

بهینه سازی فرآیند جداسازی گازی با استفاده از غشا پلیمری اصلاح شده بر پایه الگوریتم ژنتیک و شبکه عصبی

امین هدایتی مقدم^{۱*}، سید امین میرمحمدی^۱، افشار علی حسینی^۱ و فرهاد امانیزاده فیینی^۲

۱- گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی مهندسی، واحد تهران مرکزی، دانشگاه آزاد اسلامی، ایران

۲- آزمایشگاه نفت و گاز، گروه مهندسی نفت، دانشکده نفت و مهندسی شیمی، واحد علوم و تحقیقات، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱/۲۰ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۹/۳/۲۷

چکیده

افزودن نانوذرات به ماتریس پلیمری منجر به افزایش عملکرد غشا در فرایند جداسازی گازی می‌شود. در تحقیق جاری، هدف یافتن نقطه بهینه عملیاتی جداسازی گازی برای غشای پلیمری اصلاح شده با نانوذرات می باشد. متغیرهای عملیاتی مورد بررسی نوع نانوذره، غلظت نانوذره اضافه شده و اختلاف فشار عملیاتی در دوسوی غشا می‌باشد. نانوذرات ZnO ، Al_2O_3 و TiO_2 در این تحقیق مورد استفاده قرار گرفتند. همچنین غلظت نانوذره و اختلاف فشار عملیاتی به ترتیب در محدوده ۲/۵ تا ۱۵٪ و ۲ تا ۲۵ bar مورد بررسی قرار گرفتند. یکی از الزامات بهینه‌سازی فرایند، توسعه یک مدل قوی و کارآمد است. بدین منظور ابتدا یک مدل قدرتمند با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی توسعه پیدا کرد که قادر به پیش‌بینی میزان تراوش پذیری گازهای اکسیژن، نیتروژن، متان و دی اکسید کربن می باشد. مدل‌هایی براساس انواع شبکه های عصبی پیشخور توسعه داده شدند که R^2 بزرگتر از ۰/۹ داشتند. سپس با استفاده از الگوریتم ژنتیک شرایط بهینه عملیاتی برای هر یک از گازهای مورد بررسی با در نظر گرفتن چهار هدف و راهبرد استخراج شدند. نتایج بهینه‌سازی نشان دادند که مقدار تراوش پذیری بیشینه برای گازهای اکسیژن، نیتروژن، متان و دی اکسید کربن به ترتیب برابر با ۳۳۴/۷، ۷۷۹/۹، ۹۰۲/۷ و ۲۷۰/۴ می‌باشد.

کلمات کلیدی: جداسازی گازی، غشا پلیمری، بهینه سازی، شبکه عصبی مصنوعی، الگوریتم ژنتیک.

مقدمه

سرمایشی^۳ و غیره اشاره کرد [۱-۳]. با توجه به مصرف بالای انرژی و هزینه بالای این فرایندهای جداسازی، در سال های اخیر سرمایه گذاری های گسترده‌ای در زمینه تحقیق و پژوهش بر کاربرد

فرایندهای مختلفی برای جداسازی گازی وجود دارد که می‌توان به جذب^۱، جذب سطحی^۲، تقطیر

1. Absorption
2. Adsorption
3. Cryogenic Distillation

*مسئول مکاتبات
آدرس الکترونیکی
Ami.hedayati_moghaddam@iauctb.ac.ir
شناسه دیجیتال: (DOI: 10.22078/pr.2020.4134.2877)

غشا شد [۷]. تحقیق مشابهی را اسماعیلی و عطار نمرتی به منظور ارتقا عملکرد غشا کامپوزیتی پلی وینیل پیرولیدین انجام دادند و اثرات افزودن $AgNO_3$ و $AgBF_4$ به ساختار غشا را بر عملکرد آن در جداسازی اتیلن از اتان مورد بررسی قرار دادند [۸]. آنسون و همکاران برای جداسازی CO_2 از CH_4 از یک غشای کامپوزیتی ماتریس ترکیبی^۲ (MMC) استفاده کردند. آنها از اکریلونیتریل-بوتادین-استایرن (ABS) به عنوان ماتریس پلیمر و از کربن فعال (AC) به عنوان پرکننده^۳ استفاده کردند. نتایج نشان دادند که تراوش پذیری و انتخابگری ماتریس AC-ABS با افزایش مقدار AC افزایش می‌یابد [۹]. مطالعاتی وجود دارد که در آنها از چارچوب‌های آلی فلزی (MOFs) برای ارتقا عملکرد غشا پلیمری در جداسازی گازی CO_2/CH_4 استفاده کرده‌اند [۴-۳]. MOF ماده‌ای میکروپروس است که از فلز انتقالی یا اکسید فلزی انتقالی که توسط یک پیوند آلی به یک ساختار میکروپروس متصل شده است، تشکیل شده است [۱۲].

عابدینی و همکاران عملکرد غشای پلیمری پلی ۴-متیل-۱-پنتن که اختصاراً PMP نامیده می‌شود را که با افزودن NH_2 -MIL53 ارتقا یافته است در جداسازی گازی CO_2/CH_4 مورد بررسی قرار دادند و افزایش عملکرد سیستم از لحاظ تراوش‌پذیری^۴ خصوصاً برای CO_2 و انتخابگری^۵ را گزارش کردند [۱۳]. پدram و همکاران عملکرد غشای پلیمری پیچ خورده پلی وینیل الکل (PVA) حاوی دی اتانول آمین (DEA) بر پایه پلی تترافلوئرواتیلن (PTFE) را در جداسازی CO_2/CH_4 مورد بررسی قرار دادند. در این تحقیق آنها از عامل شبکه ساز گلو تار آلدهید (GA) استفاده کردند و عملکرد غشا را در نسبت‌های مختلف GA/PVA مورد بررسی قرار دادند. نسبت

