Exploring the performance of machine learning models to predict carbon monoxide solubility in underground pure/saline water

By Ali H Alibak

Soran University (SUN)

Faculty of Engineering

لینکی توێژینەوە:

https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2024.106742

eng.soran.edu.iq

Abstract

released carbon monoxide (CO) into the atmosphere is a threat to human life and environmental safety. CO storage in surface and underground seawater/water may be viewed as a potential scenario to decrease the concentration of this dangerous gas in the atmosphere. A reliable tool to calculate CO solubility in aqueous media is a prerequisite for accomplishing such a process. Since the least-squares support vector regression (LSVR), CatBoost, extreme gradient boosting, light gradient boosting, random forest, and extra tree regression can extract even the most complex relationships among a series of independent-dependent variables, they are also potential candidates for modeling CO solubility in pure and saline water as a function of temperature and salt concentration. The present work performs relevancy tests, model construction, the best model selection, accuracy assessment, and trend monitoring using 232 literature records of CO solubility in aquatic solutions containing different salt concentrations. Relevancy analysis by the multiple linear regression as well as Pearson's method approve that CO solubility in water decreases by increasing the temperature and salinity. Moreover, trial and error justified that the LSVR with the Gaussian kernel function has the highest accuracy among the six checked models to estimate CO solubility in aqueous solutions. The acceptable agreement between literature and calculated CO solubility in aquatic solutions is also approved by comprehensive numerical and graphical investigations. According to the results, the LSVR predictions for the CO-water and CO-brine equilibrium behavior correspond well with the literature records (mean square error = 6.18×10^{-8}, summation of absolute error = 0.02581 cm3 CO/mL H_2O, correlation coefficient = 0.99844, and mean absolute percentage error = 0.48 %).

پوختە

یەکەم ئۆکسیدی کاربۆن (CO) کە دەردەچێت بۆ ناو بەرگەهەوا، مەترسییە بۆ سەر ژیانی مرۆڤ و سەلامەتی ژینگە. هەڵگرتنی لە ئاو/ئاوی سەرزەوی و ژێر زەویدا ڕەنگە وەک سیناریۆیەکی ئەگەری سەیر بکرێت بۆ کەمکردنەوەی چڕیی ئەم گازە مەترسیدارە لە بەرگەهەواوە. ئامرازێکی جێی متمانە بۆ حیسابی تواوەیی CO لە میدیای ئاوییدا مەرجێکی پێشوەختەیە بۆ بەدیهێنانی پرۆسەیەکی لەو جۆرە. بەو پێیەی کەمترین چوارگۆشە پشتگیری پاشەکشەی قۆچکەری (LSVR)، CatBoost، بەرزکردنەوەی گرادێنت توند، بەرزکردنەوەی گرادێنت ڕووناکی، دارستانی هەڕمەکی، و پاشەکشەی دارە زیادەکان دەتوانن تەنانەت ئاڵۆزترین پەیوەندییەکان لە نێوان زنجیرەیەک گۆڕاوە وابەستە سەربەخۆکان دەربهێنن، هەروەها ئەوان کاندیدی پۆتانسێڵن بۆ مۆدێلکردنی تواوەیی CO لە ئاوی پاک و خوێدا وەک کارکردی پلەی گەرمی و چڕیی خوێ. کارەکانی ئێستا تاقیکردنەوەکانی پەیوەندی، دروستکردنی مۆدێل، باشترین هەڵبژاردنی مۆدێل، هەڵسەنگاندنی وردبینی، و چاودێریکردنی ڕەوت ئەنجام دەدات بە بەکارهێنانی 232 تۆماری ئەدەبیاتی تواوەیی CO

لە گیراوە ئاوییەکان کە چڕیی خۆیی جیاوازیان تێدایە. شیکاری پەیوەندیدار بە پاشەکشەی هێڵی فرەیی و هەروەها شێوازی پیرسۆن پەسەندی دەکەن کە تواوەیی CO لە ئاودا کەم دەبێتەوە بە زیادکردنی پلەی گەرمی و شووتی. سەرەڕای ئەوە، تاقیکردنەوە و هەڵە پاساویان دا کە LSVR بە ئەرکی ناوکی گاوسی بەرزترین وردبینی لە نێوان شەش مۆدێلی پشکنینکراودا هەیە بۆ خەملاندنی تواوەیی CO لە گیراوە ئاوییەکان. هەروەها ڕێککەوتنی قبوڵکراو لە نێوان ئەدەبیات و تواوەیی COی حیسابکراو لە گیراوە ئاوییەکاندا بە لێکۆڵینەوە ژمارەیی و گرافیکی گشتگیر پەسەند کراوە. بەپێی ئەنجامەکان، پێشبینییەکان LSVR بۆ هەڵسوکەوتی هاوسەنگی CO-ئاو و CO-شۆوڕ بە باشی لەگەڵ تومارەکانی ئەدەبیاتدا دەگونجێت

