

استفاده از شبکه‌ی عصبی و الگوریتم ژنتیک در مدلسازی جداسازی رنگ از محلولهای آبی توسط جذب بر روی نانولوله های کربنی

زهرا شهریاری^۱، عطا...سلطانی گوهرریزی^{۲،۳*}، علی مجبی^{۲،۴}

۱. کارشناس ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه شهید باهنر کرمان

۲. پژوهشکده انرژی و محیط زیست، دانشگاه شهید باهنر کرمان

۳. استادیار مهندسی شیمی، دانشگاه شهید باهنر کرمان (a.soltani@mail.uk.ac.ir)*

۴. دانشیار مهندسی شیمی، دانشگاه شهید باهنر کرمان

چکیده

در این تحقیق جذب متیلن بلو از محلول آبی بر روی نانولوله های کربنی مورد مطالعه قرار گرفته است. داده‌های آزمایشگاهی در سه دمای ۲۹۰، ۳۰۰ و ۳۱۰K با مدل‌های تعادلی و در دمای ۳۰۰K با مدل های سینتیکی مطابقت داده شد و مشاهده گردید که داده های تعادلی جذب منطبق بر ایزوترم لانگمویر بوده و سینتیک جذب با معادله سینتیکی شبه درجه دوم مکی و هو سازگار است. پارامترهای دیگری نظیر زمان تماس، pH محلول، غلظت اولیه متیلن بلو و مقدار جاذب به عنوان فاکتورهای مؤثر بر جذب بررسی شدند. نود دسته از داده های آزمایشگاهی برای توسعه یک شبکه عصبی بکار گرفته شد. ورودی های شبکه شامل پارامترهای غلظت اولیه محلول، میزان جاذب، pH اولیه محلول، زمان تماس و دما بودند و خروجی شبکه غلظت نهایی متیلن بلو در فاز محلول بوده است. شبکه با استفاده از الگوریتم ژنتیک بهینه شده و نتایج آن با داده‌های آزمایشگاهی مقایسه شد که مطابقت بسیار خوبی مشاهده گردید.

مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله :

دریافت ۱۰ خرداد ۱۳۸۸

دریافت پس از اصلاحات ۱۵ فروردین ۱۳۸۹

پذیرش نهایی ۳۱ خرداد ۱۳۸۹

کلمات کلیدی :

جذب سطحی

رنگ

متیلن بلو

نانولوله های کربنی

شبکه عصبی

الگوریتم ژنتیک

۱- مقدمه

همچنین امکان استفاده در فرآیندهای مختلف، تنوع جاذبها، سهولت طراحی و اجرای فرایند، نسبت به سایر روشها دارای امتیازات بیشتری می باشد. موادی که به عنوان جاذب صنعتی در فرآیندهای جذب مورد استفاده قرار می گیرند عبارتند از: مواد بیولوژیکی، اکسیدهای معدنی، کربن فعال، رزینهای پلیمری، نانوذرات و ... [۱۰، ۱۱].

مطالعات بسیاری در زمینه جذب رنگ روی جاذب هایی از جمله مونت موریلونیت، فسفات طبیعی، کربن فعال، لایه های سیلیکاتی، پوست میوه، ماسه و... انجام گرفته است [۱۶-۱۲].

نانو لوله های کربنی از جمله ساختار های جدید کربن هستند که برای نخستین بار در سال ۱۹۹۱ توسط Ijima سنتز شدند. این ترکیبات با توجه به تعداد لایه های موجود در ساختارشان به دو گروه تک دیواره و چند دیواره تقسیم می شوند. نانولوله های کربنی به دلیل سطح ویژه زیاد و ساختار لایه لایه و تو خالی ظرفیت جذب بالایی دارند و می توانند به عنوان جاذب مواد آلی و غیر آلی مورد استفاده قرار بگیرند.

در این تحقیق برای نخستین بار جذب سینتیکی و تعادلی متیلن بلو روی نانولوله های کربنی چند دیواره با در نظر گرفتن تأثیر پارامترهایی چون pH، غلظت اولیه، دما و مقدار جاذب بررسی شده و با استفاده از شبکه عصبی مدلسازی شده است. نتایج بدست آمده از آزمایشات برای تعیین یک مدل مناسب با معادلات سینتیکی شبه درجه اول لاگگرگن و شبه درجه دوم مککی و ایزوترم های تعادلی لانگمویر و فرندلیچ مقایسه شده و در نهایت مدل های سینتیکی و تعادلی مناسب برای بیان جذب معرفی شده است. در ادامه توسط نرم افزار NeuroSolutions برای مدلسازی جذب یک شبکه عصبی که با استفاده از الگوریتم ژنتیک آموزش داده شده طراحی شده و نهایتاً خروجی های شبکه با داده های آزمایشگاهی و مدل های ریاضی مقایسه شده اند.

