

استفاده از الگوریتم ژنتیک در تعیین مؤلفه‌های برهم کنش الگوهای ضریب فعالیت در استخراج مایع - مایع

محمدجواد ابراهیم‌خانی^۱، حسین قنادزاده گیلانی^{۲*}

۱- دانشجوی دکتری مهندسی شیمی، دانشگاه گیلان

۲- استاد مهندسی شیمی، دانشگاه گیلان

پیام‌نگار: hggilani@guilan.ac.ir

چکیده

به‌تازگی روش‌های بهینه‌سازی، به‌طور گسترده در محاسبات تعادل فاز استفاده شده‌است. از بین این روش‌ها، می‌توان از الگوریتم ژنتیک برای محاسبه مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی الگوهای ضریب فعالیت در سامانه‌های تعادلی استفاده کرد. در این مطالعه، با استفاده از الگوریتم ژنتیک، مؤلفه‌های برهم‌کنش ۵ الگو ضریب فعالیت شامل مارگولس ۲- مؤلفه‌ای، ۳- مؤلفه‌ای، ویلسون، NRTL و UNIQUAC برای ۲۰ سامانه تعادلی سه‌جزئی (آب + اسیدهای کربوکسیلیک + حلال‌های آلی) شامل ۱۲۶ خط رابط حساب شده‌است. اندازه‌های مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی این الگوها به‌همراه میانگین انحراف مربع ریشه (RMSD) گزارش شده‌است. مقادیر میانگین RMSD سامانه‌ها به‌ترتیب الگوهای مذکور ۰/۰۲۹۸، ۰/۰۰۶۷، ۰/۰۱۱۴، ۰/۰۰۲۵ و ۰/۰۰۵۲ شده‌است. نتایج حاکی از این است: به‌جز الگوی مارگولس ۲- مؤلفه‌ای، بقیه الگوها دقت نسبتاً مناسبی دارند. با مقایسه میانگین RMSD مقالات در الگوهای NRTL و UNIQUAC مقادیرها به ترتیب از ۰/۰۱۲۴ و ۰/۰۱۸۱ به ۰/۰۰۲۵ و ۰/۰۰۵۲ بهبود یافته‌اند.

تاریخ دریافت: ۹۹/۰۲/۰۲

تاریخ پذیرش: ۹۹/۰۳/۲۷

شماره صفحات: ۸۱ تا ۹۴

کلیدواژه‌ها: استخراج

مایع- مایع، الگوریتم ژنتیک، مؤلفه
برهم‌کنش دوتایی، الگوی
ضریب فعالیت، اسیدهای
کربوکسیلیک

۱. مقدمه

بررسی فرایندهای جداسازی اجزاء مخلوط‌های چندجزئی همواره یکی از موضوعات با اهمیت و مورد توجه پژوهشگران در صنایع شیمیایی و مهندسی شیمی است. به‌ندرت می‌توان یک فرایند شیمیایی را یافت که نیازمند خالص‌سازی مواد اولیه و یا جداسازی نهایی محصولات از محصولات جانبی واکنش نباشد [۱]. اساس و مبنای روش‌های جداسازی بر خواص مواد استوار است، بدین‌منظور

می‌توان به روش‌هایی مانند تقطیر جزء‌به‌جزء، تبخیر، تبلور، جذب سطحی و استخراج با حلال اشاره کرد. استفاده از روش استخراج مایع- مایع برای جداسازی یکی از روش‌های مهم در پروژه‌های صنعتی و در مهندسی شیمی است [۲]. اسیدهای کربوکسیلیک از جمله مواد شیمیایی آلی هستند که با فرایندهای همنهشت شیمیایی و یا تخمیر تولید می‌شود. هر دو روش، محلول آبی و اسیدی ایجاد می‌کند که جداسازی اسید از فاز آب ضروری است [۳-۱]. امروزه برای از بین بردن مواد زائد از قبیل

* رشت، دانشگاه گیلان، دانشکده فنی، گروه مهندسی شیمی

Archive of SID

رنگ‌ها، فلزات سنگین و اسیدها از منابع آب و پساب از روش‌های فیزیکی، شیمیایی و زیست‌شناختی از قبیل جذب^[۴]، رسوب شیمیایی^[۵]، فناوری‌های الکتروشیمیایی^[۶]، تبادل یونی^[۷]، استخراج^[۸و۹]، پالایش غشایی^[۱۰] و اسمز معکوس^[۱۱] استفاده شده‌است. استخراج مایع-مایع با استفاده از یک حلال برای جداسازی ترکیبات آلی از آب، یک روش مقرون به صرفه، مناسب و فرایندی سازگار با محیط زیست است^[۱-۳].

همهٔ سامانه‌های تعادل مایع-مایع را می‌توان با استفاده از الگوهای تعادل گرمایی بر مبنای ضریب فعالیت از قبیل الگوهای مارگولس^۴، ویلسون^۵، NRTL^۶، UNIQUAC^۷ الگوسازی کرد. همچنین باید دانست که این الگوهای گرمایی بدون تنظیم مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی الگوها، دقیق و قابل اعتماد نیستند، مگر این‌که مؤلفه‌های برهم‌کنش^۸ الگوها بر اساس داده‌های تجربی هر سامانهٔ تعادلی مایع-مایع با روش‌های محاسباتی به‌دست آیند^[۱۲-۱۵]. در محاسبات تعادل فاز از یکی از مسائل مهم، تعیین همین مؤلفه‌های قابل تنظیم در الگوهای مختلف ضریب فعالیت است. هریک از الگوها دارای مجموعه‌ای از مؤلفه‌هاست که باید با داده‌های آزمایشگاهی مرتبط شوند و این تعیین یکی از مسائل چالشی است. با توجه به محاسبات تعادلی فاز، روش‌های مختلفی در مقالات پیشنهاد شده‌است. یکی از بهترین این راه‌حل‌ها، استفاده از روش‌های بهینه‌سازی با تعریف تابع هدف حداقل مربعات خطای کسر مولی است. در این مسائل، تابع هدف یک رابطه پیچیده‌به‌شدت غیرخطی و دارای چندین نقاط اکسترمم در محدودهٔ مشخصی از داده‌ها است^[۱۶]. بنابراین، به‌کارگیری روشی که نتایج آن به بهینه‌سازی کلی^۹ متغیرها منتهی شود، ضروری است. روش‌های بهینه‌سازی فرا ابتکاری^{۱۰} زیادی در این ارتباط وجود دارد؛ سینق^{۱۱} و همکارانش^[۱۷] از الگوریتم ژنتیک (GA) برای تعیین مؤلفه‌های برهم‌کنش الگوهای NRTL و UNIQUAC در تعادل سامانه‌های LLE چندجزئی استفاده کردند و نشان دادند که عملکرد آن از روش

تعیین واریانس داخلی^{۱۲} (IVEM) و روش‌های به‌کار گرفته در ASPEN و DECHEMA به‌وسیلهٔ ساهو^{۱۳} و همکارانش^[۱۸] بهتر است. رشتچیان و همکارانش به بررسی رفتارهای فاز سامانه‌های چندجزئی و چندفازی بر اساس الگوریتم ژنتیک پرداختند و مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی الگوهای ویلسون، NRTL و UNIQUAC را برای تعدادی از سامانه‌ها حساب و با مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی در سامانه‌های VLE، VLLE و LLE که در

مقالات گزارش شده‌اند، مقایسه کردند^[۱۹]. نتایج این مقایسه، پیش‌بینی بسیار خوب آن‌ها را نشان داد. الوارز^{۱۴} و همکارانش، اظهار کردند که روش‌های بهینه‌سازی تصادفی، همچون روش‌های جبری در بسیاری از کاربردهای مختلف مهندسی قدرتمند و مؤثر هستند و از GA برای تعیین مؤلفه‌های الگوی ویلسون در سامانهٔ VLE استفاده کردند^[۲۰]. همچنین اشاره کردند که الگوریتم تبرید تدریجی^{۱۵} (SA) نیازمند نقطهٔ شروع است، اما الگوریتم ژنتیک (GA) و تکامل تفاضلی^{۱۶} (DE) نیازی به حدس اولیه ندارند و فقط نیازمند تعریف یک محدودهٔ بالا و پایین از متغیرها هستند. وطنی و همکارانش، از GA برای محاسبهٔ مؤلفه‌های برهم‌کنش الگوهای مارگولس ۲- مؤلفه‌ای^{۱۷} و NRTL در سامانه‌های سه‌جزئی استخراج با مایعات یونی استفاده کردند^[۲۱]. کاپوچه^{۱۸} و همکارانش، با ترکیبی از دو روش بهینه‌سازی تصادفی GA و SA با الگوریتم‌های ترکیبی^{۱۹} باعث بهبود در تعیین مؤلفه‌های برهم‌کنش الگوهای ضریب فعالیت NRTL و UNIQUAC در سامانه‌های سه‌جزئی استخراج الکل با (دی‌کلرومتان و دی‌اتیل‌اتر) شدند^[۲۲]. عسگرپور و همکارانش، به تعیین مؤلفه‌های برهم‌کنشی الگوهای ویلسون، NRTL و UNIQUAC با استفاده از دو روش بهینه‌سازی تکاملی GA و PSO در سامانه‌های سه‌جزئی، چهارجزئی و پنج‌جزئی پرداختند و نشان دادند که دو روش GA و PSO، برای محاسبات تعادلی LLE قابل اعتماد است^[۲۳].

در این مطالعه، ۲۰ سامانهٔ سه‌جزئی تعادل مایع-مایع (آب + اسیدهای کربوکسیلیک + حلال‌های آلی) در دماهای مختلف از منابع^[۲] و^[۳۰-۲۴] استخراج شده‌است و از الگوریتم ژنتیک با یک

1. Adsorption
2. Chemical Precipitation
3. Ion Exchange
4. Margules
5. Wilson
6. Non Random Two Liquids
7. Universal Quasi Chemical
8. Interaction
9. Global Optimization
10. Inheuristic
11. Singh

12. Inside Variance Estimation Method
13. Sahoo
14. Alvarez
15. Simulated Annealing
16. Differential Evolution
17. Two-Suffix Margules
18. Kabouche
19. Hybrid

γ_i را می‌توان از الگوهای گرمایایی با تنظیم مناسب مؤلفه‌های برهم کنش اجزاء به‌دست آورد. با حل معادله (۴)، L نسبت جدا شده مولی به‌دست آمده و سپس کسر مولی اجزاء در هر دو فاز به‌دست خواهد آمد. با توجه به اینکه داده‌های گزارش شده در برخی از منابع بر اساس کسر جرمی است، کسر مولی با رابطه $w_i = \sum_{i=1}^N M w_i x_i / \sum_{i=1}^N M w_i$ به کسر جرمی تبدیل می‌شود. تعیین مؤلفه‌های برهم کنش الگوهای گرمایایی بر اساس کمینه‌کردن تابع برازندگی به‌دست خواهد آمد. تابع برازندگی در این مطالعه با رابطه (۵) که در آن بر اساس انحراف کسر جرمی داده آزمایشگاهی با کسر جرمی محاسبات برای تمام اجزاء، تعریف می‌شود.

$$F_{fit} = \sum_{k=1}^t \sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^n (w_{ijk}^{exp} - w_{ijk}^{cal})^2 \quad (5)$$

که در آن زیرنویس‌های n ، z و k مشخص‌کننده اجزاء و بالانویس exp و cal نشان‌دهنده داده‌های آزمایشگاهی و محاسباتی و p ، t و n به‌ترتیب تعداد خط رابطه، تعداد فاز و تعداد اجزاء است. مقایسه داده‌های آزمایشگاهی با داده‌های محاسباتی با استفاده از ریشه مربع میانگین انحرافات (RMSD) که در رابطه (۶) آمده انجام می‌شود.

$$RMSD = \left[\frac{\sum_{k=1}^t \sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^n (w_{ijk}^{exp} - w_{ijk}^{cal})^2}{\sum_{k=1}^t \sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^n 1} \right]^{1/2} \quad (6)$$

۳. الگوهای مختلف ضریب فعالیت

برای توصیف و الگوسازی رفتار واقعی مخلوط‌های چندجزئی، از الگوهای گرمایایی مختلفی که در آنها، انرژی گیبس اضافی به‌عنوان تابعی از دما و ترکیب‌های سامانه، برای تعیین ضرایب فعالیت اجزاء مختلف، استفاده می‌شود. در این الگوها، مؤلفه‌های برهم کنش دوتایی بین اجزاء که باید با داده‌های تجربی به‌دست آیند، برای تشریح رفتار واقعی مخلوط‌ها به‌کار می‌روند.

