

شبیه‌سازی استخراج فنل از فاضلاب با حلال تری بوتیل فسفات با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی

محسن کشاورز ترک^۱، احد قائمی^{۲*}، منصور شیروانی^۳

^۱ دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، نارمک، تهران، ایران

^۲ استادیار، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، نارمک، تهران، ایران

^۳ دانشیار، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران، نارمک، تهران، ایران

دریافت: ۹۳/۱۱/۱۶ پذیرش: ۹۴/۸/۱۱

چکیده

در مطالعه حاضر از شبکه عصبی مصنوعی برای پیش بینی راندمان استخراج فنل با استفاده از حلال تری بوتیل فسفات استفاده شده است. متغیرهای ورودی شبکه شامل نسبت حجمی آلی به آبی، سرعت روتور، دما، اسیدیته و زمان می‌باشد و متغیر خروجی شبکه بازده استخراج فنل انتخاب گردید. برای آموزش و ارزیابی شبکه عصبی از ۱۸۴ داده تجربی استفاده شده است. برای به دست آوردن ساختار بهینه شبکه مورد نظر از شبکه با تعداد لایه‌ها و نرون‌های مختلف استفاده گردید و شبکه بهینه با یک لایه و تعداد ۱۰ نرون به دست آمد. به منظور ارزیابی عملکرد شبکه بهینه از میانگین ریشه دوم خطا و ضریب همبستگی که به ترتیب برابر ۱/۰۳۹ و ۰/۹۹ به دست آمد، استفاده گردید. شرایط بهینه فرآیند، نسبت آلی به آبی ۰/۲۲، سرعت روتور ۳۵۰ دور در دقیقه، دما ۲۲/۷۶ درجه سانتی‌گراد، اسیدیته ۷/۵ و زمان ۱۵/۸۶ دقیقه با بازده استخراج متناظر ۹۶/۲۳ به دست آمد.

کلمات کلیدی: بازده استخراج، مدل‌سازی حذف فنل، شبکه عصبی پرسپترون.

مقدمه

امروزه حضور فنل و مشتقات آن در آب و فاضلاب به دلیل خطراتی که روی سلامت انسان و محیط دارد، به عنوان یک نگرانی عمده محسوب می‌شود [۱]. فنل یکی از ترکیبات آلی موجود در فاضلاب‌های صنعتی بوده که دارای وزن مولکولی ۹۴/۱۱ گرم بر مول می‌باشد. فنل هیدروکربن حلقوی است که در حالت خالص بی‌رنگ یا جامد سفید رنگ می‌باشد [۲]. این آلاینده آلی در غلظت‌های مختلف از طریق فاضلاب‌های صنایع پتروشیمی، تولید رزین و پلاستیک، کاغذ، پالایشگاه نفت، صنعت فولاد و آفت‌کش وارد محیط می‌گردد [۳]. فنل سمی است و خاصیت سرطان‌زایی دارد، بنابراین کاهش و حذف بیولوژیکی آن مشکل می‌باشد؛ لذا استانداردهای سخت‌گیرانه‌ای برای تخلیه مواد فنل‌دار به محیط زیست در نظر گرفته شده است [۵]. میزان

* aghaemi@iust.ac.ir

فنل در آب آشامیدنی از سوی آژانس حفاظت محیط زیست آمریکا کم‌تر از ۰/۵ میلی‌گرم بر لیتر تعیین شده است [۳]. همچنین حداکثر غلظت مجاز فنل برای تخلیه به آب‌های سطحی، مصارف کشاورزی و آبیاری طبق استاندارد سازمان حفاظت محیط زیست ایران، ۱ میلی‌گرم بر لیتر می‌باشد [۶].

یکی از پیامدهای وجود ترکیبات فنلی در منابع آب آشامیدنی که با ترکیبات کلردار گندزدایی شده‌اند، ایجاد ترکیبات کلروفنل می‌باشد که موجب طعم و بوی نامطبوع در آب می‌شود. از این رو به منظور جلوگیری از مخاطرات بهداشتی و زیست محیطی، تصفیه فاضلاب‌های حاوی فنل قبل از تخلیه به محیط زیست ضروری می‌باشد [۷، ۵]. روش‌های مختلفی برای حذف فنل ارائه شده که شامل روش‌های شیمیایی، فیزیکی و بیولوژیکی نظیر جذب سطحی، استخراج، اولترافیلتراسیون، اسمز معکوس، الکترودیالیز، تبادل یونی، اکسیداسیون شیمیایی و بیولوژیکی، روش‌های الکتروشیمیایی می‌باشند [۳، ۵]. اغلب این روش‌ها دارای معایبی نظیر هزینه بالای تصفیه، قابلیت کاربرد برای غلظت‌های محدودی از آلاینده‌ها، تشکیل فرآورده‌های جانبی خطرناک، نیاز به تصفیه اضافی و راندمان پایین می‌باشند [۸]. در این میان فرآیند جذب سطحی با کربن فعال به دلیل قابلیت جذب بالای آن و همچنین فرآیند استخراج، بیش‌تر مورد توجه قرار گرفته‌اند. ولی فرآیند جذب سطحی به علت قیمت بالای کربن فعال و مشکلات مربوط به احیاء مجدد آن، در کشورهای در حال توسعه و کم‌درآمد کاربرد محدودی دارد [۹]. همچنین فرآیند جذب سطحی برای حذف فنل در فاضلاب با غلظت بالای فنل کارایی ندارد. معمولاً برای حذف فنل در غلظت‌های بالاتر از ۳۰۰۰ میلی‌گرم در لیتر در فاضلاب از فرآیند استخراج مایع-مایع استفاده می‌شود [۳]. به دلیل تأثیرپذیری بازده استخراج از مشخصه‌های متعدد که دارای رفتار پیچیده و غیرخطی هستند، مدل‌های کلاسیک نظیر رگرسیون خطی و غیرخطی در پیش‌بینی بازده عملکرد مناسبی ندارند. در مدل‌های آماری مانند رگرسیون خطی و غیرخطی، اهمیت نسبی پارامترها به کمک ضرایب و توان‌های مدل بیان می‌شود. دقت پیش‌بینی این مدل‌ها به مقدار زیادی به رابطه ریاضی ارائه شده بستگی دارد. مدل رگرسیون خطی به دلیل سادگی روش، بیش‌تر مورد استفاده قرار می‌گیرد، ولی در مدل‌سازی سیستم‌های پیچیده ناتوان است. رگرسیون غیرخطی توانایی بالایی در مدل‌سازی سیستم‌های پیچیده دارد، اما به دست آوردن ضرایب این مدل پیچیده می‌باشد. اطلاعات فیزیکی و شیمیایی اجازه پیش‌بینی اثرات و تعاملات غیرخطی ناشی از تکامل غلظت فنل را به عنوان تابعی از زمان و دیگر پارامترها نمی‌دهند. در واقع فرآیند تصفیه فاضلاب بسیار پیچیده بوده و مدل‌های حاصل غیرخطی می‌باشند. همچنین دستیابی به پارامترهای نفوذی، ساختاری و ضرائب مدل با ابهامات زیادی همراه است. علاوه بر این بسیاری از مواردی که برای تصفیه فاضلاب به کار می‌روند، تجهیزات اندازه‌گیری و کنترل ندارند و طراحی روش‌های هوشمند برای عملیات تصفیه به منظور بهبود کارایی، ضروری به نظر می‌رسد. یکی از این روش‌های هوشمند شبکه عصبی مصنوعی^۱ می‌باشد [۱۰]. پژوهشگران متعددی از شبکه عصبی مصنوعی برای مدل‌سازی فرآیندهای شیمیایی استفاده نموده‌اند. اما در مورد حذف فنل از فاضلاب بیش‌تر روی یافتن روش‌ها و جاذب‌های جدید با کارایی بهتر و هزینه کم‌تر تمرکز شده و کارهای اندکی در زمینه مدل‌سازی و شبیه‌سازی انجام شده است. در این میان، مویبی و همکاران از شبکه

¹Artificial Neural Network (AAN)

عصبی مصنوعی برای پیش‌بینی ظرفیت بهینه جذب سطحی به منظور حذف فنل از فاضلاب استفاده نمودند. نتایج آن‌ها نشان داد که بهترین مدل برای پیش‌بینی ظرفیت جذب دارای ۲ لایه پنهان و ۱۰ نرون در هر لایه می‌باشد، که نسبت به مدل‌های غیر خطی دیگر کارایی بهتری از خود نشان می‌دهد [۱۱].

