

مدل سازی هوش مصنوعی جداسازی ترکیب های گوگردی از دیزل توسط فرایند تراوش تبخیری

مجتبی راجی، امیر دشتی

دانشکده مهندسی، دانشگاه کاشان، کاشان، ایران

ماشاء الله رضا کاظمی⁺*

دانشکده مهندسی شیمی و مواد، دانشگاه صنعتی شاهرود، شاهرود، ایران

نسبیه حاجیلری

گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی، دانشگاه گلستان، گرگان، ایران

چکیده: در این پژوهش، به مدل سازی و بررسی فرایند گوگردزدایی با روش غشایی از ترکیب دیزل موجود در پالایشگاه اصفهان با استفاده از فرایند غشایی پرداخته شد. برای مدل سازی پارامترهای فشار خوراک و ورودی به ماژول غشایی (۹ تا ۹ بار)، میزان مصرفی عامل اتصال عرضی (۵ تا ۳ درصد وزنی *TMOS*)، دمای اتصال عرضی (۶۵ تا ۸۵ °C) و زمان اتصال عرضی (۵ تا ۲/۵ ساعت) به عنوان پارامترهای ورودی و میزان گوگردزدایی از ترکیب خوراک و ورودی به ماژول غشایی (دیزل) با میزان گوگرد (۶۳۸۰ ppm) به عنوان پارامتر خروجی در نظر گرفته شد. در این مطالعه ۴ نوع غشا شامل پلی دی متیل سیلوکسان، پلی اتیلن گلاکول، پلی اترسولفون و پلی اکریل نیتریل مورد بررسی قرار گرفت. برای مدل سازی فرایند تراوش تبخیری، از ابزار شبکه عصبی و برنامه نویسی ژنتیکی استفاده شد. برای پیدا کردن شرایط بهینه مدل سازی با شبکه عصبی الگوریتم آموزشی لونیبرگ - مارکواردت با یک لا به استفاده شد و تعداد نرون ها تغییر داده شد تا شرایط بهینه پیدا شود. بیشینه مقدار R^2 (۰/۹۳۴۱) برای شبکه عصبی با الگوریتم آموزشی لونیبرگ - مارکواردت با ۶ نرون در لا به مخفی به دست آمد. بیشینه مقدار R^2 (۰/۸۹۹۷) برای برنامه نویسی ژنتیکی به دست آمد. مدل ریاضی برنامه نویسی ژنتیکی را به خوبی می توان برای پیش بینی مقدار گوگرد خروجی در هر شرایطی استفاده نمود. نتیجه های گوگردزدایی با فرایند غشایی آشکار کرد که با افزایش فشار ماژول میزان گوگرد موجود در ترکیب دیزل کاهش یافت. بیش ترین تأثیر پمپ فشار ماژول غشایی بر کاهش گوگرد در جریان دیزل، در ترکیب PDMS و پلیمر PEG برای ساخت غشاها دیده شد.

واژگان کلیدی: مدل سازی، شبکه عصبی، برنامه نویسی ژنتیکی، هوش مصنوعی، غشا، جداسازی، گوگردزدایی.

KEYWORDS: Modeling, Artificial intelligence, Artificial neural network, Genetic programming, Membrane, Separation, Desulfurization.

مقدمه

در بیش تر کشورهای توسعه یافته محدوده گوگرد موجود در ترکیب دیزل برای رسیدگی به مقررات آژانس حفاظت از محیط زیست ۱۰ ppm عنوان شده است، و در رویکردهای جدید گوگردزایی عمیق تر برای رسیدن به غلظت کم تر از ۱۰ ppm در آینده ای نزدیک ضروری شده است [۱،۲]. با توجه به این که کاهش میزان گوگرد بر روی کارکرد موتورهای دیزلی بسیار تأثیر گذار است از این رو شرکت های خودروسازی موظف هستند تا تا موتورهای تولیدی خود را بر اساس سوخت با میزان کم گوگرد طراحی نمایند. با توجه به نکته های یاد شده، پژوهشگران به دنبال یافتن راه های جدید به منظور کاهش میزان گوگرد موجود در سوخت ها هستند [۳-۵]. به منظور حذف گوگرد از سوخت و افزایش قابلیت کارایی آن ها روش هایی مانند گوگردزایی هیدروژنی، گوگردزایی اکسایشی، گوگردزایی زیستی و گوگردزایی جذبی استفاده می شود [۶]. گوگردزایی هیدروژنی مرسوم ترین روش صنعتی کاهش گوگردزایی است که در صنایع پالایشگاهی بسیار استفاده می شود.

بنزین تجاری ترکیبی پیچیده متشکل از آلکن ها، اولفین ها، سیکلوپارافین ها و آروماتیک هاست. این ترکیب از فرآورده های واحدهای ایزومراسیون، ریفرمینگ و شکست کاتالیستی سیال تشکیل شده است. این ترکیب دارای کم ترین نقطه اشتعال 54°C و بیشینه نقطه ریزش 0°C هست. با توجه به وجود داشتن میزان ۳۰ تا ۴۰ درصد خاکستر در گازوییل تولید شده در واحدهای کاتالیستی، عامل اصلی حضور گوگرد در ترکیب گازوییل همین مسئله است. یک روش اساسی برای حذف گوگرد از بنزین، هیدرودسولفوریزاسیون کاتالیستی است. فرایند هیدرودسولفوریزاسیون کاتالیستی روشی مستقیم برای کاهش گوگرد گازوییل است. با این حال این روش به سرمایه گذاری بالا و هزینه های عملیاتی نیاز دارد و همچنین یک ایراد بزرگ وجود دارد: این فناوری از کاهش چشمگیری در عدد ستان ترکیب گازوییل که به دلیل اشباع ترکیب های اولفین ایجاد می شود رنج می برد. بنابراین با توجه به مشکل های یاد شده، برای ایجاد روش های غیر هیدرودسولفوریزاسیون کاتالیستی تلاش های بیش تری صورت گرفته است [۷]. فرایندهایی مانند بيو هیدرودسولفوریزاسیون که نیازی به هیدروژن برای حذف گوگرد ندارد، اکسیداسیون انتخابی، استخراج انتخابی، استخراج کاتالیستی، اکسایش آلکیل سازی و جداسازی غشایی جز این دسته تلاش ها هستند. در مقایسه با فرایندهای جداسازی گوگرد از گازوییل مانند هیدرودسولفوریزاسیون کاتالیستی، اکسایش، استخراج و سایر فرایندهایی که گفته شد، جداسازی غشایی برتری های بسیاری از جمله بازده