تابع برازندگی^۱ برای محاسبه مؤلفه‌های برهم کنش دوتایی الگوهای گرمایایی ضریب فعالیت استفاده شده‌است. در این کار، باهدف جامعیت در مقایسه و بررسی دقت الگوهای ضریب فعالیت از الگوی مارگولس ۲- مؤلفه‌ای، ماگولس ۳- مؤلفه‌ای، ویلسون، NRTL و UNIQUAC استفاده شده‌است. RMSD به‌دست‌آمده از سامانه‌های مورد بررسی با مقادیر آن‌ها در مقالات مقایسه شده است که نتایج حاکی از کاهش RMSD و مؤید برتری این روش نسبت به روش‌های مرسوم تعیین مؤلفه‌های برهم کنش الگوهاست و این روش در تعیین مؤلفه‌های برهم کنش دوتایی الگوهای ضریب فعالیت در استخراج اسیدهای کربوکسیلیک در محیط آبی با حلال‌های آلی رضایت‌بخش و قابل اعتماد است.

۲. الگوسازی تعادلی مایع-مایع

شرایط تعادلی گرمایایی بین دو فاز مایع-مایع، فاز آلی I و آبی بر حسب کسر مولی x_i و ضریب فعالیت γ_i بر اساس معادله (۱) حساب می‌شود.

$$(\gamma_i x_i)^I = (\gamma_i x_i)^{II} \quad (1)$$

اگر موازنه مولی اجزاء را بنویسیم، منجر به معادله (۲) خواهد شد.

$$Z_i = x_i^I L + x_i^{II} (1-L) \quad (2)$$

که در آن Z_i کسر مولی کلی، x_i کسر مولی فاز مایع و L نسبت جدا شده مولی با ۱ مول ماده اولیه در فاز I است. ضریب توزیع جزء i ، K_i به صورت معادله (۳) تعریف می‌شود.

$$K_i = \frac{x_i^I}{x_i^{II}} \quad (3)$$

با ترکیب معادله (۲) و معادله (۳) و همچنین با دانستن اینکه مجموع کسر مولی اجزاء در یک فاز برابر واحد است، معادله (۴) که معروف به معادله راجفورد-رایس است به‌دست می‌آید [۳۱].

$$\sum_i \frac{Z_i (1-K_i)}{1+L(1-K_i)} = 0 \quad (4)$$

با ترکیب معادله (۱) با معادله (۳) خواهیم داشت $K_i = \gamma_i^{II} / \gamma_i^I$

2. Tie-Line

1. Fitness Function

Archive of SID

$$\Lambda_{ij} \equiv \frac{v_j}{v_i} \exp\left(-\frac{\lambda_{ij} - \lambda_{ji}}{RT}\right) \quad (10)$$

$$\Lambda_{ji} \equiv \frac{v_i}{v_j} \exp\left(-\frac{\lambda_{ji} - \lambda_{ij}}{RT}\right) \quad (11)$$

۳-۳ الگوی NRTL

ضرایب فعالیت NRTL برای مخلوط چندجزئی با استفاده از رابطه (۱۲) به دست می‌آید.

$$\ln \gamma_i = \frac{\sum_{j=1}^m \tau_{ji} G_{ji} x_j}{\sum_{l=1}^m G_{li} x_l} + \sum_{j=1}^m \frac{x_j G_{ij}}{\sum_{l=1}^m G_{lj} x_l} \left(\tau_{ij} - \frac{\sum_{r=1}^m x_r \tau_{rj} G_{rj}}{\sum_{l=1}^m G_{lj} x_l} \right) \quad (12)$$

در این الگو، مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی و اختلاف انرژی با یکدیگر با رابطه (۱۳) و (۱۴) با هم در ارتباط هستند:

$$\tau_{ij} = \frac{\Delta g_{ij}}{RT} = \frac{A_{ij}}{T} \quad (13)$$

$$G_{ij} = \exp(-\alpha_{ij} \tau_{ij}) \quad (14)$$

در رابطه بالا به صورت کلی $A_{ii} = A_{jj} = 0$ ، $A_{ij} \neq A_{ji}$ و $\alpha_{ij} = \alpha_{ji}$ برقرار است و در این رابطه مؤلفه‌های غیرتصادفی است که در محدوده ۰/۲ تا ۰/۴۷ است [۳۲].

۴-۳ الگوی UNIQUAC

الگو ضریب فعالیت UNIQUAC در سامانه‌های چندجزئی برابر با مجموع ضریب فعالیت بخش ترکیبی γ_i^C و ضریب فعالیت بخش باقیمانده γ_i^R است که خواهیم داشت:

$$\ln \gamma_i = \ln \gamma_i^C + \ln \gamma_i^R \quad (15)$$

۱-۳ الگو مارگولس دو مؤلفه‌ای^۱ و سه مؤلفه‌ای^۲

در الگوی مارگولس دو مؤلفه‌ای، محاسبه ضریب فعالیت γ_i برای اجزاء یک سامانه سه جزئی بر اساس روابط (۷) به دست می‌آید.

$$\begin{aligned} \ln \gamma_1 &= A_{11} x_1^2 + A_{12} x_2^2 + (A_{12} + A_{21} - A_{11}) x_1 x_2 \\ \ln \gamma_2 &= A_{21} x_1^2 + A_{22} x_2^2 + (A_{12} + A_{21} - A_{22}) x_1 x_2 \\ \ln \gamma_3 &= A_{31} x_1^2 + A_{32} x_2^2 + (A_{31} + A_{32} - A_{31}) x_1 x_2 \end{aligned} \quad (7)$$

که در آن A_{11} ، A_{12} و A_{21} مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی الگو است، که در این کار این مؤلفه‌ها باید به دست آیند. همچنین الگو مارگولس سه مؤلفه‌ای برای سامانه سه جزئی بر اساس ضریب فعالیت جزء ۱ در رابطه (۸) آمده است.

$$\begin{aligned} \ln \gamma_1 &= A_{11} x_1^2 (1-x_2) + 2A_{12} x_1 x_2 (1-x_1) + A_{21} x_1^2 (1-x_2) + 2A_{11} x_1 x_2 (1-x_1) \\ &\quad - 2A_{21} x_1 x_2^2 - 2A_{22} x_1^2 x_2 + \left[\frac{1}{2} (A_{11} + A_{12} + A_{21} + A_{22} + A_{31}) - Q \right] (x_1 x_2 - 2x_1 x_2 x_3) \end{aligned} \quad (8)$$

که در آن A_{11} ، A_{12} ، A_{21} ، A_{22} ، A_{31} و Q مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی و قابل تنظیم است. برای بیان γ_1 و γ_2 می‌توان از رابطه (۸) با تغییر زیرنویس‌های سمت راست به دست آورد. برای γ_2 ، با جایگزین کردن ۱ با ۲، ۲ با ۳ و ۳ با ۱ و برای γ_3 با جایگزین کردن ۱ با ۳، ۲ با ۱ و ۳ با ۲ می‌توان به دست آورد [۳۲].

۲-۳ الگوی ویلسون^۲

ضرایب فعالیت ویلسون برای مخلوط چندجزئی با رابطه (۹) به دست می‌آید [۳۲].

$$\ln \gamma_k = -\ln \left(\sum_{j=1}^m x_j \Lambda_{kj} \right) + 1 - \sum_{i=1}^m \frac{x_i \Lambda_{ik}}{\sum_{j=1}^m x_j \Lambda_{ij}} \quad (9)$$

که در آن مؤلفه‌های قابل تنظیم Λ_{ij} به صورت روابط (۱۰) و (۱۱) است.

1. Two-Suffix Margules
2. Three-Suffix
3. Wilson

که در آن

- متقاطع: افراد جدید از افراد منتخب به‌منظور ایجاد جمعیت جدید تولید می‌شوند.
- جهش: با تغییر تصادفی در یک یا چند ژن کروموزوم، یک راه‌حل جدید تولید می‌شود.
- خاتمه: با رسیدن به شرایط مطلوب که در الگوریتم تعریف می‌شود، الگوریتم خاتمه می‌یابد [۳۴].

روش کار الگوریتم ژنتیک به‌صورت خلاصه در شکل (۱) آمده است. در مرحله اول، یک جمعیت اولیه به‌صورت تصادفی تولید می‌شود. هر کدام از افراد برای صلاحیت برازندگی در مرحله بعدی حساب می‌شوند. بهترین افراد در مرحله انتخاب، انتخاب می‌شوند. افراد با برازندگی بیشتر، احتمال بالاتری برای زاد و ولد دارند. زاد و ولد با ترکیب این افراد انتخاب شده، در مرحله تقاطع انجام می‌شود. در مرحله جهش، تغییرات تصادفی بر روی برخی از افراد انجام می‌شود. هدف از عملگر جهش این است که از همگرا شدن الگوریتم به کمینه محلی جلوگیری و جواب‌های با امکان جدید در جمعیت وارد کند. الگوریتم تا پیدا کردن کمینه تابع برازندگی، با ارضاء ضابطه توقف ادامه پیدا می‌کند. معمولاً بیشترین ضابطه توقف مورد استفاده در این الگوریتم، رسیدن تعداد تولید نسل به بیشینه مقدار لحاظ شده، است [۳۴].