گروه مهمی از ترکیبات آلی که باعث آلودگی آب ها می شوند رنگ های شیمیایی مصنوعی هستند. در حدود ده هزار نوع رنگ مختلف با تولید سالانه بیش از ۷۰۰۰۰۰ تن در صنایع مختلفی مانند چرم، کاغذ، نقاشی، آرایشی و بهداشتی، غذایی، لاستیک و پلاستیک و... مورد استفاده قرار می گیرند [۱-۳]. به طور معمول در حین تولید استفاده حدود ۱۵-۱۰٪ از این رنگ ها وارد محیط زیست می شوند. وجود ترکیبات رنگی در فاضلاب ها حتی در غلظت های بسیار پایین (۰/۰۰۵ میلی گرم در لیتر) به وسیله چشم قابل تشخیص است [۴]. اکثر رنگ ها در مقابل نور و گرما پایدارند. این گروه از ترکیبات آلی قابلیت تجزیه بیولوژیکی بسیار پایینی دارند و بعضی از آنها نیز برای فعالیت بیولوژی آبریان مخاطره آمیز می باشند [۴، ۵]. در ساختمان بعضی از انواع رنگ ها فلزات سنگین سمی وجود دارند که با گذشت زمان و تجزیه رنگ ها، این مواد آزاد شده زندگی آبریان و به دنبال آن انسان ها را به خطر می اندازند. حضور مواد رنگی در آب همچنین مانع از نفوذ نور خورشید به عمق آب شده در نتیجه در عمل فوتوسنتز اختلال ایجاد می کند [۶، ۷]. مواد رنگزا از جمله موادی هستند که با پروسه های شیمیایی و یا بیولوژیکی تغییر شکل داده سبب مصرف اکسیژن محلول در آب های جاری می گردند. با توجه به مشکلاتی که پساب های رنگی برای محیط زیست ایجاد می کنند در اکثر کشورها رنگزدایی از پساب صنایع، مشکل اساسی بوده و قوانین زیست محیطی اجرای آن را اجباری کرده است. تکنولوژی های مختلفی جهت تصفیه آب های آشامیدنی و پساب های صنعتی آلوده به رنگ های شیمیایی تا کنون مورد استفاده قرار گرفته اند، از جمله این روشها که مصارف صنعتی بیشتری دارند می توان به ته نشینی شیمیایی [۵]، استخراج حلال [۸]، اکسیداسیون [۹]، جذب سطحی و ... اشاره کرد. تنوع روشها به گونه ای است که باید با توجه به معایب و مزایای هر روش بهترین فرآیند را انتخاب کرد. در این بین جذب سطحی بدلیل توانایی بالا در خالص سازی و

۲- مواد و روش‌ها

۲-۱- دستگاه‌ها

برای تعیین غلظت رنگ در محلول از دستگاه اسپکتروفوتومتر UV-visible، مدل Cary 50 (varian) استفاده شده است. جهت تعیین pH محلول از دستگاه pH متر Metrohm استفاده شده است. دستگاه shaker-incubator مدل Infors برای عملیات همزدن محلول‌ها در حین جذب استفاده شده است و در نهایت برای صاف کردن محلول‌ها و جداسازی جاذب از محیط، از دستگاه سانتریفیوژ Hettich Universal II و فیلترهای S&S استفاده شده است.

۲-۲- مواد شیمیایی

جهت تهیه محلول‌ها از پودر متیلن بلو شرکت Merck استفاده شده است. همچنین جهت تغییر میزان pH محلول‌ها از اسید کلریدریک و محلول سود شرکت Merck استفاده شده است. جاذب‌های مورد استفاده، نانولوله های کربنی محصول پژوهشگاه صنعت نفت ایران، بوده است. در کلیه آزمایش‌ها، برای تهیه محلول از آب مقطر استفاده شده است.

۲-۳- آزمایش‌های جذب

محلول حاوی یون متیلن بلو از حل کردن پودر متیلن بلو در آب مقطر تهیه شده است. ابتدا محلولی با غلظت ۱۰۰ mg/L تهیه شده و سپس با رقیق کردن آن غلظت‌های مختلف به دلخواه تهیه شده‌اند.

