

مدل‌سازی سیستم تعادلی $Pz-CO_2-H_2O$ با استفاده از شبکه های عصبی

احد قائمی*، حسین قنادزاده^۲، زینب اصغریور^۳

^۱استادیار، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران

^۲استاد، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

^۳دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

دریافت: ۹۳/۹/۶ پذیرش: ۹۴/۸/۲۶

چکیده

در این تحقیق سیستم تعادلی پایپرژین-آب - دی‌اکسیدکربن با استفاده از مدل‌های شبکه عصبی مدل‌سازی شده است. در مدل از دو شبکه عصبی MLP, RBF استفاده شده است. در یادگیری شبکه‌ها الگوریتم پس انتشار خطا به کار رفته است. برای آموزش و تست شبکه های عصبی یک مرور کلی بر کارهای تجربی در زمینه حلالیت دی‌اکسیدکربن در محلول آبی پایپرژین انجام شده و داده های تجربی جمع‌آوری و طبقه بندی شده است. نتایج شبکه های عصبی با داده‌های تجربی ارائه شده در مقالات مورد ارزیابی قرار گرفت. متوسط مربع خطاهای کل داده‌ها برای شبکه MLP برابر با ۴/۲۱ درصد و برای شبکه RBF برابر با ۴/۷۸ بوده که نشان از پیش بینی مناسب شبکه‌های مورد استفاده می‌باشد. نتایج نشان داد که شبکه‌های عصبی ابزاری مناسب بر کاهش زمان محاسبات و افزایش دقت پیش بینی داده های تعادلی می باشند.

کلمات کلیدی: مدل‌سازی، داده های تعادلی، پایپرژین^۱، دی‌اکسیدکربن، شبکه های عصبی

مقدمه

پایپرژین یک زنجیره‌ی حلقوی با دو عامل آمین می‌باشد که در مطالعات گذشته به عنوان یک بهبود دهنده برای سیستم‌های آمین مانند مخلوط متیلدیاناتول آمین- پایپرژین یا مونواتانول آمین- پایپرژین جهت بهبود سرعت انتقال جرم دی‌اکسیدکربن مورد بررسی قرار گرفته است. پایپرژین یک آلکانول آمین نبوده اما از آنجایی که فرآیند و واکنش‌های آن با آب و گازهای ترش دقیقاً مشابه آلکانول آمین‌ها بوده و در فرآیندهای آمین مانند سایر آلکانول آمین‌ها عمل می‌کند، این حلال را در فرآیندهای آمین در دسته آلکانول آمین‌های

*aghaemi@iust.ac.ir

^۱Piperazine

نوع دوم طبقه بندی می‌کنند. هنگامی که پایپرژین به عنوان یک ارتقاء دهنده جذب استفاده می‌شود، محدوده غلظت مورد استفاده پایپرژین به علت انحلال کم آن، پایین و بین ۰/۵ تا ۲/۵ مول می‌باشد. با توجه به طبیعت و ماهیت سیستم‌های جذب و دفع، غلظت‌های بالاتر پایپرژین را باید به گونه‌ای به کار گرفت که با توجه به محدودیت انحلال آن، احتمال هیچ‌گونه رسوبی از پایپرژین در سیستم وجود نداشته باشد. نقطه جوش پایین‌تر پایپرژین (۱۴۶/۵ درجه سلسیوس) نسبت به متیل اتانول آمین (۱۷۰ درجه سلسیوس) نشان می‌دهد که احتمال فراریت پایپرژین در سیستم بیش‌تر می‌باشد [۱]. پایپرژین به عنوان یکی از مهم‌ترین جاذب‌ها در حذف گازهای اسیدی یا ترش بوده و همچنین به عنوان یک افزودنی به حلال‌های متداول مانند متیل‌دی‌اتانول آمین یا AMP (۲- آمینو-۲- متیل-۱- پروپانول آمین) مطرح شده و مورد توجه فراوان قرار گرفته است، زیرا پایپرژین از یک طرف ظرفیت بالایی در جذب گازهای اسیدی دارد و از طرف دیگر سرعت واکنش بالایی از خود نشان می‌دهد. این مزایا باعث شده جذب در فشار پایین انجام شده و ابعاد ستون جذب کاهش یابد. سینتیک واکنش‌ها، انتقال جرم و حلالیت دی‌اکسیدکربن در محلول آبی پایپرژین، توسط محققان مختلف مورد مطالعه قرار گرفته است. در این جا مروری بر کارهای صورت گرفته در زمینه حلالیت دی اکسیدکربن در محلول‌های آبی پایپرژین پرداخته شده است.

بیشنوی و روچل^۱ حلالیت دی‌اکسیدکربن را در محلول ۰/۶ مولار پایپرژین در دمای ۳۱۳ و ۳۴۳ کلوین مورد مطالعه قرار دادند و حلالیت شیمیایی و فیزیکی دی‌اکسیدکربن را در بارگذاری کم و متوسط آمین مدل سازی نمودند [۲]. آرووا و صالح^۲ حلالیت دی اکسیدکربن را در محدوده دمایی ۲۲۳-۲۹۸ کلوین و محدوده فشار جزئی ۰/۴-۹۵ کیلو پاسکال ارائه کردند. آن‌ها میانگین خطای بین نتایج پیش بینی شده و نتایج تجربی را کم‌تر از ۱۵٪ گزارش کردند [۳]. آرماتچکو و همکاران^۳ محلول آبی پایپرژین را با میزان بارگذاری پایین دی‌اکسیدکربن در محدوده خاصی از غلظت پایپرژین و فشار جزئی دی‌اکسیدکربن مطالعه کرده‌اند [۴]. آن‌ها از یک کروماتوگراف گازی برای به دست آوردن داده‌های حلالیت در بارگذاری پایین گاز اسیدی استفاده کردند. معادله انرژی اضافی گیبس تعمیم یافته پیترز، برای نشان دادن میزان غیر ایده‌آل بودن فاز مایع و محاسبه ضریب فعالیت فاز مایع استفاده شده است. در این سیستم آب به تنهایی به عنوان حلال در نظر گرفته شده و پایپرژین، دی‌اکسیدکربن و دیگر یون‌ها به عنوان اجزاء حل شونده منظور شده‌اند. تأثیر فشار روی ثابت تعادل واکنش شیمیایی، نادیده گرفته شده است. این فرضیات داده‌های حلالیت بیشنوی و روچل [۲] و درکس و همکاران^۴ [۵] را به خوبی پیش بینی می‌کند، اما تقریب مناسبی از داده‌های حلالیت آرووا و صالح ارائه نمی‌دهد [۳]. درکس و همکاران [۵]، محلول ۰/۶-۰/۲ مولار پایپرژین را در محدوده دمایی ۲۹۸-۳۴۳ کلوین مورد مطالعه قرار داده‌اند. آن‌ها از داده‌های حلالیت بیشنوی و روچل و داده‌های کمپ و همکاران^۵ [۶] و همچنین داده‌هایی که خود به صورت تجربی به دست آوردند، برای مدل-

¹Bishnoi and Rochelle

²Aroua and Salleh

³Ermatchkov et al.

⁴Derks et al.

⁵Kamp et al.

