

Predykcja absorpcji CO₂ w wodnym roztworze N-metylodietanolaminy z wykorzystaniem neuronowego modelu hybrydowego

Marcin Stec, Andrzej Wilk

Instytut Chemicznej Przeróbki Węgla, ul. Zamkowa 1, 41-803 Zabrze

e-mail: mstec@ichpw.zabrze.pl

Słowa kluczowe: MDEA, absorpcja CO₂, hybrydowa sieć neuronowa

Wyznaczanie równowagi układu amina-H₂O-CO₂ ma kluczowe znaczenie w projektowaniu i określaniu warunków pracy układów usuwania CO₂ metodą aminową.

Kent i Eisenberg [1] opracowali model wyznaczania równowagi, wykorzystując znane stałe równowagi oraz prawo Henry'ego, a stałą równowagi reakcji protonowania aminy wyznaczyli na podstawie danych eksperymentalnych. Podobne podejście zaproponował Haji-Sulaiman [2], dodatkowo modyfikując stałą równowagi protonowania aminy, uzależniając ją od stopnia karbonizacji roztworu i początkowego stężenia aminy, co było podyktowane wynikami eksperymentalnymi, wykazującymi takie zależności. Grupę modeli opartych na tej strukturze nazywamy rozszerzonymi modelami Kenta-Eisenberga. Wspólnym mianownikiem powyższych modeli jest zaniedbanie współczynników aktywności czy sił jonowych reagujących składników, a wszystkie niedoskonałości modelu są skupiane w stałej równowagi reakcji protonowania amin.

Hybrydowy model neuronowy jest modelem rozszerzonym Kenta-Eisenberga, w którym do regresji danych eksperymentalnych wykorzystano przepływową sieć neuronową. Hybrydowe modele neuronowe [3] łączą znane zależności (prawo Henry'ego, znane stałe równowagi), a do regresji nieznannej części modelu wykorzystują sieć neuronową (stała równowagi reakcji protonowania amin).

Przebiegowe sieci neuronowe są modelami nieparametrycznymi i doskonale nadają się do regresji nieliniowych zależności, a takie występują w omawianym przypadku. Do stworzenia sieci mogącej poprawnie ekstrapolować dane eksperymentalne, wymagane jest dobranie optymalnej struktury sieci i poprawne nauczanie jej w celu osiągnięcia najlepszej generalizacji [4]. W tym celu zastosowano następujące zabiegi: zagwarantowano wystarczająco duży zbiór danych do nauki poprzez interpolację posiadanych danych krzywymi sklejanymi, uzyskano poprawną generalizację przez zastosowanie oceny krzyżowej [4] i ograniczono wariancję błędu sieci przez zastosowanie zespołów sieci [5].

Zastosowana struktura modelu pozwoliła na uzyskanie znacznie lepszych wyników predykcji ciśnienia cząstkowego CO₂ niż w modelu Kenta-Eisenberga.

Literatura:

- [1] R. Kent, B. Eisenberg, *Hydrocarbon Process.*, 1976, 55, 87-90.
- [2] M.Z. Haji-Sulaiman, M.K. Aroua, A. Benamor, *Trans IChemE*, 1998, 76, 961-968.
- [3] D.C. Psychogios, L.H. Ungar, *AIChE J.*, 1992, 38, 1499-1511.
- [4] I.V. Tetko, D.J. Livingstone, A.I. Luik, *J. Chem. Inf. Comput. Sci.*, 1995, 35, 826-833
- [5] A. Krogh, J. Vedelsby, *Adv. Neural Inf. Process. Syst.*, 1995, 7, 231-238.