فناوری‌های نوین در زمینه جداسازی گازی صورت گرفته است. یکی از این فرایندهای نوین جداسازی فرایند غشایی^۱ می‌باشد [۴]. کاربرد فناوری غشایی نسبت به فرایندهای معمولی و کلاسیک جداسازی دارای مزیت‌های فراوانی می‌باشد که از جمله آنها می‌توان به مصرف انرژی پایین‌تر، کم بودن هزینه سرمایه‌گذاری اولیه، کم بودن فضای مورد نیاز، وزن پایین و ... اشاره کرد [۵]. علاوه بر این، انجام برخی از جداسازی‌هایی که توسط این فرایندها صورت می‌گیرد، توسط سایر روش‌های جداسازی امکان‌پذیر نیستند که می‌توان به جداسازی مواد حساس به دما اشاره کرد. وجود مزایای فوق سبب گسترش روزافزون استفاده از غشاها به ویژه نوع پلیمری آنها در صنایع مختلف مرتبط با جداسازی شده است. این تحقیقات در زمینه جداسازی گازی و مایع تمرکز بیشتری داشته است. غشاها از مواد مختلفی از جمله مواد پلیمری، فلزی، سرامیکی و غیره ساخته می‌شوند که تمرکز بیشتر بر غشاهای پلیمری به دلیل ارزان بودن و انعطاف‌پذیری بیشتر می‌باشد. یکی از عمده مشکلات سیستم‌های غشایی، پدیده گرفتگی غشا می‌باشد [۶] که در سال‌های اخیر پیشرفت‌های چشمگیری در این زمینه حاصل شده است.

مطالعات مختلفی پیرامون امکان‌سنجی فرایند جداسازی گازی از طریق به کارگیری غشاهای پلیمری صورت گرفته است. یکی از نقاط ضعف غشاهای پلیمری در جداسازی گازی عملکرد پایین‌تر این غشاها نسبت به غشاهای غیرآلی و غربال‌های مولکولی می‌باشد. برای حل این مشکل، مطالعاتی به منظور ارتقای عملکرد این غشاها صورت گرفته است. کیم و همکاران عملکرد غشای لاستیک پلی اتیلن کوپروپیلن (PFR) که روی پایه پلی استر متخلخل نشانده شده است در جداسازی پروپیلن/ پروپان را مطالعه کردند. آنها به منظور ارتقا عملکرد غشا، نانوذرات نمک نقره ($AgBF_4$) را در پلیمر توزیع کردند که منجر به تسهیل انتقال پروپیلن در

1. Membrane Technology
2. Mixed matrix composite
3. Filler
4. Permeability
5. Selectivity

برای ایجاد و ارتقای این مدل استفاده خواهد شد. شبکه‌های عصبی مورد استفاده در این سیستم از نوع شبکه‌های پیش‌خور چندلایه^۱ می‌باشند. با توجه به کارهای مطالعاتی پیشین، در این تحقیق متغیرهای نوع نانوذرات، غلظت نانوذرات و فشار عملیاتی در دو سوی غشا به عنوان فاکتورهای تأثیرگذار در نظر گرفته شده و مورد بررسی قرار گرفتند [۱۶].

مواد و روش‌ها مواد

از PMP به عنوان ماتریس غشا استفاده شد که از شرکت سیگماآلد ریچ تهیه شد. همچنین، از نانوذرات ZnO، TiO₂ و Al₂O₃ در محدوده ۲۰ تا ۳۰ nm به عنوان پرکننده و افزودنی به ماتریس پلیمر استفاده شد که این مواد نیز از شرکت سیگماآلد ریچ تهیه شدند. باید توجه داشت که غلظت این نانوذرات در محدوده ۵ تا ۱۵٪ می‌باشد.

شبکه عصبی مصنوعی

نظریه شبکه‌های عصبی مصنوعی الهام گرفته از مدل سلول‌های عصبی مغز انسان است. شبکه عصبی توانایی یافتن ارتباطات غیرخطی پیچیده بین متغیرهای ورودی و خروجی در فرایندهایی که مدل‌سازی آنها با روش‌های تحلیلی مشکل و بعضاً غیرممکن است را دارا می‌باشد. شبکه عصبی طبق تعریف مجموعه‌ای متشکل از واحدهای پردازش اطلاعات تحت عنوان نرون است که با یکدیگر در ارتباط هستند و ساختار شبکه را ایجاد می‌کنند. معماری، مقادیر وزن‌ها و شیوه پردازش متغیرهای مهمی هستند که مفهوم شبکه را تعریف می‌کنند. نرون، ورودی به شبکه را دریافت می‌کند با تخصیص وزن آنها را جمع می‌کند، یک انحراف^۲ (b) را اضافه می‌کند و حاصل را به عنوان ورودی تابع انتقال^۳ (f) در نظر می‌گیرد.

وزنی ۱٪ برای PVA/GA و PTFE حاوی ۱۵٪ DEA به عنوان شرایط بهینه گزارش شد [۱۴]. قاسمی و همکاران اثر افزودن نانوذرات نقره بر افزایش تراوش پذیری غشا پلی اتر بلاک امید را مثبت و قابل توجه ارزیابی کردند [۱۵]. در کارهای تحقیقاتی پیشین، حسینی و همکاران ارتقای عملکرد غشای پلیمری PMP از طریق افزودن نانوذرات در فرایند جداسازی گازی را مورد مطالعه قرار دادند. آنها از نانوذرات ZnO، TiO₂ و Al₂O₃ به منظور توزیع در ماتریس پلیمر استفاده کردند [۱۶-۱۷].