چکیده الگوریتم اجرا شده برای بهینه‌سازی مؤلفه‌های برهم کنش الگوهای گرماپویایی چنین است:

۱. تابع برازندگی را با استفاده از رابطه (۵) تعریف کنید.
۲. مشخصات الگوریتم ژنتیک (اندازه جمعیت، تولید، انتخاب، متقاطع و جهش) را تنظیم کنید.
۳. جمعیت اولیه (مؤلفه‌های تعامل باینری) را تشکیل دهید.
۴. با استفاده از الگوهای گرماپویایی ضرایب فعالیت را به‌دست آورید.
۵. معادله راشفورد-رایس (رابطه (۴)) را حساب کنید و کسر جرمی را به‌دست آورید.
۶. تابع برازندگی را برای هر فرد در آن جمعیت ارزیابی کنید.
۷. بهترین افراد را برای تولید مثل انتخاب کنید.
۸. با استفاده از عملیات متقاطع و جهش، افراد جدیدی تولید کنید.
۹. با استفاده از افراد جدید تابع برازندگی را حساب کنید.
۱۰. تا زمانی که به مؤلفه‌های خاتمه الگوریتم برسید، الگوریتم را برای ایجاد نسل جدید ادامه دهید.

$$\ln \gamma_i^C = \ln \frac{\varphi_i}{x_i} + \frac{z}{2} q_i \ln \frac{\theta_i}{\varphi_i} + l_i - \frac{\varphi_i}{x_i} \sum_j x_j l_j \quad (16)$$

و

$$\ln \gamma_i^R = q_i \left[1 - \ln \left(\sum_{j=1}^m \theta_j \tau_{ji} \right) - \sum_{j=1}^m \frac{\theta_j \tau_{ij}}{\sum_{k=1}^m \theta_k \tau_{kj}} \right] \quad (17)$$

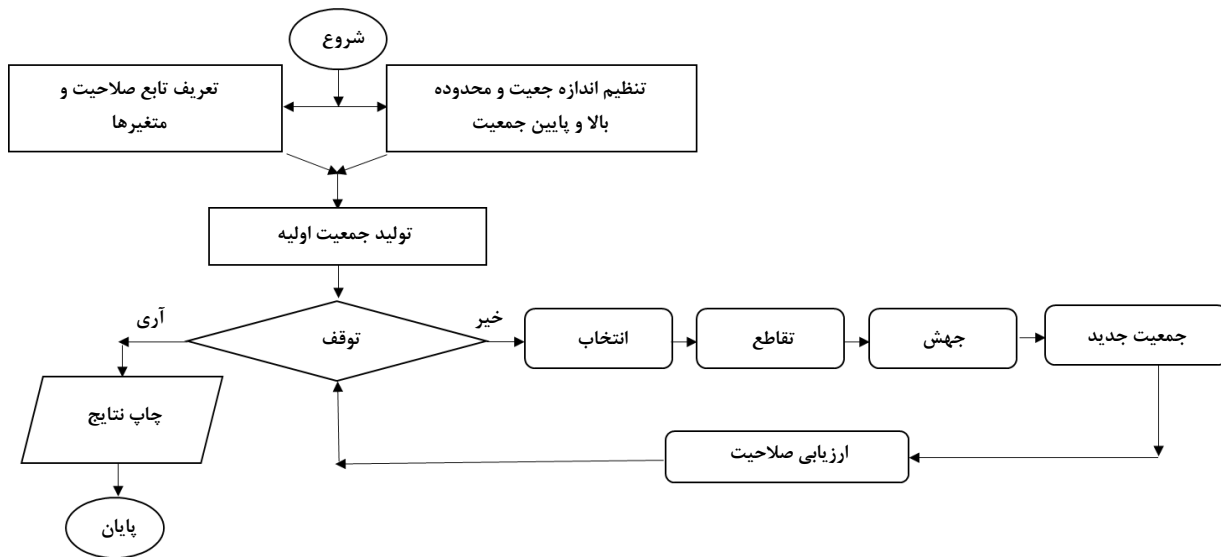
که در رابطه بالا $l_i = (z/2)(r_i - q_i) - (r_i - 1)$ ، تعداد مختصات z روی عدد ۱۰ تنظیم شده و مؤلفه برهم کنش دوتایی $\tau_{ij} = \exp[-(u_{ji} - u_{ii})/RT] = \exp[-A_{ij}/T]$ است که در آن $\tau_{ii} = \tau_{jj} = 1$ برقرار است و همچنین $\varphi_i = (r_i x_i) / \sum_j r_j x_j$ و $\theta_i = (q_i x_i) / \sum_j q_j x_j$ به ترتیب کسر حجمی و کسر سطحی جزء i است، در این رابطه r_i و q_i به ترتیب مؤلفه حجم و سطح جزء i و u_{ij} مؤلفه برهم کنش مابین جزء i و j است که در آن رابطه $u_{ij} = u_{ji}$ برقرار است [۳۲].

۴. الگوریتم ژنتیک

الگوریتم ژنتیک یک الگوریتم تکاملی برای بهینه‌سازی محاسبات پیچیده مهندسی بر اساس روش‌های زیست‌شناسی وراثت و جهش است که جان هنری هولند^۱ و شاگردانش در دانشگاه میشیگان ارائه کردند [۳۳]. همه الگوریتم‌های ژنتیک شامل مؤلفه‌های اصلی زیر هستند:

- کروموزوم: هر کروموزوم از رشته‌ای از ژن‌ها تشکیل شده و راه حل مسأله را نشان می‌دهد.
- جمعیت اولیه: جمعیت اولیه تصادفی در محدوده پایین و بالای مقادیر ورودی مجاز است.
- ارزیابی برازندگی: تعیین تابعی که در برابر آن هر کروموزوم با هر کروموزوم در جمعیت آزمایش می‌شود.
- انتخاب: کروموزوم والد مقادیر با برازندگی بهتر را از جمعیت قبلی انتخاب می‌کند.

1. John Henry Holland



شکل ۱. نمودار طرز کار الگوریتم ژنتیک [۳۴].

از منابع [۲، ۳۰-۲۴] گردآوری شده است که در جدول (۳) آمده است.

جدول ۱. مؤلفه‌های الگوریتم ژنتیک استفاده شده در این مطالعه.

| مؤلفه | مقادیر |
|---------------------------|-------------------------------------|
| اندازه جمعیت | ۲۰۰ |
| تعداد نسل | ۱۰۰ |
| نوع جمعیت | بردار دوتایی |
| تعداد متغیرهای تصمیم‌گیری | ۳ تا برای الگوی مارگولس ۲- مؤلفه‌ای |
| | ۷ تا برای الگوی مارگولس ۳- مؤلفه‌ای |
| | ۶ تا برای الگوی ویلسون |
| حد بالایی و پایین متغیرها | ۹ تا برای الگوی NRTL |
| | ۶ تا برای الگوی UNIQUAC |
| حد اکثر تعداد تکرارها | ۱۰۰۰ |
| نوع انتخاب | چرخه رولت |
| نوع تقاطع | آریسماتیک |
| نوع جهش | گوسی |
| تولرانس | ۰/۰۰۰۰۰۱ |

در این مطالعه، برای اجرای الگوریتم ژنتیک برای بهینه‌سازی مؤلفه‌های برهم‌کنش الگوهای گرماپویایی از نرم‌افزار بهینه‌سازی مؤلفه‌های برهم‌کنش الگوهای گرماپویایی از نرم‌افزار استفاده شده است. مؤلفه‌های الگوریتم ژنتیک به کار رفته در این مطالعه در جدول (۱) آمده است. در این کار در مرحله انتخاب از چرخه رولت، در مرحله تقاطع از آریسماتیک و نوع جهشی که انتخاب شده گوسی است. علت انتخاب این نوع از عملگرها در پیاده‌سازی الگوریتم ژنتیک، کاربرد رایج و مرسوم آنها در بهینه‌سازی مسائل مهندسی بوده است.

۵. سامانه استخراج مایع - مایع مورد بررسی

در این مطالعه از سامانه سه‌جزئی استخراج اسیدهای کربوکسیلیک در محیط آبی به وسیله حلال‌های آلی استفاده شده است. در این کار از اسیدهای کربوکسیلیک به کار رفته شامل اسید فرمیک، اسید استیک، اسید پروپیونیک، اسید بوتیریک و اسید والریک و از حلال‌های آلی مختلف هم به منظور جامعیت کار، از اتیل بنزن، ایزوآمیل استات، متیل ایزوآمیل کتون، پروپیلن کربنات، هپتان نرمال، دی کلرومتان، متیل ایزوبوتیل کربنول، ۱- هپتانول، ۱- اکتانول، ۲- اتیل ۱- هگزانول و اتیل هپتانولیت استفاده شده است که برخی از خصوصیات فیزیکی آن مواد در جدول (۲) ذکر شده است. داده‌های آزمایشگاهی برای این سامانه‌های سه‌جزئی (آب + اسیدهای کربوکسیلیک + حلال‌های آلی) در دماهای مختلف

جدول ۲. برخی از خصوصیات فیزیکی مواد به کار رفته در این مطالعه [۳۵].

| ردیف | نام ترکیب | نام IUPAC | فرمول شیمیایی | وزن مولکولی | r | q | ساختار شیمیایی |
|----------------------------|------------------------|-----------------------------|-----------------------------------------------|-------------|--------|-------|----------------|
| آب جزء (۱) | | | | | | | |
| ۱ | آب | Water | H ₂ O | ۱۸/۰۲ | ۰/۹۲ | ۱/۴۰ | |
| اسیدهای کربوکسیلیک جزء (۲) | | | | | | | |
| ۲ | اسید فرمیک | Methanoic Acid | CH ₂ O ₂ | ۴۶/۰۳ | ۱/۵۳ | ۱/۵۳ | |
| ۳ | اسید استیک | Ethanoic Acid | C ₂ H ₄ O ₂ | ۶۰/۰۵ | ۲/۲۰ | ۲/۰۷ | |
| ۴ | اسید پروپونیک | Propanoic Acid | C ₃ H ₆ O ₂ | ۷۴/۰۸ | ۲/۸۸ | ۲/۶۱ | |
| ۵ | اسید بوتیریک | Butanoic Acid | C ₄ H ₈ O ₂ | ۸۸/۱۱ | ۳/۵۵۱ | ۳/۱۵۲ | |
| ۶ | اسید والریک | Pentanoic Acid | C ₅ H ₁₀ O ₂ | ۱۰۲/۱۳ | ۴/۲۲۵۶ | ۳/۶۹۲ | |
| حلال‌های آلی جزء (۳) | | | | | | | |
| ۷ | اتیل بنزن | Ethylbenzene | C ₈ H ₁₀ | ۱۰۶/۱۷ | ۴/۶۰ | ۳/۵۲ | |
| ۸ | ایزوامیل استات | 3-Methylbutyl Acetate | C ₇ H ₁₄ O ₂ | ۱۳۰/۱۹ | ۵/۲۷ | ۴/۴۹ | |
| ۹ | متیل ایزوامیل کتون | 5-Methylhexan-2-one | C ₇ H ₁₄ O | ۱۱۴/۱۹ | ۴/۷۳ | ۵/۵۰ | |
| ۱۰ | پروپیلن کربنات | 4-Methyl-1,3-dioxolan-2-one | C ₄ H ₆ O ₃ | ۱۰۲/۰۹ | ۳/۲۸ | ۲/۷۴ | |
| ۱۱ | هپتان نرمال | n-Heptane | C ₇ H ₁₆ | ۱۰۰/۲۱ | ۵/۱۷۴ | ۴/۳۹۶ | |
| ۱۲ | دی کلرومتان | Dichloromethane | CH ₂ Cl ₂ | ۹۳/۸۴ | ۲/۲۰۶ | ۱/۹۸ | |
| ۱۳ | متیل ایزوبوتیل کرپینول | 4-Methylpentan-2-ol | C ₆ H ₁₄ O | ۱۰۲/۱۷ | ۴/۸۰۲ | ۴/۱۴۲ | |
| ۱۴ | ۱-هپتانول | Heptan-1-ol | C ₇ H ₁₆ O | ۱۱۶/۸۸ | ۵/۴۷ | ۴/۶۷ | |
| ۱۵ | ۱-اکتانول | Octan-1-ol | C ₈ H ₁₈ O | ۱۳۰/۲۳۱ | ۶/۶۲ | ۵/۸۳ | |
| ۱۶ | ۲-اتیل-۱-هگزانول | 2-Ethylhexan-1-ol | C ₈ H ₁₈ O | ۱۳۰/۲۳۱ | ۶/۲۰ | ۵۳/۱۰ | |
| ۱۷ | اتیل هپتانوئیت | Ethyl heptanoate | C ₉ H ₁₈ O ₂ | ۱۵۸/۲۴۱ | ۶/۸۵۱ | ۵/۸۱۶ | |