سازی معادله حالت الکترولیت استفاده کردند. آن‌ها به این نتیجه رسیدند که داده های تجربی به دست آمده مطابقت خوبی با مطالعات قبلی به جز داده‌های آرووا و صالح دارد. کمپ و همکاران [۶] در سال ۲۰۰۳، انحلال دی‌اکسیدکربن را در محلول ۰/۲ و ۰/۴ مولار پایپرژین در محدوده دمایی ۳۹۵-۳۱۳ کلوین و فشار تا حدود ۹/۶ مگا پاسکال مورد مطالعه قرار داده‌اند. آن‌ها از مدل گیبس باقیمانده پیتزر برای تطبیق داده‌هایشان استفاده نمودند. دش و همکاران داده‌های فراوانی از حلالیت دی‌اکسید کربن در دامنه وسیعی از غلظت‌های پایپرژین از ۰/۳ تا ۶/۸ مولال و در بازه دمایی ۳۲۸-۲۹۸ گزارش نموده‌اند و امکان بررسی انطباق پذیری داده‌ها با نتایج مدل سازی فراهم می‌باشد [۷]. نتایج نشان داد که داده‌های مدل‌سازی در دماهای بین ۳۱۳ تا ۳۲۸ و در غلظت‌های پایین پایپرژین، تطابق خوبی با داده‌های تجربی دارند. از آنجایی که نتایج مدل‌سازی منطبق معینی را دنبال می‌کند، امکان انطباق با تمامی داده‌های موجود وجود ندارد. به همین دلیل نیاز است که این داده‌ها به شکل مناسبی غربال شوند. در این تحقیق عمل غربال داده‌ها و انتخاب داده‌های مناسب روی داده‌های مربوط به غلظت‌های پایین پایپرژین صورت گرفته و از بین داده‌ها ۱۴۱ داده برای مقایسه نتایج مدل انتخاب گردید که میزان خطای نسبی بین داده های مدل‌سازی و داده‌های تجربی برابر با ۴/۴۲ درصد می‌باشد. در غلظت‌های بالای پایپرژین مدل توانایی پیش بینی خود را تا حدی از دست می‌دهد. به همین منظور در دامنه غلظت‌های بالای ۴ مولال پایپرژین، دقت حاصل از مدل به صورت جداگانه بررسی گردید و ملاحظه شد که در ۳۱ داده غربال شده در غلظت‌های بالای پایپرژین مقدار خطای نسبی مدل به ۱۸/۶۳ درصد می‌رسد که در مقایسه با غلظت‌های پایین پایپرژین خطای بیش‌تری می‌باشد. درکز و دیکسترا [۵] داده‌های حلالیت دی‌اکسید کربن را در غلظت‌های پایین پایپرژین ۰/۳ مولال تا ۰/۹ مولال در بازه دمایی ۳۴۳-۲۹۸ ارائه نمودند. آن‌ها داده‌های خود را با داده‌های دیگر محققان مقایسه نمودند و مشاهده نمودند که داده‌ها انطباق بسیار خوبی با داده‌های روچل [۸] دارد. این داده‌ها امکان مقایسه نتایج مدل‌سازی را تنها در غلظت‌های پایین پایپرژین فراهم می‌کند. از این‌رو امکان مقایسه نتایج مدل در غلظت‌های بالا وجود ندارد. نتایج حاصل از مقایسه مقادیر غلظت پایین پایپرژین با خروجی مدل انطباق بسیار بالایی را بین داده‌ها نشان می‌دهد، به‌طوری‌که خطای حاصل از این مقایسه در ۳۲ نقطه خطایی کم‌تر از ۱ درصد را نشان می‌دهد. این نتیجه نشان می‌دهد. گری روچل [۸] آزمایشات حلالیت دی‌اکسید کربن در محلول آبی پایپرژین را در محدوده وسیع غلظت پایپرژین از ۰/۹ تا ۱۲ مولال و بازه دمایی ۳۸۳-۳۱۳ کلوین انجام دادند. داده‌های آن‌ها مطابقت بالایی با داده‌های درکز و همکاران و همچنین داده‌های دش و همکاران دارد. از این‌رو می‌بایست مطابقت خوبی نیز با مدل‌سازی از خود نشان دهد. نتایج حاصل از انطباق پذیری این داده‌ها با نتایج مدل سازی نشان داد که میزان خطا در ۳۸ نقطه ۱/۹۸ درصد به دست آمد. همان‌گونه که پیش بینی می‌شد مدل در غلظت‌های بالای پایپرژین پیش بینی ضعیف‌تری از خود نشان می‌دهد و میزان خطای به دست آمده ۱۶/۶۱ درصد می‌باشد. آرووا و صالح [۳] اطلاعات حلالیت دی‌اکسید کربن را در غلظت‌های پایین پایپرژین بین ۰/۱ تا ۱/۵ مولال در بازه دمایی ۳۲۳-۲۹۸ کلوین منتشر کردند. به دلیل آن‌که آن‌ها آزمایشات خود را در غلظت‌های مختلف انجام داده‌اند، نتایج آن‌ها با داده‌ها مدل‌سازی قابل مقایسه بوده و در این مقایسه مشاهده گردید که نتایج مدل دارای خطایی برابر با ۱۴/۳۶ درصد می‌-

باشد. این خطا در محدوده غلظت‌های پایین پایپرژین خطای زیادی می‌باشد. سلیم کادوالا و همکاران [۹] و مک لی و همکاران [۱۰] در تحقیقاتی جداگانه روی غلظت‌های پایپرژین پایین‌تر از ۲ مولال داده‌های تجربی گزارش نموده‌اند. جان آرتور مک لی و همکاران [۱۰] تحقیقات خود را به گونه‌ای متفاوت با داده‌هایی که تاکنون بررسی گردید ارائه دادند. آن‌ها سیستم را به گونه‌ای به کار گرفتند که غلظت پایپرژین بین ۴/۹-۶/۸ مولال تغییر می‌کند و اثر دمای بالا را بر فشار جزئی دی‌اکسید کربن بررسی کردند. نتایج تحقیقات آن‌ها نشان داد که با افزایش دما فشار جزئی دی‌اکسید کربن در بارگذاری ثابت با شیب تندی افزایش می‌یابد و به شدت از میزان انحلال دی‌اکسید کربن کاسته می‌شود. در جدول ۱ داده‌های تجربی ارائه شده توسط محققان در دماها و غلظت‌های مختلف محلول پایپرژین ارائه شده است. با توجه بررسی‌های انجام شده مشخص گردید که مدل واحدی وجود ندارد که حلالیت دی‌اکسید کربن را در غلظت‌های پایین و بالای پایپرژین به خوبی مدل‌سازی نماید. بنابراین در این تحقیق از مدل‌های شبکه عصبی برای مدل‌سازی حلالیت دی‌اکسید کربن در تمامی محدود‌های دمایی و غلظت‌های پایین و بالای پایپرژین استفاده شده است. در این تحقیق از داده‌های جدول ۱ برای آموزش و تست شبکه‌های عصبی استفاده شده است.