۲-۳-۱- آزمایش‌های تعیین سینتیک جذب:

برای مطالعه تأثیر زمان تماس و سینتیک جذب متیلن بلو از محلول آبی، محلول‌هایی با غلظت‌های اولیه ۱ mg/L، ۵، ۱۰، ۲۰، ۳۰ و ۴۰ تهیه شده و با ۸۰ mg/L نانولوله کربنی مخلوط شده و درون shaker-incubator در دمای ۳۰۰K با دور ۱۸۰ rpm قرار داده شدند. نمونه‌های لازم در مدت زمان‌های ۱، ۵، ۱۰، ۱۵، ۳۰، ۴۵، ۶۰ و ۹۰ دقیقه از دستگاه خارج شدند. در پایان

هر آزمایش، محلول‌ها درون سانتریفیوژ با دور rpm ۳۵۰۰ به مدت ۳ دقیقه برای جداسازی جاذب قرار داده شده و سپس با استفاده از فیلترهای ۰/۲ میکرون صاف شدند. غلظت محلول با دستگاه اسپکتروفوتومتر UV-visible در طول موج ۶۶۰ nm اندازه‌گیری شد.

۲-۳-۲- آزمایش‌های تعادلی

برای بررسی جذب تعادلی متیلن بلو، محلول‌هایی با غلظت‌های اولیه ۱۰ mg/L تهیه شده و با مقادیر ۲۰، ۴۰، ۶۰، ۸۰، ۱۰۰، ۱۲۰، ۲۰۰ و ۴۰۰ نانولوله کربنی مخلوط شدند و درون shaker-incubator در دماهای ۲۹۰K، ۳۰۰ و ۳۱۰ و با دور rpm ۱۸۰ به مدت ۲ ساعت (زمان تعادل) قرار داده شدند. برای صاف کردن محلول‌ها مراحل ذکر شده تکرار شده‌اند.

۲-۳-۳- آزمایش‌های تأثیر pH

به منظور بررسی تأثیر pH محلول‌ها بر درصد جذب، محلول‌هایی با غلظت اولیه ۱۰ mg/L تهیه شده و با افزودن اسید کلریدریک و محلول سود، محلول‌هایی با pH برابر با ۲، ۲/۹۲، ۴/۱، ۷/۳۴، ۱۰/۴۲ و ۱۲/۲ تهیه شده، با ۸۰ mg/L نانولوله کربنی مخلوط شده، درون shaker-incubator در دمای ۳۰۰K و با دور rpm ۱۸۰ به مدت ۲ ساعت قرار داده شدند. برای صاف کردن محلول‌ها مراحل ذکر شده تکرار شده‌اند.

۲-۴- شبکه عصبی مصنوعی (ANN)

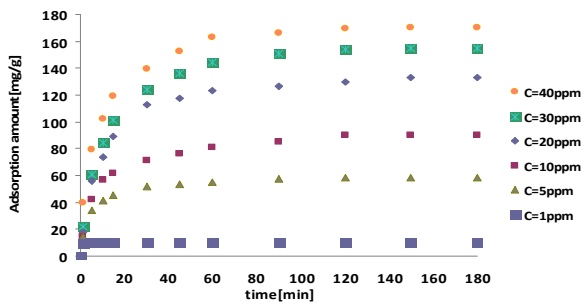
در این تحقیق، برای مدلسازی جذب متیلن بلو روی نانولوله های کربنی از شبکه عصبی استفاده شد. برای افزایش کارایی شبکه عصبی و بهینه سازی پارامترهای آن از جمله تعداد نرون در لایه مخفی، نرخ منتوم و نرخ یادگیری از الگوریتم ژنتیک استفاده شد. برای اینکار از نرم افزار NeuroSolution که برای یافتن بهترین ساختار شبکه عصبی و بهینه سازی پارامترهای آن، طراحی شده، استفاده شده است. لازم بذکر است برای یافتن بهترین تعداد نرون در لایه مخفی شبکه های

۳- ارائه نتایج و تحلیل یافته‌ها

۳-۱- بررسی سینتیکی جذب

۳-۱-۱- تأثیر زمان تماس روی میزان جذب

اثر زمان تماس روی میزان جذب در غلظت اولیه های مختلف از متیلن بلو در شکل (۱) نشان داده شده است.



شکل (۱): تأثیر زمان تماس روی میزان جذب متیلن بلو

همانگونه که در شکل دیده می شود در زمان های اول تماس به دلیل وجود تعداد فضاهای خالی زیاد شیب نمودار زیاد است و با گذشت زمان و پر شدن فضاهای مناسب برای جذب شیب نمودار کم می شود به طوریکه در مدت ۱۲۰ دقیقه فرایند جذب به تعادل می رسد.

۳-۱-۲- بررسی ثابت سرعت جذب

ثابت سرعت جذب متیلن بلو روی نانولوله های کربنی را می توان با مقایسه آن با معادله ی شبه درجه اول لاگرگرن [۱۷] و معادله شبه درجه دوم مککی و هو [۱۷] و تعیین بهترین مدل محاسبه کرد.

