

تخمین سرعت رشد کریستال های هیدرات گازی دی اکسیدکربن در حضور بازدارنده به کمک شبکه عصبی

جواد صیاد امین^{۱*}، الهیار داغبندان^۱، مرتضی محمدی^۲

^۱استادیار، دانشگاه گیلان، گروه مهندسی شیمی

^۲دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشگاه گیلان، گروه مهندسی شیمی

چکیده

در این مقاله سرعت تشکیل هیدرات گازی دی اکسیدکربن با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی مورد بررسی قرار گرفته است. این گاز به علت اهمیت آن در صنعت انتخاب شده است. مدل ارائه شده بر پایه یک شبکه عصبی با الگوریتم پیشرو^۱ و با ۲ لایه بنا نهاده شده است. ۲۲۷ داده آموزشی و ۵۰ داده آزمایشی برای محاسبات استفاده شد. در نهایت منحنی های تجربی و محاسباتی مقدار مصرف دی اکسیدکربن برای تشکیل هیدرات (به عنوان شاخص سرعت مصرف) بر حسب زمان با هم مقایسه شدند و دو نوع خطای میانگین مربعات خطا و میانگین قدر مطلق خطای نسبی برای سنجش میزان دقت و کارایی روش اندازه گیری و خطای بدست آمده با روش محاسباتی مقایسه شد.

کلمات کلیدی

شبکه عصبی، سرعت تشکیل هیدرات گازی، هیدرات دی اکسیدکربن، بازدارنده، PVP.

نکات برجسته پژوهش

- تحلیل سینتیک تشکیل هیدرات گازی با استفاده از الگوی شبکه عصبی.
- استفاده از متغیر مقدار بازدارنده در شبکه عصبی به عنوان پارامتر تاثیر گذار در تشکیل هیدرات گازی.
- عدم نیاز به معادلات پیچیده در عین داشتن خطای کمتر نسبت به روش های تحلیلی.

*sayyadamin@gmail.com

^۱Feed forward neural network

۱- مقدمه

هیدرات گازی ساختار کریستالی شبیه به یخ است که از مولکول های کوچک غیر قطبی یا با قطبیت کم (معمولاً گاز) تشکیل شده است. مولکول های آب با پیوند هیدروژنی تشکیل قفس هایی می دهند که توسط این مولکول های کوچک پر می شوند و ساختار پایداری تشکیل می دهند که می تواند در دمایی بالاتر از دمای ذوب یخ هم پایدار بماند. [۱] هیدرات گازی در صنایع نفت و گاز از نظر اقتصادی و مسائل ایمنی از اهمیت زیادی برخوردار می باشد. هیدرات گازی در صورت تشکیل در خطوط انتقال گاز، باعث انسداد خطوط انتقال می شود [۲] همچنین از فرآیند تشکیل هیدرات گازی می توان برای حذف گاز دی اکسید کربن از گازهای حاصل از احتراق در صنایع استفاده کرد. [۳]

مطالعه روی هیدرات های گازی از دو منظر ترمودینامیکی و سینتیکی انجام می پذیرد. مطالعه ترمودینامیکی شرایط دمایی و فشاری تشکیل هیدرات و مطالعه سینتیکی سرعت تشکیل و رشد کریستال های هیدرات گازی را بررسی می کنند. تا سال های گذشته به علت استفاده از بازدارنده های ترمودینامیکی در صنعت، توجه مهندسان روی مطالعه ترمودینامیکی هیدرات های گازی بوده است ولی امروزه با توجه به روند رو به رشد استفاده از بازدارنده های سینتیکی (که سرعت تشکیل هیدرات را تحت تأثیر قرار می دهند) بررسی سینتیک تشکیل هیدرات گازی رو به افزایش است. برای تعیین سرعت تشکیل و رشد کریستال های هیدرات، از معادلات مختلفی استفاده می شود که پیچیده و نیازمند محاسبات بسیاری می باشند. [۴] بازدارنده های سینتیکی رشد کریستال ها و به تله افتادن هیدروکربن ها در شبکه ی کریستالی یخ را به تأخیر می اندازند. اثر آن ها به این شکل است که روی مولکول های آب جذب سطحی می شوند و جلوی تشکیل پیوند شیمیایی مولکول های گازی با آب را می گیرند. معروف ترین بازدارنده های سینتیکی پلی وینیل پیرولیدین (PVP)، پلی وینیل کاپرولاکتوم (PVCAP)، پلی متیل وینیل لاکتامید (VIMA)، پلی وینیل والرولاکتام (PVVam)، پلی اکریلو پیرولیدین (PAPYD) و ترکیبی از این پلیمر ها می باشند. این بازدارنده ها هزینه عملیاتی کمتری نسبت به بازدارنده های ترمودینامیکی دارند و دوستدار محیط زیست بوده و سمی نمی باشند. [۵]