سیستم تعادلی $Pz-CO_2-H_2O$

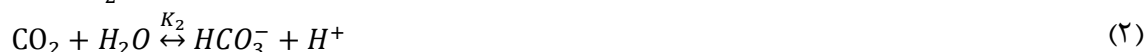
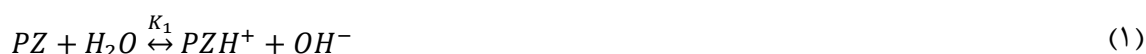
در سیستم تعادلی دی‌اکسید کربن- پایپرژین- آب اجزاء مولکولی به صورت جزئی بین فاز مایع و بخار توزیع می‌شوند. با توجه به این‌که محلول مورد نظر الکترولیت ضعیف بوده و در فاز مایع اجزاء به صورت مولکولی و یونی بوده در حالی‌که در فاز گاز فقط اجزاء به صورت مولکولی می‌باشند. توزیع اجزاء بین دو فاز مایع و بخار در شکل ۱ نشان داده شده است. واکنش‌های شیمیایی تعادلی که در محلول سیستم پایپرژین- دی‌اکسید کربن- آب انجام می‌شوند به صورت زیر می‌باشند [۸]:

جدول ۱. داده‌های تعادل بخار- مایع سیستم پایپرژین- دی‌اکسید کربن- آب

منبع داده‌ها	N	T	m_{Pz}	CO_2 Loading	مرجع
Derks and Dijkstra, 2005	58	298-343	0.3-0.9	0.3-1.1	[5]
Aroua&Salleh, 2004	140	298-323	0.15-1.5	0.15-1.1	[3]
John Arthur McLees, Jr., 2006	37	263-323	0.3-2	0.2-1.05	[10]
Gary T. Rochelle, 2008	125	313-383	0.9-12	0.1-1	[8]
Qing Xu& Martin Metzner, 2009	163	383-453	4.96-8	0.2-0.5	[11]
SalimKadiwala et al., 2010	42	313-343	0.45, 1.8	0.8-2.08	[9]
Stephanie et al. 2010	92	373-465	4.93-9.92	0.281-0.422	[1]
Perez-Salado Kamps et al., 2003	48	313-393	2, 4	0.54-1.64	[6]
Ermatchkov et al., 2006	18	353, 373	2- 4.2	0.06-0.41	[4]
Hilliard, 2008	60	313, 333	0.9 - 5	0.1-0.45	[12]
Nguyen et al. , 2008	109	313, 393	0.9-12	0.1-0.44	[13]
JORGE M. PLAZA, 2009	75	354-453	7.43, 7.94	0.31-0.42	[14]
Rochechhe et al. 2008	40	313-373	2-12	0.22-0.41	[8]
Qing Xu, 2011	182+36	373-464	4-10	0.2-0.45	[15]
Sukanta Kumar Dash, 2011	315	298-328	0.2-4.5	0.2-3	[7]

بخار	PZ ↓	CO ₂ ↓	H ₂ O ↓
مایع	PZ PZH ⁺ PZCOO ⁻ PZ(COO ⁻) ₂ H ⁺ PZCOO ⁻	CO ₂ PZCOO ⁻ PZ(COO ⁻) ₂ H ⁺ PZCOO ⁻ HCO ₃ ⁻ CO ₃ ²⁻	H ₂ O OH ⁻ H ⁺

شکل ۱. توزیع اجزاء مختلف سیستم پایپرزین-دی اکسید کربن- آب در فاز مایع و بخار



پیش بینی تعادل بخار- مایع با استفاده از شبکه عصبی

امروزه مهندسين و محققان تمایل زیادی به محاسبه خواص ترمودینامیکی سیستم‌های تعادلی توسط روش‌های عددی از خود نشان می‌دهند که این امر ناشی از توان بالای روش‌های عددی در شبیه سازی تعادل-های ترمودینامیکی می‌باشد. روش‌های عددی دارای محاسن و معایبی می‌باشند، از جمله مزایای این روش‌ها، بالا بودن سرعت محاسبات و قابل استفاده بودن برای سامانه‌های مختلف می‌باشد و از معایب آن می‌توان از نیاز به داده‌های تجربی زیاد نام برد. یکی از روش‌های عددی که در سال‌های اخیر جایگاه خاصی در محاسبات مهندسی شیمی پیدا کرده است، شبکه‌های عصبی می‌باشد. از شبکه‌های عصبی در ترمودینامیک برای پیش بینی خواص ترمودینامیکی شامل فاکتور تراکم پذیری، فشار تعادلی، ضرایب فعالیت، فوگاسیته، ویسکوزیته و دانسیته و دیگر خصوصیات ترمودینامیکی استفاده شده است [۱۶]. تحقیقات نشان می‌دهد که شبکه عصبی به ابزاری قدرتمند با دقت محاسبات مورد قبول در مهندسی شیمی خصوصاً ترمودینامیک تبدیل شده است. شبکه‌های RBF و MLP شبکه‌هایی هستند که بیش‌تر در ترمودینامیک و مهندسی شیمی به کار رفته و به طور وسیع برای تخمین تعادل بخار- مایع استفاده شده است. اولین بار پترسون و همکارانش [۱۷] در سال ۱۹۹۴ از شبکه MLP برای محاسبه ضرایب فعالیت سامانه‌های دوتایی استفاده کردند. آن‌ها نتایج حاصل از شبکه را با پیش بینی مدل UNIFAC و داده‌های تجربی مقایسه کردند [۱۸].

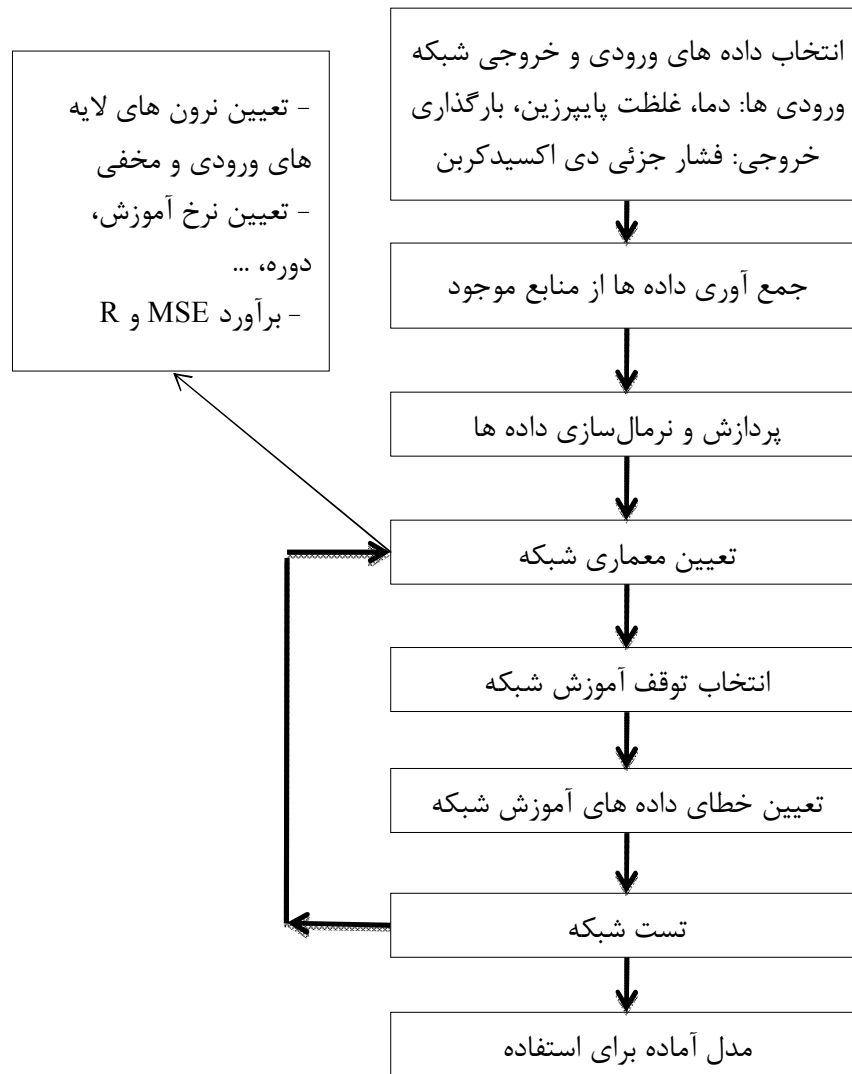
در سه دهه اخیر تعادل بخار- مایع محلول‌های الکترولیت دوتایی و سه تایی همچنان مورد علاقه محققان زیادی بوده است. تحقیقات انجام شده در جدول ۲ آمده است.

