

Applying Artificial Neural Network in Prediction Behavior of Alkylation of m-Cresol with Isopropanol Process and Yield Optimization by Bee Colony Algorithm

Hamid Karami¹, Saeed Soltanali^{2*}, Shokoufe Tayyebi³

1 Department of Chemical and Petroleum Engineering, Sharif University of Technology, Tehran, Iran

2 Catalysis Technologies Development Division, Research Institute of Petroleum Industry, Tehran, Iran

3 Refining Technologies Development Division, Research Institute of Petroleum Industry, Tehran, Iran

Abstract

Research subject: In recent decades, hybrid optimizations methods based on natural phenomenon have placed special position according to their capabilities in finding optimal solutions without expensive computational loads and disassociation on choosing initial points. Artificial Neural Network is used as one of the powerful tools of Artificial Intelligence for process simulation. The employment of the neural network in the modeling of m-Cresol alkylation process of with isopropanol as well as meta-heuristic methods in obtaining the optimal conditions for the catalyst and the reaction can prepare an effective step towards a high efficiency process.

Research approach: In the present study, the artificial neural network is applied to model alkylation of m-Cresol with isopropanol process. In addition, the bee colony is employed in order to optimize the process yield. To verify its performance, the proposed method is used in prediction of the m-Cresol conversion and thymol selectivity of the alkylation process with isopropanol 120 data. In this process, the input variables are Weight Hourly Space Velocity (WHSV), pressure and temperature; m-Cresol conversion and thymol selectivity are considered as the output variables of the neural network. Five hidden neurons are considered for the proposed neural network. 120 data is used to train the neural network. The meta-heuristic approach based on bee colony (BC) is applied to maximize the yield of the process.

Main results: The results confirm that the proposed method develops the accurate model with an R2 value of greater than 97.5%. The maximum yield is obtained 28.9% by bee colony algorithm with adjustable variables that are WHSV of 0.062 hr⁻¹, the pressure of 1.5 bar and the temperature of 300 °C. In addition, in order to achieve the better performance of the optimization algorithm, the appropriate values of acceleration coefficient and population size are chosen 100 and 10 during the trial-and-error phase.

key words

Artificial Neural Network

Bee Colony Algorithm

Optimization

Alkylation of m-Cresol

Thymol

*To whom correspondence should be addressed:
soltanalis@ripi.ir

پژوهش‌های کاربردی مهندسی شیمی - پلیمر

به کارگیری شبکه عصبی در پیش‌بینی رفتار فرایند آلکیلاسیون متاکروزل با ایزوپروپانول و بهینه‌سازی بازده فرایند با الگوریتم کلونی زنبورهای عسل

حمید کرمی^۱، سعید سلطانه‌لی^{۲*}، شکوفه طیبی^۳

۱ دانشکده مهندسی شیمی و نفت، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، ایران
۲ پژوهشکده توسعه فناوری‌های کاتالیست، پژوهشگاه صنعت نفت، تهران، ایران
۳ پژوهشکده توسعه فناوری‌های پالایش، پژوهشگاه صنعت نفت، تهران، ایران
۱۴۱۵

چکیده

موضوع تحقیق: در دهه‌های اخیر روش‌های بهینه‌سازی مبتنی بر پدیده‌های طبیعی به دلیل عدم نیاز به انجام محاسبات سنگین ریاضی، عدم وابستگی به نقاط انتخابی اولیه و قابلیت بهینه‌سازی نسبت به سایر روش‌ها، در زمینه بهینه‌سازی ترکیبی جایگاه ویژه‌ای پیدا کرده است. علاوه بر این شبکه عصبی مصنوعی به‌عنوان یکی از ابزار قدرتمند هوش مصنوعی در شبیه‌سازی فرایندها به کار برده می‌شود. به کارگیری شبکه عصبی برای مدل‌سازی فرایند آلکیلاسیون متاکروزل با ایزوپروپانول و روش فرا ابتکاری در به دست آوردن شرایط بهینه برای کاتالیست و واکنش می‌تواند گام مؤثری، در جهت انجام فرایند با بازده بالا فراهم سازد.