معادله سینتیکی لاگرگرن به صورت زیر است:

$$\ln[Q_e - Q_t] = \ln Q_e - k_t t \quad (1)$$

که در آن Q_e غلظت تعادلی فاز جاذب، Q_t غلظت در لحظه t و k_t ثابت سرعت معادله می باشد. شکل (۲) نمودار حاصل از رسم داده های تجربی بر اساس مدل سینتیکی لاگرگرن می باشد.

عصبی از روش سعی و خطا استفاده می شود که این روش غیر از وقت گیر بودن از دقت خوبی هم برخوردار نمی باشد. بنا براین جهت یافتن نتایج بهتر از شبکه ها از الگوریتم ژنتیک برای بهینه سازی پارامترهای شبکه استفاده شد.

نود دسته از داده های آزمایشگاهی برای توسعه شبکه که در دو دسته ورودی ها و خروجی ها قرار دارند بکار گرفته شد. ورودی های شبکه شامل پارامترهای غلظت اولیه محلول، میزان جاذب، pH اولیه محلول، زمان تماس و دما بوده و خروجی شبکه غلظت نهایی متیلن بلو در فاز محلول بوده است. شبکه عصبی (Multi-Layer perceptron) با یک لایه مخفی ایجاد شده که توابع انتقال در لایه مخفی و لایه خروجی تابع تانژانت هایپربولیک (Tanh) بوده است. حدود ۶۵ درصد داده ها برای آموزش شبکه، ۱۵ درصد به منظور اعتبار سنجی (Validation) و باقی داده ها برای تست شبکه استفاده شده اند. برای آموزش شبکه از الگوریتم لونبرگ مارکورت (Levenberg-Marquardt) استفاده شده است و تعداد سه نرون در لایه مخفی توسط الگوریتم ژنتیک بصورت بهینه بدست آمد. عملگر انتخاب چرخ رولت و عملگرهای پیوند و جهش یکنواخت در این شبکه بکار رفته اند. سایر مشخصات شبکه که توسط الگوریتم ژنتیک بهینه شده است در جدول (۱) آورده شده است.

جدول (۱): مشخصات شبکه عصبی و الگوریتم ژنتیک استفاده شده

Learning rule	Levenberg-Marquardt
Maximum epoch	1000
Population size	40
Maximum generations	10
Operator	best
Crossover	uniform
Mutation	uniform
Selection	Roulette

همانگونه که از نتایج مشخص است داده های تجربی تطابق بالایی با مدل شبه درجه دوم مک کی و هو دارند.

۲-۳- بررسی تعادلی جذب

به منظور مدل سازی فرایند جذب متیلن بلو روی نانولوله های کربنی نتایج تجربی حاصل از آزمایشهای تعادلی با ایزوترم های لانگمویر و فرنلیچ، مقایسه می شوند.

فرم خطی ایزوترم فرنلیچ به صورت زیر بیان می شود.

$$\ln Q_e = \ln K_F + \frac{1}{n} \ln C_e \quad (۳)$$

K_F و $\frac{1}{n}$ ثوابت مدل و C_e و Q_e به ترتیب نشان دهنده غلظت تعادلی در فاز جامد و محلول هستند.

فرم خطی ایزوترم لانگمویر نیز به صورت زیر بیان می شود.

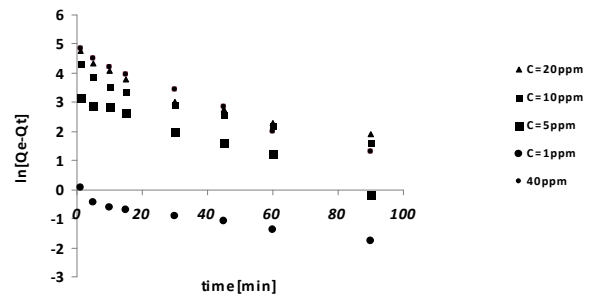
$$\frac{C_e}{Q_e} = \frac{1}{bQ_m} + \frac{C_e}{Q_m} \quad (۴)$$

در این مدل Q_m بیشینه ظرفیت جذب و b ثابت مدل می باشد. پارامترها و ضرایب همبستگی این مدلها محاسبه شده و در جدول (۳) بیان شده اند [۱۸].