جدول ۲. استفاده از شبکه عصبی توسط محققین برای سامانه‌های تعادلی دوتایی و سه تایی

مرجع	شبکه	سیستم	سال	نویسنده
[17]	MLP	Binary Systems	1994	Pertersen et al.
[18]	MLP	Binary Systems	1995	Guimaraes and McGreavy
[19]	MLP	Binary Systems	1999	Sharma et al.
[20]	MLP	Binary Systems	2000	Iliuta et al.
[21]	MLP	Binary Systems	2002	Urata et al.
[22]	MLP	Binary Systems	2002	Dubdu
[23]	RBF	Binary and Ternary Systems	2003	Ganguly
[24]	MLP	Binary systems	2006	Mohanty
[25]	RBF	Binary and Ternary Systems	2006	Govindarajan et al.
[26]	MLP	Ternary Systems	2007	Nguyen et al.
[27]	MLP	Binary systems	2010	Claudio et al.[13]
[28]	MLP,RBF	Ternary systems	2008	Ghaemi et al.
[29]	MLP	Binary systems	1994	Lee, Chen
[30]	MLP	Binary systems	2008	Ghanadzadeh, Ahmadifar
[31]	Cascade	Binary systems	2013	Lashkarblooki et al.
[32]	MLP	Binary systems	2006	Swati Mohanty
[33]	MLP	Binary systems	2007	Karimi and Fakhri
[34]	MLP	Ternary Systems	2003	Piotrowski et al.

مدل‌سازی سیستم پایپرژین-دی‌اکسید کربن-آب توسط شبکه عصبی پرسپترون

در این تحقیق از یک مدل‌سازی شبکه عصبی پرسپترون برای سیستم تعادلی پایپرژین-دی‌اکسید کربن-آب استفاده شده است که بر اساس شیوه با ناظر مورد آموزش قرار گرفته است، یعنی هر سیگنال از یک نرون به نرون بعدی به صورت مسیر مستقیم فرستاده می‌شود. ساختار یک شبکه پیش‌خور با یک لایه میانی، شامل یک لایه ورودی جهت وارد کردن داده‌ها، یک لایه مخفی جهت پردازش داده‌ها و یک لایه خروجی است. از الگوریتم آموزشی پس انتشار خطا برای تنظیم توابع وزنی میزان خطا استفاده شده است. الگوریتم پس انتشار خطا به روش شیب نزولی مقادیر وزن مورد استفاده در شبکه جهت حداقل کردن تابع خطای جمعی تنظیم می‌نماید. مراحل کلی ایجاد شبکه عصبی در شکل ۲ نشان داده شده است که نشان دهنده گام‌های مختلف ایجاد و آموزش یک شبکه عصبی می‌باشد.



شکل ۲. طرح کلی مراحل آموزش شبکه عصبی مصنوعی

در این تحقیق وزن ها و بایاس ها به صورت مقادیر اولیه در نظر گرفته شده اند و بر اساس آموزش شبکه مورد تغییر قرار گرفته اند. تعداد لایه های مخفی، نرون های لایه مخفی، نوع توابع انتقال و نیز تابع فعال سازی توسط سعی و خطا به دست می آید. بدین صورت که شبکه های مختلف پس از آموزش مورد ارزیابی قرار گرفته و با توجه به عملکرد آن ها انتخاب می شوند و ساختار شبکه ای که کمترین میزان انحراف از مقادیر هدف را داراست، به عنوان شبکه مورد قبول معرفی شده است. مقدار سرعت یادگیری (η) عددی بین ۰-۱ است. اگر این مقدار بسیار کوچک انتخاب شود، یادگیری شبکه بسیار کند خواهد شد و در صورت انتخاب عددی بزرگ، سبب دور شدن مقادیر وزنی و تابع هدف می شود. بنابراین انتخاب مقدار مناسب سرعت یادگیری بسیار حائز اهمیت بوده و از طریق سعی و خطا قابل تنظیم است.

در شبکه‌های عصبی چند لایه تابع فعال‌سازی و نیز تعداد نرون لایه میانی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است، زیرا لایه‌های ورودی و خروجی عملیات توزیع و جمع‌آوری سیگنال‌ها را بر عهده دارند [۲۱] و عملیات پردازش داده‌ها توسط لایه میانی صورت می‌گیرد. پرکاربردترین توابع فعال‌سازی، تابع لگاریتمی سیگموئید است که این تابع توسط رابطه (۸) تعریف می‌شود:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (8)$$

عموماً شبکه‌های عصبی با دو لایه مخفی پرکاربردترین انواع شبکه‌های عصبی با کارکردی ساده می‌باشند. تابع انتقال لایه خروجی purelin و توابع فعال‌سازی Tansig و Satlins در این لایه قرار گرفته است. بدین طریق تک تک پارامترهای پیکربندی این شبکه با سعی و خطا جایگذاری شده و عملکرد این شبکه‌ها با پارامترهای خطا و رگرسیون و ضریب همبستگی مورد ارزیابی قرار گرفته است. یعنی شبکه‌ای که کم‌ترین میزان انحراف را از مقادیر هدف هم برای داده‌های آموزش و هم برای داده‌های آزمون شبکه داراست، به عنوان مدل ارائه شده است.