روش تحقیق: در این پژوهش شبکه عصبی برای پیش‌بینی فرایند آلکیلاسیون متاکروزل با ایزوپروپانول و الگوریتم کلونی زنبورهای عسل به‌منظور بهینه‌سازی بازده فرایند به کار گرفته شد. شبکه عصبی طراحی شده دارای ۵ نورون در لایه پنهان است. به‌منظور بررسی عملکرد الگوریتم پیشنهادی، شبکه عصبی مصنوعی برای پیش‌بینی تبدیل متاکروزل و گزینش‌پذیری آن به تیمول در فرایند آلکیلاسیون متاکروزل با ایزوپروپانول ۱۲۰ داده استفاده شد. در این فرایند، سرعت فضایی (WHSV)، فشار و دما، به‌عنوان متغیرهای ورودی و تبدیل متاکروزل و گزینش‌پذیری تیمول به‌عنوان متغیرهای خروجی شبکه عصبی در نظر گرفته شده است.

نتایج اصلی: سامانه شبیه‌سازی طراحی شده با ضریب رگرسیون (R^2) بالاتر از ۹۷/۵٪، نشان‌دهنده دقت بالای شبکه عصبی طراحی شده برای این فرایند است. میزان بیشینه بازده این فرایند با استفاده از الگوریتم کلونی زنبورهای عسل ۲۸/۹٪ (با متغیرهای قابل تنظیم $WHSV=0/062 h^{-1}$ ، فشار ۱/۵ bar و دمای ۳۰۰ °C) حاصل شد. هم‌چنین برای دستیابی به کارایی بهتر الگوریتم بهینه‌سازی، مقادیر مطلوب ضریب شتاب و جمعیت زنبورها با آزمون سعی و خطا ۱۰۰ و ۱۰ حاصل شد.

فصلنامه علمی - پژوهشی بین رشته‌ای
سال پنجم، شماره ۴، نسخه ۱
زمستان ۱۴۰۰، صفحه ۷۸-۶۹

کلمات کلیدی

شبکه عصبی مصنوعی
الگوریتم کلونی زنبورها
بهینه‌سازی
آلکیلاسیون متاکروزل
تیمول

*مسئول مکاتبات:

soltanalisi@ripi.ir

۱ مقدمه

تیمول سازنده بسیاری از روغن‌های اساسی طبیعی است که به‌طور معمول از مواد گیاهی مانند آویشن، نعنای و اوکالیپتوس استخراج می‌شود و به‌صورت مصنوعی نیز تولید می‌شود. این ماده خاصیت ضد عفونی‌کننده و فعالیت ضد میکروبی روی باکتری‌های درگیر در عفونت‌های دستگاه تنفسی فوقانی دارد [۱،۲]. همچنین این ماده به‌عنوان آنتی‌اکسیدان از خود فعالیت نشان می‌دهد و در برخی از عطرها، طعم‌دهنده‌ها و به‌عنوان واسطه در عطرسازی مورد استفاده قرار می‌گیرد [۳].

ساخت صنعتی تیمول در حال حاضر توسط فرایند بایر انجام می‌شود که شامل آلکیلاسیون فاز مایع متاکروزول با پروپین به‌عنوان ماده آلکیله کننده در دمای واکنش ۳۶۵ - ۳۵۰ درجه سانتی‌گراد و فشار ۵۰ اتمسفر است. کاتالیست مورد استفاده در این سنتز آلومینای فعال است که به‌طور معمول حاوی ۴۰ درصد وزنی گاما آلومینا و ۳۵ درصد وزنی بوهمیت است. محصول این فرایند حاوی ۶۰٪ تیمول، ۲۵٪ متاکروزول واکنش نداده و ۱۵٪ محصولات دیگر است؛ بنابراین، فرایند بایر دارای ۷۵٪ تبدیل و گزینش‌پذیری (نسبت به تیمول) ۸۰٪ است [۴].