جدول (۳): نتایج تجربی حاصل از برازش داده های تعادلی

Model	290K	300K	310K
Freundlich	$R^2 = 0.944$ $K_F = 45.987$ $n = 2.7$	$R^2 = 0.939$ $K_F = 61.88$ $n = 3.3$	$R^2 = 0.921$ $K_F = 73.96$ $n = 3.45$
Langmuir	$R^2 = 0.999$ $Q_m = 103.62$ $b = 0.93$	$R^2 = 0.986$ $Q_m = 109.31$ $b = 2.16$	$R^2 = 0.987$ $Q_m = 119.71$ $b = 3.12$

نتایج نشان می دهند که ایزوترم لانگمویر به خوبی داده های تعادلی را پوشش می دهد.

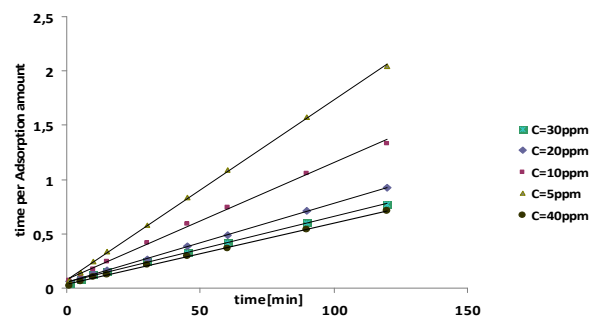


شکل (۲): مقایسه داده های سینتیکی با مدل لاگرگن

فرم معادله سینتیکی مک کی و هو به صورت زیر است:

$$\frac{t}{Q_t} = \frac{1}{k_2 Q_e^2} + \frac{t}{Q_e} \quad (۲)$$

در این معادله نیز Q_e غلظت تعادلی فاز جاذب، Q_t غلظت در لحظه t و k_2 ثابت سرعت معادله می باشد شکل (۳) نمودار حاصل از رسم داده های تجربی بر اساس مدل سینتیکی مک کی و هو می باشد. ثوابت و ضرایب همبستگی در جدول (۲) بیان شده اند.

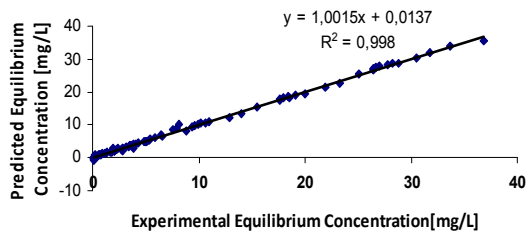


شکل (۳): مقایسه داده های سینتیکی با مدل مک کی و هو

جدول (۲): نتایج تجربی حاصل از برازش داده های سینتیکی

Conc ppm	First order model Lagergren			Second order model Mackay & Ho		
	K_1	Q_e	R^2	K_2	Q_e	R^2
1	0.04	0.0011	0.914	0.348	10.67	1
5	0.036	23.45	0.989	0.0037	60.24	0.999
10	0.028	51.42	0.945	0.0014	93.458	0.998
20	0.0315	78.88	0.92	0.001	136.99	0.999
30	0.055	97.51	0.975	0.0007	166.67	0.999
40	0.04	105.95	0.98	0.0009	178.57	0.999

۳-۳- مقدار بهینه جاذب

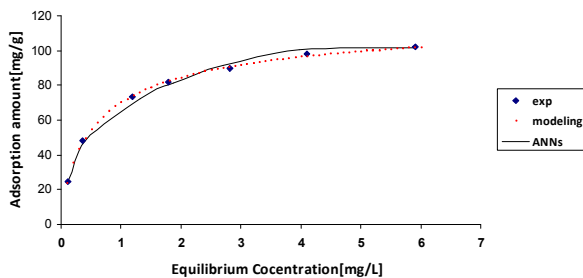


شکل (۵): مقایسه نتایج شبکه عصبی و داده های آزمایشگاهی

در ادامه نتایج شبکه در پیش‌بینی تأثیر پارامترهای مختلف در میزان جذب بررسی شده‌است.

۳-۵-۱- تعادل و ایزوترم جذب

پس از آموزش شبکه، به منظور بررسی کارایی آن در پیش‌بینی فرآیند جذب، داده‌های خروجی شبکه با نتایج آزمایشگاهی و مدل‌های ریاضی بدست آمده مقایسه شده‌اند. در شکل (۶) داده‌های تعادلی حاصل از شبکه در مقایسه با نتایج آزمایشگاهی و مدل لانگمویر، که بر اساس ضریب همبستگی محاسبه شده منطبق‌ترین مدل ریاضی با داده‌های آزمایشگاهی بود، در دمای ۳۰۰K آورده شده‌است.



