیش معین شده (غیر خطی) روی ورودی تصویر شده عمل می کند. توابع فعال مختلفی هم چون sigmoid یا hyperbolic به طور

و هدف از آموزش آنها تنها بدست آوردن ضرایب وزنی سینابتیکی و ذخیره سازی آنها در شبکه می باشد. شبکه های عصبی پیش رو چند لایه شامل یک یا چند لایه میانی می باشند که نودهای محاسباتی در نوروهای میانی مستقر هستند. وظیفه نوروهای میانی ایجاد ارتباط بین ورودی و خروجی شبکه است. با اضافه کردن یک یا چند لایه میانی، شبکه قابلیت استخراج اطلاعات بالاتری توسط ارتباطات اضافی سینابتیکی می یابد. نوروهای هر لایه بصورت جزئی یا کلی با لایه مجاور ارتباط پیدا می کنند.

در شبکه بازگشتی خروجی بعضی نوروها خوراک برگشتی نوروهای همان لایه یا نودهای لایه پیشین می باشند. بنابراین سیگنال ها می توانند در مسیر های پیش رو یا برگشتی جریان یابند. شبکه های برگشتی حافظه های دینامیکی دارند، که خروجی آنها در هر لحظه انعکاسی از ورودی جاری، خروجی گذشته است. به دلیل وجود همین حافظه دینامیکی، شبکه های عصبی برگشتی برای کنترل و شبیه سازی دینامیکی کاربردهای فراوانی دارند.

الگوریتم یادگیری شبکه های عصبی با تنظیم پارامترهای شبکه سروکار دارد و بطور معمول حل مسائل بهینه سازی مشروط و غیر مشروط را معین می کند. مدل ارائه شده برای شبکه های عصبی بصورت خطی یا غیر خطی و یا ترکیبی از هر دو نسبت به پارامتر های شبکه می باشد. از دیگر خصوصیات تابع هدف این است که عملکرد شبکه ممکن است فقط به ورودی، یا هم به ورودی و هم به خروجی بستگی داشته باشد.

تابع هدف اول به صورت آموزش بدون مربی، آموزش می یابد در حالی که تابع هدف بعدی به یک آموزنده که مستقیماً آموزش می دهد (معلم یا مربی) نیاز دارد. فرآیند آموزش یک شبکه فاقد مربی به مقدار خروجی نیاز ندارد، فقط خصوصیات ورودی در طول آموزش ارائه می شوند. برای یک ساختار معین، هدف از آموزش شبکه، تنظیم و ذخیره سازی پارامتر های سیستم جهت دسته بندی نمودن اتوماتیک ورودی ها در گروه های با خصوصیات مشابه می باشد.

می کند، اما ممکن است بطور بالقوه ناپایدار باشد. تنظیم سرعت آموزش در صفر، ضرایب وزنی شبکه را ثابت نگه می دارد. معمولاً از روش بهینه سازی خطی موسوم به تندترین نزول (Steepest descent) با اندازه قدم ثابت (η) برای تثبیت سریع ضرایب وزنی استفاده می شود.

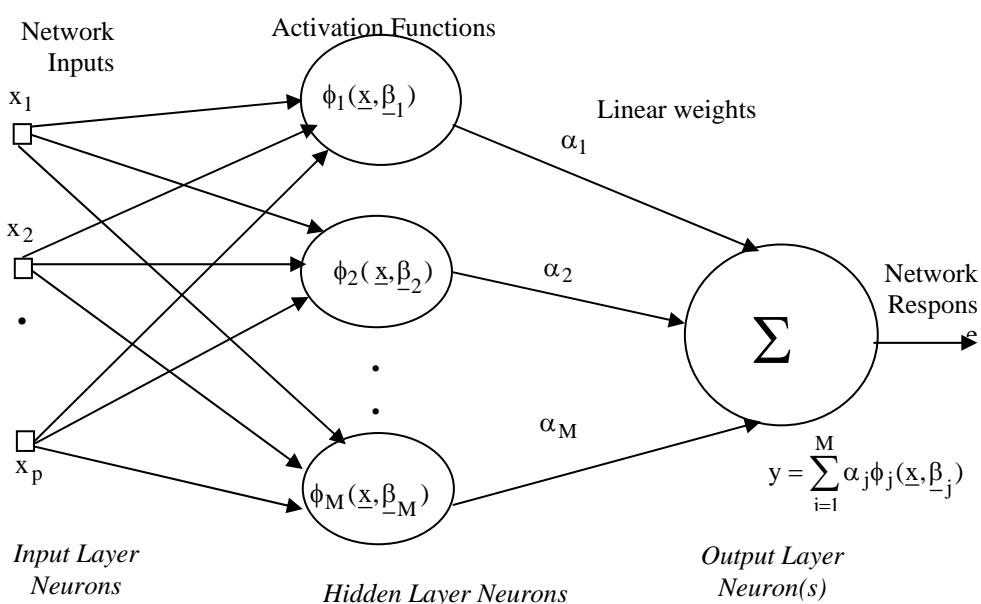
همانگونه که در شکل (ب-۱) نشان داده شده است، از یک سری ضرایب وزنی خطی با نماد α جهت تسریع سرعت همگرایی شبکه استفاده شده است [18]. مقدار بهینه این پارامترهای خطی بعد از هر تکرار back-propagation با استفاده از معادله (ب-۱) به دست می آید.