جداسازی بالاتر، مصرف انرژی پایین و هزینه های عملیاتی، عملیات ساده، طرح کنترل، سادگی افزایش مقیاس و سازگاری با تغییر جریان های فرایند ارایه می دهد [۸-۱۰]. این برتری های امیدوار کننده، جداسازی غشایی را به عنوان یک فرایند جذاب برای بسیاری از کارهای پژوهشی در مطالعه های اخیر کرده است. غشای هیبریدی اتیل سلولز (EC) پر شده از C_{60} برای حذف گوگرد از بنزین با استفاده از فرایند تراوش تبخیری تهیه شد. تصویر میکروسکوپ الکترونی غشای هیبریدی EC/C_{60} وجود خوشه های C_{60} در غشای هیبریدی را تأیید نمود. نتیجه عملکرد تراوش تبخیری با استفاده از غشای اتیل سلولز و غشای هیبرید EC/C_{60} نشان داد که شار عبوری به دلیل افزایش دمای عملیات افزایش یافته است، ولی فاکتور غنی سازی گوگرد نخست افزایش می یابد و سپس کاهش می یابد [۱۱]. تأثیر انواع هیدروکربن بر حذف تیوفن از بنزین با استفاده از یک ماژول ماریچ با روش تراوش تبخیری بررسی شد. در این پژوهش، پارامترهای حمل و نقل غشایی با استفاده از نتیجه های تجربی پیش بینی شد و یک روش مناسب برای مدل سازی حذف تیوفن از بنزین چند منظوره پیشنهاد شد. همچنین، اثرهای سطح غشایی موجود در ماژول نیز به لحاظ نظری مورد مطالعه قرار گرفت [۱۲]. به منظور حذف ترکیب های گوگردی غشاهای ترکیبی بر پایه پلی دی متیل سیلوکسان آماده شد. رفتارهای جذب و انتشار تیوفن، بنزن، تولوئن، سیکلو هگزان، n-پنتان، n-هگزان و n-هپتان در غشاهای سنتز شده بررسی شد. نتیجه ها نشان داد که افزودن پلی POSS^۱ به غشای پلی دی متیل سیلوکسان باعث افزایش ضریب حلالیت و ضریب انتشار تیوفن، بنزن و تولوئن در غشاهای می شود [۱۳].

در مقاله های قبلی، دو نوع مدل پدیدار شناختی فرایندهای فیلتراسیون فاز مایع به نام های مدل نظری یا مدل انتقالی غشا و مدل پارامتری توده ای در نظر گرفته شده است، گرچه می توانیم مدل های پارامتری توزیع شده نیز پیدا کنیم که به طور عمده مدل های ریاضی هستند که دلخواه بوده و آن ها را می توان به صورت مستقیم در کاربردهای کنترلی به کار برد [۱۴]. به دلیل پیچیدگی مدل های انتقال جرم و فقدان دقت کافی از مدل ها در بسیاری از سامانه های تصفیه با غشا، هوش مصنوعی می تواند برای مدل سازی سامانه تراوش تبخیری با دقت بالا به کار رود. در پژوهش های اخیر، شبکه عصبی مصنوعی به عنوان روشی برای پردازش اطلاعات در فرایندهای غشایی گوناگون مورد استفاده قرار گرفته است [۱۵، ۱۶]. شبکه عصبی مصنوعی می تواند برای بررسی رفتار پیچیده و غیرخطی عملکرد جداسازی از طریق غشاء در شرایط عملیاتی گوناگون استفاده شود. بسیاری

(۱) Poly(oligosilsesquioxanes)

است. احساس نیاز بشر برای دستیابی به هوش مصنوعی به منظور نزدیک‌تر کردن ارتباط انسان و ماشین و دستیابی به ماشین‌های هوشمندی که بتوانند از عهده وظیفه‌های پیچیده‌تر برآیند، انگیزه اصلی پژوهش‌های گسترده بر روی سامانه عصبی انسان و دیگر موجودهای زنده و تلاش برای شبیه‌سازی مصنوعی آن بوده است.

شبکه عصبی مصنوعی ایده‌ای است برای پردازش اطلاعات که از سامانه عصبی زیستی الهام گرفته و مانند مغز به پردازش اطلاعات می‌پردازد. شبکه عصبی مصنوعی شامل دو بخش گره و اتصال‌ها است. گره‌ها شامل نورون‌ها هستند که از عناصر پردازش تکی هستند و اتصال‌ها شامل وزنه‌های مرتبط با ارتباط بین دو نورون هستند [۲۰، ۲۱]. تعیین ساختار مناسب شبکه عصبی مصنوعی به کار انجام‌شده بستگی دارد. پرسپترون چندلایه یکی از پرکاربردترین ساختار شبکه عصبی مصنوعی در فرایندهای غشایی است. پرسپترون چندلایه دارای یک ساختار با خوراک روبه‌جلو است. در این ساختار، نورون‌ها در لایه‌های ورودی مخفی و خروجی در نظر گرفته شده‌اند. هر نورون یک تابع انتقال دارد. یکی از مهم‌ترین توابع انتقال، log-sigmoid [۲۲] است که در این مطالعه مورد استفاده قرار گرفته است.

$$\text{Logsig}(x) = \frac{1}{1+e^{-x}} \quad (1)$$

مکانیسم پرسپترون^۱ چندلایه خوراک روبه‌جلو پس انتشار به شرح بالا است:

نخست بردار ورودی توسط وزن‌های متصل به هم اصلاح می‌شود و به نورون‌های لایه ورودی تغذیه می‌شود. هر نورون یک پیش‌مقدار به این مقدارها افزوده می‌کند و سپس مقدار خروجی را با استفاده از تابع انتقال آن محاسبه می‌کند. محاسبه خروجی در هر گره به صورت لایه به لایه به صورت مستقیم انجام می‌شود و در پایان مقدار خروجی به وسیله لایه خروجی ارابه می‌شود. اختلاف میان خروجی شبکه عصبی و خروجی واقعی (میزان خطا) به منظور تعیین وزن‌ها و پیش‌مقدارها در شبکه عصبی با استفاده از الگوریتم یادگیری به کار گرفته می‌شود. الگوریتم یادگیری یک روش برای تعیین وزن و پیش‌مقدار شبکه عصبی برای اجرای برخی از وظیفه‌ها است. به تقریب همه پژوهش‌های غشایی روش پس انتشار را برای شبکه عصبی مصنوعی به کار برده‌اند. در شبکه عصبی پس انتشار، پس از محاسبه خطا در مسیر روبه‌جلو خطابه سمت عقب از لایه خروجی به لایه ورودی انتشار داده می‌شود تا وزن‌های شبکه را اصلاح کند.