جدول ۳. سامانه‌های سه‌جزئی تعادل مایع-مایع به‌کار رفته در این مطالعه.

| ردیف | نام سامانه | دما (K) | تعداد خط رابط | مرجع |
|------|------------------------------------------------------|---------|---------------|------|
| ۱ | آب (۱) + اسید فرمیک (۲) + اتیل بنزن (۳) | ۲۹۸/۱۵ | ۶ | [۲] |
| ۲ | آب (۱) + اسید استیک (۲) + اتیل بنزن (۳) | ۲۹۸/۱۵ | ۶ | [۲] |
| ۳ | آب (۱) + اسید پروپیونیک (۲) + اتیل بنزن (۳) | ۲۹۸/۱۵ | ۶ | [۲] |
| ۴ | آب (۱) + اسید بوتریک (۲) + اتیل بنزن (۳) | ۲۹۸/۱۵ | ۶ | [۲] |
| ۵ | آب (۱) + اسید فرمیک (۲) + ایزوآمیل استات (۳) | ۲۹۸/۱۵ | ۶ | [۲۴] |
| ۶ | آب (۱) + اسید فرمیک (۲) + متیل ایزوآمیل کتون (۳) | ۲۹۸/۱۵ | ۶ | [۲۴] |
| ۷ | آب (۱) + اسید بوتریک (۲) + ایزوآمیل استات (۳) | ۲۹۸/۱۵ | ۶ | [۲۴] |
| ۸ | آب (۱) + اسید بوتریک (۲) + متیل ایزوآمیل کتون (۳) | ۲۹۸/۱۵ | ۶ | [۲۴] |
| ۹ | آب (۱) + اسید والریک (۲) + پروپیلن کرینات (۳) | ۲۹۸/۲ | ۶ | [۲۵] |
| ۱۰ | آب (۱) + اسید والریک (۲) + هپتان نرمال (۳) | ۲۹۸/۲ | ۱۱ | [۲۶] |
| ۱۱ | آب (۱) + اسید والریک (۲) + دی کلرو متان (۳) | ۲۹۸/۲ | ۷ | [۲۶] |
| ۱۲ | آب (۱) + اسید بوتریک (۲) + متیل ایزوآمیل کربونیل (۳) | ۲۹۸/۲ | ۶ | [۲۷] |
| ۱۳ | آب (۱) + اسید بوتریک (۲) + متیل ایزوآمیل کربونیل (۳) | ۳۰۸/۲ | ۶ | [۲۷] |
| ۱۴ | آب (۱) + اسید بوتریک (۲) + متیل ایزوآمیل کربونیل (۳) | ۳۱۸/۲ | ۶ | [۲۷] |
| ۱۵ | آب (۱) + اسید پروپیونیک (۲) + ۱-هپتانول (۳) | ۲۹۸/۱۵ | ۶ | [۲۸] |
| ۱۶ | آب (۱) + اسید پروپیونیک (۲) + ۱-هپتانول (۳) | ۳۰۸/۱۵ | ۶ | [۲۹] |
| ۱۷ | آب (۱) + اسید بوتریک (۲) + ۱-هپتانول (۳) | ۲۹۸/۱۵ | ۶ | [۲۹] |
| ۱۸ | آب (۱) + اسید بوتریک (۲) + ۱-اکتانول (۳) | ۳۰۸/۲ | ۶ | [۳۰] |
| ۱۹ | آب (۱) + اسید بوتریک (۲) + ۲-اتیل-۱-هگزانول (۳) | ۳۱۸/۲ | ۶ | [۳۰] |
| ۲۰ | آب (۱) + اسید بوتریک (۲) + اتیل هپتانویت (۳) | ۲۸۸/۱۵ | ۶ | [۳۰] |
| | کل سامانه‌ها | | ۱۲۶ | |

۶. نتایج و بحث

در الگوی UNIQUAC، مؤلفه‌های ساختاری r و q ترکیبات بر اساس جدول (۲) به‌کار رفته‌است [۳۵]. مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی و RMSD به‌دست‌آمده برای ۲۰ سامانه‌ی مورد بررسی با الگوهای گرمایابی مارگولس ۲- مؤلفه‌ای، مارگولس ۳- مؤلفه‌ای، ویلسون، NRTL و UNIQUAC در جدول‌های (۴) تا (۸) آمده‌است. در این جدول‌ها میانگین RMSD سامانه‌ها به‌منظور مقایسه الگوهای مختلف به‌دست آمده‌است که به‌ترتیب در الگوهای مذکور ۰/۰۲۹۸، ۰/۰۰۶۷، ۰/۰۱۱۴، ۰/۰۰۲۵ و ۰/۰۰۵۲ شده‌است. مقایسه RMSD الگوها نشان می‌دهد که ترتیب دقت الگوها به‌صورت NRTL < UNIQUAC < مارگولس ۳- مؤلفه‌ای < ویلسون < مارگولس ۲- مؤلفه‌ای است. همچنین برای مقایسه دقت تعیین مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی، RMSD الگوها به‌دست آمده با روش الگوریتم ژنتیک و با روش‌های دیگری که در مقالات، بیشتر به‌وسیله نرم‌افزار

در این مطالعه، با استفاده از الگوریتم ژنتیک مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی الگوهای گرمایابی ضریب فعالیت در استخراج مایع-مایع سامانه (آب + اسیدهای کربوکسیلیک + حلال‌های آلی) تعیین شده‌اند. برای جامعیت کار از الگوهای مختلف گرمایابی شامل مارگولس ۲- مؤلفه‌ای و ۳- مؤلفه‌ای، ویلسون، NRTL و UNIQUAC استفاده شده‌است. در سامانه‌های سه‌جزئی این الگوها به‌ترتیب دارای ۳، ۷، ۶، ۹ و ۶ مؤلفه برهم‌کنشی دوتایی است که باید مؤلفه‌های بهینه آنها به‌دست آیند. محدوده مقادیر مؤلفه‌های برهم‌کنش به‌عنوان جمعیت اولیه الگوریتم برای تمامی الگوها در بازه [۵۰۰۰، -۲۰۰۰] و محدوده مقادیر α_{ij} در الگو NRTL بر اساس پیشنهاد پرازنیتز و همکاران [۳۲] در بازه [۴/۷ - ۰/۲] در نظر گرفته شده‌است.

تعادل مایع-مایع نوع ۲ است، خط رابط داده‌های آزمایشگاهی و محاسباتی الگوهای مختلف در نمودار مثلثی شکل (۲) آورده شده است. این شکل‌ها نشان می‌دهد که به‌جز ماگولس ۲- مؤلفه‌ای که دقت کمتری دارد، الگوهای دیگر نسبتاً دقت مناسب و رضایت بخشی دارند. همچنین نمودار شاخص انتخاب‌پذیری آزمایشگاهی و محاسباتی از الگوها در شکل (۳) رسم شده است. در این شکل مشاهده می‌شود که شاخص انتخاب‌پذیری حساب‌شده به‌جز الگو ماگولس ۲- مؤلفه‌ای بقیه الگوها دقت نسبتاً خوبی دارند.

ASPEN به‌دست آورده‌اند در جدول‌های (۷) و (۸) ذکر شده است. میانگین RMSD به‌دست آمده در سامانه‌های بررسی شده با استفاده از الگوریتم ژنتیک در الگوهای NRTL و UNIQUAC به‌ترتیب ۰/۰۰۲۵ و ۰/۰۰۵۲ و میانگین RMSD آن الگوها در مقالات به‌ترتیب ۰/۰۱۲۴ و ۰/۰۱۸۱ شده است. مقایسه نتایج نشان می‌دهد که دقت تعیین مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی الگوهای گرمایی با استفاده از الگوریتم ژنتیک از روش‌های مرسوم ذکر شده در مقالات بیشتر است. به‌منظور مقایسه طرحواره‌ای دو سامانه شماره ۹ و ۱۲ از جدول (۳) که یکی از آن‌ها تعادل مایع-مایع نوع ۱ و دیگری

جدول ۴. مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی الگوی مارگولس ۲- مؤلفه‌ای به‌دست آمده در سامانه‌های سه‌جزئی مطالعه‌شده.

| RMSD | A_{12} | A_{13} | A_{23} | Sys.no |
|--------|----------|----------|----------|--------|
| ۰/۰۰۲۰ | ۱/۸۴۴۱ | ۸/۰۱۲۹ | ۰/۲۶۴۶ | ۱ |
| ۰/۰۰۳۳ | ۲/۲۱۷۹ | ۷/۱۹۷۷ | ۱/۱۰۵۶ | ۲ |
| ۰/۰۰۹۵ | ۰/۱۲۵۷ | ۶/۲۰۵۹ | ۱/۷۷۶۰ | ۳ |
| ۰/۰۲۰۸ | ۱/۵۷۷۴ | ۶/۳۵۵۳ | ۳/۶۵۴۸ | ۴ |
| ۰/۰۳۳۷ | -۲/۰۷۵۸ | ۶/۸۶۵۰ | -۲/۹۹۸۰ | ۵ |
| ۰/۰۴۱۱ | ۵/۸۹۸۰ | ۶/۳۳۸۸ | ۳/۸۰۴۱ | ۶ |
| ۰/۰۲۳۶ | -۰/۵۴۴۳ | ۶/۲۷۵۹ | ۳/۲۱۹۵ | ۷ |
| ۰/۰۳۲۸ | -۰/۰۲۷۳ | ۵/۹۰۱۹ | ۴/۰۳۲۷ | ۸ |
| ۰/۰۲۵۷ | -۰/۱۸۵۸۹ | ۳/۸۸۴۴ | ۴/۱۳۹۲ | ۹ |
| ۰/۰۳۲۰ | -۰/۲۰۹۲ | ۳/۶۷۶۷ | ۲/۵۸۸۵ | ۱۰ |
| ۰/۰۳۴۵ | ۰/۳۶۸۷ | ۳/۲۲۶۱ | ۲/۶۲۰۰ | ۱۱ |
| ۰/۰۳۶۳ | -۰/۱۰۹۳ | ۵/۳۱۳۳ | ۴/۰۸۴۵ | ۱۲ |
| ۰/۰۴۱۲ | ۰/۰۶۱۹ | ۵/۳۳۶۸ | ۴/۳۲۲۰ | ۱۳ |
| ۰/۰۴۳۷ | ۰/۱۳۶۰ | ۵/۳۶۴۶ | ۴/۴۴۶۲ | ۱۴ |
| ۰/۰۳۸۸ | -۱/۰۵۷۸ | ۵/۸۶۲۳ | ۲/۲۱۳۶ | ۱۵ |
| ۰/۰۳۹۲ | -۱/۵۸۸۶ | ۵/۷۶۹۴ | ۱/۹۱۰۰ | ۱۶ |
| ۰/۰۴۰۵ | -۰/۱۰۶۸ | ۵/۹۱۶۸ | ۴/۲۲۳۱ | ۱۷ |
| ۰/۰۳۷۷ | -۰/۱۷۷۵ | ۶/۱۷۲۱ | ۴/۱۳۲۲ | ۱۸ |
| ۰/۰۳۰۳ | ۰/۳۴۱۴ | ۶/۳۰۲۶ | ۴/۰۰۹۶ | ۱۹ |
| ۰/۰۲۹۳ | ۰/۵۴۴۷ | ۳/۵۷۰۴ | ۰/۷۱۵۵ | ۲۰ |
| ۰/۰۲۹۸ | | | میانگین | |