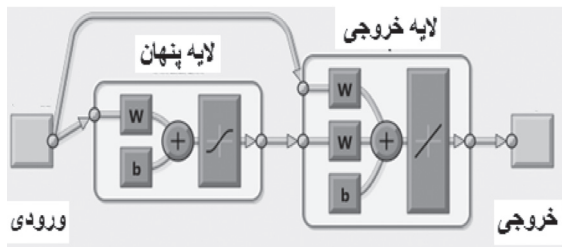
دستیابی به شرایط بهینه متغیرهای عملیاتی در هر فرایندی حائز اهمیت می‌باشد. به عبارت دیگر به منظور صرفه جویی در هزینه‌ها و همچنین انرژی مصرفی می‌بایست شرایطی که بیشترین عملکرد با کمترین هزینه را دارد، پیدا کرد. سیستم‌های هوش مصنوعی از جمله شبکه‌های عصبی مصنوعی قادر به توسعه مدل‌هایی هستند که قابلیت پیش‌بینی رفتارهای غیرخطی بین متغیرهای ورودی و خروجی را دارا می‌باشند. در این تحقیق برای توصیف روابط پیچیده بین متغیرهای عملیاتی و عملکرد غشا در جداسازی گازی از این سیستم‌های هوش مصنوعی استفاده شده است. تاکنون از شبکه‌های عصبی مصنوعی در علوم و فناوری‌های مختلف به منظور مدل‌سازی فرایندها استفاده شده است [۲۱-۲۱ و ۶]. مهرآبادی و همکاران اثر عامل‌دار کردن غشای PVDF با نانولوله‌های کربنی را بر شار جریان تراوش یافته و میزان گرفتگی غشا مورد بررسی قرار دادند. ایشان برای مدل‌سازی تأثیر این عوامل از چندین شبکه عصبی مصنوعی استفاده کردند [۲۲].

در تحقیق جاری همان‌طور که پیش از این اشاره شد، هدف یافتن نقطه بهینه عملیاتی برای غشای مزبور می‌باشد که بدین منظور از الگوریتم ژنتیک استفاده شده است. باید توجه داشت که یکی از الزامات بهینه‌سازی فرایند، توسعه یک مدل قوی و کارآمد است که با استفاده از آن فرایند بهینه‌سازی به انجام رسد. بنابراین، از سیستم‌های هوش مصنوعی

1. Multi-layer feed-forward
2. Bias
3. Transfer function

تعداد متغیرهای ورودی شبکه، k_{net} تعداد لایه‌های پنهان شبکه و pk_{net} تعداد نرون‌ها در k امین لایه است.

همانطور که پیش از این اشاره شد، ورودی به نرون پس از ضرب در وزن‌های اختصاصی، با مقداری تحت عنوان انحراف جمع می‌شود. بنابراین، اگر مقدار داده ورودی بزرگ باشد، ممکن است تابع انتقال اشباع شود. برای جلوگیری از وقوع این پیشامد، داده‌های ورودی می‌بایست نرمال شوند. شبکه عصبی Cascade نوع دیگری از شبکه‌های عصبی مصنوعی پیشخور است که در آن اتصالات بین لایه ورودی و لایه‌های بعدی علاوه بر اتصالات بین لایه‌های مجاور وجود دارد (شکل ۲). نوع دیگری از شبکه‌های عصبی تحت نام Fitnet نیز وجود دارد. برای کسب اطلاعات بیشتر در رابطه با ساختار، آموزش و عملکرد انواع شبکه‌های عصبی مصنوعی می‌توان به مراجع مربوطه مراجعه کرد [۲۴-۲۳].



شکل ۲ ساختار شبکه Cascade.

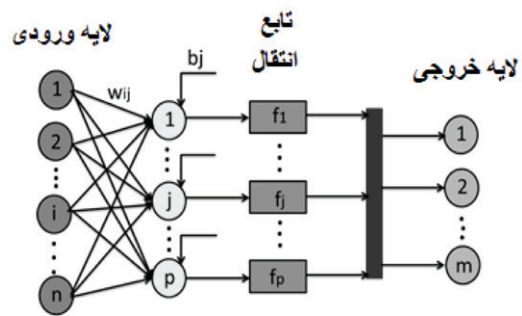
آموزش شبکه

فرایند آموزش مهمترین مرحله در طراحی ساختار یک شبکه است. توانایی پیش بینی یک شبکه قویاً وابسته به چگونگی آموزش آن است. در ادامه، روال تعیین مقادیر وزن در یک شبکه به صورت مرحله به مرحله نشان داده شده است:

۱- ابتدا مقادیر تصادفی کوچکی به عنوان مقادیر اولیه به وزن اختصاص داده می‌شود.

۲- داده‌های ورودی دسته آموزش به مدل ساخته

ساختار یک شبکه عصبی پیش‌خور چندلایه از نوع Feed forward در شکل ۱ نشان داده شده است. همانطور که مشخص است در این نوع از شبکه‌های عصبی مصنوعی سه نوع لایه وجود دارد که عبارتند از لایه ورودی، لایه‌های پنهان و لایه خروجی.



شکل ۱ ساختار شبکه عصبی مصنوعی پیشخور.

تابعی که به هر نرون تخصیص داده می‌شود و مقدار خروجی را تعیین می‌کند، تابع انتقال نامیده می‌شود. توابع انتقال مختلفی وجود دارد که می‌توان به سیگموئید^۱، تانژانت هایپربولیک^۲ و خطی^۳ اشاره کرد. هر یک از این توابع در شرایط مختلف به کار می‌روند. شایان ذکر است که برای روابط غیرخطی بین خروجی‌ها و ورودی‌ها، تابع سیگموئید به طور گسترده به کار می‌رود. روابط ریاضی ذیل بین ورودی و خروجی شبکه عصبی مصنوعی برقرار است:

$$X_{net} = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_{n_{net}} \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$W_{net}^{k_{net}} = \begin{bmatrix} W_{1,1}^{k_{net}} & \dots & W_{1,p}^{k_{net}} \\ \vdots & \dots & \vdots \\ W_{p^{k_{net}-1},1}^{k_{net}} & \dots & W_{p^{k_{net}-1},p}^{k_{net}} \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$Z_{net}^{k_{net}} = \begin{bmatrix} z_{net,1}^{k_{net}} \\ \vdots \\ z_{net,p^{k_{net}}}^{k_{net}} \end{bmatrix} = f^{k_{net}} (W_{net}^{k_{net}} Z_{net}^{k_{net}-1} + b^{k_{net}}) \quad (3)$$