از پژوهشگران از مدل جعبه سیاه با استفاده از برنامه‌نویسی ژنتیکی [۱۷] برای مدل‌سازی فرایند جداسازی استفاده کرده‌اند تا یک مدل ریاضی برای سامانه تولید کنند. شکرکار و همکاران [۱۸] یک برنامه‌نویسی ژنتیکی برای استخراج یک تابع ریاضی برای پیش‌بینی شار غشایی در تصفیه پساب‌های روغنی با غشاهای سنتزی میکروفیلتراسیون استفاده کردند. این مدل با استفاده از پارامترهای ورودی برای شرایط عملیاتی (زمان شار و فیلتراسیون) و کیفیت پساب‌های روغنی (غلظت روغن، دما، فشار ترانس غشا و سرعت جریان متقابل) مورد استفاده قرار گرفت. نتیجه‌های به دست آمده از مدل برنامه‌نویسی ژنتیکی نشان داد که داده‌های تجربی دارای یک خطای متوسط کم‌تر از ۵٪ است. هم‌چنین از آن‌جا که فرایند حذف گوگرد از ترکیب‌های نفتی با روش غشایی به وسیله فرایند تراوش تبخیری انجام می‌گیرد، غشاهای پلیمری پلی‌دی‌متیل سیلوکسان، پلی‌اتیلن گلايکول، پلی‌اتر سولفون و پلی‌اکریل‌نیتریل، که بازدهی بالایی در این فرایند در پژوهش‌های پیشین ارایه داده‌اند، برای این پژوهش انتخاب شده‌اند.

در پژوهش حاضر، شبکه عصبی مصنوعی و برنامه‌نویسی ژنتیکی از غشاهای اسمز معکوس بر پایه غشاهای پلی‌دی‌متیل سیلوکسان، پلی‌اتیلن گلايکول، پلی‌اتر سولفون و پلی‌اکریل‌نیتریل به منظور پیش‌بینی جداسازی میزان ترکیب‌های گوگرد از گازوییل واحد نفتی پالایشگاه اصفهان طراحی شد.

بخش نظری

شبکه عصبی

با توجه به این‌که طراحی و تحلیل هر سامانه مستلزم داشتن یک مدل ریاضی از سامانه واقعی هست، بنابراین به دست آوردن مدل ریاضی معتبر از سامانه واقعی، یکی از پیش‌شرط‌های اساسی در طراحی آن سامانه می‌باشد. انسان به عنوان یک موجود هوشمند تنها با استفاده از اطلاعات کیفی و ذهنی و تجربیات خود قادر به هدایت و راهبری موفقیت‌آمیز این گونه سامانه‌ها می‌باشد توانایی انسان در برخورد و مواجهه با این سامانه‌ها و چگونگی عملکردش باعث شده تا پژوهشگران به مدل‌سازی شیوه عملکرد انسان در حل این گونه مسئله‌ها روی آورند یکی از زمینه‌های پژوهشی نوین در این راسته شبکه‌های عصبی هست [۱۹]. در دیدگاه شبکه عصبی، تلاش در الگوبرداری از چگونگی عملکرد سامانه مغز انسان بوده است. این شیوه با تکیه بر قابلیت یادگیری و توانایی پردازش موازی در شبکه‌های عصبی قادر به درک و حل مسائل پیچیده است توانایی شبکه‌های عصبی در حل مسئله‌های گوناگونی مانند مدل‌سازی، کنترل، بهینه‌سازی و شناسایی الگوی تأیید شده

(۱) Perceptron algorithm

تئوری برنامه‌نویسی ژنتیکی

فشار پمپ ماژول غشایی (۵ تا ۹ بار)، میزان مصرفی عامل اتصال عرضی (۱/۵ تا ۳ درصد وزنی TMOS)، دمای اتصال عرضی (۶۵ تا ۸۵ °C) و زمان اتصال عرضی (۱/۵ تا ۲/۵ ساعت) به‌عنوان پارامترهای ورودی و میزان گوگردزایی از ترکیب خوراک ورودی به ماژول غشایی (دیزل با میزان گوگرد ۶۳۸۰ ppm) به‌عنوان خروجی در نظر گرفته شد و میزان گوگردزایی به‌عنوان خروجی در نظر گرفته شده است. برای مدل‌سازی شبکه عصبی نخست داده‌ها به‌صورت اتفاقی به دودسته کلی آموزش و آزمون تقسیم شدند. برای پرهیز از مدل مریض ۳ و نیز عمومیت بخشی به مدل این عمل تقسیم داده‌ها به‌صورت اتفاقی و تصادفی انجام شد. ۷۰ درصد از داده‌ها در شبکه عصبی به‌عنوان داده‌های آموزش و ۳۰ درصد به‌عنوان آزمودن مورد استفاده قرار گرفت. در مدل‌سازی با برنامه‌نویسی ژنتیکی ۷۰ درصد داده‌ها به‌عنوان آموزش و ۳۰ درصد به‌عنوان آزمودن استفاده شد. برای جلوگیری از ایجاد خطا در مدل‌سازی و کاهش توزیع ورودی‌ها و خروجی‌ها نرمالیزه شدند [۲۶]، یعنی مقدار آن‌ها با استفاده از فرمول زیر بین صفر و یک قرار گرفت:

$$x_{normalized} = \frac{x - x_{min}}{x_{max} - x_{min}} \quad (2)$$

سپس مقادارها وارد مدل شدند تا مدل‌سازی و یافتن معادله همبستگی آن‌ها صورت بگیرد و پارامترهای بهینه شبکه عصبی مشخص شود. ضابطه‌ها و معیارهای تعیین مقدار خطا در این پژوهش خطای جذر میانگین مربعات ($RMSE^2$) و ضریب تشخیص (R^2) است که فرمول‌های آن‌ها بدین صورت است:

$$RSME = \sqrt{\frac{1}{n} \sum (x^{exp} - x^{sim})^2} \quad (3)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n [x^{sim} - x^{exp}]^2}{\sum_{i=1}^n [x^{sim} - x^m]^2}, x_m = \frac{\sum_{i=1}^n x^{sim}}{n} \quad (4)$$

که در آن x_{exp} مقادارهای آزمایشگاهی و x_{sim} مقدار پیش‌بینی شده توسط مدل و n تعداد آزمایش‌ها است

نتیجه‌های شبکه عصبی مصنوعی

برای مدل‌سازی شبکه عصبی داده‌ها از الگوریتم آموزشی لونیگ مارکواردت با یک‌لایه مخفی استفاده شد. سپس تعداد نرون‌ها از ۱ تا ۲۰ تغییر داده شد و نتیجه‌های آن در جدول ۱ دیده می‌شود.