جدول ۵. مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی الگوی مارگولس ۳- مؤلفه‌ای به‌دست آمده در سامانه‌های سه‌جزئی مطالعه‌شده.

| RMSD | Q | A _{rr} | A _{rr} | A _{r1} | A _{r2} | A _{r1} | A _{r2} | Sys.no |
|--------|---------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|--------|
| ۰/۰۰۱۳ | -۳/۵۸۹۷ | ۱/۹۶۴۹ | ۰/۷۷۲۷ | ۶/۸۵۱۲ | ۵/۸۷۶۰ | -۰/۵۹۰۲ | -۱/۶۸۱۱ | ۱ |
| ۰/۰۰۱۶ | -۱/۰۵۵۳ | ۰/۰۳۹۳ | ۱/۸۳۷۹ | ۸/۰۰۴۱ | ۴/۸۷۶۵ | ۰/۸۹۵۴ | -۰/۵۲۸۸ | ۲ |
| ۰/۰۰۳۰ | ۴/۱۰۵۶ | ۱/۰۷۶۶ | -۰/۲۰۹۸ | ۶/۹۲۴۲ | ۴/۸۰۴۷ | ۱/۷۷۴۳ | ۳/۰۱۹۲ | ۳ |
| ۰/۰۰۸۶ | ۲/۹۱۵۴ | -۲/۷۵۳۱ | -۰/۵۵۲۱ | ۶/۴۲۷۱ | ۶/۴۷۰۴ | ۱/۷۹۲۶ | -۳/۳۷۲۸ | ۴ |
| ۰/۰۰۷۴ | ۳/۴۸۲۳ | ۰/۸۴۴۶ | -۱/۰۸۵۵ | ۷/۴۶۱۳ | -۰/۶۰۴۸ | -۰/۳۳۶۴ | -۱/۱۷۳۷ | ۵ |
| ۰/۰۰۸۹ | ۵/۷۶۷۲ | ۱/۷۴۴۹ | -۰/۸۹۴۲ | ۷/۱۵۱۹ | -۰/۶۲۲۰ | ۰/۷۵۱۸ | -۳/۷۶۶۶ | ۶ |
| ۰/۰۰۳۹ | ۴/۵۹۷۰ | ۲/۸۹۸۷ | -۳/۳۰۲۲ | ۶/۵۴۴۸ | ۰/۲۸۴۰ | ۳/۰۵۸۵ | -۱/۱۱۹۴ | ۷ |
| ۰/۰۰۲۹ | ۷/۰۹۳۹ | ۱/۴۸۱۰ | -۳/۸۳۱۰ | ۶/۱۴۹۹ | ۱/۴۶۴۹ | ۲/۲۵۵۶ | -۴/۳۵۵۵ | ۸ |
| ۰/۰۱۲۳ | ۲/۲۸۳۴ | -۰/۹۳۶۳ | -۰/۴۷۲۶ | ۳/۵۸۱۱ | ۰/۸۹۰۶ | ۳/۶۲۵۸ | ۰/۴۰۹۵ | ۹ |
| ۰/۰۰۷۳ | -۴/۰۱۶۱ | -۳/۷۲۸۰ | ۰/۰۹۲۷ | ۵/۵۹۷۹ | ۴/۵۸۳۸ | ۲/۹۹۴۱ | -۱/۲۴۰۶ | ۱۰ |
| ۰/۰۰۴۳ | -۱/۷۳۷۸ | -۴/۶۷۵۴ | ۲/۱۲۳۹ | ۴/۸۰۲۴ | ۴/۲۵۰۷ | ۲/۷۶۱۸ | -۳/۶۴۶۷ | ۱۱ |
| ۰/۰۰۶۰ | ۱/۹۶۲۷ | ۰/۹۲۳۱ | -۲/۷۴۴۷ | ۴/۸۳۶۳ | -۰/۷۹۷۶ | ۲/۴۱۹۹ | -۵/۲۲۸۵ | ۱۲ |
| ۰/۰۰۹۱ | ۶/۶۰۹۹ | ۱/۸۳۰۰ | -۱/۰۸۳۸ | ۴/۹۹۸۸ | ۰/۵۴۲۵ | ۲/۱۱۵۹ | -۵/۲۵۹۴ | ۱۳ |
| ۰/۰۰۹۰ | ۸/۸۶۴۴ | ۴/۱۱۸۲ | -۵/۳۷۳۹ | ۴/۵۰۶۳ | -۰/۱۴۳۳ | ۱/۷۳۰۴ | -۶/۵۸۹۲ | ۱۴ |
| ۰/۰۱۳۰ | ۶/۸۲۵۴ | ۲/۰۰۴۵ | -۳/۲۶۵۱ | ۴/۶۱۷۴ | -۲/۶۹۲۲ | ۱/۵۵۸۶ | -۱/۶۴۱۳ | ۱۵ |
| ۰/۰۱۱۱ | ۱۱/۳۴۸۰ | ۵/۲۴۵۸ | -۱/۸۶۱۲ | ۴/۸۶۲۲ | -۱/۷۰۳۹ | ۲/۲۱۴۴ | ۱/۵۳۹۵ | ۱۶ |
| ۰/۰۰۶۵ | ۷/۳۰۱۲ | ۳/۲۸۶۹ | -۲/۹۹۳۷ | ۵/۱۲۹۶ | -۲/۰۷۲۳ | ۲/۵۳۴۰ | -۴/۱۶۵۵ | ۱۷ |
| ۰/۰۰۵۵ | ۸/۶۲۱۰ | ۱/۹۳۰۹ | -۵/۰۵۱۳ | ۵/۳۸۱۹ | -۰/۶۴۳۶ | ۲/۲۵۳۳ | -۴/۱۵۷۸ | ۱۸ |
| ۰/۰۰۴۶ | ۷/۱۰۶۰ | ۲/۳۳۸۶ | -۴/۱۹۵۵ | ۶/۱۲۵۴ | ۱/۰۹۴۸ | ۲/۶۹۳۲ | -۲/۷۲۴۲ | ۱۹ |
| ۰/۰۰۷۳ | -۱/۳۴۵۱ | ۱/۸۲۰۳ | -۰/۶۸۵۷ | ۵/۲۶۱۲ | ۱/۵۴۴۲ | ۰/۷۰۲۰ | ۱/۵۵۰۷ | ۲۰ |
| ۰/۰۰۶۷ | | | | میانگین | | | | |

جدول ۶. مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی الگوی ویلسون به‌دست آمده در سامانه‌های سه‌جزئی این مطالعه.