$$(\Phi^T \Phi) \underline{\alpha} = \Phi^T \underline{y} \quad (ب-۱)$$

در حالی که $\Phi_{i,j} = \phi(z_{i,j})$, $i = 1, \dots, N$ & $j = 1, \dots, M$ و بردار \underline{y} , $N \times 1$ مقادیر اندازه گیری شده هستند. پارامتر N و M تعداد داده های آموزش و تعداد نورونها را به ترتیب نشان می دهد.

متداول برای این منظور استفاده می شود [18]. شبکه های MLP از تعدادی نورونی که در لایه هایی منظم شدند ساخته شده است. نورونهای لایه میانی فرآیند های واقعی را انجام می دهند. در حالی که لایه های ورودی و خروجی فقط توزیع و جمع آوری سیگنالها را بر عهده دارند. با اینکه می توان در شبکه های MLP از چندین لایه میانی استفاده کرد ولی شبکه های دارای یک لایه میانی به دلیل داشتن ساختاری ساده، برای کاربردهای جزئی مفیدتر هستند. استفاده از چندین لایه میانی به درجه آزادی غیر لازم منجر می شود.

شبکه های MLP با تثبیت ضرایب وزنی که در تکنولوژی back-propagation و یا هر روش بهینه سازی دیگر به کار می رود آموزش داده می شود. در طول مراحل آموزش، خروجی شبکه با خروجی مورد نظر مقایسه می شود. اختلاف بین این دو سیگنال برای تثبیت ضرایب وزنی استفاده می شود. سرعت تثبیت ممکن است توسط سرعت آموزش کنترل شود. یک سرعت آموزش بالا به سرعت ضرایب وزنی را تثبیت



شکل ب-۱ نمایش استوکومیتری شبکه های عصبی پیش رو

مجموعه معادلات خطی زیر نوشت [19, 20]:

$$(G + \lambda I_N) \underline{w}_\lambda = \underline{y} \quad \text{(ج-۱)}$$

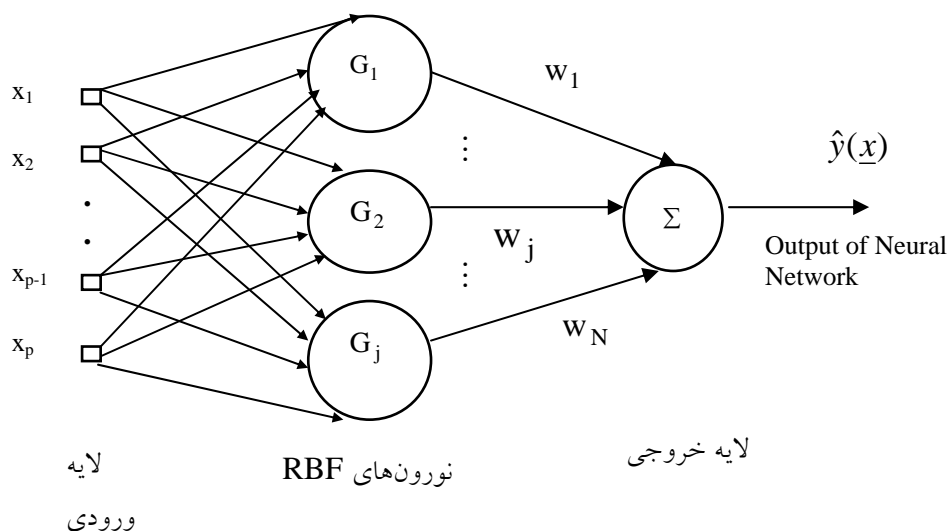
در معادله فوق، G ماتریس مقارن Green $N \times N$ با اعضاء $G_{ij} = G(\underline{x}_i, \underline{x}_j)$ و λ پارامترهای رگولاریزاسیون است. در عمل λ را به اندازه‌های بزرگ انتخاب می کنند که مطمئن باشند ماتریس $(G + \lambda I_N)$ معین مثبت معکوس پذیر است.