برنامه‌نویسی ژنتیکی (GP) یک نوع الگوریتم ژنتیک تکاملی است که توسط Koza توسعه یافته است [۲۳]. برنامه‌نویسی ژنتیکی در زمینه‌هایی نظیر کنترل، رباتیک، بازی‌ها و برازش نمادین استفاده می‌شود. برنامه‌نویسی ژنتیکی بر اساس قوانین تکامل زیستی است [۲۴]. برنامه‌نویسی ژنتیکی یک روش پیشرفته برای عرضه مدل‌های تجربی غیرخطی ورودی - خروجی در برنامه‌های مهندسی است. این الگوریتم راه‌حل‌های خوبی برای مسئله‌های گوناگون ارائه می‌دهد و ورژن توسعه یافته الگوریتم ژنتیک (GA) ^۲ هست. خروجی GP یک برنامه کامپیوتری است، درحالی که خروجی GA یک مقدار است. GP به‌طور چشمگیری قدرتمندتر از GA است و یک روش یادگیری برای بهینه‌سازی یک جنبه خاص از سامانه بر اساس یک معیار آمادگی ارائه شده توسط کاربر است. فرکانس GP جمعیت برنامه‌های کامپیوتری را به سمت نسل جدیدی از جمعیت تغییر می‌دهد. در هر نسل از الگوریتم، افراد نزدیک به مطلوب به‌عنوان پدر و مادر برای نسل بعدی انتخاب می‌شوند و یک منبع تولیدمثل تازه ایجاد می‌کنند. نسل تازه‌ای از راه‌حل‌ها، با استفاده از یکی از سه عملیات ژنتیکی شامل تقاطع، جهش و تولیدمثل رشد می‌کند. پس از چندین نسل، یک برنامه راه‌حل‌های ارائه شده برای این موضوع را توسعه می‌دهد. توابع اتصال گره‌های ورودی و ثابت‌ها یک مدل اولیه جمعیت را ایجاد می‌کنند که پیچیدگی آن توسط کاربر تعیین می‌شود. تنظیم پایانه‌ها (متغیرهای مستقل و ثابت‌های تصادفی مسائل) و توابع اصلی برای هر یک از شاخه‌های منفرد برنامه، اندازه‌گیری تناسب ژن‌ها در جمعیت، اعتبار سنجی پارامترها برای برنامه‌ای که می‌خواهد اجرا شود و روش‌های تخمین میزان تناسب چهار مرحله اساسی و مهم در برنامه ژنتیکی هستند. اندازه جمعیت، بیشینه تعداد نسل و احتمال تقاطع و جهش، پارامترهای مشخصی در GP هستند [۲۳] هر برنامه در فرایند GP به‌عنوان یک درخت بیان می‌شود. تابع‌های موردنظر تابع‌هایی هستند که دارای مقدارهای عملکرد متناسب هستند [۲۵] یک برنامه نرم‌افزاری (جعبه‌ابزار برنامه‌نویسی ژنتیک Matlab) برای استفاده از GP در یک کامپیوتر استفاده شد.

نتیجه‌ها و بحث

داده‌ها

در این مطالعه از داده‌های موجود در مقاله فارسی و همکاران [۲۴] استفاده شده است که داده‌های آن از روی نمودار به دست آمد. تعداد داده‌های به‌دست آمده از این پژوهش ۱۰۸ مورد بود. پارامترهای

(۱) Genetic Programming

(۳) Sick

(۲) Genetic algorithm

(۴) Root mean square deviation

جدول ۲- مقدرهای R^2 و RMSE را برای پیش بینی گوگردزایی غشایی

الگوریتم آموزشی	RMSE کل	RMSE آزمودن	RMSE آموزش	R^2 کل	R^2 آزمودن	R^2 آموزش
شبکه عصبی مصنوعی	۰/۶۲۵	۰/۰۵۸۳	۰/۶۱۸	۰/۹۳۳۸	۰/۹۳۴۱	۰/۹۳۳۰
برنامه نویسی ژنتیکی	۰/۹۶۹	۰/۰۷۳۳	۰/۱۰۵۲	۰/۸۴۶۹	۰/۸۹۹۷	۰/۸۴۲۳

$$0.006888 \tan(\tan(\exp(x_2)) - 3.642533) - 0.07511 \exp(x_1 x_2) + 0.1502 \exp(x_2 x_3) - 0.07511 \tan(\exp(\exp(x_1))) + 0.006888 \tan(\exp(\text{square}(x_3))) - 0.01378 \exp(x_2) + 0.5504$$

که در آن X_1 نوع پلیمر (نوع اول مشخص شده با عدد یک PDMS، نوع دوم مشخص شده با عدد دو PDMS+PEG، نوع سوم مشخص شده با عدد سه PDMS+PEG، نوع چهارم مشخص شده با عدد چهار PDMS+PAN، x_2 دما (C)، x_3 TMOS %، x_4 زمان اتصال عرضی (our)، x_5 فشار (bar) و Y خروجی مجموع گوگرد خروجی (ppm) است.

دقت مدل ها

جدول ۲ مقدرهای R^2 و RMSE را برای پیش بینی گوگردزایی غشایی، با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی و برنامه نویسی ژنتیکی برای داده های نرمال شده نشان می دهد. همان گونه که دیده می شود شبکه عصبی با R^2 و RMSE ۰/۹۳۴۱ و ۰/۰۵۸۳ و برنامه نویسی ژنتیکی با R^2 و RMSE ۰/۸۹۹۷ و ۰/۰۷۳۳ میزان گوگردزایی را پیش بینی می کنند که دقت شبکه عصبی بیش تر هست. شکل ۱ و ۲ به ترتیب میزان R^2 را برای شبکه عصبی مصنوعی و برنامه نویسی ژنتیکی نشان می دهد که محور عمودی مقدرهای آزمایشگاهی و محور افقی مقدرهای پیش بینی شده با استفاده از مدل می باشند. در نمودار ۱ و ۲ مقدرهای منفی نیز دیده می شوند. این بدان خاطر است که مدل های هوش مصنوعی بعضی از مقدرها را با خطا پیش بینی می کنند، یعنی مقدرهای نزدیک به صفر را در برخی از موردها کمتر از صفر پیش بینی می کنند.

بررسی اثر پارامترهای ورودی بر تغییرهای گوگرد

شکل ۳ تغییر مجموع گوگرد در جریان خروجی به وسیله فشار پمپ ماژول غشایی برای حالتی که درصد وزنی عامل اتصال عرضی (TMOS) برابر ۱/۵ درصد وزنی بود را نشان می دهد. با توجه به این شکل، بیشترین تأثیر پمپ فشار ماژول غشایی بر کاهش گوگرد در جریان گازوییل، در ترکیب PDMS و پلیمر PEG برای ساخت غشاهای دیده می شود و دلیل آن این است که استفاده از فن آوری های ترکیب پلیمرها باعث بهبود ویژگی های غشایی می شود که انتخاب پذیری