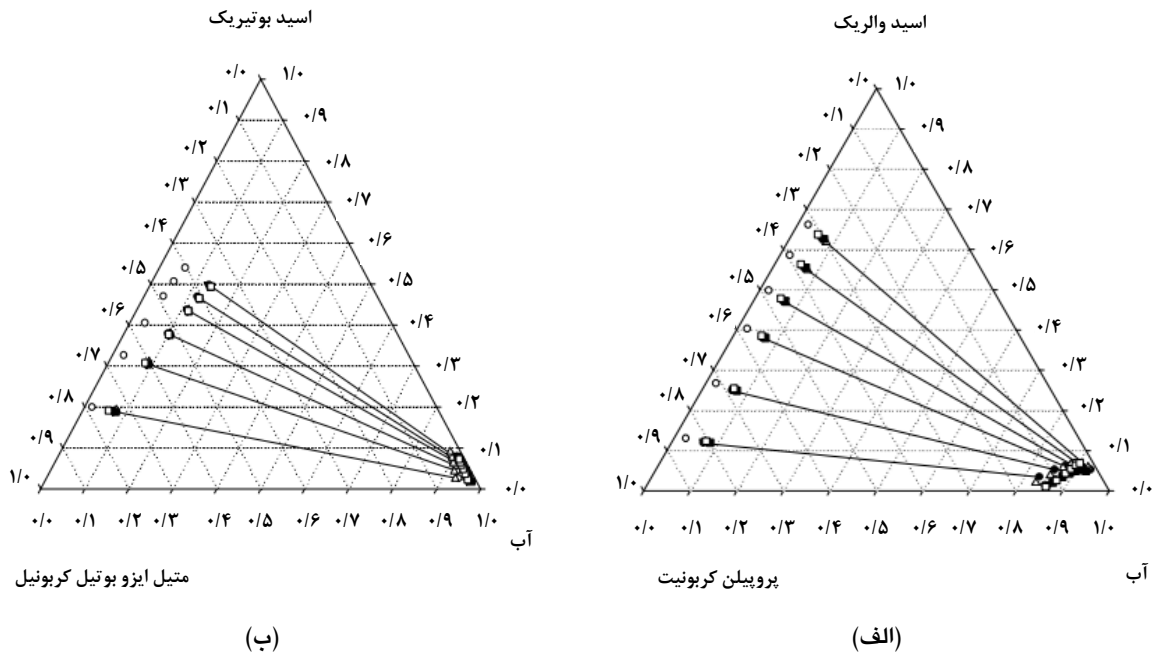
| RMSD | A _{rr} | A _{rr} | A _{r1} | A _{r2} | A _{r1} | A _{r2} | Sys.no |
|--------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|--------|
| ۰/۰۱۴۱ | ۰/۰۰۴۷ | ۰/۰۰۰۳ | ۱/۷۰۲۰ | ۱/۶۳۱۷ | ۰/۰۱۳۸ | ۳/۵۱۷۵ | ۱ |
| ۰/۰۰۴۶ | ۰/۰۰۴۸ | ۰/۰۰۰۳ | ۱/۱۴۶۰ | ۲/۸۵۶۲ | ۰/۰۰۰۵ | ۰/۵۹۴۱ | ۲ |
| ۰/۰۱۳۵ | ۰/۰۷۲۸ | ۰/۰۰۰۱ | ۳/۳۷۵۲ | ۰/۳۳۸۶ | ۰/۰۲۱۴ | ۰/۲۵۴۰ | ۳ |
| ۰/۰۰۲۸ | ۰/۱۴۵۸ | ۰/۰۰۰۱ | ۰/۳۳۴۰ | ۰/۰۱۷۸ | ۰/۰۱۴۰ | ۰/۰۱۵۶ | ۴ |
| ۰/۰۰۹۳ | ۰/۰۱۶۶ | ۰/۰۰۰۴ | ۰/۵۰۷۲ | ۰/۱۵۱۴ | ۰/۱۶۲۲ | ۰/۶۰۵۵ | ۵ |
| ۰/۰۱۸۱ | ۰/۰۰۸۹ | ۰/۰۰۲۵ | ۴/۴۳۲۲ | ۲/۲۴۷۶ | ۰/۲۲۰۶ | ۰/۰۱۴۵ | ۶ |
| ۰/۰۳۱۲ | ۵/۵۸۱۸ | ۰/۰۰۰۷ | ۰/۸۸۳۰ | ۰/۳۶۱۴ | ۰/۰۴۲۲ | ۰/۰۹۴۰ | ۷ |
| ۰/۰۲۱۲ | ۸/۶۵۶۰ | ۰/۰۰۰۵ | ۶/۲۵۲۷ | ۰/۱۴۰۳ | ۰/۰۶۴۲ | ۰/۱۹۲۹ | ۸ |
| ۰/۰۰۱۲ | ۰/۷۶۰۶ | ۰/۰۰۰۱ | ۰/۲۷۶۳ | ۰/۰۰۵۷ | ۰/۰۰۶۷ | ۰/۰۱۰۸ | ۹ |
| ۰/۰۰۲۹ | ۰/۸۰۵۷ | ۰/۰۱۱۳ | ۱/۷۱۸۸ | ۰/۰۱۶۳ | ۰/۰۱۵۷ | ۰/۰۲۳۳ | ۱۰ |
| ۰/۰۰۱۳ | ۷/۳۶۸۸ | ۰/۰۰۰۶ | ۳/۱۹۶۷ | ۰/۰۰۳۵ | ۰/۰۱۴۱ | ۰/۰۲۳۲ | ۱۱ |
| ۰/۰۱۱۵ | ۷/۱۰۱۹ | ۰/۰۰۰۱ | ۴/۹۵۹۸ | ۰/۰۹۸۶ | ۰/۰۲۶۸ | ۰/۰۸۳۲ | ۱۲ |
| ۰/۰۱۱۴ | ۷/۱۶۷۷ | ۰/۰۰۱۴ | ۱۱/۴۹۰۳ | ۰/۱۳۹۱ | ۰/۰۵۹۹ | ۰/۰۳۵۵ | ۱۳ |
| ۰/۰۱۰۶ | ۸/۵۱۷۰ | ۰/۰۰۰۱ | ۶/۳۳۶۶ | ۰/۰۷۴۶ | ۰/۰۸۹۷ | ۰/۰۳۳۶ | ۱۴ |
| ۰/۰۱۲۰ | ۰/۳۶۹۶ | ۰/۰۰۰۱ | ۱/۳۷۳۱ | ۰/۱۱۱۶ | ۰/۰۹۷۵ | ۰/۱۶۹۷ | ۱۵ |
| ۰/۰۱۰۸ | ۰/۰۳۱۲ | ۰/۰۰۰۱ | ۱/۷۵۸۹ | ۰/۰۴۰۴ | ۰/۰۰۶۲ | ۱/۱۴۱۳ | ۱۶ |
| ۰/۰۰۵۲ | ۰/۳۶۸۲ | ۰/۰۰۰۱ | ۰/۲۳۱۰ | ۰/۰۰۶۰ | ۰/۰۳۱۹ | ۰/۴۲۴۰ | ۱۷ |
| ۰/۰۱۸۵ | ۵/۳۳۶۸ | ۰/۰۰۲۲ | ۹/۰۶۹۰ | ۰/۱۷۰۲ | ۰/۰۴۵۵ | ۰/۰۸۱۵ | ۱۸ |
| ۰/۰۲۲۰ | ۶/۷۱۲۷ | ۰/۰۰۰۱ | ۱۰/۸۵۵۷ | ۰/۲۵۳۹ | ۰/۰۳۹۰ | ۰/۰۴۷۵ | ۱۹ |
| ۰/۰۰۶۷ | ۰/۰۱۸۸ | ۰/۰۰۲۷ | ۳/۹۱۴۶ | ۲/۲۲۷۶ | ۰/۰۱۱۶ | ۰/۰۱۳۲ | ۲۰ |
| ۰/۰۱۱۴ | میانگین | | | | | | |

جدول ۷. مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی الگوی NRTL به‌دست آمده در سامانه‌های سه‌جزئی این مطالعه.

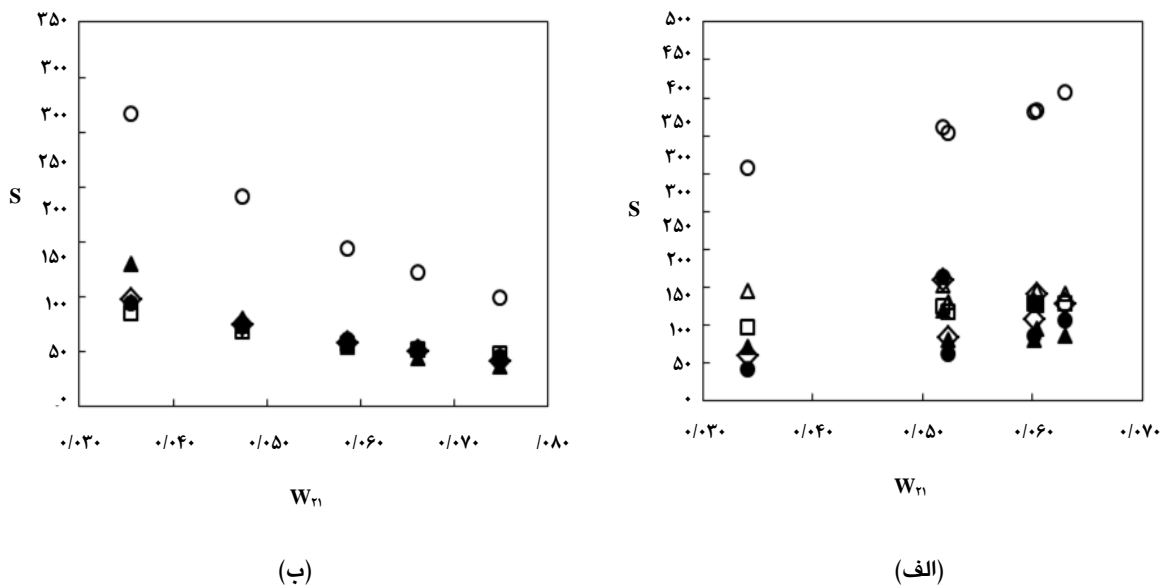
| RMSD _{lit} | RMSD | α_{rr} | α_{1r} | α_{1r} | A_{rr} | A_{rr} | A_{r1} | A_{1r} | A_{r1} | A_{1r} | Sys.no |
|---------------------|--------|---------------|---------------|---------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|---------|
| ۰/۰۰۴۰ | ۰/۰۰۱۲ | ۰/۳۹۹۹ | ۰/۴۱۰۸ | ۰/۳۲۲۸ | ۶۳۷/۱ | ۱۶۶۳/۲ | ۱۵۹۸/۹ | ۲۵۰۹/۳ | ۱۶۹۵/۶ | ۸۳۴/۷ | ۱ |
| ۰/۰۱۶۳ | ۰/۰۰۳۵ | ۰/۳۶۰۰ | ۰/۴۳۵۴ | ۰/۳۸۶۹ | ۱۱۸۵/۴ | ۱۷۷۳/۰ | ۳۰۱۰/۳ | ۶۶۰/۸ | ۱۶۹۲/۳ | ۷۸۹/۱ | ۲ |
| ۰/۰۱۴۰ | ۰/۰۰۲۴ | ۰/۳۲۸۸ | ۰/۳۸۲۳ | ۰/۳۷۶۶ | ۵۷۵/۹ | ۱۷۴۶/۲ | ۱۰۸۲/۳ | ۱۰۷۶/۹ | ۲۵۲۰/۸ | ۹۹۷/۸ | ۳ |
| ۰/۰۱۴۴ | ۰/۰۰۱۶ | ۰/۳۴۸۴ | ۰/۳۵۷۰ | ۰/۳۷۰۸ | ۲۱۳۷/۷ | ۲۴۳۶/۰ | ۶۱۲/۰ | ۱۱۸۶/۶ | ۲۷۳۶/۶ | ۱۰۰۱/۴ | ۴ |
| ۰/۰۱۳۵ | ۰/۰۰۴۶ | ۰/۳۳۰۵ | ۰/۳۴۵۷ | ۰/۳۸۶۵ | ۱۲۵۹/۲ | ۱۴۳۰/۶ | ۴۴۸/۸ | ۳۱۱/۷ | ۱۹۱۱/۸ | ۱۰۵۱/۰ | ۵ |
| ۰/۰۱۲۷ | ۰/۰۰۲۹ | ۰/۳۵۳۵ | ۰/۳۹۴۷ | ۰/۳۸۹۱ | ۳۰۹۰/۵ | ۲۲۵۱/۷ | ۶۵۱/۳ | -۱۶۵/۳ | ۳۰۰۴/۴ | ۱۱۴۸/۱ | ۶ |
| ۰/۰۰۹۹ | ۰/۰۰۰۹ | ۰/۳۶۲۴ | ۰/۲۸۵۷ | ۰/۳۵۴۴ | ۱۸۱۲/۵ | ۲۵۸۰/۴ | ۱۰۱۶/۲ | ۲۰۴۳/۳ | ۲۴۷۷/۱ | ۱۳۷۲/۹ | ۷ |
| ۰/۰۱۹۶ | ۰/۰۰۰۶ | ۰/۴۷۰۰ | ۰/۳۶۰۹ | ۰/۳۴۷۵ | ۲۸۷۹/۹ | ۱۶۷۶/۷ | ۲۴۵/۵ | ۱۸۷۳/۸ | ۲۳۷۵/۹ | ۱۱۲۲/۲ | ۸ |
| ۰/۰۴۰۰ | ۰/۰۰۸۶ | ۰/۴۷۰۰ | ۰/۴۳۰۲ | ۰/۳۹۱۵ | ۲۱۷۶/۸ | ۱۱۹۹/۱ | -۶۴/۲ | ۱۳۷۹/۳ | ۱۲۲۸/۹ | ۱۱۱۴/۳ | ۹ |
| ۰/۰۱۳۶ | ۰/۰۰۲۳ | ۰/۳۵۹۷ | ۰/۳۸۴۸ | ۰/۳۶۱۹ | ۱۰۶۳/۹ | ۳۰۴۶/۱ | ۳۰۰۲/۸ | ۱۲۲۶/۲ | ۲۲۲۵/۴ | ۱۶۰۳/۹ | ۱۰ |
| ۰/۰۰۷۰ | ۰/۰۰۲۲ | ۰/۲۸۶۲ | ۰/۳۰۸۸ | ۰/۳۴۶۵ | ۲۵۵۸/۷ | ۱۳۷۴/۵ | ۱۲۳۱/۶ | ۱۰۲/۸ | ۱۶۹۰/۸ | ۱۶۰۱/۵ | ۱۱ |
| ۰/۰۰۴۴ | ۰/۰۰۰۷ | ۰/۳۴۷۰ | ۰/۳۵۴۵ | ۰/۳۵۸۱ | ۲۵۸۳/۸ | ۱۵۹۵/۳ | ۸۸/۴ | ۲۰۵۵/۰ | ۱۶۶۸/۷ | ۱۱۷۴/۲ | ۱۲ |
| ۰/۰۰۴۴ | ۰/۰۰۱۶ | ۰/۳۷۳۸ | ۰/۳۳۶۴ | ۰/۳۵۳۹ | ۵۲۲/۸ | ۱۷۳۸/۴ | ۱۵۹۰/۰ | ۲۵۶۷/۷ | ۱۶۸۲/۲ | ۱۶۴۸/۸ | ۱۳ |
| ۰/۰۰۴۴ | ۰/۰۰۱۳ | ۰/۳۲۸۳ | ۰/۳۱۴۹ | ۰/۳۷۳۴ | ۷۱/۸ | ۲۴۱۹/۷ | ۲۳۷۴/۳ | ۲۲۶۳/۳ | ۱۶۶۱/۴ | ۱۵۴۹/۰ | ۱۴ |
| ۰/۰۰۹۱ | ۰/۰۰۳۷ | ۰/۲۸۳۹ | ۰/۳۳۷۵ | ۰/۳۸۹۳ | ۴۴۶/۰ | ۱۱۵۴/۴ | ۹۵۹/۹ | ۱۶۷۳/۵ | ۲۱۴۶/۵ | ۱۴۰۵/۲ | ۱۵ |
| ۰/۰۰۹۱ | ۰/۰۰۲۴ | ۰/۳۰۵۲ | ۰/۳۳۳۶ | ۰/۴۲۵۸ | ۹۷۰/۹ | ۱۴۰۶/۳ | ۱۲۴۱/۱ | ۱۵۰۳/۲ | ۳۰۱۹/۱ | ۱۵۵۶/۶ | ۱۶ |
| ۰/۰۱۷۱ | ۰/۰۰۲۲ | ۰/۳۰۳۸ | ۰/۲۸۵۹ | ۰/۴۱۶۷ | ۲۲۷۹/۸ | ۱۰۶۱/۴ | ۱۸۱۱/۱ | ۲۱۳۴/۲ | ۳۴۳۲/۵ | ۱۵۹۲/۸ | ۱۷ |
| ۰/۰۱۶۷ | ۰/۰۰۱۹ | ۰/۳۵۷۲ | ۰/۳۲۴۸ | ۰/۴۳۱۳ | -۲۹۶/۹ | ۱۰۱۶/۸ | ۱۲۹۰/۶ | ۱۲۱۹/۳ | ۲۷۵۵/۵ | ۱۱۶۶/۴ | ۱۸ |
| ۰/۰۰۵۱ | ۰/۰۰۰۷ | ۰/۳۷۷۵ | ۰/۳۳۳۳ | ۰/۳۷۹۰ | ۲۷۷۲/۵ | ۱۷۴۸/۸ | ۹۱۹/۳ | ۲۴۲۸/۳ | ۲۳۵۶/۶ | ۱۵۵۰/۴ | ۱۹ |
| | ۰/۰۰۵۸ | ۰/۳۸۸۰ | ۰/۳۴۲۱ | ۰/۳۹۱۶ | ۱۲۲۵/۳ | ۱۲۵۴/۵ | ۴۰۹۵/۶ | ۱۷۸۵/۵ | ۲۴۵۶/۰ | ۱۳۰۹/۸ | ۲۰ |
| ۰/۰۱۲۴ | ۰/۰۰۲۵ | | | | | | | | | | میانگین |