که X_{net} بردار ورودی شبکه، W_{net} ماتریس وزن شبکه و Z_{net} بردار خروجی شبکه می‌باشد. همچنین، n_{net}

1. Sigmoid
2. Hyperbolic tangent
3. Linear

استفاده کرد. در این الگوریتم در هر مرحله الگوریتم افرادی را به طور تصادفی از جمعیت انتخاب می کند و از آنها به عنوان والدین برای ایجاد فرزندان نسل بعد استفاده می کند. به این ترتیب طی چندین نسل جمعیت به سمت حل بهینه مسئله حرکت می کند. یکی از اشکالات اساسی روش های بهینه سازی کلاسیک عدم امکان ایجاد تمایز بین نقاط بهینه محلی و کلی است که در الگوریتم ژنتیک این مشکل تا حد زیادی حل شده است.

نتایج و بحث

در این بخش، فرایند جداسازی غشایی گازی ارزیابی می شود و توسط استراتژی داده کاوی مدل سازی خواهد شد. تراوش پذیری غشایی به عنوان شاخص عملکرد فرایند غشایی تعیین شد. تعداد متغیرهای ورودی (عملیاتی) برابر با ۳ می باشد که شامل نوع و غلظت نانوذره و اختلاف فشار عملیاتی در دو سوی غشا است. طراحی آزمایش توسط روش پاسخ سطح انجام شده است. تعداد سری داده ها (آزمایشات) برابر با ۴۱ و شامل همه انواع نانوذره می باشد. غلظت نانوذره و فشار عملیاتی به ترتیب در محدوده ۲/۵ تا ۱۵٪ و ۲ تا ۲۵ bar است. برای بررسی و تحقیق روی اثر نوع نانوذره بر عملکرد فرایند غشایی، به هر یک از نانو ذرات یک شاخص مشخص تخصیص داده شده است و به این ترتیب نوع نانوذره به صورت یک کمیت عددی در مدل قرار داده شد. در ادامه تراوش پذیری گازهای اکسیژن، نیتروژن، دی اکسید کربن و متان مورد بررسی قرار می گیرد و مدل های مناسب برای پیش بینی عملکرد غشا برای هر یک از گازها از دیدگاه تراوش پذیری ارزیابی می شوند.

اکسیژن

در جدول ۱، عملکرد سه نوع شبکه عصبی Cascade Fitnet، و Feed forward در پیش بینی تراوش پذیری غشا مقایسه شده است. قابلیت پیش بینی شبکه با استفاده از مقادیر R^2 مربوط به داده های صحت سنجی مورد بررسی قرار گرفته است.

شده داده می شوند و نتایج ذخیره می شوند.

۳- میانگین خطای مربعات (MSE) بین مقادیر تجربی و پیش بینی شده در مرحله قبل با استفاده از رابطه ذیل محاسبه می شود:

$$MSE = \frac{\sum (y_{exp.} - y_{pred.})^2}{N_{data}} \quad (4)$$

که y_{exp} و y_{pred} به ترتیب مقادیر واقعی و پیش بینی شده هستند و N_{data} تعداد داده ها است.

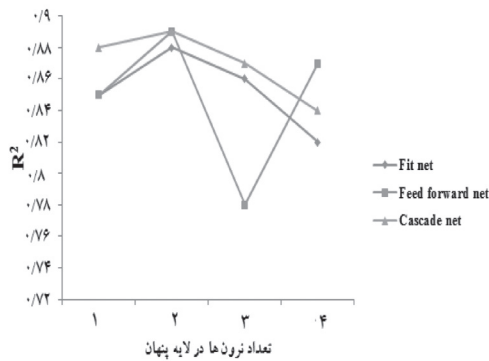
مقدار MSE در شبکه مجدداً محاسبه می شود به طوریکه وزن های اختصاص داده شده در مرحله قبل با استفاده از تابع موجود در رابطه ۵ تصحیح می شود:

$$W_k = W_{k-1} + \mu \left(-\frac{\partial MSE}{\partial W} \right) \Big|_{W=W_{k-1}} \quad (5)$$

w معرف وزن شبکه است. این روال تا جایی ادامه پیدا می کند که MSE به میزان تعیین شده برسد. برای آموزش شبکه عصبی مصنوعی از روش leave_one_out استفاده شده است. در این روش، کل n سری داده به دو دسته داده با $n-1$ و ۱ داده تقسیم بندی می شود که دسته اول داده های مربوط به بخش آموزش و دسته دوم داده های مربوط به بخش صحت سنجی می باشد و این عمل n بار تکرار می شود. بنابراین، n مرتبه مراحل سه گانه فوق تکرار می شود و بدین ترتیب n شبکه عصبی مصنوعی ایجاد خواهد شد.

الگوریتم ژنتیک

در این تحقیق برای یافتن نقاط بهینه عملیاتی با توجه به مدل های شبکه عصبی مصنوعی توسعه یافته از الگوریتم ژنتیک استفاده می شود. الگوریتم ژنتیک روشی است که برای حل مسائل بهینه سازی محدود و نامحدود بر اساس قواعد ژنتیکی استفاده می شود. این الگوریتم در حقیقت یک روش بهینه سازی بر اساس جستجوی تصادفی است. از الگوریتم ژنتیک می توان برای حل مسائلی که با روش ها و الگوریتم های بهینه سازی کلاسیک امکان حل آنها وجود ندارد مانند مسائلی که در آنها تابع هدف به صورت غیرخطی یا ناپیوسته می باشد،

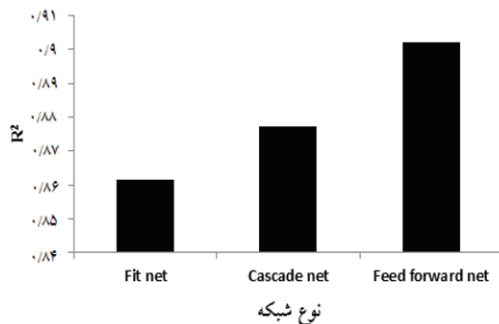


شکل ۳ قابلیت پیش‌بینی تراوش‌پذیری گاز متان سه شبکه مختلف با یک لایه پنهان.