جدول ۱- الگوریتم آموزشی لونبرگ مارکواردت با یک لایه مخفی

تعداد نرون	RMSE آزمودن	RMSE کل	R^2 آزمودن	R^2 کل
۱	۰/۲۲۵۳	۰/۲۳۴۵	۰/۰۰۱۲	۰/۰۷۲۵
۲	۰/۲۱۸۸	۰/۲۱۸۷	۰/۰۵۱۵	۰/۱۴۶۶
۳	۰/۰۸۹۸	۰/۰۸۶۹	۰/۸۵۳۴	۰/۸۷۱۳
۴	۰/۰۹۰۹	۰/۰۷۶۳	۰/۸۳۴۰	۰/۸۹۶۰
۵	۰/۰۹۸۵	۰/۰۷۳۴	۰/۸۱۱۰	۰/۹۰۶۸
۶	۰/۰۵۸۴	۰/۰۶۱۳	۰/۹۳۴۲	۰/۹۳۳۰
۷	۰/۰۹۴۹	۰/۰۷۸۹	۰/۸۲۵۸	۰/۸۸۹۳
۸	۰/۱۴۰۸	۰/۱۱۹۸	۰/۶۱۴۴	۰/۷۴۹۴
۹	۰/۰۹۷۳	۰/۰۷۳۷	۰/۸۰۹۵	۰/۹۰۳۰
۱۰	۰/۱۰۰۸	۰/۰۸۴۲	۰/۸۰۶۴	۰/۸۸۳۶
۱۱	۰/۱۲۷۶	۰/۰۹۰۲	۰/۶۹۶۳	۰/۸۵۵۰
۱۲	۰/۱۲۱۸	۰/۱۰۱۰	۰/۷۴۸۷	۰/۸۳۲۴
۱۳	۰/۱۱۱۶	۰/۱۰۵۹	۰/۷۷۱۵	۰/۸۳۷۴
۱۴	۰/۱۰۵۲	۰/۰۷۱۳	۰/۷۹۴۵	۰/۹۰۹۴
۱۵	۰/۰۹۴۵	۰/۰۷۴۱	۰/۸۶۲۶	۰/۹۰۵۶
۱۶	۰/۰۸۹۵	۰/۰۷۰۴	۰/۸۴۱۵	۰/۹۱۴۰
۱۷	۰/۱۲۳۲	۰/۱۰۰۲	۰/۷۰۹۹	۰/۸۲۳۹
۱۸	۰/۱۰۶۸	۰/۰۸۴۶	۰/۸۱۲۹	۰/۸۸۳۷
۱۹	۰/۱۹۰۸	۰/۱۶۳۳	۰/۴۳۱۹	۰/۵۶۷۰
۲۰	۰/۱۳۱۱	۰/۰۹۵۵	۰/۶۷۰۸	۰/۸۴۱۳

نتیجه های مدل سازی با برنامه نویسی ژنتیکی

اولین مرحله، بعد از جایگذاری داده ها در مدل سازی به وسیله برنامه نویسی ژنتیکی تولید برخی از افراد است که در واقع مدل های ریاضی هستند. هر مدل جمعیت اولیه شامل برخی از گره ها و پایانه ها است. مجموعه تابع های انتخاب شده شامل $(+, -, \times, /, \exp, \sin, \cos, \tan, \cot)$ است. مجموعه پایانه انتخاب شده شامل متغیر مستقل X یا یک عدد صحیح است. در این پژوهش پارامترهای فشار پمپ ماژول غشایی، میزان مصرفی عامل اتصال عرضی، دمای اتصال عرضی و زمان اتصال عرضی به عنوان متغیر مستقل و میزان گوگرد موجود در جریان خروجی از ماژول غشایی به صورت تابعی از پارامترهای متغیر در نظر گرفته شد. اندازه جمعیت، تعداد کل نسل، عمق درخت تصادفی اولیه به ترتیب در ۶۰، ۵۰ و ۸ بود. بین شش تا دوازده حداکثر عمق درخت مورد آزمایش قرار گرفت و بهترین عدد ۸ با کمترین زمان اجرا، پیچیدگی و مقدرهای خطا بود. بهترین مدل که پس از رفع معیار خاتمه به دست می آید عبارت است از:

$$Y = -0.07511x_1^2 + (0.082x_3 + 0.006888)x_1 + 0.01378x_3 - 0.07511x_2 + 0.7511x_4 - 0.07511x_5 - 0.07511 \tan(\tan(\exp(\exp(x_1)))) - 0.006888 \exp(\exp(x_3)) - 0.01378 \exp(\exp(x_5)) + 0.006888 \tan(\exp(x_2)) + 0.006888 \tan(\exp(x_3)) + 0.006888 \tan(12877x_1 + x_2 - x_4) + 0.006888 \exp(3.617018x_1(x_1 - x_3)) +$$

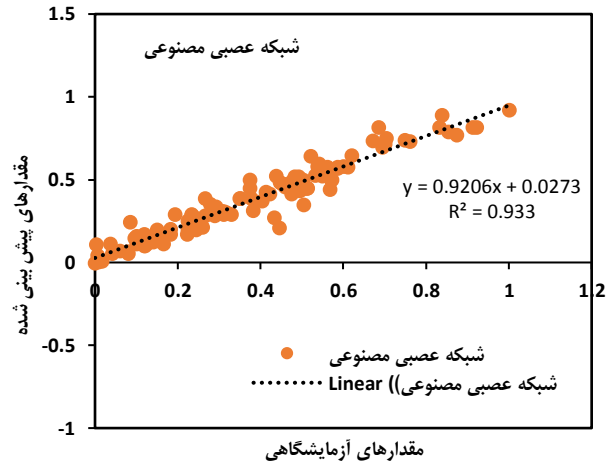
افزایش می‌یابد، بنابراین فاکتور غنی‌سازی گوگرد نسبت به غشا افزایش می‌یابد. با تمام این تفاسیر، مقدار گوگرد موجود در جریان کاهش می‌یابد. در اصل با افزایش دمای اتصال‌ها، زنجیره‌الیگومرها بین اتصال‌های عرضی کوتاه شده و این کوتاه شدن زنجیرها بین اتصال‌های عرضی مقاومت کششی را تقویت می‌کند که باعث کاهش درجه تورم غشا می‌شود.

تغییر میزان گوگرد خروجی نسبت به تغییر پارامتر زمان اتصال عرضی در شکل ۵ نمایش داده شده است. ضریب تراوایی (P) می‌تواند از رابطه ریاضی زیر محاسبه شود [۲۸].

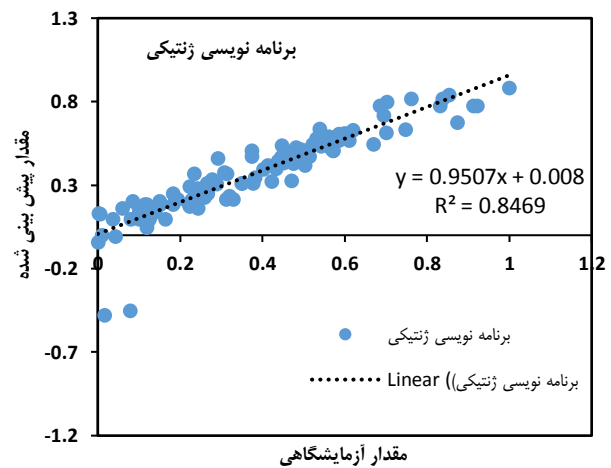
$$P = D \times S \quad (۵)$$

در معادله (۵)، D، P و S به ترتیب تراوایی، ضریب نفوذپذیری و ضریب انحلال‌پذیری هستند. با توجه به شکل ۶ با افزایش زمان اتصال از ۱/۵ تا ۱/۵ ساعت در ساخت غشاها، ضریب‌های D، S و P مربوط به مولکول‌های هیدروکربن دیزل کاهش می‌یابد، درحالی‌که ضرایب بالا برای مولکول‌های گوگردی دیزل، افزایش می‌یابد و در نتیجه مولکول‌های گوگرد بیشتری توسط غشا از دیزل جدا می‌شود. در حال حاضر با افزایش این پارامتر از ۱/۵ ساعت تا ۲/۵ ساعت ضریب مربوطه (D، S و P) مربوط به مولکول‌های گوگردی دیزل کاهش می‌یابد و از این رو مولکول‌های کم‌تری از گوگرد موجود در دیزل توسط فرایند غشایی جدا می‌شود.