با توجه به تحقیقات پیشین، در این مطالعه از حلال تری‌بوتیل فسفات^۱ استفاده شده است و تأثیر پارامترهای مختلف از جمله حجم آلی به آبی، سرعت چرخش روتور، دما، اسیدیته و زمان چرخش روی بازده استخراج فنل، به کمک شبکه عصبی مصنوعی بررسی شده است. به این منظور از ۱۸۴ مجموعه داده تجربی استفاده شد، که ورودی‌های شبکه عصبی را تشکیل دادند. ۷۰٪ از مجموعه داده‌ها برای آموزش شبکه، ۱۵٪ داده‌ها برای اعتبارسنجی و ۱۵٪ برای تست شبکه مورد استفاده قرار گرفت. در واقع ورودی‌های شبکه عصبی شامل حجم آلی به آبی، سرعت چرخش روتور، دما، pH و زمان چرخش و خروجی شبکه بازده استخراج می‌باشد. با توجه به این که فرآیند استخراج در غلظت‌های بالای فنل در فاضلاب عملکرد بهتری از خود نشان داده است و همچنین پیش‌بینی شرایط بهینه فرآیند استخراج فنل برای کاهش هزینه‌های عملیاتی و آزمایشگاهی احساس می‌شود. هدف اصلی این مطالعه ارائه مدلی بر پایه شبکه عصبی پرسپترون چند لایه^۲ برای پیش‌بینی شرایط بهینه فرآیند استخراج فنل از فاضلاب و ارائه اثر هر یک از پارامترهای عملیاتی بر کارایی استخراج می‌باشد.

ارائه مدل شبکه عصبی

شبکه‌های عصبی جزء دسته‌ای از سیستم‌های دینامیکی مدل آزاد هوشمند قرار دارند، که با پردازش روی داده‌های تجربی، دانش یا قانون نهفته در ورای داده‌ها را به ساختار شبکه منتقل می‌کنند و به همین دلیل به این سیستم‌ها هوشمند می‌گویند [۱۲]. در واقع شبکه عصبی یکی از ابزارهای محاسباتی است که در هوش محاسباتی جای می‌گیرد. منشاء این ابزارها مبانی بیولوژیک است که توسط دانشمندان به صورت توصیف ریاضی در آمده است و سپس این توصیف‌های ریاضی تبدیل به بلوک‌های محاسباتی شده‌اند. دیدگاه جدید شبکه‌های عصبی در دهه ۴۰ قرن بیستم میلادی آغاز شد، زمانی که وارن مک کلوت^۳ و والتر پیتز^۴ نشان دادند که شبکه‌های عصبی می‌توانند هر تابع حسابی و منطقی را محاسبه نمایند. کار این افراد را می‌توان نقطه شروع حوزه عملی شبکه‌های عصبی دانست. نخستین کاربرد عملی شبکه‌های عصبی در اواخر دهه ۵۰ قرن بیستم میلادی مطرح شد، زمانی که روزنبلات^۵ در سال ۱۹۵۸ میلادی شبکه پرسپترون را معرفی نمود. او و همکارانش شبکه‌ای ساختند که قادر بود الگوها را از هم شناسایی کند. پیشرفت شبکه‌های عصبی تا اوایل دهه ۸۰ به علت عدم بروز ایده‌های جدید و فقدان کامپیوترهای سریع جهت پیاده‌سازی الگوریتم‌ها، کم رنگ می‌نمود. لکن در خلال دهه ۸۰، رشد تکنولوژی ریز پردازنده‌ها روند صعودی داشت و

¹Tri Butyl Phosphate (TBP)

²Multi-Layer Perceptron

³Warren McCulloch

⁴Walter Pitts

⁵Frank Rosenblatt

تحقیقات روی شبکه‌های عصبی فزونی یافت و ایده‌های بسیار جدیدی مطرح شدند [۱۳]. یکی از این ایده‌ها - های کلیدی الگوریتم پس انتشار خطا^۱ می‌باشد که توسط دیوید رامهارت و جیمز مک‌لند در سال ۱۹۸۶ میلادی مطرح گردید. این الگوریتم یک روش معمول آموزش شبکه عصبی برای به حداقل رساندن تابع هزینه می‌باشد. پس انتشار خطا یک روش یادگیری نظارت شده می‌باشد که نیازمند مجموعه داده (پایگاه داده) از خروجی مطلوب برای ورودی‌ها می‌باشد [۱۳].

شبکه‌های عصبی انواع مختلفی دارند. یکی از مشهورترین این شبکه‌ها برای ایجاد نگاشت‌های غیرخطی، شبکه‌های عصبی پرسپترون چند لایه (MLP) هستند. در هر لایه یک یا چند نرون وجود دارد، به طوری که عملکرد این نرون‌ها شبیه عملکرد نرون‌های مغز انسان می‌باشد. در یک ساختار شبکه عصبی، مجموعه‌ای از نرون‌ها دخالت دارند که هر نرون با همه نرون‌های لایه بعدی مرتبط است [۱۴]. تعداد نرون‌های لایه ورودی برابر تعداد متغیرهای مستقل سیستم مورد نظر می‌باشد. هر یک از نرون‌های لایه ورودی در وزنی ضرب می‌شوند. مقدار این وزن همانند تقاطع‌های سیناپتیک در نرون‌های زیستی، تعیین کننده تأثیر هر متغیر بر میزان عملکرد لایه ورودی است. هر نرون از دو بخش تشکیل شده است، در بخش نخست، مجموع وزنی مقادیر ورودی محاسبه می‌شوند و در بخش دوم خروجی بخش نخست در یک تابع ریاضی ضرب می‌شود و خروجی نرون را محاسبه می‌نماید. این تابع ریاضی، تابع محرک یا فعالیت نامیده می‌شود و دارای انواع مختلفی نظیر توابع تانژانت هیپربولیک، سیگموئید، خطی و گوسی می‌باشد. همه این توابع پیوسته و مشتق- پذیر هستند [۱۲، ۱۳].

در این تحقیق از ۱۸۴ داده تجربی بر گرفته از مرجع [۱۵] برای آموزش و تست شبکه عصبی استفاده شده است. با بررسی فرآیند پارامترهای تأثیرگذار روی راندمان استخراج شامل سرعت چرخش روتور، نسبت فاز پراکنده به پیوسته و زمان تماس بین فازها و تعداد مراحل می‌باشند. بنابراین ورودی‌های مورد نظر برای شبکه شامل نسبت حجمی آلی به آبی، سرعت روتور، دما، pH و زمان انتخاب شدند و هدف بررسی تأثیر هر یک از ورودی‌ها روی بازده استخراج می‌باشد که به عنوان خروجی در نظر گرفته شده است. در جدول ۱ محدوده تغییرات داده‌های تجربی آمده است.