نماینده‌ی معادله‌ی (ج-۱) در شبکه‌ی رگولاریزاسیون شکل (ج-۱) نشان داده شده است. شبکه شامل یک لایه میانی منفرد با N نورون و تابع فعال نورون میانی j^{th} تابع Green، $G(\underline{x}, \underline{x}_j)$ است که در نقاط داده‌های ویژه تمرکز یافته است. تأثیر پارامترهای رگولاریزاسیون λ در ضرایب وزنی سینابتیک غیر معین w_j 's جاسازی شده است.

ضمیمه ج

آموزش شبکه های RBF

آموزش شبکه های بر پایه projection (مانند MLP) همیشه در عمل منجر به حل مسائل بهینه سازی غیر خطی در اندازه های بزرگ می گردند که بسیار پیچیده هستند. زیرا چنین مسائلی نیاز به زمان اجرایی بسیار زیاد داشته و اغلب به سختی همگرا می شوند. در مقابل، آموزش شبکه های RBF با مقادیر از پیش تعیین شده برای پارامتر های غیر خطی (مراکز و گستردگی آنها)، در نهایت منجر به یک مجموعه معادلات خطی می گردد که می توانند به سهولت با تکنیک های مختلف که دارای پایداری بالایی می باشند، حل گردند. دو تن از دانشمندان مشهور ایتالیایی با نام های Poggio and Girosi در سال ۱۹۹۰ میلادی ضمن حل مسئله رگولاریزاسیون چند متغیره، نشان داده اند که پاسخ شبکه های مذکور را می توان به صورت



شکل ج-۱ شبکه رگولاریزاسیون با تک لایه میانی

شبیه سازی داده های آزمایشگاهی مربوط به جذب ...

$$f = G(G + \lambda I)^{-1} y \quad (\text{ج-۴})$$

بنابراین ماتریس هموار کننده، $H(\lambda)$ برای شبکه های رگولاریزاسیون به صورت زیر محاسبه می شود:

$$H(\lambda) = S = G(G + \lambda I)^{-1} \quad (\text{ج-۵})$$

تعداد مؤثری پارامترها یا درجه آزادی (df) یک هموار کننده خطی مانند ماتریس برابر با مجموع مقادیر ویژه (Eigenvalues) یا مجموع اعضاء قطری است $\text{tr} H(\lambda) = \text{df}$. بدیهی است که تعداد درجه آزادی تابع فضای متغیر های ورودی بوده و ارتباطی با داده های خروجی ندارد [23].

محاسبه $H(\lambda)$ و بنابراین $CV(\lambda)$ به ازای هر مقدار λ به معکوس ماتریس $N \times N$ ، $(G + \lambda I)$ نیاز صرف زمان زیادی دارد که با استفاده از تکنیک تبدیل مشابه (Similarity transformation) می توان از آن اجتناب کرد [24]. پیشنهاد اصلی در ابتدا توسط Golub et al [25] برای رگرسیون لبه ای (Ridge regression) ارائه شد.

معادله های (۳) تا (۵) نشان می دهد که $CV(\lambda)$ یک تابع پیچیده ای از λ و σ است. بنابراین مقدار بهینه پارامترهای رگولاریزاسیون λ^* (حداقل کردن) $CV(\lambda)$ خیلی به گستردگی ایزوتروپیک (σ) وابسته است. به عبارت دیگر مقدار مناسب λ^* خیلی وابسته به σ برای داده های ویژه با میزان noise ثابتی دارد.