در شکل ۶ نیز تغییر میزان گوگرد خروجی نسبت به تغییر درصد وزنی عامل اتصال عرضی به‌کاررفته در سنتز غشاها ترسیم شده است. فشار پمپ ماژول غشایی، زمان اتصال عرضی و دمای اتصال عرضی برای همه غشاها در این حالت ثابت و به ترتیب ۷ بار، ۱ ساعت و ۷۰ درجه سلسیوس در نظر گرفته شد. مطابق شکل ۸ با افزایش میزان عامل مصرفی اتصال عرضی در ساخت غشاها، مجموع گوگرد خروجی کاهش می‌یابد و در نتیجه عامل غنی‌سازی گوگرد افزایش می‌یابد. با مصرف TMOS به‌عنوان عامل اتصال عرضی، تحرک ماکرو مولکول‌ها و بخش‌های زنجیره‌ای ضعیف می‌شود و بنابراین حجم آزاد بین زنجیره‌ای کاهش می‌یابد که مانع نفوذ مولکول‌های کوچک می‌شود. این پدیده با افزایش عامل اتصال عرضی دیده می‌شود [۲۷-۱۹، ۲۵]. اثر TMOS به‌عنوان عامل متصل‌کننده بر روی افزایش انتخابی و همچنین محدود کردن تورم در غشا با لایه فعال ۸ میلی‌متری PDMS مورد بررسی قرار گرفت. همان‌گونه که انتظار می‌رفت، عامل افزایش غلظت گوگرد با افزایش مقدار عامل اتصال عرضی افزایش می‌یابد. گرچه، لازم است تا از اتصال عرضی بیش‌ازحد جلوگیری شود، چون باعث شکنندگی غشای پلیمری با تخریب در پایداری ابعادی آن می‌شود که در نتیجه آن کاربردپذیری آن در فرایندهای غشایی کاهش می‌یابد.