جدول ۱. محدوده مربوط به متغیرهای ورودی

نام متغیر ورودی	محدوده
نسبت حجمی آلی - آبی	۰/۵ - ۰/۱
سرعت چرخش (rpm)	۵۰۰ - ۲۰۰
دما (سانتی‌گراد)	۳۰ - ۲۰
اسیدیته (pH)	۱۱/۲۵ - ۱/۹۸
زمان چرخش (دقیقه)	۲۰ - ۵

^۱ Error Back Propagation

برای به دست آوردن بازده استخراج ابتدا نسبت غلظت فنل در استخراج به دست می‌آید و سپس با استفاده از فرمول (۲) بازده استخراج محاسبه می‌شود.

$$S_e = \frac{\text{غلظت فنل در زمان } t \text{ در محلول آبی}}{\text{غلظت اولیه فنل در محلول آبی}} \quad (1)$$

$$E_{eff} = 100(1 - S_e) \quad (2)$$

پارامترهای مختلف مقادیر متفاوتی دارند که بر روند اجرای برنامه تأثیر منفی می‌گذارد، یکی از این موارد افتادن در نقاط حداقل محلی است. رای جلوگیری از افتادن در نقاط حداقل محلی می‌توان فضای مورد بررسی را کاهش داد تا احتمال گیر کردن در این نقاط کاهش یابد. بدین منظور مقادیر همه پارامترها (ورودی و خروجی) بین بازه ۱ و ۱- نرمال‌سازی شده است. در رابطه (۳)، معادله استفاده شده جهت نرمال‌سازی آورده شده است.

$$X_{Norm} = 2 \left(\frac{X - X_{min}}{X_{Max} - X_{Min}} \right) - 1 \quad (3)$$

در فرمول بالا X_{Norm} داده نرمال شده، X داده مورد نظر، X_{max} حداکثر داده موجود در مجموعه داده‌ها و X_{min} حداقل داده موجود در مجموعه داده‌ها می‌باشد. از این فرمول برای نرمال‌سازی داده‌های ورودی و خروجی استفاده شده است.

روش‌های ارزیابی و توقف شبکه عصبی

منظور از آموزش شبکه عصبی تعیین مقادیر وزن‌های مربوط به نرون‌ها می‌باشد. به طور کلی آموزش شبکه‌های عصبی به دو طریق صورت می‌گیرد، آموزش تحت نظارت^۱ که در آن خروجی مشخصی به هر ورودی اختصاص داده می‌شود و آموزش بدون نظارت^۲ که خروجی از قبل تعیین شده‌ای ندارد. در این مطالعه از روش آموزش تحت نظارت استفاده شده است.

به منظور ارزیابی اعتبار شبکه‌های پی‌ریزی شده در برآورد بازده استخراج، از تحلیل خطاهای باقیمانده و اختلاف بین مقادیر اندازه‌گیری شده و پیش‌بینی شده استفاده می‌شود. توابع استفاده شده میانگین ریشه دوم خطا^۳ (RMSE)، میانگین مربعات خطا (MSE)، ضریب همبستگی^۴ (R) و توان دوم ضریب همبستگی (R²) می‌باشند. تعریف ریاضی این توابع به صورت رابطه (۴) تا (۷) است [۱۶، ۱۷]:

$$R - value = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N \left(\frac{Y_i^{Exp.} - \overline{Y^{Exp.}}}{S_t^{Exp.}} \right) \left(\frac{Y_i^{ANN} - \overline{Y^{ANN}}}{S_t^{ANN}} \right) \quad (4)$$

¹Supervised Learning

²Unsupervised Learning

³Root Mean Square Deviation

⁴Correlation Coefficient

$$R^2 = \frac{\sum_{i=1}^N (Y_i^{Exp.} - \bar{Y})^2 - \sum_{i=1}^N (Y_i^{Exp.} - Y_i^{ANN})^2}{\sum_{i=1}^N (Y_i^{Exp.} - \bar{Y})^2} \quad (5)$$

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^N (Y_i^{Exp.} - Y_i^{ANN})^2}{N} \quad (6)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^N (Y_i^{Exp.} - Y_i^{ANN})^2}{N}} \quad (7)$$

که در آن $\bar{Y}^{Exp.}$ میانگین مقادیر آزمایشگاهی و St نمایانگر انحراف معیار، $Y_i^{Exp.}$ خروجی مطلوب، خروجی شبکه عصبی و N تعداد نمونه‌ها می‌باشد. در این تحقیق از R^2 و RMSE برای ارزیابی شبکه طراحی شده استفاده می‌شود.

الگوریتم محاسبات و تعیین شبکه بهینه

برای آموزش شبکه‌های عصبی از الگوریتم‌های یادگیری متفاوتی مانند الگوریتم پس انتشار گرادیان توأم مزدوج، الگوریتم کاهش گرادیان، الگوریتم تنظیم بیزین و الگوریتم لونبرگ مارکوآرت استفاده می‌شود. انتخاب هر الگوریتم در سرعت یادگیری و دقت شبکه مؤثر است [۱۸]. در این میان، شبکه‌ای با یک لایه پنهان و ۱۰ نرون در لایه پنهان در نظر گرفته شد، تا بدین وسیله تأثیر الگوریتم‌های مختلف بررسی شود. در جدول ۲ نتیجه الگوریتم‌های مختلف آموزش، آمده است.

جدول ۲. نتایج شبیه سازی حاصل از الگوریتم‌های پس انتشار خطا

R^2	میانگین مربعات خطا		تعداد تکرار	الگوریتم یادگیری
	MSE	RMSE		
۰/۹۹	۱/۰۸۰۳	۱/۰۳۹۳	۲۸	لونبرگ مارکوآرت
۰/۹۴	۱۵/۰۶۴۱	۳/۸۸۱۳	۴۴	روش شبیه سازی نیوتنی BFGS
۰/۹۵	۵/۱۵۰۲	۲/۵۸۴۵	۵۸	گرادیان توأم مزدوج
۰/۸۷	۳/۶۸۵۸	۲/۵۸۷۰	۲۰	الگوریتم تنظیم بیزین
۰/۹۴	۱۵/۶۹۸۵	۶/۵۷۸۰	۲۰	کاهش گرادیان
۰/۸۷	۱۸/۱۱۵۱	۵/۵۸۹۷	۳۰	کاهش گرادیان با مومنتم

معمولاً برای برازش‌های غیرخطی از الگوریتم لونبرگ مارکوآرت استفاده می‌شود [۱۸]. با توجه به جدول ۲ و معیارهای ارزیابی شبکه موجود، بهترین الگوریتم برای این مسئله نیز لونبرگ مارکوآرت می‌باشد. سرعت همگرایی الگوریتم پس انتشار خطا، به انتخاب مقادیر اولیه وزن‌های شبکه، بردارهای بایاس و پارامترهای موجود در الگوریتم مانند نرخ یادگیری وابسته است. با تغییر پارامترهای شبکه شامل ضریب

یادگیری، تغییر توابع نرون‌ها می‌توان برای داشتن بالاترین همگرایی مقادیر مناسب توابع و ضرائب یادگیری را تعیین کرد. در جدول ۳ اطلاعات مربوط به شبکه عصبی و ضریب یادگیری ارائه شده است.