در مورد گاز متان عملکرد شبکه‌هایی با دو لایه پنهان در پیش‌بینی میزان تراوش‌پذیری پایین‌تر از شبکه‌هایی با تک لایه پنهان می‌باشد. بنابراین از یک شبکه Cascade با دو نرون در لایه پنهان برای محاسبات مربوط به مدل‌سازی و بهینه‌سازی استفاده شد. حداکثر مقدار تراوش‌پذیری گاز متان برابر با ۵۹۳/۰۴ می‌باشد که با استفاده از نانوذره ZnO با غلظت ۱۵٪ و فشار عملیاتی ۲۵ bar محقق خواهد شد. همچنین، حداقل مقدار تراوش‌پذیری برابر با ۱۱۶۹۸/۰ خواهد بود.

دی‌اکسید کربن

در شکل ۴ عملکرد انواع شبکه‌های عصبی با دو لایه مخفی نشان داده شده است. بهترین عملکرد مربوط به شبکه Feed forward با چهار و یک نرون در لایه مخفی می‌باشد که مقدار R^2 صحت‌سنجی متناظر با این شبکه برابر با ۰/۹۰۲۱ می‌باشد. با بررسی مدل‌های مختلف برای تراوش‌پذیری غشایی گاز دی‌اکسید کربن مشخص شد که عملکرد شبکه‌های تک لایه پنهان ضعیف‌تر از شبکه‌هایی با دو لایه پنهان می‌باشد.



شکل ۴ مقایسه عملکرد شبکه‌هایی با دو لایه مخفی در پیش‌بینی تراوش‌پذیری گاز دی‌اکسید کربن

جدول ۱ مقایسه عملکرد سه نوع شبکه عصبی با یک لایه پنهان در پیش‌بینی تراوش‌پذیری گاز اکسیژن

نوع شبکه	تعداد نرون‌ها در لایه پنهان			
	۱	۲	۳	۴
Fitnet	۰/۸۱	۰/۸۷	۰/۸۶	۰/۸۷
Feed forward	۰/۷۸	۰/۸۷	۰/۸۵	۰/۸۴
Cascade	۰/۹۱	۰/۹۱	۰/۳۵	۰/۸۱

نیتروژن

مشابه با تراوش‌پذیری اکسیژن، برای تراوش‌پذیری نیتروژن، حداکثر مقدار R^2 مربوط به صحت‌سنجی برابر با ۰/۹۰ می‌باشد که مربوط به شبکه‌ای از نوع Cascade با یک نرون در لایه پنهان می‌باشد. با افزایش تعداد نرون‌ها در لایه پنهان به بیش از چهار یا پنج نرون عملکرد شبکه به نحو واضحی کاهش می‌یابد. در جدول ۲ عملکرد شبکه‌هایی با دو لایه پنهان نشان داده شده است. همانطور که مشخص است، بهترین عملکرد مربوط به شبکه Feed forward با دو لایه پنهان و یک نرون در هر یک از این لایه‌ها می‌باشد که از این شبکه برای پیش‌بینی تراوش‌پذیری نیتروژن استفاده خواهد شد.

با توجه به نتایج مستخرج از این مدل، حداکثر مقدار تراوش‌پذیری گاز نیتروژن برابر با ۵۳۶/۴۰۱۸ می‌باشد که با استفاده از نانوذره Al_2O_3 با غلظت ۴۵/۵۳٪ و فشار عملیاتی ۲۵ bar محقق خواهد شد.

جدول ۲ مقایسه عملکرد سه نوع شبکه عصبی با دو لایه پنهان در پیش‌بینی تراوش‌پذیری گاز نیتروژن

نوع شبکه	عملکرد بهینه شبکه	
	R^2	تعداد نرون‌ها در اولین و دومین لایه پنهان
Fitnet	۰/۸۶۲۳	۱-۲
Feed forward	۰/۹۱۴۳	۱-۱
Cascade	۰/۸۶۸۸	۴-۲

متان

در شکل ۳ عملکرد شبکه‌های مختلف در پیش‌بینی تراوش‌پذیری گاز متان نشان داده شده است.

بهینه سازی

و بهینه‌سازی پاسخ خروجی (تراوش پذیری) بهترین شرایط است. در استراتژی‌های فوق، هر متغیر دارای درجه‌ای از اهمیت می‌باشد. درجه اهمیت با استفاده از یک وزن تخصیص یافته نمود پیدا می‌کند. به منظور بهینه‌سازی با استفاده از الگوریتم ژنتیک، یک تابع بهینه‌سازی به صورت ذیل تعریف می‌شود:

$$OF = (1 - PR) \times w_{yield} + \sum_{(i=1)}^n (y_i \times w_i) \quad (6)$$

که OF و PR به ترتیب تابع بهینه‌سازی و میزان تراوش پذیری است. همچنین w_i ، w_{yield} و y_i به ترتیب درجه اهمیت تراوش پذیری، درجه اهمیت متغیر عملیاتی و متغیر عملیاتی نرمال شده می‌باشد. باید توجه داشت که وزن‌ها با توجه چهار هدف تعریف شده انتخاب می‌شوند. به عنوان مثال برای هدف دوم، وزن مربوط به تراوش پذیری و غلظت نانوذره برابر با ۰/۵ و وزن سایر متغیرها برابر با صفر در نظر گرفته می‌شود. به طور خلاصه می‌توان بیان کرد که وزن‌های تخصیص داده شده به هر هدف در واقع درجه اهمیت آن هدف را در هر استراتژی نشان می‌دهند. شرایط بهینه حاصل از به‌کارگیری الگوریتم ژنتیک به همراه وزن‌های تخصیص یافته به متغیرهای عملیاتی و پاسخ خروجی در جدول ۳ نشان داده شده است.