استفاده از پروپین به‌عنوان ماده آلکیلیت‌کننده، همانند فرایند بایر، دارای چندین محدودیت فنی است. استفاده از پروپین به دلیل الیگومریزاسیون در واکنش‌های ثانویه با تشکیل کک همراه است که در نتیجه منجر به غیرفعال شدن کاتالیست می‌شود. همچنین، علاوه بر مشکلات تأمین پروپین به‌عنوان یکی از اجزای واکنش، خطرات احتمالی کار با پروپین نیز استفاده از آن را به‌عنوان آلکیلیت‌کننده دشوار می‌سازد [۵]. با توجه به ساختار مولکولی تیمول، مطالعاتی برای تعیین اینکه آیا ژئولیت‌های شکل‌گزینش‌پذیر کاتالیزورهای بهتری برای سنتز هستند یا خیر انجام شده است. در مطالعه انجام‌شده، کاتالیزورهای ژئولیتی مختلف از نوع Beta، Mordenite و ZSM-۵ با نسبت‌های مختلف برای آلکیلاسیون انتخابی m-Cresol با پروپین در سنتز تیمول مورد بررسی قرار گرفتند. در شرایط عملیاتی ۲۵۰ درجه سانتی‌گراد و ۱ اتمسفر، نمونه ژئولیت با منافذ متوسط H-ZSM-۵ با کم‌ترین تراکم سایت‌های اسیدی، فعالیت، پایداری و گزینش‌پذیری نسبت به تیمول این کاتالیست در شرایط واکنش معتدل‌تر نسبت به کاتالیست آلومینا استفاده شده برای فرایند صنعتی بایر، برتر بود [۶]. مطالعات انجام‌شده صرفاً اثر تغییرات پارامترها را بر گزینش‌پذیری و تبدیل تیمول بررسی کرده‌اند. داده‌های ارائه‌شده در مطالعات، امکان مدل‌سازی اثر پارامتر مهم عملیاتی (دما، فشار و WHSV) بر میزان تبدیل و گزینش‌پذیری فراهم

می‌سازد. معرفی شرایط بهینه برای این کاتالیست و واکنش گام بزرگی در جهت انجام این فرایند با بازده بالای تولید تیمول به دست می‌دهد.

در جهت کاهش مشکلات ناشی از پروپین به‌عنوان عامل آلکیلیت‌کننده، به کارگیری ایزوپروپانول به جای پروپین می‌تواند مورد قبول واقع شود. شرایط عملیاتی (سرعت فضایی (WHSV)، فشار و دما) استفاده از ایزوپروپانول به‌عنوان عامل آلکیلیت‌کننده در واکنش با کروزل توسط محققین مورد مطالعه قرار دارد.