الملخص

يشكل أول أكسيد الكربون المنبعث في الغلاف الجوي تهديدًا لحياة الإنسان والسلامة البيئية. ويمكن النظر إلى تخزين ثاني أكسيد الكربون في مياه/مياه البحر السطحية والجوفية على أنه سيناريو محتمل لتقليل تركيز هذا الغاز الخطير في الغلاف الجوي. تعد الأداة الموثوقة لحساب قابلية ذوبان ثاني أكسيد الكربون في الوسائط المائية شرطًا أساسيًا لإنجاز مثل هذه العملية. نظرًا لأن المربعات الصغرى تدعم انحدار المتجهات (LSVR)، وCatBoost، وتعزيز التدرج الشديد، وتعزيز التدرج الخفيف، والغابة العشوائية، والانحدار الشجري الإضافي، يمكنها استخلاص حتى العلاقات الأكثر تعقيدًا بين سلسلة من المتغيرات المستقلة، فهي أيضًا مرشحة محتملة لنمذجة قابلية ذوبان ثاني أكسيد الكربون في الماء النقي والمالح كدالة لدرجة الحرارة وتركيز الملح. يُجري العمل الحالي اختبارات الملاءمة، وبناء النموذج، واختيار أفضل نموذج، وتقييم الدقة، ومراقبة الاتجاه باستخدام 232 سجلًا من الأدبيات الخاصة بقابلية ذوبان ثاني أكسيد الكربون في المحاليل المائية التي تحتوي على تركيزات ملح مختلفة. يؤكد تحليل الملاءمة من خلال الانحدار الخطي المتعدد وكذلك طريقة بيرسون على أن قابلية ذوبان ثاني أكسيد الكربون في الماء تتناقص عن طريق زيادة درجة الحرارة والملوحة. علاوة على ذلك، بررت التجربة والخطأ أن LSVR مع وظيفة Gaussian kernel يتمتع بأعلى دقة بين النماذج الستة التي تم فحصها لتقدير قابلية ذوبان ثاني أكسيد الكربون في المحاليل المائية. تمت الموافقة أيضًا على الاتفاق المقبول بين الأدبيات وذوبان ثاني أكسيد الكربون المحسوب في المحاليل المائية من خلال التحقيقات العددية والرسومية الشاملة. وفقًا للنتائج، فإن تنبؤات LSVR لسلوك توازن ثاني أكسيد الكربون في الماء والمحلول الملحي تتوافق جيدًا مع سجلات الأدبيات (متوسط الخطأ المربع = 6.18 × 10−8، مجموع الخطأ المطلق = 0.02581 سم 3 CO / مل H2O، معامل الارتباط =0.99844، ومتوسط نسبة الخطأ المطلقة=0.48%).

About Soran University

Soran University (SUN) is located in the city of Soran, which is about a two-hour drive north-east of Erbil (Arbil, Hewlér), the capital of the Kurdistan Region of Iraq (KRIQ). The city is flanked by the famous Korek, Zozik, Henderén, and Biradost mountains. The medieval mountain village of Rewandiz (Rawanduz, ڕەواندز) is a stone-cast away, and the two cities share this lovely, harmonious upland. While waiting for its green, environmentally friendly building to be erected on a hilltop overlooking the cities of Soran and Rewandiz, its existing city campus has been meticulously set out to accommodate the lovely natural landscape. The new campus will be the first of its type, being walkable, balanced, powered by renewable energy, and compliant with all international environmental regulations. There are 5 Faculties in SUN; Faculty of Arts (FAAR), Faculty of Science (FSCN), Faculty of Education (FEDU), Faculty of Law, Political Science, and Management (FLAW/PSM), and Faculty of Engineering (FENG). Also, there is SUN research centre. Moreover, at SUN, there is a Language Center. SUN signed many Memoranda of Understandings (MoU) with many International Universities,

How to get here

Soran University (SUN) is located in the heart of the city of Soran. The main city campus is easily found on Google Maps for direction.