استفاده از شبکه های عصبی مصنوعی^۲ می تواند به عنوان راه جدیدی برای بررسی سینتیک تشکیل هیدرات گازی مطرح شود. این روش می تواند محققان را از استفاده از معادلات پیچیده و محاسبات فراوان بی نیاز کند. به علت نیاز کمتر به بررسی سینتیک تشکیل هیدرات، تاکنون از روش شبکه عصبی در این شاخه بندرت استفاده شده است ولی به علت کاربرد روزافزون بازدارنده های هیدرات و یا فرآیند های تشکیل هیدرات، نیاز به بررسی سرعت رشد هیدرات نیز افزایش یافته است و استفاده از شبکه های عصبی می تواند به عنوان روشی قابل قبول و بی نیاز از انجام محاسبات مطرح باشد. پیش از این، از شبکه های عصبی برای پیش بینی سرعت رشد کریستال های هیدرات گازی صرفاً بر اساس فشارهای مختلف استفاده شده است [۶] و اکنون در این مقاله، وابستگی سرعت رشد کریستال علاوه بر فشار، به غلظت بازدارنده هم بررسی می شود.

۲- شبکه عصبی مصنوعی

شبکه عصبی شامل شبکه ای از عناصر پردازش ساده (نورونها) است، که می تواند رفتار پیچیده کلی تعیین شده ای از ارتباط بین عناصر پردازش و پارامترهای عنصر را نمایش دهد. منبع اصلی و الهام بخش برای این تکنیک، از آزمایش سیستم مرکزی عصبی و نورونها، نشأت گرفته است، که یکی از قابل توجه ترین عناصر پردازش اطلاعات سیستم عصبی را تشکیل می دهد. در یک مدل شبکه عصبی، گره های ساده (نورون) برای تشکیل شبکه ای از گره ها، به هم متصل شده اند. در حالی که یک شبکه عصبی نباید به خودی خود سازگارپذیر باشد، استفاده عملی از آن بواسطه الگوریتمهایی امکان پذیر است، که جهت تغییر وزن ارتباطات در شبکه (به منظور تولید سیگنال مورد نظر) طراحی شده باشد.

²Artificial Neural Network (ANN)

خروجی هر نورون به صورت معادله (۱) می باشد:

$$(1)$$

که در آن، f تابع انتقال یا فعالیت، O_j خروجی نورون j ام، W_i وزن سیناپسی با توجه به سیناپس i ام از نورون j ام، x_i سینگنال ورودی i ام به نورون j ام و n تعداد سینگنال های ورودی به نورون j ام می باشد. [۷]

در معادله (۱) بایاس برای تولید داده های ورودی و ضریب وزنی آن داده ها می باشد. بیشترین توابع انتقال مورد استفاده، توابع لگاریتمی، حلقوی^۳، تانژانت هایپربولیک توابع حلقوی و توابع خطی می باشد. ورودی توابع انتقال مجموع تمام ورودی ها که در وزن خود ضرب شده اند به همراه بایاس نورون است. توابع انتقال همانند یک فیلتر عمل می کنند که به برخی از سینگنال ها اجازه عبور می دهد و برخی را متوقف می سازد. مدل های مختلفی از شبکه های عصبی نظیر ART، Feed forward network, radial basis function network و Auto associative network می باشد. [۸]