جدول ۸. مؤلفه‌های برهم‌کنش دوتایی الگوی UNIQUAC به‌دست آمده در سامانه‌های سه‌جزئی این مطالعه.

| RMSD _{lit} | RMSD | A_{rr} | A_{rr} | A_{r1} | A_{1r} | A_{r1} | A_{1r} | Sys.no |
|---------------------|--------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|---------|
| ۰/۰۰۳۱ | ۰/۰۰۲۴ | ۱۹/۸ | ۱۲۲۸/۰ | ۹۰۹/۱ | -۴۰۴/۹ | ۲۸۰/۶ | ۱۲۹۷/۹ | ۱ |
| ۰/۰۰۹۷ | ۰/۰۰۱۴ | ۱۵۲۸/۳ | ۹۱۱/۹ | -۱۱۶/۱ | ۷۰۴/۲ | ۳۸۶/۸ | ۴۹۷/۳ | ۲ |
| ۰/۰۲۲۸ | ۰/۰۰۷۶ | -۸۶/۸ | ۳۲۱/۳ | ۱۵۹۰/۸ | ۶۰۷/۴ | ۱۳۵۶/۳ | ۴۵/۸ | ۳ |
| ۰/۰۰۷۸ | ۰/۰۰۵۵ | ۶۹۱/۸ | ۱۵۶۲/۷ | -۲۶۴/۸ | -۱۶۶/۷ | ۶۹۹/۳ | ۴۱۳/۸ | ۴ |
| ۰/۰۱۸۴ | ۰/۰۰۸۵ | ۸۹۵/۸ | ۷۶۲/۶ | ۲۰۱/۶ | ۱۰۵۸/۰ | ۵۹/۰ | ۴۵۱/۹ | ۵ |
| ۰/۰۱۳۴ | ۰/۰۰۸۱ | ۵۹۷/۱ | ۸۲۵/۰ | ۱۶۲/۴ | ۱۷۳۲/۱ | ۱۰۶/۷ | ۳۷۹/۱ | ۶ |
| ۰/۰۲۲۷ | ۰/۰۰۵۵ | ۵۴۵/۰ | ۱۲۴۷/۲ | ۱۱۳۵/۸ | -۱۸۸/۶ | ۹۴۸/۳ | ۱۱۵۵/۹ | ۷ |
| ۰/۰۰۳۰۹ | ۰/۰۰۴۸ | ۱۳۷۴/۴ | ۱۴۵۹/۹ | -۳۰۹/۹ | -۲۸/۳ | ۱۱۴۷/۹ | ۲۳۶/۴ | ۸ |
| ۰/۰۳۳۶ | ۰/۰۱۱۸ | ۱۱۰۵/۲ | ۹۲۱/۷ | -۲۸۵/۳ | ۲۴۲/۰ | ۴/۲ | ۴۰/۵ | ۹ |
| ۰/۰۲۱۹ | ۰/۰۰۵۷ | -۸۷/۴ | ۱۳۷۲/۹ | -۵۸۸/۴ | ۱۷۵/۵ | ۴۳۱/۳ | ۵۰/۸ | ۱۰ |
| | ۰/۰۰۴۴ | -۲۲۹/۲ | ۱۷۳۴/۶ | ۱۰۹/۹ | ۵۶/۹ | ۸۹۰/۵ | ۱۵۶/۹ | ۱۱ |
| ۰/۰۱۲۴ | ۰/۰۰۱۸ | -۳۱۵/۹ | ۷۴۴/۲ | ۱۶۰۳/۹ | ۱۲۵۴/۰ | ۱۰/۹ | -۳۵/۴ | ۱۲ |
| ۰/۰۱۲۴ | ۰/۰۰۴۳ | ۱۱۵۴/۸ | ۲۳۷۴/۵ | -۲۷۲/۰ | ۱۰/۶ | ۲۴/۶ | ۱۹۹/۹ | ۱۳ |
| ۰/۰۱۲۴ | ۰/۰۰۳۱ | ۱۳۶۸/۰ | ۹۴۴/۶ | -۲۸۶/۹ | ۴۰/۹ | ۴۳/۱ | ۱۸۰/۹ | ۱۴ |
| ۰/۰۱۶۹ | ۰/۰۰۵۰ | ۱۲۶۴/۱ | ۶۲۲/۳ | -۳۱۰/۱ | ۱۰۲۳/۹ | ۹۲۳/۷ | -۲۵۲/۸ | ۱۵ |
| ۰/۰۱۶۹ | ۰/۰۰۳۵ | ۱۸۱۴/۱ | ۱۰۲۷/۹ | -۳۴۵/۴ | ۸۸۷/۸ | ۱۰۱/۴ | -۲۲۶/۹ | ۱۶ |
| ۰/۰۲۵۳ | ۰/۰۰۵۰ | ۱۲۲۰/۵ | ۵۱۱/۱ | -۲۶۰/۸ | ۱۳۸۰/۷ | ۱۰۱۳/۲ | -۴۴/۹ | ۱۷ |
| ۰/۰۲۹۸ | ۰/۰۰۴۲ | ۱۲۲۳/۲ | ۵۸۲/۹ | -۲۹۱/۷ | ۱۲۱۴/۹ | ۱۱۳۳/۹ | -۶۸/۰ | ۱۸ |
| ۰/۰۲۵۹ | ۰/۰۰۴۲ | ۵۹۰/۵ | ۵۹۷/۳ | -۲۶۲/۶ | ۱۲۲۱/۰ | ۸۱۰/۷ | -۷۲/۳ | ۱۹ |
| ۰/۰۰۷۰ | ۰/۰۰۶۷ | ۸۹/۱ | ۵۳۲/۷ | ۶/۲ | ۱۱۰۲/۶ | ۹۰۲/۷ | -۳۰۲/۲ | ۲۰ |
| ۰/۰۱۸۱ | ۰/۰۰۵۲ | | | | | | | میانگین |



شکل ۲. نمودار مثلثی خطوط رابط LLE داده‌های آزمایشگاهی و تعیین شده با الگوهای گرمایی برای سامانه سه جزئی (الف) شماره ۹ و (ب) شماره ۱۲ از جدول (۳): (●) داده‌های آزمایشگاهی، (○) مارگولس ۲- مؤلفه‌ای، (▼) مارگولس ۳- مؤلفه‌ای، (Δ) ویلسون، (■) NRTL و (□) UNIQUAC.



شکل ۳. نمودار شاخص انتخاب‌پذیری داده‌های آزمایشگاهی و تعیین شده با الگوهای گرمایی برای سامانه سه جزئی (الف) شماره ۹ و (ب) شماره ۱۲ از جدول (۳): (●) داده‌های آزمایشگاهی، (○) مارگولس ۲- مؤلفه‌ای، (□) مارگولس ۳- مؤلفه‌ای، (▲) ویلسون، (◇) NRTL و (Δ) UNIQUAC.