مدل‌سازی سیستم پایپرزین - دی‌اکسید کربن - آب توسط شبکه عصبی RBF

برخلاف شبکه عصبی پرسپترون که دارای توابع تحریک سیگموئید یا تانژانت هیپربولیک می‌باشد، در شبکه RBF تابع تحریک یک تابع غیرخطی گوسی است. در این شبکه ارتباط بین نرون‌های لایه‌های ورودی و پنهان به سادگی MLP نمی‌باشد. نرون‌های لایه مخفی، واحدهای چندبعدي هستند و بعد این نرون‌ها برابر تعداد ورودی شبکه می‌باشد [۲۳]. به‌طور ساده می‌توان گفت، به علت شکل خاص تابع گوسی، هر نرون لایه مخفی، هنگامی دارای خروجی بزرگ‌تر است که بردار ورودی شبکه، به مرکز تابع گوسی آن نرون نزدیک‌تر باشد و با افزایش فاصله بردار ورودی از مرکز این تابع غیرخطی، خروجی نرون نیز کاهش می‌یابد. این فاصله را می‌توان با معیار فاصله اقلیدسی تعریف نمود. یک تابع گوسی به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$f(x) = e^{-\left(\frac{X_i - C_{ij}}{d_{ij}}\right)^2} \quad (9)$$

که در آن x_i ، i امین درایه بردار ورودی است، C_{ij} مرکز تقارن و d_{ij} عرض i امین تابع گوسی از i امین نرون مخفی می‌باشد. در شکل ۳ نمودار تابع گوسی نشان داده شده است [۲۵]. شبکه RBF، مانند شبکه MLP قابلیت پردازش هر نوع نگاشت غیرخطی بین اطلاعات ورودی و خروجی را دارد. تفاوت این دو در توابع تحریک آن‌هاست، به طوری که خروجی نرون‌های لایه مخفی در MLP در محدوده گسترده‌تری از ورودی‌ها غیر صفر است ولی در شبکه‌های RBF نرون در محدوده کوچکی دارای خروجی غیر صفر هستند و به صورت محلی عمل می‌کنند. بنابراین شبکه‌های RBF اغلب در مسائل طبقه بندی نقاط بهتر از MLP عمل می‌کند در صورتی که شبکه MLP در برازش منحنی مناسب‌تر است.

ویژگی شبکه RBF نسبت به سایر شبکه‌ها از جمله پرسپترون آنست که آموزش این شبکه‌ها آسان‌تر از شبکه‌های عصبی معمولی بوده و از روش پس انتشار خطا^۱ استفاده می‌کنند و همچنین این شبکه یک تقریب کلی از تابع را با استفاده از مجموع تقریب‌های محلی محاسبه می‌کند.

انتخاب داده‌های ورودی و خروجی شبکه‌ها

به دست آوردن نتایج مورد قبول از شبکه عصبی نیازمند انتخاب داده‌هایی مناسب به عنوان ورودی و خروجی شبکه است که این داده‌ها به طور مستقیم بر عملکرد شبکه تأثیرگذار می‌باشند. وقتی داده‌های ورودی به شبکه بسیار وسیع هستند، ابتدا باید داده‌ها را دسته‌بندی کرد. در این تحقیق داده‌های مربوط به سیستم پایپرژین- دی‌اکسید کربن- آب به سه دسته مستقل تقسیم شده است. دسته اول داده‌های فشار پایین دی‌اکسید کربن، دسته دوم داده‌های فشار بالای دی‌اکسید کربن و دسته سوم داده‌های دما بالا می‌باشند. داده‌های مورد استفاده در جدول ۱ برای سیستم پایپرژین- دی‌اکسید کربن- آب ارائه شده است. داده‌های جمع‌آوری شده شامل ۵۷۱ داده می‌باشد که ۷۰٪ داده‌ها جهت آموزش شبکه و ۳۰٪ دیگر جهت تست شبکه آموزش داده شده، مورد استفاده قرار گرفته است. جهت به دست آوردن نتایج قابل قبول از شبکه عصبی ابتدا می‌بایست داده‌ها نرمالایز شوند. به این منظور کلیه داده‌ها به بازه ۰ تا ۱ انتقال می‌یابند.

جدول ۳. داده‌های نرمالایز شده ورودی و خروجی شبکه‌ها

داده‌های ورودی	داده‌های خروجی
$U_1 = \frac{T - T_{\min}}{T_{\max} - T_{\min}}$ (۱۰)	
$U_2 = \frac{m_{PZ} - m_{PZ,\min}}{m_{PZ,\max} - m_{PZ,\min}}$ (۱۱)	$S = \frac{P_{CO_2} - P_{CO_2,\min}}{P_{CO_2,\max} - P_{CO_2,\min}}$ (۱۳)
$U_3 = \frac{a_{CO_2} - a_{CO_2,\min}}{a_{CO_2,\max} - a_{CO_2,\min}}$ (۱۲)	

$$r = \frac{N \sum_{i=1}^N k_{\text{exp}} k_{\text{predict}} - \sum_{i=1}^N k_{\text{exp}} \sum_{i=1}^N k_{\text{predict}}}{\sqrt{(N \sum_{i=1}^N k_{\text{predict}}^2 - (\sum_{i=1}^N k_{\text{predict}})^2)(N \sum_{i=1}^N k_{\text{exp}}^2 - (\sum_{i=1}^N k_{\text{exp}})^2)}} \quad (14)$$

$$r^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (k_{\text{exp}} - k_{\text{mean}})^2 - \sum_{i=1}^N (k_{\text{predict}} - k_{\text{exp}})^2}{\sum_{i=1}^N (k_{\text{exp}} - k_{\text{mean}})^2} \quad (15)$$

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (k_{\text{exp}} - k_{\text{predict}})^2 \quad (16)$$

^۱ Back Propagation

بررسی عملکرد شبکه

در مرحله یادگیری شبکه، معیارهای مختلفی برای توقف شبکه‌های عصبی وجود دارد این معیارها شامل زمان محاسبات، میزان خطاها و تعداد مراحل اعمال داده‌ها^۱ به شبکه می‌باشد. برای محاسبه میزان خطا از روابطی مانند ثابت رگرسیون (r)، متوسط ضریب همبستگی (r^2) و متوسط مربع خطا (MSE) استفاده می‌شود. در این تحقیق از معیار مربع متوسط خطاها استفاده شده است [۲۷-۱۷] که در آن، مقدار k_{exp} خروجی هدف، $k_{predict}$ خروجی پیش‌بینی شده توسط شبکه آموزش داده شده، k_{mean} متوسط داده‌ها و N تعداد داده‌ها می‌باشد.

نتایج شبیه سازی شبکه های عصبی

بعد از انجام مراحل آموزش و تست شبکه های عصبی، بهترین ساختار شبکه پرسپترون در جدول ۴ ارائه شده است. در جدول ۴ تعداد داده های آموزش، تست به همراه توابع فعال سازی و توابع انتقال آمده است. در جدول ۵ مشخصات شبکه RBF برای آموزش دیده شده برای سیستم مورد نظر ارائه شده است. پارامترهای پیکربندی این شبکه با روش سعی و خطا به دست آمده و عملکرد این شبکه‌ها با پارامترهای خطا و رگرسیون و ضریب همبستگی مورد ارزیابی قرار گرفته است. شبکه‌ای که کمترین میزان انحراف را از مقادیر هدف هم برای داده‌های آموزش و هم برای داده‌های آزمون شبکه داراست، به عنوان مدل ارائه شده است. در جدول ۶ نتایج آماری مراحل تست و آموزش شبکه‌های عصبی MLP و RBF داده شده است. در این مطالعه رگرسیون^۲، ضریب همبستگی^۳، متوسط مربعات خطا^۴ و متوسط نسبی انحراف^۵ به عنوان معیار یادگیری و انتخاب شبکه‌ها می‌باشد.

همان‌طور که در جدول ۶ مشاهده می‌شود، هر دو شبکه عصبی شبیه سازی شده نتایج قابل قبولی با رگرسیون بالا در محدوده وسیعی از داده‌ها ارائه می‌دهند. نتایج نشان می‌دهد که شبکه‌های عصبی ابزار مناسب برای پیش‌بینی داده‌های حلالیت دی‌اکسیدکربن در محلول آبی پایپرزین می‌باشد که از سرعت و دقت بالایی برخوردار است. شبکه‌های عصبی محدودیت‌های کمتری نسبت به مدل ترمودینامیکی دارند و می‌توانند جایگزین این مدل‌ها شوند.