همبستگی قوی بین این دو پارامتر (λ^* و σ) به شدت پیچیده و نمی توان بطور مستقیم به صورت تحلیلی آن را بیان نمود. یک روش نسبتاً ساده در برخی مقالات [16, 1, 2] برای تجزیه این ارتباط قوی بین پارامترهای λ و σ ارائه گردیده است که قادر است مقادیر بهینه پارامترهای مذکور را برای یک مجموعه اطلاعات حاوی نویز به دست آورد. هدف از

در سال ۱۹۹۹ Poggio and Girrosi تابع Green را تعریف کردند. این تابع ایزوتروپیک چند بعدی تبدیلی و چرخشی است و تعداد نامحدودی مشتق پیوسته دارد [20].

$$G(\underline{x}, \underline{x}_j) = \exp \left[-\frac{\|\underline{x} - \underline{x}_j\|^2}{2\sigma_j^2} \right] \\ = \prod_{k=1}^p \exp \left[-\frac{(x_k - x_{j,k})^2}{2\sigma_j^2} \right] \quad (\text{ج-۲})$$

σ ظاهر شده در رابطه ی (ج-۲) به گستردگی ایزوتروپیک (Isotropic spread) تابع Green j^{th} که به صورت یکسان برای همه دیمانسیون های ورودی فرض شده اشاره می کند. کارایی شبکه رگولاریزاسیون بطور قوی هم به انتخاب مناسب گستردگی ایزوتروپیک و هم به مقدار بهینه پارامتر رگولاریزاسیون بستگی دارد [21]. یکی از معیارهای ارزیابی برای محاسبه راندمان پارامتر رگولاریزاسیون بهینه λ^* برای یافتن σ استفاده شده است [22].

$$CV(\lambda) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left[\frac{\underline{e}_k^T (I_N - H(\lambda)) \underline{y}}{\underline{e}_k^T (I_N - H(\lambda)) \underline{e}_k} \right]^2 \quad (\text{ج-۳})$$

N نشان دهنده تعداد نمونه های آموزشی و هم تعداد نورونهای شبکه های رگولاریزاسیون است. \underline{e}_k بردار واحد k^{th} به اندازه N ، I_N ماتریس واحد $N \times N$ و $H(\lambda)$ ماتریس هموار کننده (Smoother matrix) در ابتدا توسط Hastie and Tibshirani تعریف شده است [23].

عملکرد تعمیم شبکه به سادگی از $f = G \underline{w}_\lambda$ محاسبه می شود و با جایگزینی \underline{w}_λ از رابطه ی (ج-۱) خواهیم داشت [19,20]:

انجام این روش آموزش شبکه های بهینه عصبی می باشد که قادر است ضمن فیلتر نمودن نویز نسبت به بازسازی سطح چند بعدی مستتر در داده های نویزی اقدام نماید.

مراجع

1. Shahsavand, A., " An Optimal Radial Basis Function (RBF) Neural Network for Hyper-surface Reconstruction", *Scintia iranica, Transactions C: Chemistry and Chemical Engineering.*, 16(1), pp. 41-53, (2009).
2. Shahsavand, A., and Ahmadpour, A., " Application of optimal RBF neural networks for optimization and characterization of porous materials", *Computers and Chemical Engineering.*, 29(10), pp. 2134-2143, (2005).
3. XU X., SONG Ch., Miller B. G., Scaroni A.W., " Adsorption separation of carbon dioxide from flue gas of natural gas-fired boiler by a novel nanoporous 'molecular basket' adsorbent", *Fuel processing technology.*, 86(14-15), pp. 1457-1472, (2005).
4. Fauth, D.J., Frommell, E.A., Hoffman, J.S., Reasbeck, R.P., and pennline, H.W., " Eutectic salt promoted lithium zirconate: Novel high temperature sorbent for CO₂ capture", *fuel processing technology.*, 86(14-15), pp. 1503_1521, (2005).
5. Gray, M.L., Soong, Y., Champagne, K.J., Pennline, H., Baltrus, J.P., Stevens Jr, R.W., khatri, R., Chuang, S.S.C., and Filburn, T., " Improved immobilized carbon dioxide capture sorbents", *fuel processing thecnology.*, 86(14-15), pp. 1449-1455, (2005).
6. Park, S.W., Suh, D.S., Hwang, K.S., and Kumazawa, H., " Gas absorption of carbon dioxide in a hollow fiber cotained liquid membrane absorber", *Korean J. of Chemical Engineering.*, 14(4), pp. 285-291, (1997).
7. Datta, A.K., and Sen, P.K., " Optimization of membrane unit for removing carbon dioxide from natural gas ", *J. of membrane. Sci.*, 283(1-2), pp. 291-300, (2006).
8. Yeh, J.T., Pennline, H.W., and Resnik, K.P., " Study of CO₂ absorption and desorption in a packed column", *Energy and Fuels.*, 15(2), pp. 274-278, (2001).
9. Vaidya, P. D., and Kenig, E. Y., " Absorption of CO₂ in to aqueous blends of alkanolamines prepared from renewable resources", *Chemical Engineering Science.*, 62(24), pp. 7344-7350, (2007).
10. Huttenhuis, P. J. G., Agrawal, N. J., Hogendoorn, J. A., and Versteeg, G. F., " Gas solubility of H₂S and CO₂ in aqueous solution of N-methyldiethanolamine", *J. of Petroleum. Sci and Engineering.*, 55(1), pp. 122-134, (2007).