جدول ۳. ساختار و متغیرهای شبکه عصبی

متغیر	نوع و مقادیر
ساختار شبکه	شبکه پیش‌خور
تعداد ورودی‌های شبکه	۵
تابع فعالیت	در لایه‌های پنهان تابع تانژانت سیگموئید و در لایه خروجی خطی
الگوریتم یادگیری	پس انتشار خطا با الگوریتم لوبزبرگ - مارکوآرت
سرعت یادگیری	۰/۰۱
داده‌های آموزش	۷۰ درصد کل داده‌ها
داده‌های اعتبار سنجی	۱۵ درصد کل داده‌ها
داده‌های تست	۱۵ درصد کل داده‌ها
تعداد حداکثر تکرار	۱۰۰۰

یکی از مشکلاتی که برای شبکه عصبی ممکن است ایجاد شود، بیش‌برازش^۱ می‌باشد که در آن خطا روی مجموعه‌ی آموزشی شبکه مقدار کوچکی است، ولی زمانی که اطلاعات جدید به شبکه وارد می‌شود، خطا زیاد می‌شود. در واقع شبکه قدرت تعمیم به شرایط جدید را ندارد. از راهکارهای مهم برای بهبود تعمیم شبکه، استفاده از شبکه به اندازه کافی بزرگ و تعداد مناسب نرون‌ها می‌باشد. برای تعیین بهترین ساختار می‌توان از حدس و خطا استفاده نمود و باید به این نکته توجه داشت که تعداد لایه و نرون زیاد همیشه بهترین راهکار نیست. لذا در تعیین ساختار شبکه عصبی، حداقل تعداد نرون‌ها با حفظ دقت شبیه‌سازی یک هدف مطلوب می‌باشد. در شکل ۱ فلوجارت مراحل انجام کار برای تعیین بهترین ساختار شبکه عصبی آورده شده است.

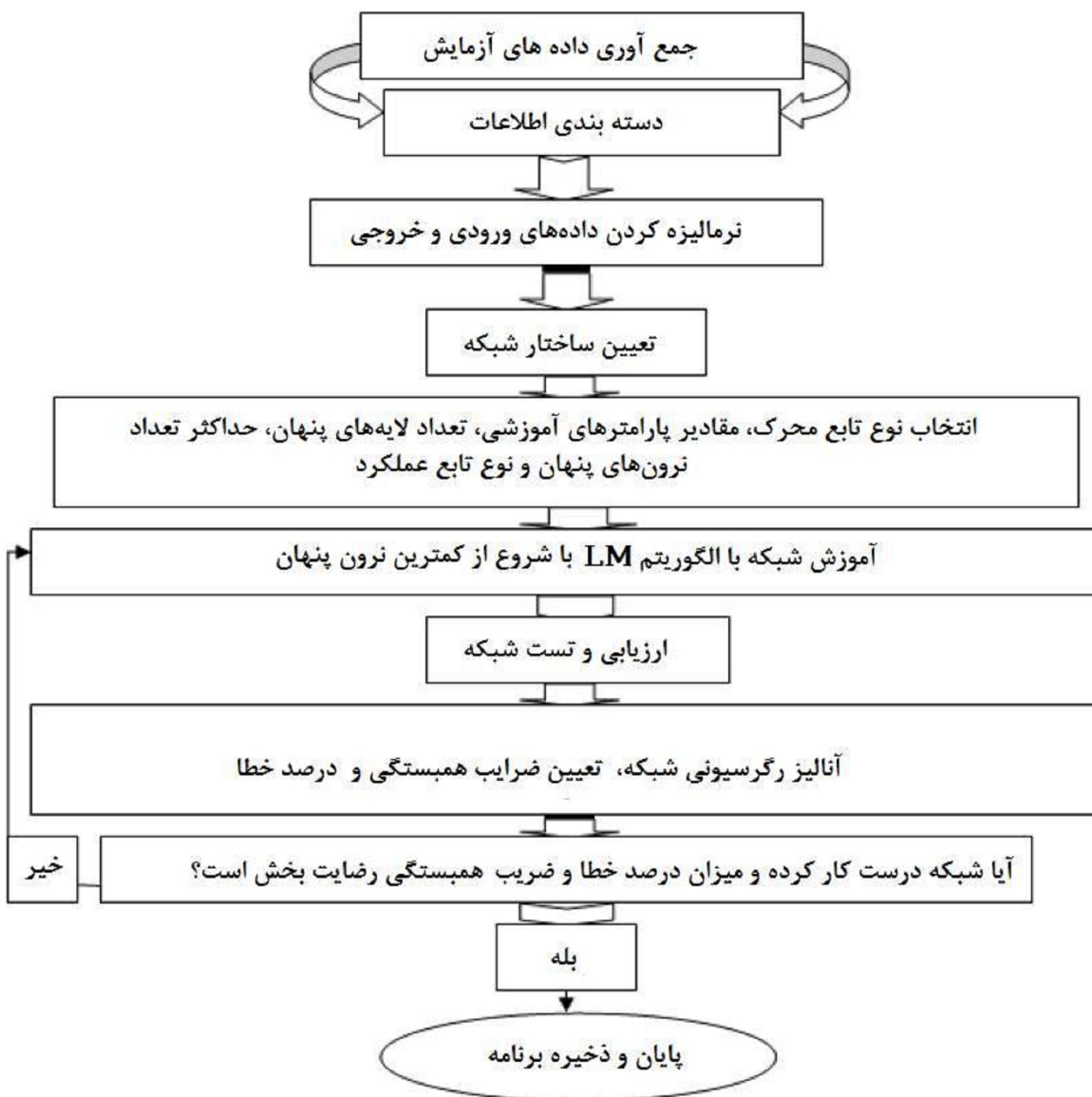
در جدول ۴ تعدادی از ساختارهای مختلف شبکه عصبی برای ورودی‌ها آورده شده است که با توجه به معیارهای ارزیابی ساختار شماره ۶، یعنی استفاده از ۱۰ نرون در یک لایه پنهان بهترین حالت می‌باشد. ساختار شبکه عصبی بهینه مورد استفاده در شکل ۲ ارائه شده است. تابع محرک برای همه نرون‌ها در لایه پنهان و خروجی به ترتیب، تابع سیگموئید (logsig) و خطی (purelin) می‌باشد.

نتایج و بحث

برای یافتن شرایط بهینه به منظور حداکثر راندمان استخراج فنل از فاضلاب با حلال تری بوتیل فسفات، ۷۰٪ از مجموعه داده‌ها (۱۲۸ مجموعه داده) برای آموزش شبکه، ۱۵٪ داده‌ها برای اعتبارسنجی و ۱۵٪ برای تست شبکه مورد استفاده قرار گرفته است. شبکه عصبی پرسپترون با یک لایه پنهان و ۱۰ نرون در