۳- داده های تجربی

در این مقاله داده های تجربی برای مقدار دی اکسیدکربن مصرف شده برای تشکیل هیدرات گازی از مرجع شماره (۴) استخراج شده اند و در جداول شماره (۱) و (۲) آورده شده اند. این داده ها حاصل انجام آزمایش تشکیل هیدرات در شرایط دما و فشار معین و ثابت است. آب خالص و یا مخلوط شده با دوز معین بازدارنده، درون راکتور از گاز دی اکسید کربن با خلوص ۹۹/۹۵ درصد اشباع شده و در دمای ثابت ۷ درجه سانتیگراد و دو فشار ثابت ۴ و ۷ مگاپاسکال قرار داده شد و تشکیل کریستال های هیدرات گازی در آن بررسی گردید. با رشد کریستال ها، گاز دی اکسید کربن به راکتور تزریق می شود و مقدار مصرف این گاز ثبت می شود. این داده ها مقدار مصرف دی اکسیدکربن برای تشکیل هیدرات گازی را بر حسب زمان و در دو فشار ۴ و ۷ مگاپاسکال و در حضور بازدارنده پلی وینیل پیرولیدین^۴ با غلظت های ۲۵۰۰، ۲۰۰، ۱۰۰ و ۵۰۰۰ ppm و همچنین بدون حضور بازدارنده نشان می دهند.

جدول ۱: مقدار دی اکسیدکربن مصرف شده برای تشکیل هیدرات در دمای ۲۸۰/۱۵ کلوین و فشار ۴MPa و در حضور بازدارنده PVP در غلظت های ۵۰۰۰، ۲۵۰۰، ۲۰۰، ۱۰۰، ۰ [۴]

time	No inhibitor	time	100 ppm	time	200 ppm	time	2500 ppm	time	5000 ppm
23.813	0.52459	61.908	0.52459	81.905	0	138.1	0.52459	149.53	0.52459
33.343	1.5738	70.504	4.7213	90.495	3.1475	147.64	3.6721	157.16	2.623
42.873	2.623	80.987	5.7705	99.073	4.1967	158.12	3.6721	167.63	2.623
52.4	3.1475	90.52	7.3443	110.5	4.7213	166.69	4.7213	177.16	3.6721
60.99	6.2951	99.107	9.9672	120.04	6.2951	177.17	5.2459	186.69	3.6721
70.529	8.918	109.6	13.115	128.62	7.3443	185.75	5.2459	196.22	4.7213
81.012	9.9672	120.1	16.787	138.15	9.9672	195.28	6.8197	205.75	5.7705
90.554	13.115	129.65	21.508	147.69	12.59	204.81	7.3443	215.28	6.2951
100.11	17.836	138.25	26.23	157.23	14.689	215.29	8.918	224.81	7.8689
109.66	23.082	148.76	32	165.82	17.311	224.82	10.492	235.29	8.918
119.23	30.951	158.33	39.869	176.32	20.984	234.35	11.016	244.82	9.4426
128.8	38.82	167.9	46.689	185.86	24.656	243.89	13.115	253.4	11.016
138.38	48.262	176.52	55.082	195.41	28.328	253.41	13.115	262.93	12.066
147.97	58.23	187.05	64.525	205.91	32.525	262.95	15.738	273.41	12.066
158.52	70.82	196.63	73.443	215.46	36.721	272.48	17.311	282.94	14.164
167.16	83.41	205.26	82.885	224.05	40.393	282.02	18.885	292.47	15.213

³ sigmoid

⁴ polyvinylpyrrolidone (PVP)

178.68	98.623	214.85	95.475	233.6	45.639	292.51	22.033	301.05	16.787
187.33	111.74	224.44	105.44	243.16	51.41	302.04	23.082	310.59	18.361
196.94	125.38	234.99	118.03	253.67	56.656	310.63	25.18	321.08	20.984
		245.55	132.2	263.22	60.852	321.11	26.754	330.6	21.508
		254.22	148.98	272.79	68.197	330.65	28.852	340.14	23.607
				282.35	73.967	339.24	32	349.68	26.23
				292.87	81.836	358.31	36.197	359.21	27.279
				301.48	88.656	368.81	39.344	369.7	29.902
				312.01	97.049	378.35	42.492	378.28	30.951
				321.57	104.39	387.88	44.59	387.82	33.049
				330.2	114.36	396.48	48.262	397.35	35.148
				339.78	123.28	407.93	51.934	406.89	37.77
				349.36	132.72	417.47	55.607	416.42	39.344
				358.96	144.79	426.06	58.23	426.91	40.393
						435.62	63.475	436.45	44.066
						446.11	67.148	445.04	46.164
						454.72	72.393	455.53	48.787
						464.27	77.115	466.03	52.459
						473.82	82.361	474.61	54.557
						484.35	90.23	484.15	57.18