11. Lin Sh. H., and Shyu. Ch. T., " Performance characteristics and modeling of carbon dioxide absorption by amines in a packed column", *Waste Management*, 19(4), pp. 255 – 262, (1999).
12. Sultan, G.I., Hamed, Ahmed M., and Sultan, A.A., " The effect of inlet parameters on the performance of packed tower-regenerator", *Renewable Energy.*, 26(2), pp. 271–283, (2002).
13. Brettschneider, O., Thiele, R., Faber, R., Thielert, H., and Woznya, G., "Experimental investigation and simulation of the chemical absorption in a packed column for the system $\text{NH}_3\text{-CO}_2\text{-H}_2\text{S-NaOH-H}_2\text{O}$ ", *Separation and Purification Technology*, 39, pp. 139-159, (2004).
14. Sharma, R., Singh, K., Singhal, D., and Ghoshd, R., " Neural network applications for detecting process faults in packed towers", *Chemical Engineering and Processing.*, 43(7), pp. 841–847, (2004).
15. Liua, G.B., Yua, K.T., Yuana, X.G., Liua, C.J., and Guob, Q.C., " Simulations of chemical absorption in pilot-scale and industrial-scale packed columns by computational mass transfer", *Chemical Engineering Science.*, 61(19), pp. 6511-6529, (2006).
16. Omohundro, S.M., " Efficient Algorithm with Neural Network Behavior", *Complex Systems*, 1, pp. 273-347, (1987).
17. Shahsavand, A., " Optimal and adaptive radial basis function neural networks", Ph.D. Thesis, University of Surrey, UK, (2000).
18. Shahsavand, A., and Pourafshari Chenar, M., " Neural networks modeling of hollow fiber membrane processes", *J. of Membrane. Sci.*, 297(1-2), pp. 59-73, (2007).
19. Poggio, T., and Girosi, F., " Regularization algorithms for learning that are equivalent to multilayer networks", *Science*, 247(4945), pp. 978-982, (1990).
20. Poggio, T., and Girosi, F., " Networks for approximation and learning", *Proceedings of the IEEE.*, 78(9), pp. 1481-1497, (1990).
21. Sugiyama, M., and H. Ogawa., " Optimal design of regularization term and regularization parameter by subspace information criterion", *Neural Networks*, 15 (3), pp. 349-361, (2002).
22. Golub, G.H., and Van Loan, C.G., " *Matrix Computations*" , 3rd ed., Johns Hopkins University Press, Baltimore, (1996).
23. Hastie, T.J., and Tibshirani, R.J., " *Generalized Additive Models*" , 1st ed., Chapman and Hall, London, (1990).
24. Hunt, K.J., Sbarbaro, D., Zbikowski, R., and Gawthrop, P.J., " *Neural Networks for Control Systems : A Survey*", *Automatica*, 28(6), pp. 1083-1112, (1992).
25. Golub, G.H., Heath, M., and Wahba, G., " Generalized Cross-Validation as a Method for Choosing a good ridge parameter", *Technometrics.*, 21(2), pp. 215, (1979).