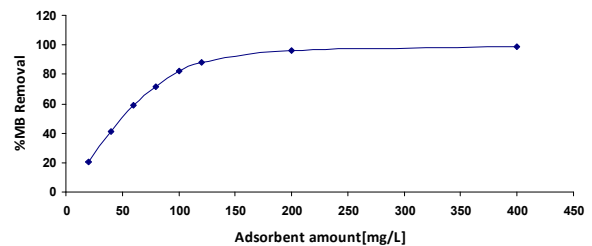
شکل (۶): مقایسه نتایج آزمایشگاهی و مدل لانگمویر با پیش‌بینی شبکه عصبی

همان‌طور که در شکل مشخص است، نتایج پیش‌بینی شده توسط شبکه سازگاری بسیار خوبی با نتایج آزمایشگاهی و مدل ریاضی نشان می‌دهد.

۳-۵-۲- اثر زمان تماس و سینتیک جذب

همان‌طور که مشخص شد، سینتیک جذب متیلن بلو بر روی نانولوله های کربنی از معادله‌ی شبه درجه دوم مککی و هو تبعیت می‌کند. برای بررسی عملکرد شبکه

در شکل (۴) درصد جذب متیلن بلو به ازای مقادیر مختلف جاذب در دمای ۳۰۰ K نشان داده شده است. همانطور که در شکل مشاهده می‌شود به ازای ۲۰۰ mg/L نانولوله کربنی درصد جذب به بیش از ۹۸٪ می‌رسد که این مقدار به عنوان مقدار بهینه جاذب در نظر گرفته می‌شود.



شکل (۴): تأثیر مقدار جاذب روی درصد جذب

۳-۴- تأثیر غلظت اولیه روی میزان و درصد جذب متیلن بلو

همان‌طور که در شکل (۱) دیده می‌شود با افزایش غلظت اولیه از ۱ تا ۴۰ ppm میزان جذب بر واحد جرم جاذب (mg/g) از ۱۰/۶ تا ۸۵/۲۲ (۸۵٪) تا ۱۷۰ تا ۳۴٪ افزایش می‌یابد. در واقع غلظت اولیه بزرگتر به عنوان نیروی محرکه ای برای غلبه بر مقاومت های فاز محلول و فصل مشترک دو فاز است. همچنین در غلظت های بالاتر برخورد بین یون های رنگ و جاذب بیشتر شده میزان جذب زیاد می‌شود. این در حالی است که برای یک میزان ثابت و مشخص از جاذب، تعداد سایت های فعال برای جذب ثابت هستند بنابراین در غلظت های اولیه بالاتر درصد کمتری از متیلن بلو جذب خواهد شد.

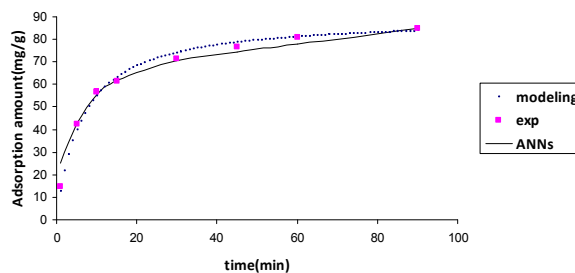
۳-۵-۳- شبکه عصبی

شکل (۵) نتایج خروجی شبکه‌ی عصبی آموزش داده شده با الگوریتم ژنتیک را در مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی نشان می‌دهد. همان‌طور که مشخص است، نتایج شبکه با داده‌های آزمایشگاهی تطابق بسیار خوبی دارد.

۴- نتیجه‌گیری

در این مطالعه جذب تعادلی و سینتیکی متیلن بلو از محلول های آبی بر روی نانولوله های کربنی به روش ناپیوسته مورد بررسی قرار گرفت. به منظور بررسی سینتیک جذب و مدلسازی ریاضی آن، داده های سینتیکی با مدل های شبه درجه اول لاگرن و شبه درجه دوم مک کی و هو مقایسه شدند که با توجه به تطابق بالای داده ها با مدل شبه درجه دوم مک کی و هو، این مدل به عنوان مدل سینتیکی جذب انتخاب شد. در بررسی تأثیر زمان تماس روی میزان جذب مشاهده شد که با افزایش غلظت، مدت زمان لازم برای رسیدن به تعادل نیز افزایش می یابد. به طور کلی زمان تعادل برای محدوده غلظت ۱-۴۰، ۱۲۰ دقیقه در نظر گرفته شد. داده های تعادلی به منظور مدل سازی جذب با ایزوترم های لانگمویر و فرندلیچ مقایسه شدند که تطابق خوبی بین داده های آزمایشگاهی و ایزوترم لانگمویر مشاهده شد. همچنین با مقایسه میزان جذب در سه دمای ۲۹۰، ۳۰۰ و ۳۱۰ K مشاهده شد که جذب متیلن بلو روی نانولوله های کربنی گرماگیر است. در بررسی میزان بهینه جذب نشان داده شد که با افزایش میزان جذب تا ۲۰۰ mg/L درصد جذب افزایش یافته و به ۹۸٪ می رسد و سپس ثابت می ماند. به منظور مدل سازی جذب توسط شبکه های عصبی مصنوعی، پارامترهای مؤثر بر جذب سطحی شناسایی شدند. در نهایت یک شبکه عصبی با یک لایه مخفی که توسط الگوریتم ژنتیک آموزش داده شده، تهیه شد و نتایج خروجی شبکه با مدل های ریاضی بدست آمده و همچنین داده های آزمایشگاهی به صورت موردی و کلی مقایسه شد که انطباق بسیار خوبی مشاهده گردید.