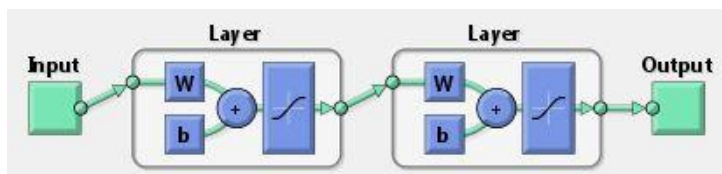
جدول ۲: مقدار دی اکسیدکربن مصرف شده برای تشکیل هیدرات در دمای ۲۸۰/۱۵ کلوین و فشار ۷MPa و در حضور بازدارنده PVP در غلظت های ۰، ۱۰۰، ۲۰۰، ۲۵۰۰، ۵۰۰۰ppm [۴].

time	No inhibitor	time	100 ppm	time	200 ppm	time	2500 ppm	time	5000 ppm
21.826	2.0833	68.727	0	68.727	0	50.186	1.0417	96.004	1.0417
31.644	2.0833	77.489	9.375	86.216	9.375	60.004	1.0417	105.82	1.0417
41.47	4.1667	87.326	14.583	97.136	12.5	68.746	5.2083	115.64	2.0833
50.193	3.125	96.064	17.708	104.78	13.542	77.481	7.2917	125.47	4.1667
60.019	5.2083	104.81	21.875	115.72	21.875	88.394	8.3333	134.2	4.1667
68.754	7.2917	114.65	29.167	125.56	28.125	96.034	9.375	144.02	6.25
78.591	12.5	124.51	39.583	134.31	35.417	104.76	9.375	151.66	6.25
87.345	19.792	134.37	53.125	143.07	44.792	114.58	10.417	161.48	8.3333
96.098	27.083	143.15	65.625	151.84	56.25	124.41	11.458	170.21	8.3333
105.94	33.333	151.94	82.292	161.7	67.708	134.24	16.667	180.04	11.458
114.7	43.75	160.72	98.958	170.48	82.292	142.98	19.792	188.77	12.5
124.57	57.292	170.61	118.75	180.37	101.04	152.82	25	197.51	14.583
133.38	78.125	180.52	143.75	189.16	117.71	160.47	29.167	208.42	16.667
143.27	97.917	189.34	169.79	199.03	133.33	170.31	36.458	217.16	17.708
152.07	118.75	198.16	193.75	207.85	158.33	180.16	42.708	225.89	20.833
161.98	143.75	208.11	230.21	216.64	176.04	188.91	50	234.63	22.917
170.81	172.92	218.04	261.46	226.55	202.08	198.75	57.292	244.45	25
180.75	206.25	226.89	294.79	236.47	228.12	207.52	66.667	253.19	27.083
189.6	239.58			245.3	258.33	216.28	76.042	263.02	30.208
198.46	277.08			254.15	290.62	226.13	85.417	271.76	33.333
						235.98	95.833	281.59	36.458
						244.75	106.25	291.42	40.625
						253.52	117.71	300.16	42.708
						262.3	131.25	308.9	47.917
						272.17	146.87	318.73	52.083
						280.94	159.37	327.47	55.208
						290.81	173.96	336.22	60.417
						300.69	190.62	346.05	64.583
						309.47	205.21	355.88	67.708
						319.36	223.96	365.72	71.875
						328.16	244.79	374.46	77.083
						338.04	261.46	384.3	82.292

						347.95	287.5	394.14	89.583
								401.8	94.792
								411.64	101.04
								419.29	105.21
								429.14	113.54
								438.98	118.75
								447.74	128.12
								457.57	132.29
								467.42	140.62
								475.08	146.87
								484.93	156.25

۴- استفاده از شبکه عصبی

برای انجام محاسبات سرعت رشد کریستال های هیدرات گازی از یک شبکه عصبی با دو لایه مطابق شکل (۱) استفاده شد. تابع انتقال به صورت tansig انتخاب شد.



شکل ۱: الگوی شبکه دو لایه ای استفاده شده

برای سنجش میزان دقت نتایج بدست آمده، از دو نوع تابع میانگین قدر مطلق خطای نسبی (TAAD%) و میانگین مربعات خطا (MSE) استفاده شده است که به صورت زیر معرفی می گردند.