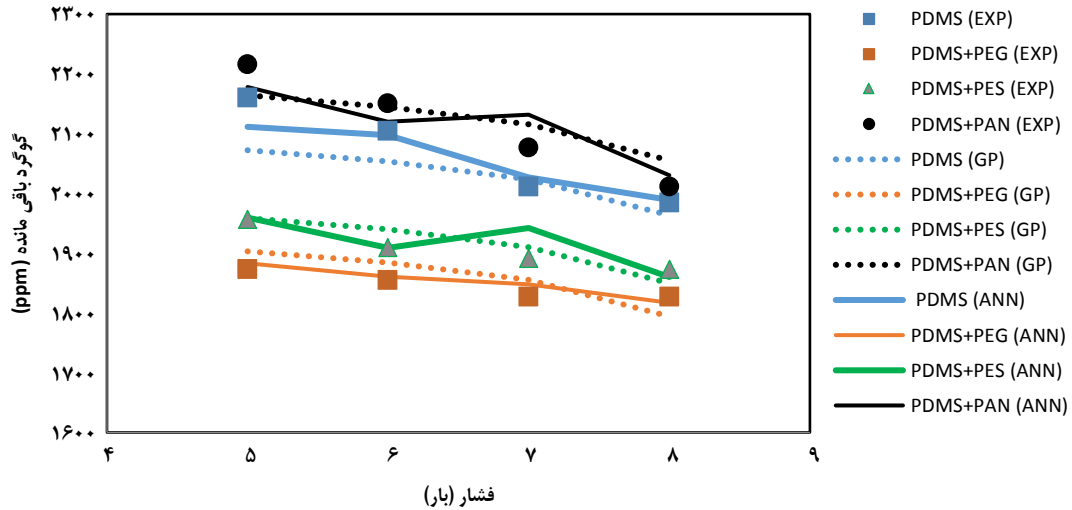


شکل ۱. نمودار R^2 برای شبکه عصبی مصنوعی

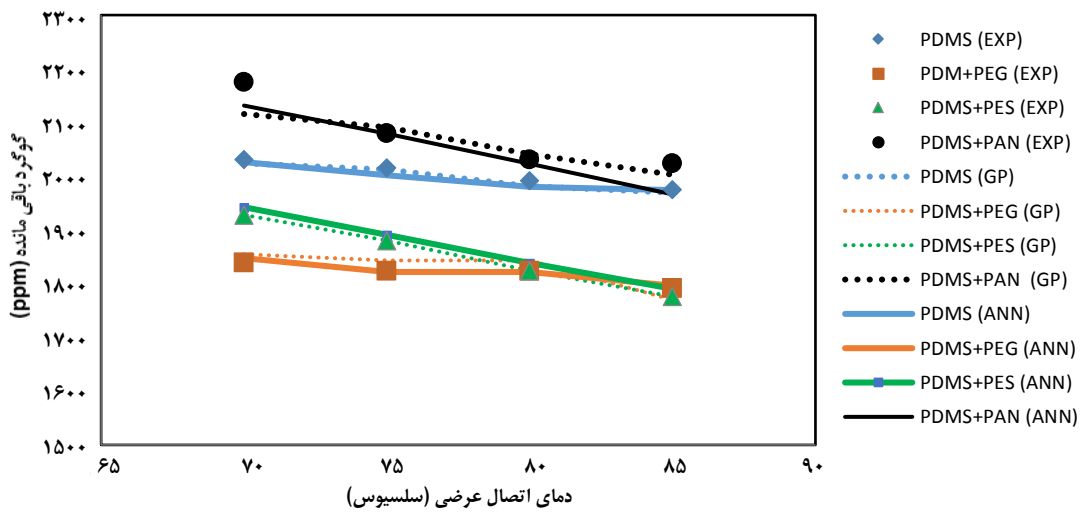


شکل ۲. مقدار R^2 برای برنامه‌نویسی ژنتیکی

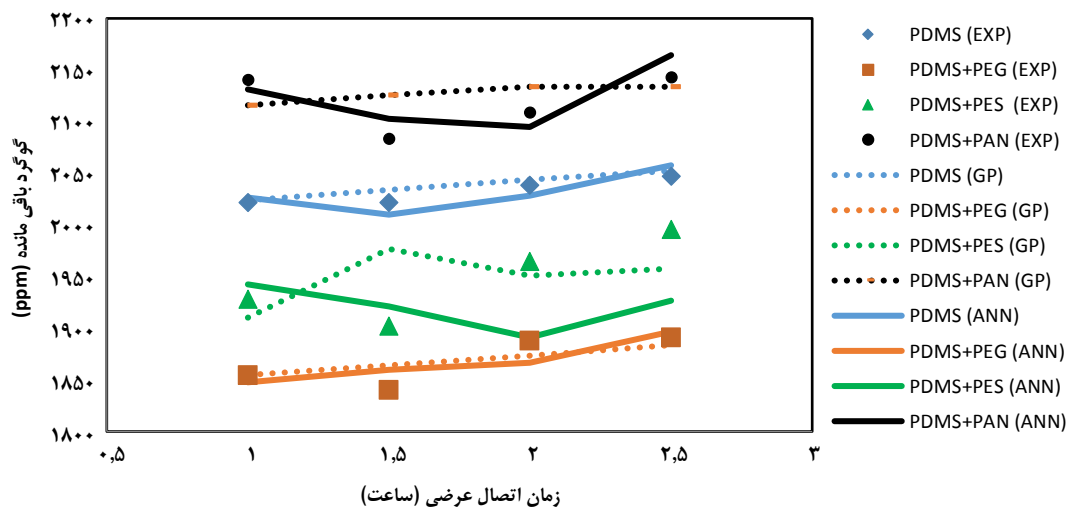
نسبت به ترکیب‌های گوگردی در این پژوهش چشمگیر است. با توجه به اثر سینرژیک بین پلیمرها، غشای مخلوط PDMS / PEG عملکرد گوگردزدایی درخشان نسبت به هیدروکربن‌های خوراک مایع با بهره‌گیری از ویژگی‌های هر دو پلیمر PEG و PDMS (وابستگی شدید به ترکیب‌های گوگرد و پارامتر محلول همانند) نشان می‌دهد [۲۸]. در شکل ۴ تغییرهای میزان گوگرد باقیمانده در جریان خروجی در برابر تغییرهای دمای اتصال عرضی برای حالتی که ۱/۵ درصد وزنی TMOS به‌عنوان عامل اتصال عرضی بوده است، نمایش داده شده است. با توجه به شکل ۴، به‌طور کلی، با افزایش دمای اتصال در چهار نوع غشا، کل گوگرد در جریان خروجی کاهش می‌یابد. با توجه به این شکل، بیش‌ترین اثر دمای اتصال عرضی در کاهش گوگرد در جریان خروجی، در مورد ترکیب پلیمرهای PEG و PDMS مورد استفاده برای ساخت غشا است. برای تفسیر دلیل، می‌توان گفت که با افزایش دمای اتصال‌ها، درجه تورم غشا کاهش می‌یابد، در نتیجه، انتخاب‌پذیری غشا نسبت به ترکیب‌های گوگردی



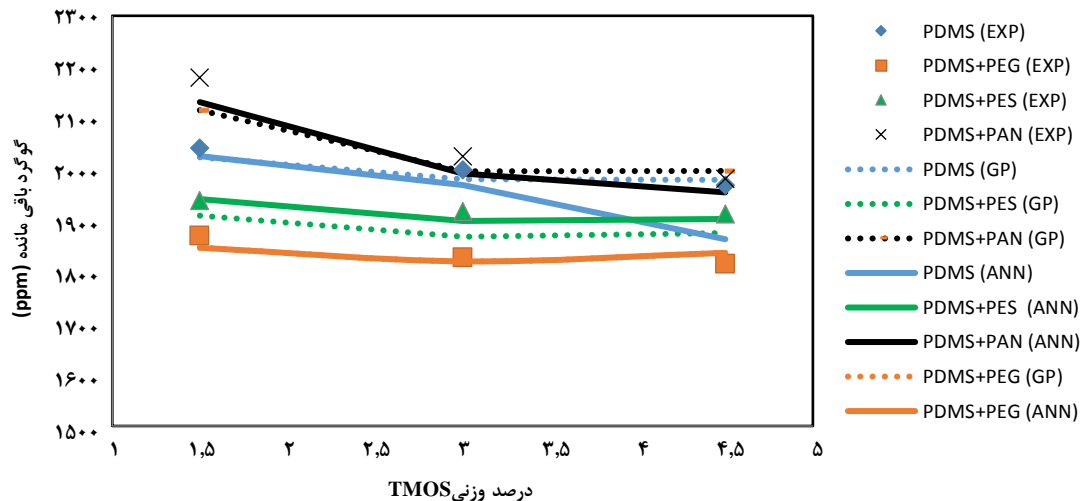
شکل ۳. تغییر میزان گوگرد باقی‌مانده نسبت به فشار مازول (۱/۵٪ وزنی TMOS، دمای ۷۰ درجه سلسیوس و زمان یک ساعت)



شکل ۴. تغییر میزان گوگرد باقی‌مانده نسبت به تغییر دمای اتصال عرضی (۱/۵٪ وزنی TMOS، فشار ۷ بار و زمان یک ساعت)



شکل ۵. تغییر میزان گوگرد خروجی نسبت به زمان اتصال عرضی (۱/۵٪ وزنی TMOS، دمای ۷۰ درجه سلسیوس و فشار ۷ بار)



شکل ۶. تغییر گوگرد خروجی نسبت به تغییر درصد وزنی عامل اتصال عرضی (فشار ۷ بار، دمای ۷۰ درجه سلسیوس و زمان یک ساعت)

نتیجه گیری

در این مطالعه چهار نوع غشا شامل پلی دی متیل سیلوکسان، پلی اتیلن گلاکول، پلی اتروسولفون و پلی اکریل نیتریل برای بررسی گوگردزدایی از ترکیب خوراک ورودی به غشای اسمز معکوس مورد بررسی قرار گرفت. برای مدل سازی پارامترهای فشار خوراک ورودی، میزان بارگذاری عامل اتصال عرضی، دمای اتصال عرضی و زمان اتصال عرضی به عنوان پارامترهای ورودی و میزان گوگردزدایی از ترکیب خوراک ورودی به ماژول غشایی به عنوان پارامتر خروجی در نظر گرفته شد. در این پژوهش، جهت تحلیل سامانه تراوش تبخیری غشایی از هوش مصنوعی استفاده شد. نتیجه های گوگردزدایی با فرایند غشایی آشکار کرد که با افزایش فشار ماژول میزان گوگرد موجود در ترکیب دیزل کاهش می یابد. بیش ترین تأثیر پمپ فشار ماژول غشایی بر کاهش گوگرد در جریان دیزل، در ترکیب PDMS و پلیمر PEG برای ساخت غشاها دیده شد. از شبکه عصبی و برنامه نویسی ژنتیکی برای مدل سازی و ایجاد

مراجع

- [۱] شفقت قانديان،، محرابی امین،، کاهش گوگرد گازوییل به کمک امواج اولتراسونیک، پژوهش نفت، ۲۴: ۸۵ تا ۹۵ (۱۳۹۳).
- [2] Abdullah W.N.W., "Preparation Characterization and Mechanistic Study of Alumina Supported Polymolybdate Based Catalysts for Catalytic Oxidative Desulfurization of Diesel Fuel", Universiti Teknologi Malaysia (2016).
- [3] Bhutto A. W., Abro R., Gao S., Abbas T., Chen X., Yu G., Oxidative Desulfurization of Fuel Oils Using Ionic Liquids: A Review, *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, **62**: 84-97 (2016).