^۱ Over Fitting

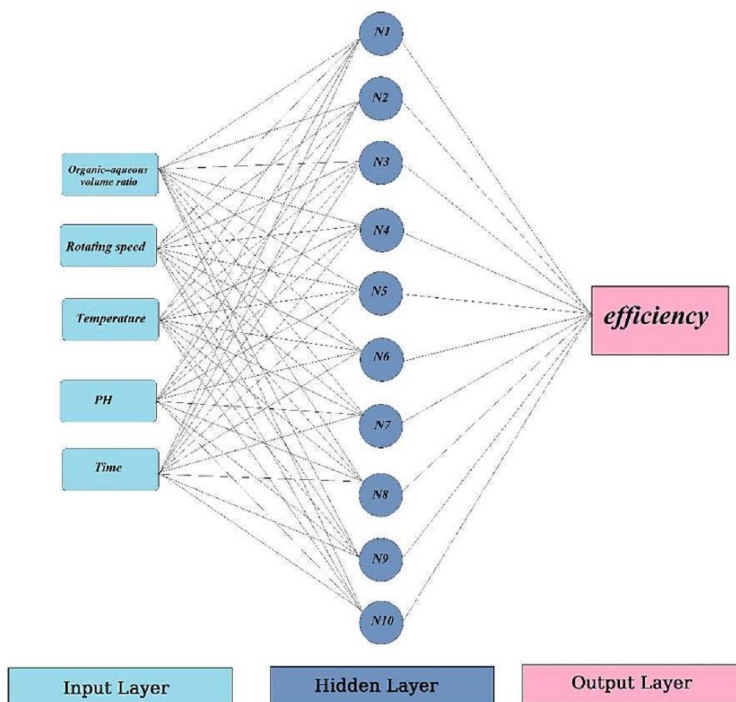
لایه پنهان ایجاد شد و کمترین مقدار RMSE، $1/0.39$ و بیشترین مقدار توان دوم ضریب همبستگی $0/992$ به دست آمده است. نمودار عملکرد شبکه در شکل ۳ ارائه شده است. بر طبق این نمودار شبکه در تکرار ۲۸ امین به ضریب MSE برابر $1/70.19$ رسیده است. تطبیق بین داده‌های تجربی و مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه MLP در شکل ۴ آورده شده است. با توجه به نتایج نشان داده شده در شکل ۴ مشاهده می‌شود که تمام نقاط نزدیک به یک خط راست بوده و مدل شبکه عصبی به خوبی توانسته است داده‌های تجربی را پیش‌بینی نماید. در واقع این نتایج نشان می‌دهد که قدرت پیش‌بینی مدل بالا می‌باشد. برخی از داده‌های مورد استفاده در پیوست آمده است.



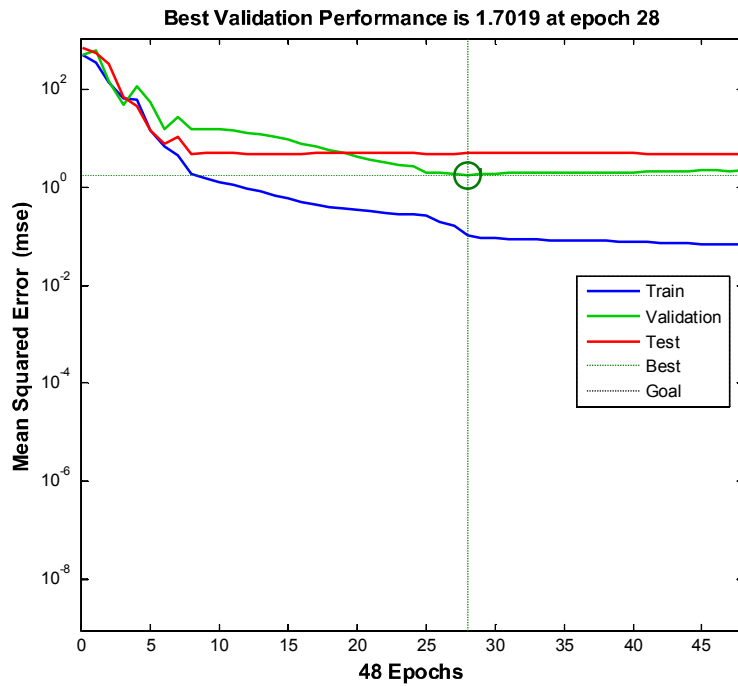
شکل ۱. الگوریتم آموزش و تعیین شبکه عصبی بهینه

جدول ۴. انواع ساختارهای آزمایش شده برای شبکه عصبی مصنوعی

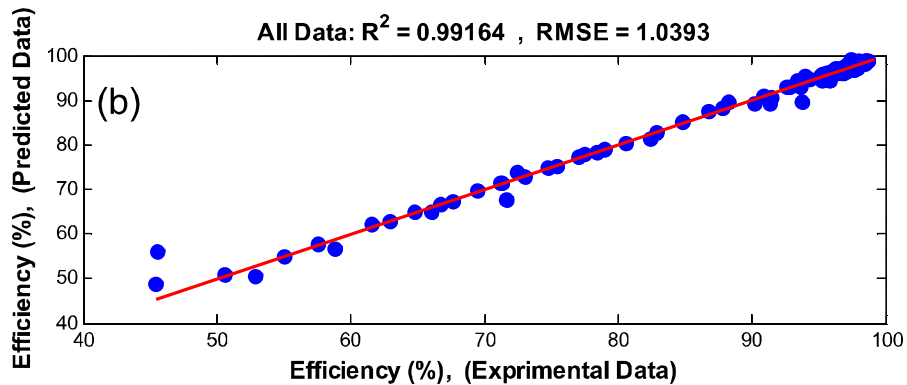
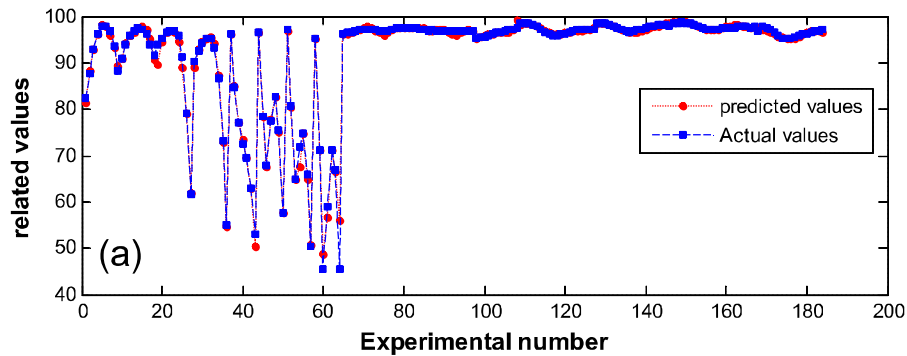
توان دوم ضریب همبستگی	میانگین مربعات خطا		ساختار شبکه عصبی	شماره
	MSE	RMSE		
R^2				
۰/۸۵	۱۸/۴۲	۴/۲۹۲	۵×۵×۱	۱
۰/۹۵	۵/۲۸۷۲	۲/۲۹۹۴	۵×۶×۱	۲
۰/۹۷	۲/۷۵۵۷	۱/۶۶	۵×۷×۱	۳
۰/۹۴	۷/۰۹۷۱	۲/۶۶۴	۵×۸×۱	۴
۰/۹۵	۶/۲۰۰۹	۲/۴۹۰۲	۵×۹×۱	۵
۰/۹۹	۱/۰۸۰۱	۱/۰۳۹۳	۵×۱۰×۱	۶
۰/۹۷	۳/۴۷۲۶	۱/۸۶۳۵	۵×۱۵×۱	۷
۰/۹۰	۱۲/۸۳۶۹	۳/۵۸۲۹	۵×۵×۴×۱	۸
۰/۹۶	۵/۶۹۶۵	۲/۳۸۶۷	۵×۷×۴×۱	۹
۰/۹۷	۲/۹۱۲۷	۱/۷۰۶	۵×۷×۷×۱	۱۰
۰/۹۷	۲/۷۴۸۱	۱/۶۵۷۷	۵×۷×۱۰×۱	۱۱
۰/۹۵	۶/۶۲۳۷	۲/۵۷۳۷	۵×۱۰×۴×۱	۱۲
۰/۹۹	۱/۲۷۷۱	۱/۱۳۰۱	۵×۱۰×۷×۱	۱۳
۰/۹۸	۱/۷۲۵۹	۱/۳۱۳۷	۵×۱۰×۱۰×۱	۱۴
۰/۶۷	۴۲/۸۰۳۹	۶/۵۴۲۵	۵×۱۵×۴×۱	۱۵