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (r_{cal,i} - r_{exp,i})^2 \quad (2)$$

$$TAAD\% = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{|r_{cal,i} - r_{exp,i}|}{r_{exp,i}} \times 100 \quad (3)$$

که $r_{cal,i}$ مقدار مصرف دی اکسیدکربن محاسبه شده توسط شبکه عصبی و $r_{exp,i}$ مقدار مصرف بدست آمده از نتایج آزمایشگاهی می باشد.

جدول (۳) مشخصات شبکه عصبی استفاده شده و خطاهای بدست آمده را نشان می دهد.

جدول ۳: مشخصات شبکه عصبی استفاده شده و خطاهای بدست آمده

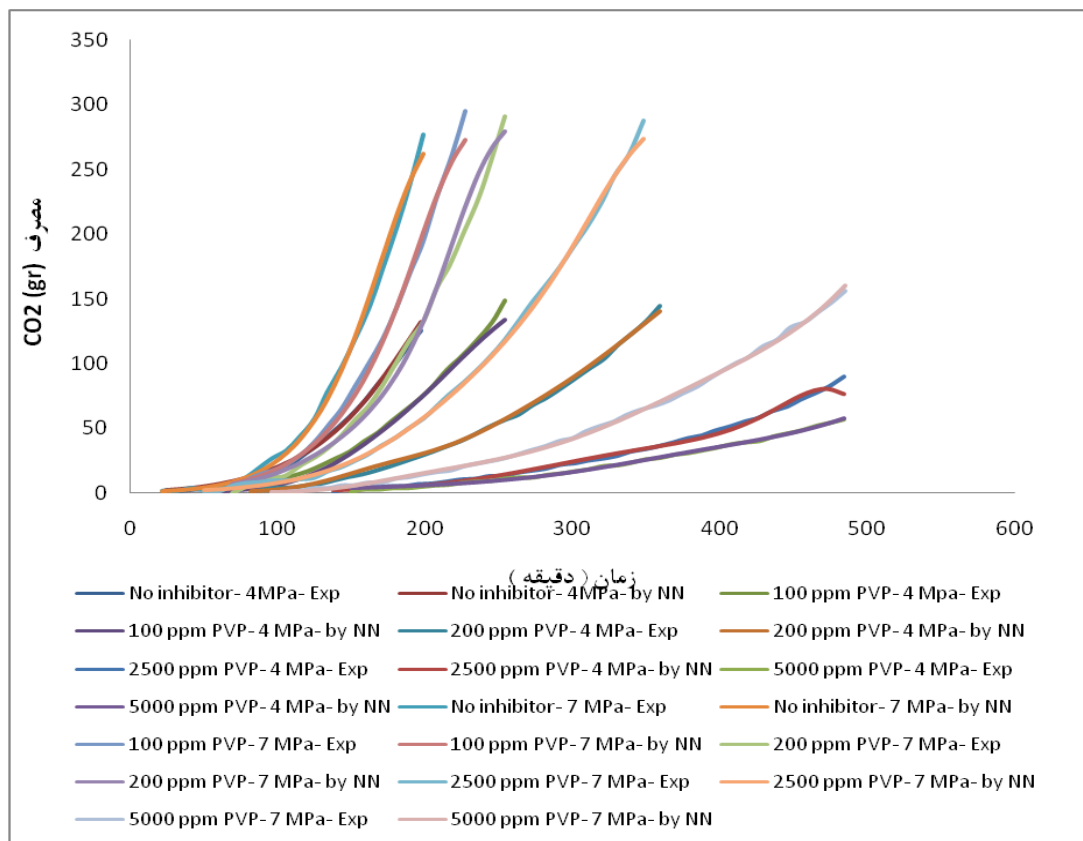
نام ماده	Epochs	MSE ¹	TAAD% ²
دی اکسیدکربن	۱۰۱	۱۲,۰۳	۶,۴۳

(1) MSE: mean squared error between the data and predicted/calculated values

(2) TAAD%: Total average absolute deviation

شکل (۲) مقدار مصرف دی اکسیدکربن برای تشکیل کریستال های هیدرات بر اساس داده های تجربی و محاسبه شده توسط شبکه عصبی برای ۵ غلظت مختلف بازدارنده، در فشارهای ۴ و ۷ مگاپاسکال و دمای ثابت ۲۸۰/۱۵ کلوین را نشان می