تهیه شده در پیش بینی تأثیر زمان تماس جاذب و محلول در میزان جذب، در شکل (۷) نتایج آزمایشگاهی، برای غلظت اولیه ۱۰ mg/L در دمای ۳۰۰K و همچنین مدل سینتیکی منتخب در مقایسه با خروجی های شبکه ی عصبی آورده شده است.

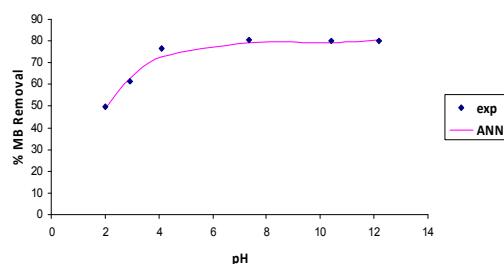


شکل (۷): مقایسه نتایج آزمایشگاهی سینتیک جذب و مدل مک کی و هو با پیش بینی شبکه عصبی

همان گونه که در شکل مشخص است، تطابق مطلوبی میان داده های خروجی شبکه عصبی با نتایج آزمایشگاهی و همچنین مدل ریاضی وجود دارد.

۳-۵-۳- اثر pH محلول اولیه بر میزان جذب

یکی از پارامترهای مهم و مؤثر بر روی راندمان جذب، pH محلول اولیه است که با بهینه سازی آن می توان درصد جذب را تا حد بالایی بهبود بخشید. استفاده از شبکه ی عصبی برای پیش بینی pH بهینه، کمک زیادی در جهت حذف آزمایشهای تکراری می کند. در شکل (۸) می توان مشاهده کرد که نتایج پیش بینی شده توسط شبکه عصبی آموزش دیده انطباق بسیار خوبی را با داده های آزمایشگاهی نشان می دهد.



شکل (۸): مقایسه نتایج آزمایشگاهی اثر pH محلول اولیه بر درصد جذب با پیش بینی شبکه عصبی