در این تحقیق، برای دستیابی به شرایط بهینه، از الگوریتم ژنتیک استفاده شد. بهترین مدل توسعه یافته برای بهینه‌سازی فرایند غشایی مربوط به هر گاز به طور جداگانه مورد استفاده قرار گرفت. در بهینه‌سازی چهار رویکرد و استراتژی کلیدی مورد توجه قرار گرفت که عبارتند از:

- هدف ۱: بهینه‌سازی تراوش پذیری غشا
 - هدف ۲: بهینه‌سازی تراوش پذیری غشا (درجه اهمیت ۰/۵۰) / کمینه‌سازی غلظت نانوذره افزوده شده (درجه اهمیت ۰/۵۰)
 - هدف ۳: بهینه‌سازی تراوش پذیری غشا (درجه اهمیت ۰/۵۰) / کمینه‌سازی اختلاف فشار عملیاتی در دو سوی غشا (درجه اهمیت ۰/۵۰)
 - هدف ۴: بهینه‌سازی تراوش پذیری غشا (درجه اهمیت ۰/۳۳) / کمینه‌سازی غلظت نانوذره افزوده شده (درجه اهمیت ۰/۳۳) / کمینه‌سازی فشار عملیاتی در دو سوی غشا (درجه اهمیت ۰/۳۳)
- افزایش غلظت نانوذره یا فشار عملیاتی به ترتیب به معنی افزایش هزینه و انرژی مورد نیاز می‌باشد. واضح است که کمینه‌سازی متغیرهای عددی عملیاتی

جدول ۳ نتایج حاصل از بهینه‌سازی فرایند با استفاده از الگوریتم ژنتیک.

نوع گاز	هدف	نانوذره	غلظت نانوذره (%)	فشار عملیاتی (bar)	تراوش پذیری
اکسیژن	۱	Al ₂ O ₃	۱۵	۲۵	۳۳۴/۷
	۲	Al ₂ O ₃	۲/۵	۲۵	۲۴۶/۶
	۳	Al ₂ O ₃	۱۵	۲	۱۰۲/۵
نیتروژن	۱	Al ₂ O ₃	۸/۴	۲۵	۷۷۹/۹
	۲	Al ₂ O ₃	۲/۵	۲۵	۶۰۴/۶
	۳	Al ₂ O ₃	۱۳/۷	۲	۱۶۵/۸
	۴	Al ₂ O ₃	۲/۵	۲	۸۳/۹
متان	۱	ZnO	۱۵	۲۵	۹۰۲/۷
	۲	ZnO	۲/۵	۲	۱۴۱/۶
	۳	ZnO	۸/۱	۲	۲۱۹/۵
	۴	ZnO	۲/۵	۲	۱۴۱/۶
دی اکسید کربن	۱	Al ₂ O ₃	۱۱	۱۸	۲۷۰/۴
	۲	Al ₂ O ₃	۲/۵	۲۰.۲	۱۴۸/۶

نتیجه‌گیری

استراتژی چهارم هدف بهینه‌سازی مقدار تراوش پذیری و همزمان کمینه‌سازی غلظت نانوذره و فشار عملیاتی در دو سوی غشا می‌باشد که وزن هر یک از این اهداف با هم برابر (۳/۳۳٪) است. افزایش غلظت نانوذره یا فشار عملیاتی به ترتیب به معنی افزایش هزینه و انرژی مورد نیاز می‌باشد. واضح است که شرایط بهینه حالتی است که منجر به کمینه‌سازی متغیرهای عددی عملیاتی و بهینه‌سازی پاسخ خروجی (تراوش‌پذیری) شود. در صورتی که هدف فقط دستیابی به حداکثر مقدار تراوش‌پذیری باشد، در جداسازی گازهای اکسیژن، نیتروژن، متان و دی‌اکسید کربن غلظت نانوذرات به ترتیب برابر با ۱۵، ۸/۴۴، ۱۵ و ۱۱٪ و فشار عملیاتی در دو سوی غشا به ترتیب برابر با ۲۵، ۲۵، ۲۵ و ۱۸ bar منجر به بهترین نتایج خواهد شد. با توجه به اهمیت مبحث بهینه‌سازی مصرف انرژی، مقدار تراوش‌پذیری برای گازهای اکسیژن، نیتروژن و متان با توجه به استراتژی شماره سه به ترتیب برابر با ۱۰۲/۵، ۱۶۵/۸ و ۲۱۹/۵ می‌باشد.