دهد. همانطور که در شکل دیده می شود، زمان شروع تشکیل کریستال های هیدرات متفاوت است. به فاصله زمانی قرار گرفتن گاز در شرایط تشکیل هیدرات تا شروع تشکیل هیدرات، زمان القا^۵ گفته می شود. مطابق شکل (۴) این زمان القا برای غلظت های مختلف بازدارنده، متفاوت است. برای غلظت های بالاتر بازدارنده، زمان القا بیشتر است. این به دلیل مکانیسم بازدارنده های سینتیکی می باشد که در مقدمه ذکر گردید.



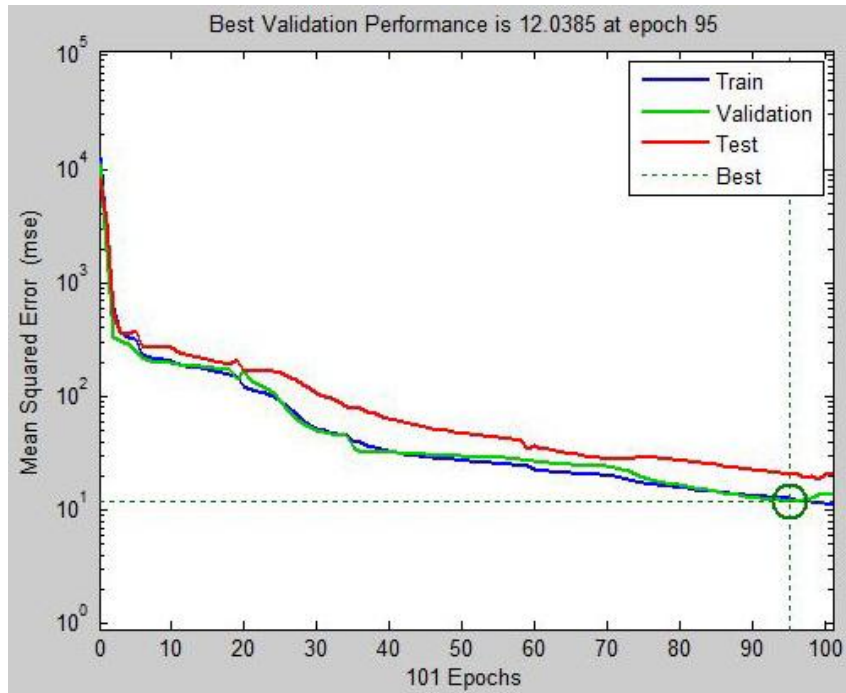
شکل ۴: مقدار مصرف دی اکسیدکربن در فشار و غلظت های مختلف بازدارنده بر اساس داده های تجربی و محاسباتی