- [4] Gao S., Yu G., Abro R., Abdeltawab A.A., Al-Deyab S.S., Chen X., [Desulfurization of Fuel Oils: Mutual Solubility of Ionic Liquids and Fuel Oil](#), *Fuel*, **173**: 164-171 (2016).
- [5] Dharaskar S.A., Wasewar K.L., Varma M.N., Shende D.Z., Yoo C., [Synthesis, Characterization and Application of 1-Butyl-3-Methylimidazolium Tetrafluoroborate for Extractive Desulfurization of Liquid Fuel](#), *Arabian Journal of Chemistry*, **9**: 578-587 (2016).
- [6] Khaled M.M., Nazal M.K., Atieh M.A., [Method for Desulfurizing Diesel Fuel](#), in, *Google Patents*, (2018).
- [7] Qi R., Wang Y., Chen J., Li J., Zhu S., [Removing Thiophenes from N-Octane Using PDMS–AgY Zeolite Mixed Matrix Membranes](#), *Journal of Membrane Science*, **295**: 114-120 (2007).
- [8] Padaki M., Murali R.S., Abdullah M.S., Misdan N., Moslehyani A., Kassim M., N., Hilal Ismail A., [Membrane Technology Enhancement in Oil–Water Separation. A Review](#), *Desalination*, **357**: 197-207 (2015).
- [9] Nath K., “[Membrane Separation Processes](#)”, PHI Learning Pvt. Ltd., (2017).
- [10] Rezakazemi Marjani, S. Shirazian M. A., [Organic Solvent Removal by Pervaporation Membrane Technology: Experimental and Simulation](#), *Environmental Science and Pollution Research*, **20**: 1-8 (2018).
- [11] Sha S., Kong Y., Yang J., [The Pervaporation Performance of C60-Filled Ethyl Cellulose Hybrid Membrane for Gasoline Desulfurization: Effect of Operating Temperature](#), *Energy & Fuels*, **26**: 6925-6929 (2012).
- [12] Jain M., Attarde D., Gupta S.K., [Influence of Hydrocarbon Species on the Removal of Thiophene from FCC Gasoline by Using a Spiral Wound Pervaporation Module](#), *Journal of Membrane Science*, **507**: 43-54 (2016).
- [13] Zhang Q.G., Fan B.C., Liu Q.L., Zhu A.M., Shi F.F., [A Novel Poly \(Dimethyl Siloxane\)/Poly \(Oligosilsesquioxanes\) Composite Membrane for Pervaporation Desulfurization](#), *Journal of Membrane Science*, **366**: 335-341(2011).
- [14] Sobana S., Panda R.C., [Identification, Modelling, and Control of Continuous Reverse Osmosis Desalination System: A Review](#), *Separation Science and Technology*, **46**: 551-560 (2011).
- [15] Rezakazemi M., Dashti A., Asghari M., Shirazian S., [H₂-Selective Mixed Matrix Membranes Modeling using ANFIS, PSO-ANFIS, GA-ANFIS](#), *International Journal of Hydrogen Energy*, **42**: 15211-15225 (2017).
- [16] Rezakazemi M., Azarafza A., Dashti A., Shirazian S., [Development of Hybrid Models for Prediction of Gas Permeation Through FS/POSS/PDMS Nanocomposite Membranes](#), *International Journal of Hydrogen Energy*, **43**: 17283-17294 (2018).
- [17] Lee T.-M., Oh H., Choung Y.-K., Oh S., Jeon M., Kim J.H., Nam S.H., Lee S., [Prediction of Membrane Fouling in the Pilot-Scale Microfiltration System Using Genetic Programming](#), *Desalination*, **247**: 285-294 (2009).

- [18] Shokrkar H., Salahi A., Kasiri N., Mohammadi T., [Prediction of Permeation Flux Decline During MF of Oily Wastewater Using Genetic Programming](#), *Chemical Engineering Research and Design*, **90**: 846-853 (2012).
- [19] Sharma S., Sandal K., Garg P., Sharma S.D., “[Performance Analysis of Window Functions for Exon Prediction in DNA Sequences](#)”, in *Computing, Communication and Automation (ICCCA), 2017 International Conference, IEEE* 283-286 (2017).
- [20] Sarkar B., Sengupta A., De S., DasGupta S., [Prediction of Permeate Flux During Electric Field Enhanced Cross-Flow Ultrafiltration—a Neural Network Approach](#), *Separation and Purification Technology*, **65**: 260-268 (2009).
- [21] Farno E., Rezakazemi M., Mohammadi T., Kasiri N., [Ternary Gas Permeation Through Synthesized Pdms Membranes: Experimental and CFD Simulation Based on Sorption-Dependent System Using Neural Network Model](#), *Polymer Engineering & Science*, **54**: 215-226 (2014).
- [22] Prochazka A., Kingsbury N., Payner P., Uhlir J., “[Signal Analysis and Prediction](#)”, Springer Science & Business Media, (2013).
- [23] Koza J.R., ‘[Genetic Programming II, Automatic Discovery of Reusable Subprograms](#)’, MIT Press, Cambridge ,MA, (1992).
- [24] Farsi M., Heidarinasab A., Honarvar B., Arjmand, M., [Desulfurization of Disle Isfahan Oil Refinery Company by Polydimethylsiloxane, Poly Ethylene Glycol, Polyethersulfone and Poly Acryl Nitrile Nanocomposites](#), *Life*, **50**: 22-36 (2017).
- [25] Grosman B., Lewin D.R., [Automated Nonlinear Model Predictive Control using Genetic Programming](#), *Computers & Chemical Engineering*, **26**: 631-640 (2002).
- [26] Das A., Abdel-Aty M., [A Genetic Programming Approach to Explore the Crash Severity on Multi-Lane Roads](#), *Accident Analysis & Prevention*, **42**: 548-557 (2010).
- [27] Lin L., Kong Y., Zhang Y., [Sorption and Transport Behavior of Gasoline Components in Polyethylene Glycol Membranes](#), *Journal of Membrane Science*, **325**: 438-445 (2008).
- [28] Lin L., Wang G., Qu H., Yang J., Wang Y., Shi D., Kong Y., [Pervaporation Performance of Crosslinked Polyethylene Glycol Membranes for Deep Desulfurization of FCC Gasoline](#), *Journal of Membrane Science*, **280**: 651-658 (2006).