نتایج این تحقیق نشان دادند که در جداسازی گازهای اکسیژن، نیتروژن و دی‌اکسید کربن افزودن نانوذره Al_2O_3 و برای متان افزودن نانوذره ZnO منجر به بالاترین عملکرد فرایند جداسازی گازی غشایی می‌شود. برای پیش‌بینی مقدار تراوش‌پذیری گازهای مختلف، شبکه‌های عصبی متعددی توسعه داده شدند که بهترین مدل توسعه داده شده مربوط به یک شبکه عصبی از نوع Feed forward می‌باشد که برای پیش‌بینی مقدار تراوش‌پذیری گاز نیتروژن به کار رفته است. این شبکه دارای دو لایه پنهان می‌باشد که در هر یک از آنها یک نرون قرار دارد. در بهینه‌سازی چهار هدف و راهبرد مورد بررسی قرار گرفت. در استراتژی اول هدف فقط دستیابی به مقدار بهینه تراوش‌پذیری گاز می‌باشد. در استراتژی دوم و سوم هدف علاوه بر دستیابی به مقدار بهینه تراوش‌پذیری به ترتیب دستیابی به مقدار کمینه غلظت نانوذره و اختلاف فشار عملیاتی در دو سوی غشا می‌باشد که وزن هر یک از این اهداف با هم برابر (۵۰٪) می‌باشد. در

مراجع

- [1]. Aaron D, Tsouris C (2001) Separation of CO_2 from Flue Gas: A Review, Separation Science and Technology, 40: 321-48.
- [2]. Wang S, Lu L, Lu X, Cao W, Zhu Y (2016) Adsorption of binary CO_2/CH_4 mixtures using carbon nanotubes: Effects of confinement and surface functionalization, Separation Science and Technology, 51: 1079-92.
- [3]. Khot KM, Heer PKKS, Biniwale RB, Gaikar VG (2014) Equilibrium Adsorption Studies of CO_2 , CH_4 , and N_2 on Amine Functionalized Polystyrene, Separation Science and Technology, 49: 2376-88.
- [4]. Salahuddin Z, Farrukh S, Hussain A (2018) Optimization study of polyethylene glycol and solvent system for gas permeation membranes, International Journal of Polymer Analysis and Characterization 23: 483-92.
- [5]. Basu A, Akhtar J, Rahman MH, Islam MR (2004) A review of separation of gases using membrane systems, Petroleum Science and Technology, 22: 1343-68.
- [6]. Moghaddam AH, Shayegan J, Sargolzaei J (2016) Investigating and modeling the cleaning-in-place process for retrieving the membrane permeate flux: Case study of hydrophilic polyethersulfone (PES), Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, 62: 150-7.
- [7]. Kim JH, Min BR, Kim YW, Kang SW, Won J, Kang YS. (2007) Novel composite membranes comprising silver salts physically dispersed in poly (ethylene-co-propylene) for the separation of propylene/propane, Macromolecular Research 15:343-7.
- [8]. اسماعیلی م، عطار نصرتی س. (۲۰۱۹) ارزیابی ساختارهای متفاوت غشای انتقال تسهیل یافته پلی‌وینیل‌پیرولیدین در حضور نمک‌های نقره و بررسی اثرات آن در فرآیند جداسازی اتیلن از اتان. پژوهش نفت ۲۹: ۲۸-۲۹.

- [9]. Anson M, Marchese J, Garis E, Ochoa N, Pagliero C (2004) ABS copolymer-activated carbon mixed matrix membranes for CO₂/CH₄ separation, *Journal of membrane science*, 243:19-28.
- [10]. Nik OG, Chen XY, Kaliaguine S (2012) Functionalized metal organic framework-polyimide mixed matrix membranes for CO₂/CH₄ separation, *Journal of Membrane Science*, 413: 48-61.
- [11]. Dorosti F, Omidkhan M, Abedini R (2014) Fabrication and characterization of Matrimid/MIL-53 mixed matrix membrane for CO₂/CH₄ separation, *Chemical Engineering Research and Design*, 92: 2439-48.
- [12]. Adams R, Carson C, Ward J, Tannenbaum R, Koros W (2010) Metal organic framework mixed matrix membranes for gas separations, *Microporous and Mesoporous Materials*, 131: 13-20.
- [13]. Abedini R, Omidkhan M, Dorosti F (2014) Highly permeable poly (4-methyl-1-pentyne)/NH 2-MIL 53 (Al) mixed matrix membrane for CO₂/CH₄ separation, *RSC advances*, 4: 36522-36537.
- [14]. Pedram MZ, Omidkhan M, Amooghin AE (2014) Synthesis and characterization of diethanolamine-impregnated cross-linked polyvinylalcohol/glutaraldehyde membranes for CO₂/CH₄ separation, *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 20: 74-82.
- [۱۵]. قاسمی اصطهباناتی ا، امیدخواه م، عبادی آ. (۲۰۱۹) تهیه غشاهای شبکه آمیخته حاوی پلی اتر بلاک آمید و نانوذرات نقره به منظور بررسی تراوایی گازهای دی اکسید کربن، نیتروژن و متان. پژوهش نفت ۲۹:۵۶-۷۰.
- [16]. Alihosseini A, Zergani D, Saeedi Dehaghani AH (2019) Optimization of parameters affecting separation of gas mixture of O₂, N₂, CO₂ and CH₄ by PMP membrane modified with TiO₂, ZnO and Al₂O₃ nanoparticles, *Polyolefins Journal*, 7: 13-24.
- [17]. Alihosseini A, Hedayati Moghaddam A (2020) Permeability and Selectivity Prediction of Poly (4-methyl 1-pentane) Membrane Modified by Nanoparticles in Gas Separation through Artificial Intelligent Systems, *Polyolefins Journal*, 7: 91-98.
- [18]. Heidari BS, Moghaddam AH, Davachi SM, Khamani S, Alihosseini A (2019) Optimization of process parameters in plastic injection molding for minimizing the volumetric shrinkage and warpage using radial basis function (RBF) coupled with the k-fold cross validation technique, *Journal of Polymer Engineering*, 39: 481-92.
- [۱۹]. شیرانی م، اکبری ع، نژادکورکی ع، گلی ع، آزمون ب، شیرانی ن. (۲۰۱۸) بهینه سازی گوگردزدايي استخراجی نمونه سوخت با یک حلال یوتکتیک عمیق جدید سبز با استفاده از الگوریتم ژنتیک- شبکه عصبی. پژوهش نفت ۲۸:۱۴۷-۵۷.
- [۲۰]. محبیان ر، ریاحی م، کدخدایی ع. (۲۰۱۸) ترکیب روش های عصبی، فازی و عصبی- فازی با استفاده از الگوریتم مورچگان پیوسته برای تشخیص رخساره های مخزن. پژوهش نفت ۲۸:۹۷-۱۰۹.
- [21]. Savari M, Moghaddam AH, Amiri A, Shanbedi M, Ayub MNB (2017) Comprehensive heat transfer correlation for water/ethylene glycol-based graphene (nitrogen-doped graphene) nanofluids derived by artificial neural network (ANN) and adaptive neuro-fuzzy inference system (ANFIS), *Heat and Mass Transfer*, 53: 3073-83.
- [۲۲]. مفخمی مهرآبادی م، آقایی ع، صهبا یغمایی م. (۲۰۱۹) مدل سازی پیش بینی پارامترهای شار و گرفتگی غشاهای نانوکامپوزیت اولترافیلتراسیون PVDF عامل دار شده با نانولوله های کربنی با استفاده از سیستم های شبکه های هوشمند. پژوهش نفت ۲۸: ۳۵-۱۸.
- [23]. Picton P (1994) *Introduction to neural networks*: Macmillan International Higher Education.
- [24]. Demuth HB, Beale MH, De Jess O, Hagan MT (2014) *Neural network design*: Martin Hagan.