شکل ۲. ساختار بهینه برای شبکه عصبی

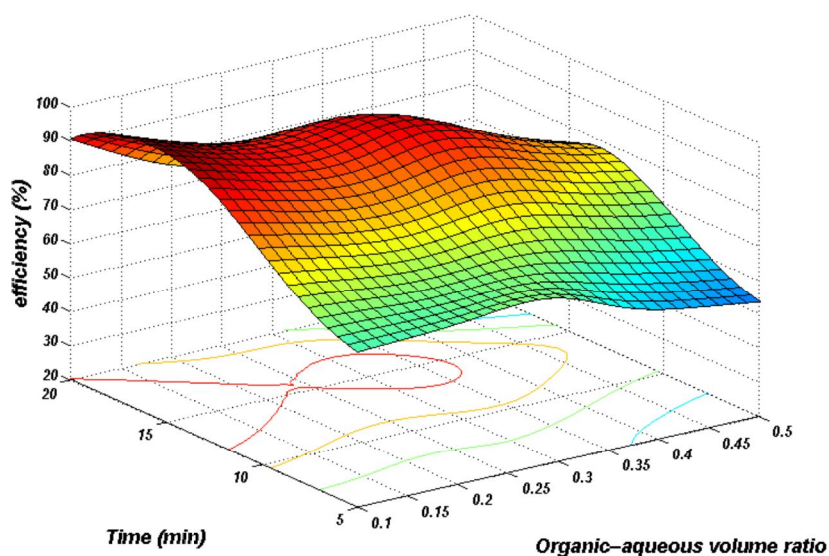


شکل ۳. منحنی‌های عملکرد شبکه عصبی برای آموزش، تست و ارزیابی



شکل ۴. مقادیر پیش بینی شبکه MPL در مقابل داده‌های تجربی برای بازده استخراج

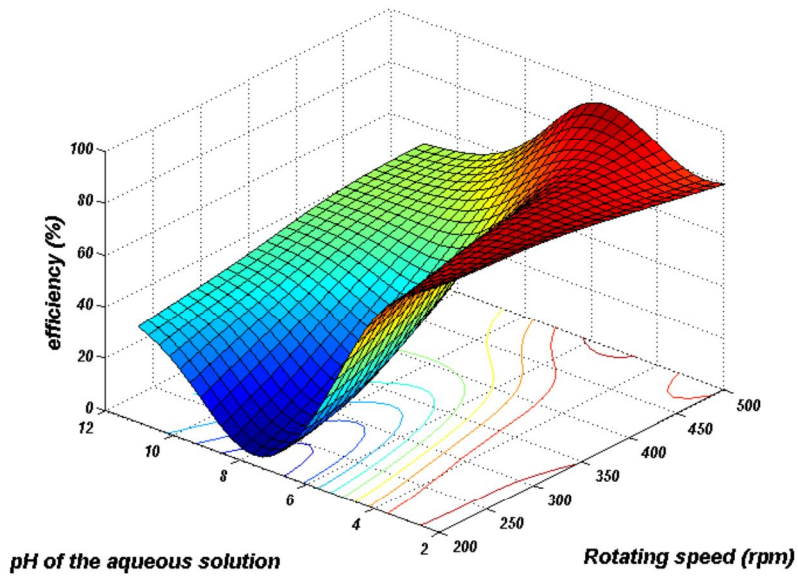
بر اساس مدل شبکه عصبی آموزش دیده، سطوح خروجی به صورت نمودار سه بعدی و طرح‌های کانتوری برای نشان دادن تأثیر متغیرهای ورودی بر بازده استخراج به عنوان مدل شبکه عصبی پیش‌بینی، ارائه شده است. این نمودارها در شکل‌های ۵ تا ۸ آورده شده است. رابطه غیرخطی موجود را می‌توان در شکل‌ها به وضوح دید و هر یک از پارامترها تأثیر معناداری روی بازده استخراج دارد.



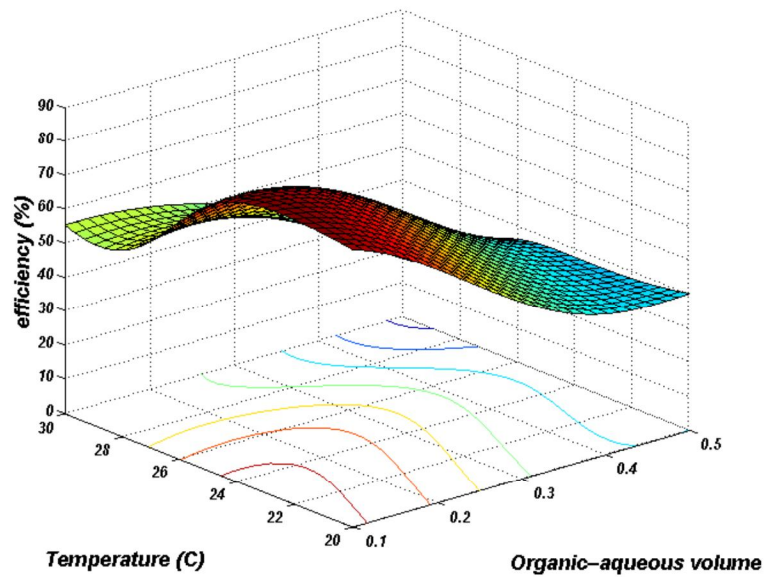
شکل ۵. تغییرات بازده استخراج بر حسب نسبت حجمی آلی به آبی و زمان

در عمل نسبت حجمی آلی به آبی و سرعت روتور تأثیرات زیادی روی بازده استخراج دارند. اثر نسبت O/A روی بازده استخراج غیرخطی و وابسته به زمان استخراج می‌باشد. انتخاب نسبت O/A بین ۰/۲۵ تا ۰/۳ بیش‌ترین مقدار بازده استخراج یعنی ۹۵٪ را در پی دارد. در سطوح مختلف O/A با افزایش زمان بازده استخراج ابتدا افزایش نشان داده و به مقدار حداکثر خود می‌رسد و سپس کاهش می‌یابد (شکل ۵). افزایش بازده در زمان‌های بین ۱۲-۱۶ دقیقه و کاهش بازده در زمان‌های ۱۹-۲۰ دقیقه به وضوح دیده می‌شود. در شکل ۶ اثر تغییرات سرعت روتور و pH بر بازده استخراج ارائه شده است.