نتایج حاصل از دو مدل شبکه عصبی MLP و RBF نشان می‌دهد که در مدل شبکه عصبی پرسپترون، دقت بالاتری نسبت به شبکه RBF برای سیستم مورد مطالعه دارد. در شبکه پرسپترون می‌بایست تابع آموزش مناسب توسط سعی و خطا به دست آید اما شبکه RBF نسبت به پرسپترون سریع‌تر و راحت‌تر به جواب می‌رسد و به این علت تمایل بیش‌تری به استفاده از آن وجود دارد.

¹Epochs

²Regression (R)

³Coefficients of determination (R^2)

⁴Mean square error (MSE)

⁵Average Relative Deviation (ARD)

جدول ۴. مشخصات شبکه عصبی مدل سازی شده MLP

پیکربندی شبکه عصبی MLP			مشخصات
دما بالا	فشار بالا	فشار پایین	
Feed forward	Feed forward	Feed forward	نوع شبکه
۸،۱۰،۱	۱۲،۱۵،۱	۴۰،۱	تعداد نرون ها
Purelin	Purelin	Purelin	تابع انتقال لایه خروجی
Tansig, Satlins	Tansig, Satlins	Tansig	تابع فعال سازی
۰/۰۹	۰/۰۹	۰/۰۹	نرخ آموزش
Levenberg-Marquardt	Levenberg-Marquardt	Levenberg-Marquardt	الگوریتم آموزش
۵۹	۱۲۷	۷۵	تعداد مراحل اعمال داده ها
۱۲۲	۱۲۳	۲۰۵	تعداد داده های آموزش شبکه
۳۱	۳۲	۵۸	تعداد داده های تست شبکه

جدول ۵. مشخصات شبکه عصبی مدل سازی شده RBF

مشخصات شبکه عصبی RBF			مشخصات
دما بالا	فشار بالا	فشار پایین	
$۱۰^{-۳}$	$۱۰^{-۳}$	$۱۰^{-۴}$	مقدار هدف (Goal)
۰/۲۵	۰/۳	۰/۶	Spreads
۶۵	۹۲	۱۶۶	حداکثر تعداد مراحل اعمال داده ها

جدول ۶. نتایج آماری مراحل تست و آموزش شبکه های عصبی تحت ناظر و بدون ناظر

RBF			MLP			دسته داده ها	پارامتر
دما بالا	فشار بالا	فشار پایین	دما بالا	فشار بالا	فشار پایین		
۰/۹۹۴۶	۰/۹۹۶۵	۰/۹۹۱۸	۰/۹۹۶۶	۰/۹۸۳۰	۰/۹۹۶۱	داده آموزش	r^2
۰/۹۵۰۰	۰/۹۵۳۸	۰/۹۴۰۱	۰/۹۵۳۹	۰/۹۶۳۷	۰/۹۵۰۱	داده تست	
۰/۹۹۷۳	۰/۹۹۸۲	۰/۹۹۷۶	۰/۹۹۶۶	۰/۹۹۱۷	۰/۹۹۸۱	داده آموزش	r
۰/۹۸۵۶	۰/۹۷۷۰	۰/۹۶۱۳	۰/۹۸۸۹	۰/۹۸۵۸	۰/۹۸	داده تست	
$۲/۲۲e-۰۳$	$۷/۳۸e-۰۴$	$۲/۴۵e-۰۴$	$۲/۷۰e-۰۳$	$۳/۶۱e-۰۳$	$۲/۲۸e-۰۶$	داده آموزش	MSE
$۶/۲۸e-۰۳$	$۴/۳۲e-۰۳$	$۱/۱۶e-۰۳$	$۵/۳۳e-۰۳$	$۳/۴۱e-۰۳$	$۲/۰۶۴e-۰۴$	داده تست	
۰/۰۷۸۱	۰/۰۲۸	۰/۰۴۸۱	۰/۰۷۲۷	۰/۰۹۰۷	۰/۰۹۰۱	داده آموزش	AAD
۰/۱۶۰۷	۰/۳۱۲۱	۰/۱۹۳۳	۰/۱۲۲۳	۰/۱۲۹۷	۰/۱۳۵۱	داده تست	

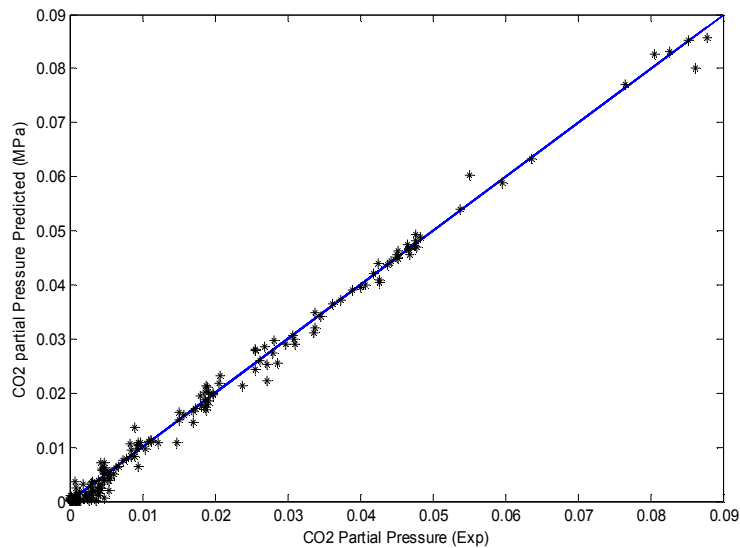
در جدول ۴-۵ نتایج شبکه های MLP و RBF، برای داده های تجربی مختلف برای سیستم پایپرزین-دی اکسیدکربن - آب نشان داده شده است. نتایج متوسط خطاها نشان می دهد که شبکه های عصبی دقت خوبی برای داده های ارائه شده با شرایط مختلف دارد در حالی که مدل های ترمودینامیکی این عمومیت را ندارند.

جدول ۷. نتایج شبکه عصبی و متوسط انحراف داده ها برای سیستم پایپرزین- دی اکسیدکربن - آب