Genetic-neural Network Based Optimization of Gas Separation Process using Modified Polymeric Membrane

Amin Hedayati Moghaddam^{1*}, Seyed Amin Mirmohammadi¹, Afshar Alihosseini¹ and Farhad Amanizadeh Fini²

¹ Department of Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Central Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

² Petroleum Laboratory, School of Petroleum and Chemical Engineering, Science and Research Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran

Ami.hedayati_moghaddam@iauctb.ac.ir

DOI: 10.22078/pr.2020.4134.2877

Received: April/08/2020

Accepted: June/16/2020

Introduction

There are different processes for gas separation such as absorption, adsorption, cryogenic distillation, and membrane technology [1-3]. Due to the high energy consumption and high cost of conventional separation processes, extensive investments have been made on research and development of new technologies in gas separation. One of these new separation processes is the membrane process [4].

Addition of nanoparticles to a polymeric matrix leads to the enhancement of the performance of membrane gas separation. In this study, the aim is to find the optimum operative point of polymeric membrane modified by adding nanoparticles in gas separation. The assessed factors are type of nanoparticle, percentage of added nanoparticle, and cross membrane pressure. Artificial intelligence system was used to develop the model. This method has been used in different fields of engineering [5-9].

Materials and Methods

Nanoparticles of Al_2O_3 , ZnO , and TiO_2 were used for modification of the membrane performance. The ranges of nanoparticle concentration and operative cross membrane pressure were 2.5 to 15% and 2 to 25 bar respectively. To optimize the process, a robust model based on artificial neural network (ANN) was developed. This model was able to predict the values of permeability of oxygen, nitrogen, methane, and carbon dioxide. Genetic algorithm was used to find the

optimum operative conditions for each gas according to four defined strategies. It is clear that minimizing the values of operative parameters and maximizing the gas permeability are of interest.

Results and Discussion

Neural network models were developed. Next, the optimum operative conditions for assessed gases were found using methodology based on genetic algorithm and considering four strategies. The results of optimization show that the maximum values of permeability for oxygen, nitrogen, methane, and carbon dioxide are 334.7, 779.9, 902.7, and 270.4, respectively.

Conclusions

In the separation of oxygen, nitrogen and carbon dioxide gases, the addition of Al_2O_3 nanoparticles and for methane, the addition of ZnO nanoparticles leads to the highest performance of the gas separation process. Finally, the best developed model is a feed forward neural network, which is used to predict the amount of nitrogen gas permeability.

References

1. Aaron D, Tsouris C (2001) Separation of CO_2 from Flue Gas: A Review, Separation Science and Technology 40:321-48.
2. Wang S, Lu L, Lu X, Cao W, Zhu Y (2016) Adsorption of binary CO_2/CH_4 mixtures using

- carbon nanotubes: Effects of confinement and surface functionalization". *Separation Science and Technology* 51:1079-92.
3. Khot KM, Heer PKKS, Biniwale RB, Gaikar VG (2014) Equilibrium adsorption studies of CO₂, CH₄, and N₂ on amine functionalized polystyrene, *Separation Science and Technology* 49:2376-88.
 4. Salahuddin Z, Farrukh S, Hussain A (2018) Optimization study of polyethylene glycol and solvent system for gas permeation membranes, *International Journal of Polymer Analysis and Characterization* 23:483-92.
 5. Moghaddam AH, Shayegan J, Sargolzaei J (2016) Investigating and modeling the cleaning-in-place process for retrieving the membrane permeate flux: Case study of hydrophilic polyethersulfone (PES), *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers* 62:150-7.
 6. Heidari BS, Moghaddam AH, Davachi SM, Khamani S, Alihosseini A (2019) Optimization of process parameters in plastic injection molding for minimizing the volumetric shrinkage and warpage using radial basis function (RBF) coupled with the k-fold cross validation technique, *Journal of Polymer Engineering* 39:481-92.
 7. Shirani M, Akbari A, NejadKooraki A, Goli A, Azmoon B, Shirani N, Habibollahi S (2018) Optimization of extractive desulfurization of model oil with a novel green deep eutectic solvent using genetic algorithm-artificial Neural network, *Journal of Petroleum Research* 28:147-57.
 8. Mohebian R, Riahi MA, Kadkhodaie A (2018) Integrating Neural, Fuzzy Logic, Nero-fuzzy approaches implementing ant colony optimization routing algorithm to determine reservoir facies, *Journal of Petroleum Research* 28:97-109.
 9. Mofakhami M, Aghaei A, Yaghmaee MS (2019) Modeling the prediction of flux and fouling parameters of PVDF nanocomposite ultrafiltration membranes with carbon nanotubes using artificial intelligence networks, *Journal of Petroleum Research* 28:18-35.