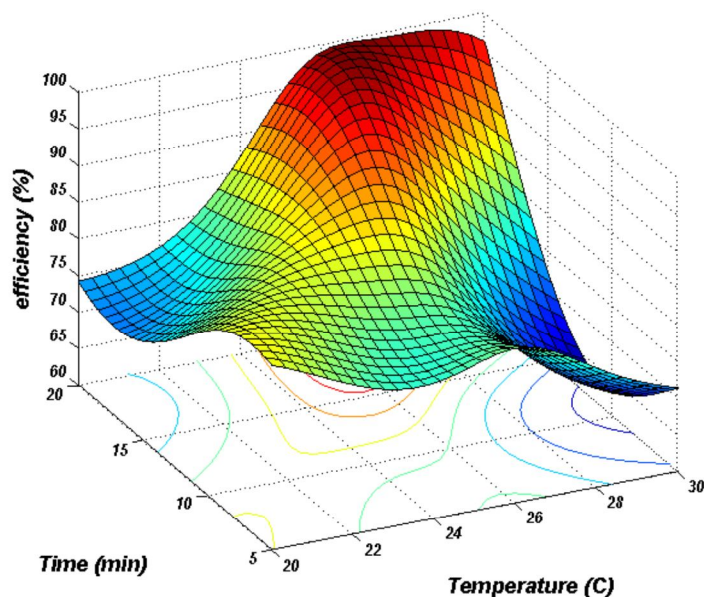
با افزایش سرعت روتور بازده استخراج افزایش می‌یابد. با افزایش سرعت روتور سطح تماس بین فازها پراکنده و پیوسته‌تر شده و انتقال جرم افزایش می‌یابد و در نتیجه باعث افزایش نفوذپذیری فازها می‌شود. از طرف دیگر ممکن است پدیده نامطلوب طغیان در ستون استخراج رخ بدهد. البته مقدار افزایش سرعت روتور و مقدار بهینه آن به موارد دیگر از جمله نسبت حجمی آلی به آبی و pH نیز بستگی دارد. تأثیر دما و pH نسبت به تأثیر O/A و RS کم‌تر قابل توجه است. دما و نسبت حجمی آلی به آبی تأثیر مشابهی روی بازده دارند و با افزایش هر دو بازده استخراج کاهش می‌یابد، البته با افزایش زمان، تأثیر دما روی استخراج بیش‌تر می‌شود. تغییرات بازده استخراج با دما، در شکل‌های ۷ و ۸ نشان داده شده است.



شکل ۶. تغییرات بازده استخراج بر حسب سرعت روتور و pH



شکل ۷. تغییرات بازده استخراج بر حسب نسبت حجمی آلی به آبی و دما



شکل ۸. تغییرات بازده استخراج بر حسب دما و زمان

همانطور که در شکل‌های (۷) و (۸) مشخص است در نسبت‌های آلی به آبی پایین درصد استخراج بالا می‌باشد. همچنین انتخاب بهینه پارامتر زمان موجب بهبود بازده استخراج می‌شود، به طوری که افزایش زمان استخراج موجب افزایش بازدهی می‌شود. نتایج نشان داد که انتخاب یک مقدار pH پایین بین ۲ و ۷/۴۸ منجر به بازدهی استخراج قابل توجه، بیش از ۹۷ درصد می‌شود.

نتیجه گیری

در این مطالعه، استخراج فنل از فاضلاب با استفاده از حلال تری بوتیل فسفات مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور ساختار بهینه‌ای از شبکه عصبی پرسپترون چند لایه پس‌خور آموزش دیده با الگوریتم پس انتشار خطا، با یک لایه پنهان و ۱۰ نرون در لایه پنهان طراحی گردید. حداقل مقدار RMSE و حداکثر مقدار R^2 برای شبکه آموزش دیده به ترتیب ۱/۰۳۹ و ۰/۹۹ به دست آمد، که تطابق خوبی بین مقدار واقعی و پیش‌بینی شده فراهم نمود، که نشان‌دهنده تعمیم‌پذیری شبکه می‌باشد. اثرات پارامترهای ورودی یعنی نسبت حجمی آلی به آبی، سرعت روتور، دما، pH و زمان، روی بازده استخراج به کمک شبکه عصبی بررسی شد. بر اساس شبیه‌سازی صورت گرفته، نتایج زیر حاصل گردید:

- با کاهش نسبت حجمی آلی به آبی، بازده استخراج افزایش می‌یابد و مقدار بهینه آن بین ۰/۲۵ تا ۰/۳ انتخاب گردید.
- در سطوح پایین سرعت روتور با افزایش pH، بازده ابتدا کاهش و سپس افزایش می‌یابد، در سطوح بالای سرعت روتور با افزایش pH، بازده افزایش یافته، به مقدار حداکثر خود می‌رسد و سپس

- کاهش نشان می‌دهد.
 - دما معمولاً روی فرآیند استخراج بی‌تأثیر و یا تأثیر ناچیزی دارد، منتها در این بررسی افزایش دما موجب کاهش بازده استخراج شده است.
 - pH نیز همانند دما تأثیر اندکی روی فرآیند استخراج دارد و در این بررسی با افزایش مقدار pH، بازده ابتدا کاهش و سپس افزایش می‌یابد.
 - افزایش زمان منجر به افزایش بازده استخراج می‌شود.
- از مهم‌ترین اهداف این مطالعه، یافتن شرایط بهینه برای دستیابی به حداکثر بازده استخراج فنل از فاضلاب می‌باشد. برای تعیین شرایط بهینه که حداکثر بازدهی استخراج را در پی دارد، ارزیابی جامعی از خروجی گروه شبکه بهینه در محدوده بردار ورودی انجام گردید. شرایط بهینه به ترتیب، نسبت آلی به آبی ۰/۲۲، سرعت روتور ۳۵۰ دور در دقیقه، دما ۲۲/۷۶ درجه سانتی‌گراد، ۷/۵pH، زمان ۱۵/۸۶ دقیقه و بازده استخراج متناظر با این شرایط ۹۶/۲۳ به دست آمد. بنابراین، می‌توان نتیجه گرفت که مدل شبکه عصبی یک ابزار کمی کارآمد برای پیش‌بینی استخراج مایع-مایع محتوی فنلی از فاضلاب به کمک حلال تری بوتیل فسفات می‌باشد.

مراجع

1. Asgari A., Sidmohammadi A., Ebrahimi A., Gholami Z. and Hosseinzadeh E., Study on phenol removing by using modified zolite (Clinoptilolite) with $FeCl_3$ from aqueous solutions, *Journal health system research*, Vol. 89, pp. 848–857, 2010.
2. Kazemi P., Peydayesh M., Bandegi A., Mohammadi T. and Bakhtiari O., Stability and extraction study of phenolic wastewater treatment by supported liquid membrane using tributyl phosphate and sesame oil as liquid membrane, *Chemical Engineering Research and Design*, Vol. 92, pp. 375–383, 2014.
3. Jiang H., Fang Y., Fu Y., and Guo Q.-X., Studies on the extraction of phenol in wastewater, *Journal of Hazardous Materials*, Vol. 101, pp. 179–190, 2003.
4. Shen S., Chang Z. and H. Liu, Three-liquid-phase extraction systems for separation of phenol and p-nitrophenol from wastewater, *Separation and Purification Technology*, Vol. 49, pp. 217–222, 2006.
5. Daraei H., Manshoury M. and Yazdanbakhsh A.R., Removal of phenol from aqueous solution using ostrich feathers ash, *Journal of Mazandaran University of Medical Sciences*, Vol. 20, pp. 81–87, 2010.
6. Pazoheshfar S. P., Survey Removal of phenol from contaminated water using activated carbon and carbon skin almonds and walnuts, *Environmental Science and Technology*, Vol. 10, pp. 219–233, 2009.
7. Diyanati R., Yousefi Z., Yazdani Cherati J. and Balarak D., Investigating Phenol Absorption from Aqueous Solution by Dried Azolla, *Journal of Mazandaran University of Medical Sciences*, Vol. 22, pp. 13–20, 2013.
8. Ghaneian M. T. and Ghanizadeh G., Application of enzymatic polymerization process for the removal of phenol from synthetic wastewater, *Iranian Journal of Health and Environment*, Vol. 2, pp. 46–55, 2009.
9. Senturk H. B, Ozdes D., Gundogdu A., Duran C., and Soylak M., Removal of phenol from