- [5] Matlock, M. M., Werton, B. S., Atwood, D. A., "Chemical precipitation of heavy metals from acid mine drainage". *Journal of Water Research*, 36: pp. 4757-4764 (2002).
- [6] Hunsom, M., Pruksathorn, K., Damronglerd, S., Vergnes, H., Duverneuil, P., "Electrochemical treatment of heavy metals (Cu 2+, Cr 6+, Ni 2+) from industrial effluent and modeling of copper reduction". *Journal of Water Research*, 39: pp. 610-616 (2005).
- [7] Maturana, H. A., Peric, I. M., Rivas, B. L., Pooley, S. A., "Interaction of heavy metal ions with an ion exchange resin obtained from a natural polyelectrolyte". *Journal of Polymer Bulletin*, 67: pp. 669-676 (2011).
- [8] Lintomen, L., Pinto, R. T. P., Batista, E., Meirelles, A. J. A., Maciel, M. R. W., "Liquid-Liquid Equilibrium of the Water + Citric Acid + 2-Butanol + Sodium Chloride System at 298.15 K". *Journal of Chemical & Engineering Data*, 45: pp. 1211-1214 (2000).
- [9] Lintomen, L., Pinto, R. T. P., Batista, E., Meirelles, A. J. A., Maciel, M. R. W., "Liquid-Liquid Equilibrium of the Water + Citric Acid + Short Chain Alcohol + Tricaprylin System at 298.15 K". *Journal of Chemical & Engineering Data*, 46: pp. 546-550 (2001).
- [10] Wu, X. M., Guo, H., Soyekwo, F., Zhang, Q. G., Lin, C. X., Liu, Q. L., Zhu, A. M., "Pervaporation Purification of Ethylene Glycol Using the Highly Permeable PIM-1 Membrane". *Journal of Chemical & Engineering Data*, 46: pp. 579-586 (2016).
- [11] Yu, L., Zhou, W., Li, Y., Zhou, Q., Xu, H., Gao, B., Wang, Zh., "Antibacterial Thin-Film Nanocomposite Membranes Incorporated with Graphene Oxide Quantum Dot Mediated Silver Nanoparticles for Reverse Osmosis Application". *Journal of Sustainable Chemistry & Engineering*, 7: pp. 8724-8734 (2019).
- [12] González, E. J., Calvar, N., Gómez, E., Domínguez, Á., "Application of [EMim][ESO 4] ionic liquid as solvent in the extraction of toluene from cycloalkanes: Study of liquid-liquid equilibria at T= 298.15 K". *Journal of Fluid Phase Equilibria*, 303: pp. 174-179 (2011).
- [13] Calvar, N., Domínguez, I., Gómez, E., Domínguez, Á., "Separation of binary mixtures aromatic+ aliphatic using ionic liquids: Influence of the structure of the ionic liquid, aromatic and aliphatic". *Journal of Chemical & Engineering Data*, 175: pp. 213-221 (2011).
- [14] Fandary, M. S., Alkhalidi, K. H., Al-Jimaz, A. S., Al-Rashed, M. H., AlTuwaim, M. S., "Evaluation of [bmim] [PF 6] as an ionic solvent for the extraction of propylbenzene from aliphatic compounds". *Journal of Chemical Thermodynamics*, 54: pp. 322-329 (2012).

۷. نتیجه‌گیری کلی

محاسبات تعادل مایع-مایع سه‌جزئی برای ۲۰ سامانه (آب + اسیدهای کربوکسیلیک + حلال‌های آلی) بر اساس محاسبات فلش با استفاده از ۵ الگوی ضریب فعالیت، شامل مارگولس ۲- مؤلفه‌ای، مارگولس ۳- مؤلفه‌ای، ویلسون، NRTL و UNIQUAC انجام شد. محاسبه مؤلفه‌های برهم‌کنش الگوها با استفاده از الگوریتم ژنتیک مبتنی بر انتخاب طبیعی و تصادفی جمعیت و بدون نیاز به حدس اولیه، انجام شد. مؤلفه‌های برهم‌کنش الگوها و RMSD آن‌ها برای این سامانه‌ها گزارش شده‌است. نتایج میانگین RMSD برای ۱۲۶ خط رابط به ترتیب الگوهای مذکور ۰/۰۲۹۸، ۰/۰۰۶۷، ۰/۰۱۱۴، ۰/۰۰۲۵ و ۰/۰۰۵۲ شده‌است. نتایج به‌دست‌آمده حاکی از این است که دقت پیش‌بینی رفتارهای فازی و خط رابط برای این سامانه‌ها با الگوها به ترتیب NRTL < UNIQUAC < مارگولس ۳- مؤلفه‌ای < ویلسون < مارگولس ۲- مؤلفه‌ای است، در الگوسازی این سامانه‌ها به‌جز مارگولس ۲- مؤلفه‌ای که دقت کمتری دارد، مابقی الگوها دقت نسبتاً خوبی دارند. میانگین RMSD مقالات در الگوهای NRTL و UNIQUAC به ترتیب الگوها از ۰/۰۱۲۴ و ۰/۰۱۸۱ به ۰/۰۰۲۵ و ۰/۰۰۵۲ بهبود یافتند و نتایج نشان می‌دهد روش الگوریتم ژنتیک یک روش دقیق‌تر و قابل‌اعتمادتر در مقایسه با سایر روش‌های سنتی گزارش شده در مقالات است.

مراجع

- [1] Ghanadzadeh, H., Ghanadzadeh, A., Sangashekan M., "Tie-line data for the aqueous solutions of phenol with organic solvents at T = 298.2 K". *Journal of Chemical Thermodynamics*, 58: pp. 142-148 (2013).
- [2] Seyed Shekarsaraee, S. L., Ghanadzadeh, A., Ghanadzadeh, H., Kashef, A., Fallahi, S., "Liquid Phase Equilibria of Aqueous Mixtures of Carboxylic Acids (C1-C4) with Ethylbenzene: Thermodynamic and Mathematical Modelling". *Journal of Chemical & Engineering Data*, 61: pp. 3391-3397 (2016).
- [3] Ghanadzadeh, A., Azadian, M., "Tie-line data for water-formic acid-1-decanol ternary system at T = 298.2, 303.2, 313.2, and 323.2 K". *Journal of Thermochemica Acta*, 547: pp. 141-145 (2012).
- [4] Sangashekan, M., Asan, Sh., Ghanadzadeh, H., "Investigation of Eosin B Removal from Aqueous Solution Employing Combined Graphene Oxide Adsorption and Zinc Oxide Coagulation Processes". *Journal of Fibers and Polymers*, 20: pp. 1411-1417 (2019).

- [15] Corderi, S., Calvar, N., Gómez, E., Domínguez, A., "Capacity of ionic liquids[EMim][NTf₂] and [EMpy][NTf₂] for extraction of toluene from mixtures with alkanes: Comparative study of the effect of the cation". *Journal of Fluid Phase Equilibria*, 315: pp. 46–52 (2012).
- [16] Sahoo, R. K., Banerjee, T., Ahmad, S. A., Khanna, A., "Improved binary parameters using GA for multi-component aromatic extraction: NRTL model without and with closure equations". *Journal of Fluid Phase Equilibria*, 239: pp. 107–119 (2006).
- [17] Singh, M. K., Banerjee, T., Khanna, A., "Genetic algorithm to estimate interaction parameters of multicomponent systems for liquid–liquid equilibria". *Journal of Computers & Chemical Engineering*, 29: pp. 1712–1719 (2005).
- [18] Sahoo, R. K., Banerjee, T., Khanna, A., "UNIQUAC Interaction Parameters with Closure for Imidazolium Based Ionic Liquid Systems Using Genetic Algorithm". *Canadian Journal of Chemical Engineering*, 85: pp. 833–840 (2007).
- [19] Rashtchian, D., Ovaysi, S., Taghikhani, V., Ghotbi, C., "Application of the Genetic Algorithm to Calculate the Interaction Parameters for Multiphase and Multicomponent Systems". *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering*, 26: pp. 89–96 (2007).
- [20] Alvarez, V. H., Larico, R., Ianos, Y., Aznar, M., "Parameter estimation for VLE calculation by global minimization: the genetic algorithm". *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 25: pp. 409–416 (2008).
- [21] Vatani, M., Asghari, M., Vakili-Nezhaad, Gh., "Application of Genetic Algorithm to the calculation of parameters for NRTL and Two-Suffix Margules models in ternary extraction ionic liquid systems". *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 18: pp. 1715–1720 (2012).
- [22] Kabouche, A., Boulif, A., Abidi, A., Gherraf, N., "Interaction parameter estimation in liquid–liquid phase equilibrium modeling using stochastic and hybrid algorithms". *Journal of Fluid Phase Equilibria*, 336: pp. 113–121 (2012).
- [23] Asgarpour, M., Hallaji, A., "Using genetic algorithm (GA) and particle swarm optimization (PSO) methods for determination of interaction parameters in multicomponent systems of liquid–liquid equilibria". *Journal of Fluid Phase Equilibria*, 365: pp. 141–145 (2014).
- [24] Ghanadzadeh, H., Ghanadzadeh, A., Saadat, S. L. S., "Experimental and Correlational Study of Phase Equilibria in Aqueous Solutions of Formic and Butyric Acids with Isoamyl Acetate and Methyl Isoamyl Ketone at T = 298.15 K". *Journal of Chemical & Engineering Data*, 59: pp. 917–925 (2014).
- [25] Shekarsaraee, S., mohamadizad, F., "Liquid-Liquid Equilibria for the aqueous mixture of C5 carboxylic acids and heavier than water solvents at T = 298.2 K". *Journal of Chemical Thermodynamics*, 118: pp. 316–324 (2017).
- [26] Choe, J., Kim, I., Kim, S. Y., Song, K. H., "Liquid–Liquid Equilibria for the Ternary Systems Water + n-Pentanoic Acid with n-Heptane or Dichloromethane at 298.2 K". *Journal of Chemical & Engineering Data*, 53: pp. 1199–1202 (2008).
- [27] Ghanadzadeh, A., Amouzadeh, F., Ghalami, B., "A comparative study of liquid–liquid equilibria for aqueous mixtures of straight chain and branched chain carboxylic acids with methyl isobutyl carbinol". *Journal of Chemical Thermodynamics*, 143: pp. 16–26 (2020).
- [28] Ghanadzadeh, A., Ghanadzadeh, H., Saadat, S. L. S., Nasiri-Touli, E., Peer, M., "Liquid-liquid equilibrium data in aqueous solutions of propionic and butyric acids with 1-heptanol at T = (298.15, 308.15, and 318.15) K". *Korean Journal of Chemical Engineering*, 33: pp. 1408–1415 (2016).
- [29] Ghanadzadeh, A., Ghanadzadeh, H., Saadat, S. L. S., "Solubility and tie line data for the aqueous solutions of butyric acid with 1-octanol and 2-ethyl-1-hexanol at various temperatures". *Journal of Fluid Phase Equilibria*, 361: pp. 45–53 (2014).
- [30] Demirel, C., Cehreli, S., "Phase equilibrium of (water + formic or acetic acid + ethyl heptanoate) ternary liquid systems at different temperatures". *Journal of Fluid Phase Equilibria*, 356: pp. 71–77 (2013).
- [31] Seader, J. D., Henley, E. J., "Separation Process Principles". 2nd ed., John Wiley & Sons, Inc, New York, USA (2006).
- [32] Prausnitz, J. M., Lechenthaler, R. N., Azevedo, E. G., "Molecular Thermodynamics of Fluid Phase Equilibria". 3rd ed., Prentice-Hall, New York, USA (1999).
- [33] Melanie, M., "An introduction to genetic algorithms". 2nd ed., MIT Press, Cambridge, London, England (1998).
- [34] Alvarez, V. H., Larico, R., Ianos, Y., Aznar, M., "PARAMETER ESTIMATION FOR VLE CALCULATION BY GLOBAL MINIMIZATION: THE GENETIC ALGORITHM". *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 25: pp. 409–418 (2008).
- [35] Bondi A., "Physical Properties of Molecular Crystals Liquids and Glasses". 3rd ed., John Wiley and Sons Inc, New York, USA (1968).