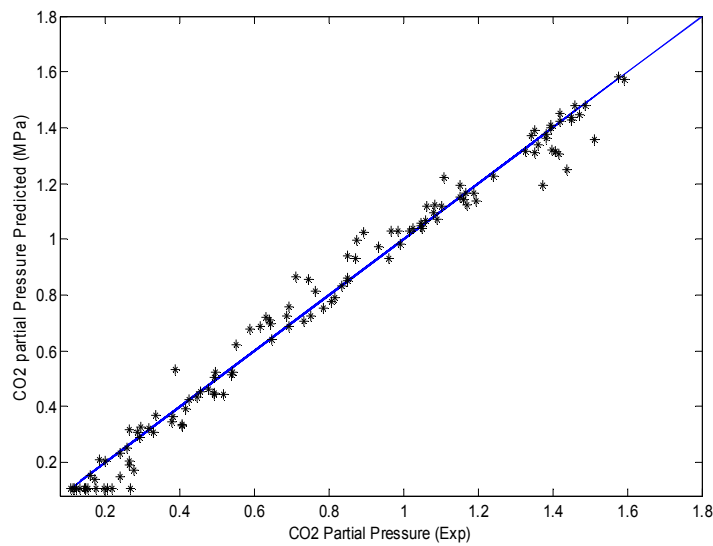
منبع داده ها	دما(کلوین)	تعداد داده	% Average Relative Deviation	
			MLP	RBF
S.K. Dash et al.[7]	۲۹۸-۳۲۸	۱۹۳	۱/۲۳	۱/۹۳
Derks and Dijkstra[5]	۲۹۸-۳۴۳	۴۲	۲/۳۹	۳/۱۰۱
Aroua&Salleh[3]	۲۹۸-۳۲۳	۶۳	۶/۵۶	۶/۶۱
John Arthur McLees, Jr.[10]	۲۶۳-۳۲۳	۱۵	۴/۱۸	۵/۲۶
Gary T. Rochelle[1]	۳۱۳-۳۸۳	۸۴	۵/۲۷	۵/۳۳
Qing Xu& Martin Metzner[15]	۳۸۳-۴۵۳	۱۵۳	۷/۲	۷/۸
SalimKadiwala et al.[9]	۳۱۳-۳۴۳	۲۱	۲/۴۱	۴/۵۳
کل داده ها و متوسط انحراف نسبی داده ها		۵۷۱	۴/۲۱	۴/۷۸

متوسط انحراف نسبی کل داده ها شبکه MLP برابر با ۴/۲۱ درصد و برای شبکه RBF برابر با ۴/۷۸ می باشد. این نتایج نشان می دهد هر دو شبکه به کار گرفته شده نتایج قابل قبولی از خود نشان می دهند و از بین آن ها شبکه MLP انحراف کمتری را نسبت به داده های تجربی از خود نشان می دهد. شکل های ۳ پیش بینی شبکه عصبی در مرحله آموزش برای شرایط مختلف فشار جزئی دی اکسیدکربن در سیستم مورد مطالعه نشان می دهد. این شکل ها نشان می دهد که آموزش به نحوه احسن انجام شده است. در این مطالعه با توجه به این که شبکه های عصبی به طور موثر و موفقیت آمیز برای پیش بینی تعادل بخار-مایع سیستم پایپرزین- دی اکسیدکربن- آب استفاده گردید، این مدل شبکه عصبی این قابلیت را دارد تا برای پیش بینی تعادل بخار- مایع سیستم های الکترولیت آبی دیگر نیز استفاده گردد. بهترین شبکه MLP برای سیستم مذکور دارای سه ورودی، ۱۲ نرون در لایه پنهان اول، ۱۵ نرون در لایه پنهان دوم و یک نرون در لایه خروجی می باشد. در شبکه عصبی با توجه به اینکه دقت نتایج به دست آمده از محاسبات به دقت و محدوده اعداد استفاده شده در مراحل تست و آموزش شبکه وابسته است، باید در مراحل ذکر شده از داده های مورد اعتماد و با دقت بالا استفاده شود. اگر به اندازه کافی اعداد تجربی در دسترس باشد شبکه های عصبی را می توان بدون داشتن محدودیت هایی که در مدل های ترمودینامیکی حاکم است به کار برد. از محدودیت های شبکه های عصبی می توان از طبیعت تجربی، کاربرد آن در محدوده آموزش دیده و عدم قابلیت استفاده در محدوده هایی آموزش ندیده و نیاز به مقادیر زیادی داده با کیفیت خوب جهت اطمینان

پذیری آن‌ها برای آموزش نام برد. با این وجود مزیت‌های محاسباتی این مدل‌ها موجب شده تا محققان به طور گسترده از این روش استفاده کنند.

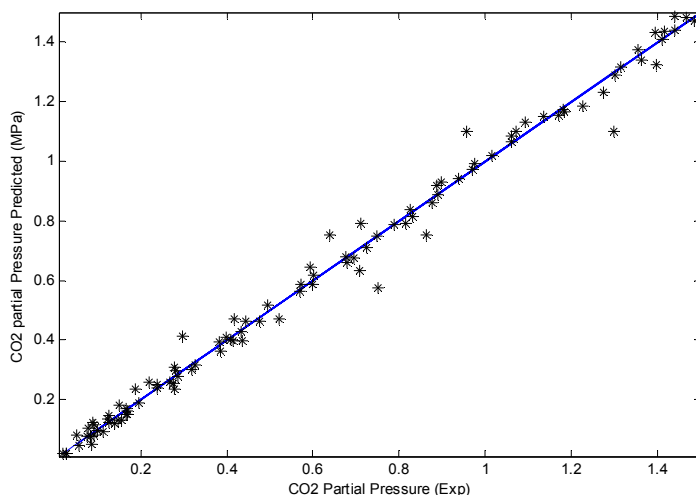


(الف)



(ب)

شکل ۳. آموزش شبکه عصبی MLP (الف) پیش بینی فشار دی‌اکسیدکربن در فشار پایین (ب) پیش بینی فشار دی‌اکسیدکربن در فشار بالا



(ج)

ادامه شکل ۳. آموزش شبکه عصبی MLP (ج) پیش بینی فشار دی اکسید کربن در دمای بالا

نتیجه گیری

در این تحقیق به طور موفقیت آمیز مدل‌های شبکه‌های عصبی برای شبیه سازی سیستم تعادلی آب-پایپرژین - دی اکسید کربن استفاده گردید. بعد از آموزش شبکه‌ها نتایج پیش بینی شبه‌های عصبی با داده‌های تجربی محققان مختلف مقایسه گردید. بهترین ساختار شبکه‌ها با حدس خطا بر مبنای کم‌ترین خطا انتخاب گردید. بهترین شبکه MLP برای سیستم مذکور دارای سه ورودی، ۱۲ نرون در لایه پنهان اول، ۱۵ نرون در لایه پنهان دوم و یک نرون در لایه خروجی می‌باشد. متوسط انحراف نسبی کل داده‌ها شبکه MLP برابر با ۴/۲۱ درصد و برای شبکه RBF برابر با ۴/۷۸ می‌باشد. نتایج نشان داد که شبکه‌های عصبی علاوه بر بالا بردن دقت پیش بینی، سرعت محاسبات را بالا می‌برد. پیشنهاد می‌شود از این روش برای پیش بینی تعادل بخار-مایع سیستم‌های الکترولیت آبی دیگر استفاده گردد. در شبکه‌های عصبی با توجه به اینکه دقت نتایج به دست آمده از محاسبات به دقت و محدوده اعداد استفاده شده در مراحل تست و آموزش شبکه وابسته است، باید در مراحل ذکر شده از داده‌های مورد اعتماد و با دقت بالا استفاده شود.