- aqueous solutions by adsorption onto organomodified Tirebolu bentonite: equilibrium, kinetic and thermodynamic study, *Journal of Hazardous Materials*, Vol. 172, pp. 353–362, 2009.
10. Piuleac C.G., Rodrigo M. A., and Can P., Environmental Modelling & Software Ten steps modeling of electrolysis processes by using neural networks, *Environmental Modelling & Software.*, Vol. 25, pp. 74–81, 2010.
 11. Olanrewaju R. F. and Muyibi S. A., prediction of optimal adsorption of aqueous phenol removal with oil palm empty fruit bunch activated carbon using artificial neural network (ANN), *Advances in Environmental Biology*, pp. 1–3, 2014.
 12. Du K. L., and Swamy M. N. S., *Neural networks in a softcomputing framework*. Springer, 2006.
 13. Hassoun M. H., *Fundamentals of artificial neural networks*, Proceedings of the IEEE, Vol. 84, pp. 906, 1996.
 14. Engelbrecht A. P., *Computational intelligence: an introduction*. John Wiley & Sons, 2007.
 15. Messikh, N., Samar, M. H. and Messikh, L. liquid–liquid extraction of phenol from wastewater using TBP solvent. *Desalination*, vol. 208, no. 1–3, pp. 42–48, 2007.
 16. Khajeh M. and Barkhordar A., Modelling of solid-phase tea waste extraction for the removal of manganese from food samples by using artificial neural network approach., *Food Chemistry.*, Vol. 141, pp. 712–7, 2013.
 17. Lashkarbolooki M., Shafipour Z. S., and Hezave A. Z., Trainable cascade-forward back-propagation network modeling of spearmint oil extraction in a packed bed using SC-CO₂, *The Journal of Supercritical Fluids.*, Vol. 73, pp. 108–115, 2013.
 18. Hagan M. T. and Menhaj M. B., Training feedforward networks with the Marquardt algorithm, *Neural Networks, IEEE Transactions.*, Vol. 5, pp. 989–993, 1994.

پیوست ۱

مقایسه بین داده‌های تجربی و خروجی شبکه عصبی مصنوعی

شماره	نسبت O/A	سرعت روتور (rpm)	دما (°C)	PH	زمان (دقیقه)	بازده استخراج (درصد)	
						آزمایش	MLP
۱	۰/۱	۲۰۰	۲۰	۶/۷۵	۵	۸۲/۴۵۵۴	۸۱/۲۱۴۸
۲	۰/۲	۲۰۰	۲۰	۶/۷۵	۵	۹۲/۷۸۹۹	۹۳/۰۲۹۱
۳	۰/۳	۲۰۰	۲۰	۶/۷۵	۵	۹۶/۱۲۲۹	۹۸/۱۵۱۹
۴	۰/۴	۲۰۰	۲۰	۶/۷۵	۵	۹۶/۹۰۳۳	۹۵/۸۹۷۶
۵	۰/۴۵	۲۰۰	۲۰	۶/۷۵	۱۵	۷۹/۰۱۶۷	۷۹/۰۲۵۸
۶	۰/۵	۲۰۰	۲۰	۶/۷۵	۵	۸۸/۲۵۷۱	۸۹/۴۰۱۹
۷	۰/۳۵	۲۰۰	۲۰	۶/۷۵	۲۰	۹۳/۳۷۲۱	۹۴/۱۸۴۴
۸	۰/۲۵	۳۰۰	۲۰	۶/۷۵	۵	۷۷/۰۷۳۶	۷۷/۱۱۱۷
۹	۰/۲۵	۳۵۰	۲۰	۶/۷۵	۱۰	۷۷/۵۳۶۹	۷۷/۷۴۳۵
۱۰	۰/۲۵	۴۰۰	۲۰	۶/۷۵	۵	۶۹/۵۱۲۴	۶۹/۵۴۷۵
۱۱	۰/۲۵	۲۵۰	۲۰	۶/۷۵	۱۵	۸۰/۵۶۱۲	۸۰/۲۴۱۲
۱۲	۰/۲۵	۴۰۰	۲۰	۶/۷۵	۲۰	۷۱/۲۶۸۲	۷۱/۲۷۰۱
۱۳	۰/۲۵	۴۵۰	۲۰	۶/۷۵	۲۰	۶۶/۷۲۶۲	۶۶/۶۵۹۲
۱۴	۰/۲۵	۵۰۰	۲۰	۶/۷۵	۲۰	۴۵/۵۶۱۳	۵۵/۹۴۸۴
۱۵	۰/۲۵	۲۰۰	۲۲	۶/۷۵	۵	۹۶/۷۰۲۱	۶۹/۴۵۳۶
۱۶	۰/۲۵	۲۰۰	۲۶	۶/۷۵	۵	۹۷/۲۳۰۶	۹۷/۶۸۵۳
۱۷	۰/۲۵	۲۰۰	۲۲	۶/۷۵	۱۰	۹۷/۴۵۶۰	۹۷/۴۴۸۷
۱۸	۰/۲۵	۲۰۰	۲۸	۶/۷۵	۱۰	۹۷/۲۹۲۷	۹۷/۵۸۸۶
۱۹	۰/۲۵	۲۰۰	۲۴	۶/۷۵	۱۵	۹۶/۷۴۵۷	۹۶/۵۷۴۴
۲۰	۰/۲۵	۲۰۰	۲۹	۶/۷۵	۱۵	۹۶/۸۸۰۸	۹۷/۰۶۵۶
۲۱	۰/۲۵	۲۰۰	۲۵	۶/۷۵	۲۰	۹۶/۴۳۰۱	۹۶/۵۶۷۷
۲۲	۰/۲۵	۲۰۰	۳۰	۶/۷۵	۲۰	۹۷/۴۴۰۴	۹۹/۱۹۱۶
۲۳	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۳	۵	۹۸/۴۷۱۳	۹۸/۳۶۴۸
۲۴	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۴/۵	۵	۹۷/۲۵۳۴	۹۷/۳۹۹۰
۲۵	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۷/۵	۵	۹۶/۳۲۱۴	۹۶/۴۳۹۵
۲۶	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۹/۵	۵	۹۷/۱۷۲۱	۹۷/۰۲۶۸
۲۷	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۱۱	۵	۹۷/۲۸۰۴	۹۷/۴۵۰۰
۲۸	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۲/۵	۱۰	۹۸/۵۴۸۴	۹۸/۵۶۵۳
۲۹	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۴	۱۰	۹۷/۹۳۳۴	۹۸/۰۱۱۱



۳۰	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۹	۱۰	۹۷/۹۶۱۷	۹۷/۷۷۴۹
۳۱	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۹/۵	۱۰	۹۸/۰۳۷۹	۹۷/۹۸۸۸
۳۲	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۱۰/۵	۱۰	۹۸/۰۸۰۹	۹۸/۳۸۶۷
۳۳	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۳	۱۵	۹۸/۶۹۰۴	۹۸/۹۵۷۶
۳۴	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۵/۵	۱۵	۹۷/۳۸۴۱	۹۷/۴۸۵۵
۳۵	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۶/۵	۱۵	۹۷/۰۸۷۲	۹۷/۰۴۳۶
۳۶	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۷	۱۵	۹۷/۱۵۲۶	۹۷/۰۴۸۳
۳۷	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۶/۵	۲۰	۹۷/۹۲۲۹	۹۷/۲۰۴۲
۳۸	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۶	۲۰	۹۵/۳۶۰۴	۹۵/۳۹۲۲
۳۹	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۸	۲۰	۹۵/۷۷۰۸	۹۵/۶۷۵۶
۴۰	۰/۲۵	۲۰۰	۲۰	۱۱	۲۰	۹۷/۱۵۹۹	۹۶/۶۵۵۲

ادامه پیوست ۱؛ مقایسه بین داده‌های تجربی و خروجی شبکه عصبی مصنوعی