مراجع

- [8] G. Muthuraman, Teng Tjoon Tow, Leh Cheu Peng, Norli Ismail, (2008), "Recovery and Reuse of Methylene Blue from Industrial Wastewater Using Benzoic Acid as a Carrier", *International Conference on Environmental Research and Technology (ICERT)*.
- [9] Ensar Oguz, Bu lent Keskinler, (2007), "Comparison among O₃, PAC adsorption, O₃/HCO₃, O₃/H₂O₂ and O₃/PAC processes for the removal of BomaplexRed CR-L dye from aqueous solution", *Dyes and Pigments*, 74, 329–334.
- [۱۰] امیر فولادی، طاهره کاغذچی، (۱۳۸۴)، "جذب کادمیوم از محلول‌های آبی توسط کربن فعال ساخته شده از ضایعات کشاورزی"، *همین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران*.
- [11] Da'browski, (2001), "Adsorption - from theory to practice", *Advances in Colloid and Interface Science*, 93, 135-224.
- [12] Fla'vio Andre' Pavan, Ana Cristina Mazzocato, Yoshitaka Gushikem, (2008), "Removal of methylene blue dye from aqueous solutions by adsorption using yellow passion fruit peel as adsorbent", *Bioresource Technology*, 99, 3162–3165.
- [13] LiWanga, Junping Zhanga, AiqinWanga, (2008), "Removal of methylene blue from aqueous solution using chitosan-g-poly (acrylic acid)/montmorillonite superadsorbent nanocomposite", *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects*, 322, 47–53.
- [14] Saeed B. Bukallah, M.A. Rauf, S.S. AlAli, (2007), "Removal of Methylene Blue from aqueous solution by adsorption on sand", *Dyes and Pigments*, 74, 85–87.
- [15] Mingfei Zhao, Zhaobin Tang, Peng Liu, (2008), "Removal of methylene blue from aqueous solution with silica nano-sheets derived from vermiculite", *Journal of Hazardous Materials*, 158, 43–51.
- [16] Nouredine Barka, Ali Assabbane, Abederrahman Nounah, Larbi Laanab, Yhya Aît Ichou, (2009), "Removal of textile dyes from aqueous solutions by natural phosphate
- [1] Emad N. El Qada, Stephen J. Allen, Gavin M. Walker, (2006), "Adsorption of Methylene Blue onto activated carbon produced from steam activated bituminous coal: A study of equilibrium adsorption isotherm", *Chemical Engineering Journal*, 124, 103–110.
- [2] P. Nigam, G. Armour, I.M. Banat, D. Singhb, R. Marchant, (2000), "Physical removal of textile dyes from e. uents and solid-state fermentation of dye-adsorbed agricultural residues", *Bioresource Technology*, 72, 219–226.
- [3] Renmin Gong; Youbin Jin; Jin Sun; Keding Zhong, (2008), "Preparation and utilization of rice straw bearing carboxyl groups for removal of basic dyes from aqueous solution", *Dyes and Pigments*, 76, 519-524.
- [۴] مختار آرامی، نرگس یوسف لیمایی، نیاز محمد محمودی، (۱۳۸۴)، "مطالعه سینتیک و تعادل جذب سطحی رنگزای مستقیم قرمز ۸۰ با به کارگیری جاذب های پوست پرتقال، پوسته بلغور سویا و غشا داخلی پوست تخم مرغ: مطالعه مقایسه ای"، *همین کنگره ملی مهندسی شیمی ایران*.
- [5] Tak-Hyun Kim, Chulhwan Park, Jeongmok Yang, Sangyong Kim; (2004), "Comparison of disperse and reactive dye removals by chemical coagulation and Fenton oxidation", *Journal of Hazardous Materials*, B112, 95–103.
- [6] V.K. Garg, Moirangthem Amita, Rakesh Kumar, Renuka Gupta, (2004), "Basic dye (methylene blue) removal from simulated wastewater by adsorption using Indian Rosewood sawdust: a timber industry waste", *Dyes and Pigments*, 63, 243–250.
- [7]. K. Rastogi, J.N. Sahu, B.C. Meikap, M.N. Biswas, (2008), "Removal of methylene blue from wastewater using fly ash as an adsorbent by hydrocyclone", *Journal of Hazardous Materials*, 158, 531–540.

[18] O. Hamdaoui, E. Naffrechoux, (2007), "Modeling of adsorption isotherms of phenol and chlorophenols onto granular activated carbon", *Journal of Hazardous Materials*, 147, 381-394.

as a new adsorbent", *Desalination*, 235, 264–275.

[17] Oualid Hamdaoui, Mahdi Chiha, (2007), "Removal of Methylene Blue from Aqueous Solutions by Wheat Bran", *Acta Chim*, 54, 407–418.

Use of Neural Network and Genetic Algorithm in Modeling of Dye Separation from Aqueous Solutions by Adsorption onto Carbon Nanotubes

Zohre Shahryari¹, Ataallah Soltani Goharrizi^{2,3}, Ali Mohebbi^{2,4}

1. *MSC in Chemical Engineering, Shahid Bahonar University.*

2. *Energy and Environmental Engineering Research Center, Shahid Bahonar University.*

3. *Assistant Perofessor of Chemical Engineering, Shahid Bahonar University.*

4. *Associate Perofessor of Chemical Engineering, Shahid Bahonar University.*

ARTICLE INFO

Article history :

Received 31 May 2009

Received in revised form 4 April 2010

Accepted 21 June 2010

Keywords:

Adsorption

Dye

Methylene blue

Carbon nanotubes

Neural network

Genetic algorithm

ABSTRACT

In this study, adsorption of methylene blue from aqueous solution on carbon nanotubes was investigated. Experimental data at three temperatures of 290, 300 and 310 K were fitted to equilibrium models and at 300K with kinetics models. It was found that the Langmuir isotherm is the best fit with isothermal data and the kinetic data could be successfully fitted by McKay and Ho as a pseudo-second order model. The effects of different experimental parameters, such as contact time, solution pH, initial concentration of methylene blue and dose of adsorbent were investigated as effective parameters. Ninety groups of the experimental data for developing a neural network were used. The inputs data were initial solution concentration, dose of adsorbent, initial pH of the solution, contact time and temperature while the final methylene blue concentration in the solution was the output of the network. Finally, the network was optimized using the genetic algorithm. The results were compared with the experimental data and a very good agreement was observed.

All rights reserved.