علائم اختصاری

m	غلظت اجزاء
N	تعداد داده
P	فشار
MSE	متوسط مربع خطاها
T	دما



مراجع

- [1] Freeman S. A., Dugas R., Van Wagener D. H., Nguyen T., Rochelle G. T., Carbon dioxide capture with concentrated, aqueous piperazine, *International Journal of Greenhouse Gas Control*, Vol. 4, 2010, pp 119-124.
- [2] Bishnoi S., Rochelle G. T. Thermodynamics of Piperazine/Methyldiethanolamine/Water/Carbon Dioxide, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol. 41, 2002, pp 604-612
- [3] Aroua M. K., Salleh R. M., Solubility of CO₂ in aqueous piperazine and its modeling using the kent-eisenberg approach, *Chemical Engineering Technology*, Vol. 27, 2004, pp 65-70.
- [4] Ermatchkov V., Kamps P. Maurer S., G., Chemical equilibrium constants for the formation of carbamates in (carbon dioxide-piperazine-water) from 1H-NMR-spectroscopy, *The Journal of Chemical Thermodynamics*, Vol. 35, 2002, pp 1277-1289.
- [5] Derks P. W. J., Dijkstra H. B. S., Hogendoorn J. A., Versteeg G. F., Solubility of Carbon Dioxide in Aqueous Piperazine Solutions, *American Institute of Chemical Engineers AIChE Journal*, Vol. 51, 2005, pp 2311-2327.
- [6] Kamps S., Xia J., Maurer G., Solubility of CO₂ in (H₂O-piperazine) and in (H₂O-MDEA-piperazine). *American Institute of Chemical Engineers AIChE Journal*, Vol. 49, 2003, pp 2662-2670.
- [7] Dasha S. K., Samantab A., Samantac A. N., Bandyopadhyay S. S., Vapour liquid equilibria of carbon dioxide in dilute and concentrated aqueous solutions of piperazine at low to high pressure, *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 300, 2011, pp 145-154.
- [8] Rochelle G. T., "CO₂ Capture by Aqueous Absorption" Summary of 3rd Quarterly Progress Reports, Department of Chemical Engineering, The University of Texas at Austin, 2008.
- [9] Kadiwala S., Rayer A. Henni V., A., High pressure solubility of carbon dioxide (CO₂) in aqueous piperazine solutions, *Fluid Phase Equilibria*, Vol. 292, 2010, pp 20-28.
- [10] McLees J. A., Jr B.S. Vapor-Liquid Equilibrium of Monoethanolamine /Piperazine/Water at 35 – 70 °C, Thesis of the Graduate School of The University of Texas at Austin, 2006.
- [11] Xu Q., Metzner M., Total P of CO₂ Loaded Aqueous Amines at High T", Thesis of the University of Texas at Austin (2009).
- [12] Hilliard M. D., A Predictive Thermodynamic Model for an Aqueous Blend of Potassium Carbonate, Piperazine, and Monoethanolamine for Carbon Dioxide Capture from Flue Gas, The University of Texas at Austin, 2008 .
- [13] Nguyen B. T., Thermodynamics of Piperazine, Quarterly Report for January by The University of Texas at Austin, 2008.
- [14] Plaza J. m., modeling absorption of CO₂ using amines, the university of Texas at Austin department of chemical engineering, 2009.
- [15] Xu Q., Thermodynamics of CO₂ Loaded Aqueous Amines, The University of Texas at Austin, Doctor of Philosophy, 2011.
- [16] Sencan A., Modeling of Thermodynamic Properties of Refrigerant/Absorbent Couples using Data Mining Process, *Energy Conversion and Management*, Vol. 48, 2007, pp 470-480.
- [17] Petersen R., Fredenslund A., Rasmussen P., Artificial Neural Network as Predictive Tool for Vapor Liquid Equilibrium", *Computer Chemical Engineering*, Vol. 18, 1994, pp 63-67.
- [18] Guimaraes P.R. B., McGreavy C., Flow of Information through an Artificial Neural Network", *Computer Chemical Engineering*, Vol. 19, 1995, pp 741-746.



- [19] SharamaR., SinghalD., GhoshR., DWivediA., potential applications of artificial of neural networks to thermodynamics: vapor-liquid equilibrium predictions”, Computer Chemical Engineering, Vol. 23, 1999, pp 385-390.
- [20] IliutaM. C., IliutaI., LarachiF., Vapour-liquid equilibrium data analysis for mixed solvent-electrolyte systems using neural network models”, Chemical Engineering Science, Vol. 55, 2000, pp2813-2825.
- [21] UrataSh., Takada A., Murata J., HiakiT., SekiyaA., Prediction of vapor-liquid equilibrium for binary systems containing HFEs by using artificial neural network”, Fluid Phase Equilibria, Vol. 199, 2002, pp63-78.
- [22] Dubdub I.J.M., Wai K.C., Application of Neural Network for Binary Distillation Using Different Back-Propagation Techniques, 2nd World Engineering Congress Kuching, Malaysia, 2002.
- [23] GangulyS., Prediction of VLE data using radial basis function network, Computers and Chemical Engineering, Vol. 27, 2003, pp 1445-1454.
- [24] MohantyS., Estimation of vapor liquid equilibria of binary system, carbon dioxide – ethylcaproate, ethyl caprylatend ethyl caprate using artificial neural network, Fluid Phase Equilibria, Vol. 235, 2005, pp 92-98.
- [25] Govindarajan L., Sabarathinam P.L., Prediction of vapor- liquid equilibrium data by using radial basis neural networks, Chemical and Biochemical Engineering Quarterly, Vol. 20, 2006, pp 319-323.
- [26] Nguyen V. D., Tan R. R., BrondialY., FuchinoT., Prediction of vapor-liquid equilibrium data for ternary systems using artificial neural networks, Fluid Phase Equilibria, Vol. 254, 2007 pp 188-197.
- [27] FaundezC. A., QuieroF. A., ValderramaJ.O., Phase equilibrium modeling in ethanol + congener mixtures using an artificial neural network, Fluid Phase Equilibria, Vol. 292, 2010, pp29-35.
- [28] Ghaemi A., Shahhosseini Sh., GhannadiMaraghehM., Prediction of vapor-liquid equilibrium for aqueous solutions of electrolytes using artificial neural networks, Journal of Applied Sciences, Vol. 8, 2008, pp615-621.
- [29] Lee M.J., Chen J.T., Vapor-liquid equilibrium for carbon dioxide/alcohol systems, Fluid Phase Equilibria, Vol. 92, 1994, pp215-231.
- [30] GhanadzadehH., AhmadifarH., Estimation of (vapor + liquid) equilibrium of binary systems (*tert*-butanol + 2-ethyl-1-hexanol) and (*n*-butanol + 2-ethyl-1-hexanol) using an artificial neural network”, The Journal of Chemical Thermodynamics, Vol. 40, 2008 pp1152-1156.
- [31] LashkarbolookiM., VaferiB., ShariatiA., HezaveA. Z., Investigating vapor-liquid equilibria of binary mixtures containing supercritical or near-critical carbon dioxide and a cyclic compound using cascade neural network”, Fluid Phase Equilibria, Vol. 343, 2013, pp24-29.
- [32] MohantyS., Estimation of vapour liquid equilibria for the system carbon dioxide–difluoromethane using artificial neural networks, International Journal of Refrigeration, Vol. 29, 2009, pp 243-249.
- [33] KarimiH., YousefiF., correlation of vapour liquid equilibria of binary mixtures using artificial neural networks, Chinese Journal of Chemical Engineering, Vol. 15, 2007, pp 765-771.
- [34] PiotrowskiK., PiotrowskiJ., Schlesinger J., Modelling of complex liquid-vapour equilibria in the urea synthesis process with the use of artificial neural network, Chemical Engineering and Processing, Vol. 42, 2003, pp 285-289.