۵- نتیجه گیری

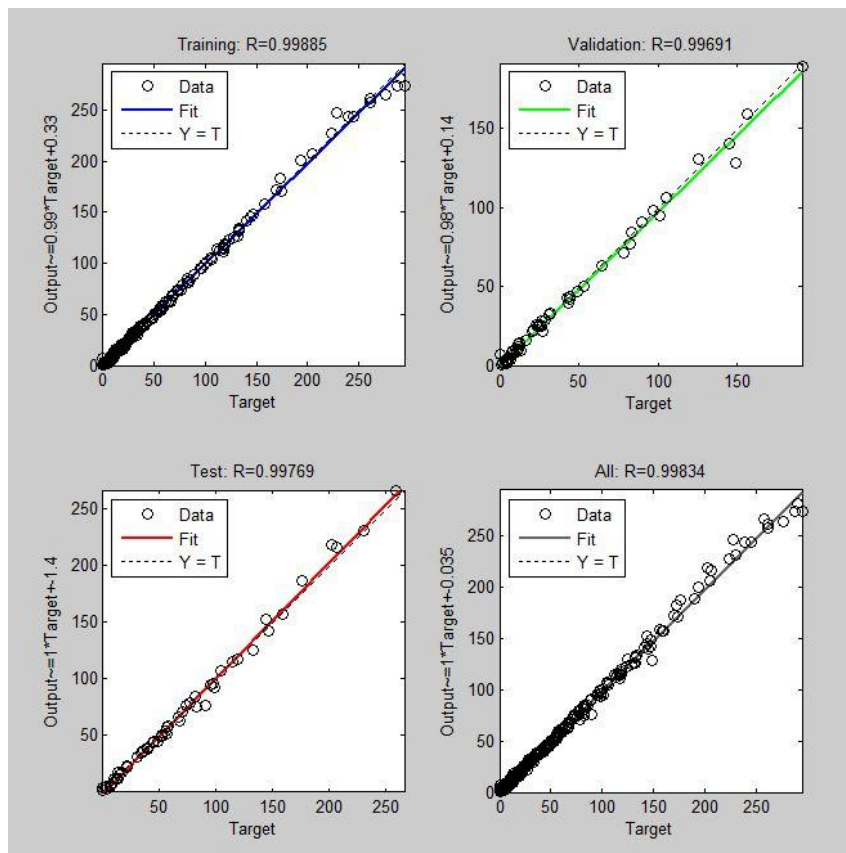
همانطور که در شکل (۳) نشان داده شده است، شبکه پس از ۹۵ دور محاسبات^۶ به بهترین آموزش رسیده است. نتایج قادر خواهد بود کلیه داده های آزمایشگاهی را پوشش دهد. همچنین پایین بودن خطاهای کل بدست آمده نشان دهنده دقت عمل این روش می باشد. مطابق مرجع شماره (۴)، میانگین قدر مطلق خطای نسبی (TAAD%)، برای پیش بینی مصرف دی اکسیدکربن در شرایط مطرح شده، ۱۵/۸ درصد می باشد، که این مقدار در شبکه عصبی طراحی شده ۶/۴۳ درصد می باشد. به منظور بررسی دقیق تر نتایج مدل، آنالیز رگرسیون میان خروجی های شبکه و اهداف مطلوب مورد ارزیابی قرار گرفت (شکل (۴)). ضریب همبستگی بدست آمده در پیش بینی چگالی ۰/۹۹۸۳ می باشد که نشان دهنده عملکرد موفقیت آمیز مدل شبکه عصبی می باشد. در مقایسه با مدل های پیچیده ریاضی، شبکه عصبی مصنوعی قادر به تخمین سرعت رشد کریستال هیدرات گازی اکسیدکربن با تقریب مناسب در مدت زمان کوتاهی می باشد.

⁵ Induction Time

⁶ epoch



شکل ۳: روند تغییرات میانگین مربعات خطای شبکه



شکل ۴: آنالیز رگرسیون میان نتایج پیش‌بینی شده بوسیله مدل شبکه عصبی و داده‌های تجربی

مراجع

- [1] Sloan, E.D., Clathrate Hydrates of Natural Gases, second ed., New York, Marcel Dekker, 1998.
- [2] Barker, J.W., Gomez, R.K., "Formation of Hydrates During Deepwater Drilling Operations", Journal of Petroleum Technology, Vol. 41, pp. 297–301, 1989.
- [3] Linga, Praveen, Kumar, Rajnish, Englezos, Peter, "The clathrate hydrate process for post and pre-combustion capture of carbon dioxide", Journal of Hazardous Materials, Vol. 149, pp. 625–629, 2007.
- [4] Talaghat, M.R., "Experimental and theoretical investigation of simple gas hydrate formation with or without presence of kinetic inhibitors in a flow mini-loop apparatus", Fluid Phase Equilibria, Vol. 279, pp. 28–40, 2009.
- [5] Frostman, L.M., Crosby, D.L., Low Dosage Hydrate inhibitor (LDHI) Experience in Deepwater, The Deep offshore Technology conference, Marseille, France, November (2003) 19-21
- [6] صیادامین، جواد، محمدی، مرتضی، "استفاده از شبکه عصبی برای محاسبه سرعت رشد کریستال های هیدرات گازی گازهای ساده"، چهاردهمین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران، دانشگاه صنعتی شریف، آبان ۱۳۹۱.
- [7] Eslamloueyan, R., Khademi, M.H., "Estimation of thermal conductivity of pure gases by using artificial neural networks", International Journal of Thermal Sciences, Vol. 48, pp. 1094–1101, 2009.
- [8] Boozarjomehri R., Abdolahi, F., Moosavian M.A., "Characterization of basic properties for pure substances and petroleum fractions by neural network", Fluid Phase Equilibria, Vol. 231, pp. 188–196, 2005.