روش‌های ابتکاری به‌عنوان روش حل مسئله برای انسان‌ها از دیرباز شناخته شده است که شاخه مهمی از یادگیری در علوم مختلف را تشکیل می‌دهد. در شرایطی که دانش کافی و حتی اطلاعات ناقص در مورد مسئله وجود ندارد، ابتکار عمل نقش اصلی را بازی می‌کند. در دهه‌های اخیر روش‌های بهینه‌سازی مبتنی بر پدیده‌های طبیعی به علت عدم نیاز به انجام محاسبات سنگین ریاضی، عدم وابستگی به نقاط انتخابی اولیه و قابلیت بهینه‌یابی کلی نسبت به سایر روش‌ها، در زمینه بهینه‌سازی ترکیبی، جایگاه ویژه‌ای پیدا کرده‌اند. روش‌های مبتنی بر پدیده‌های طبیعی سعی در قانونمند کردن روند جستجوی تصادفی با استفاده از قوانین حاکم بر طبیعت دارند. یکی از مطرح‌ترین این روش‌ها، الگوریتم بهینه‌سازی فرا ابتکاری است [۷]. الگوریتم فرا ابتکاری عملکرد بهتری نسبت به الگوریتم‌های ابتکاری دارند زیرا فرایند حل مسئله با نوعی از اطلاعات و دانش‌های موجود در فرایند هدایت می‌شود. از روش‌های جستجوی فرا ابتکاری می‌توان به الگوریتم اجتماع ذرات (Particle Swarm Optimization)، الگوریتم مورچگان (Ant Colony Optimization)، الگوریتم جستجوی تابو (Tabu Search Simulated)، شبکه عصبی، شیشه‌سازی تبرید (Simulated Annealing) و الگوریتم ژنتیک اشاره کرد. در مهندسی فرایند، بسیاری از مسائل بهینه‌سازی که به لحاظ عملی مهم هستند، مانند سنتز شبکه مبدل حرارتی و جرمی، بهینه‌سازی استاتیک و دینامیک راکتورهای شیمیایی و زیستی (ناپیوسته، نیمه-پیوسته، و پیوسته) لازم است برای پیش‌بینی رفتار سامانه تعدادی آزمایش زمان‌بر و پرهزینه تحت شرایط عملیاتی مختلف انجام شوند تا به این وسیله رفتار سامانه پیش‌بینی شود. بنابراین، ضروری است که مدلی جامع و راه‌حل‌های معنی‌دار در مدت زمان منطقی و با دقت کافی برای پیش‌بینی رفتار سامانه ارائه دهیم. الگوریتم‌های فرا ابتکاری در حل چنین مسائل دشواری نقشی کلیدی ایفا می‌کنند [۷،۸].

پیشرفت روزافزون روش‌های یادگیری ماشینی، به‌ویژه شبکه‌های عصبی مصنوعی، رویکردی جدید را برای رگرسیون مسائل در زمینه‌های مختلف علمی و

ایزوپروپانول در ابتدا واکنش دهد تا پروپن (و آب) تشکیل شود سپس متاکروزول را آلکیل کند.

دو واکنش ممکن است در آلکیلاسیون کاتالیستی متاکروزول با ایزوپروپانول برای سنتز تیمول وجود داشته باشد، که عبارتند از:

(i) حذف آب ایزوپروپانول برای تشکیل یک یون کربنیوم ثانویه (و سپس پروپن) و به دنبال آن آلکیلاسیون m-Cresol با یون کربنیوم (یا پروپن جذب شده به ترتیب) در واکنش SN-1.

(ii) آلکیلاسیون مستقیم متاکروزول با ایزوپروپانول در واکنش SN-2.

مطالعه‌ای که مستلزم بررسی فعالیت و انتخاب شرایط بهینه عملیاتی (سرعت فضایی (WHSV)، فشار و دما) با استفاده از ایزوپروپانول به عنوان عامل آلکیل‌کننده تاکنون انجام نشده است. هدف از این مطالعه، دستیابی به شرایط بهینه عملیاتی آلکیلاسیون متاکروزول با ایزوپروپانول به کمک مدل‌سازی شبکه عصبی است [۱۳، ۱۴].

۲-۲ شبکه عصبی مصنوعی (Artificial Neural Network)

شبکه عصبی مصنوعی ابزاری است برای پیش‌بینی رفتار فرایند که با الهام از سامانه عصبی زیستی به یادگیری و کلیت بخشیدن روابط غیرخطی بین متغیرهای ورودی و خروجی فرایند می‌پردازد. شبکه عصبی مجموعه‌ای از لایه‌هاست که در هر لایه نورون‌ها قرار دارند. نورون شامل دو بخش اصلی بوده که بخش اول، جمع‌کننده و بخش دیگر، تابع تبدیل (Transfer Function) است. اولین گام در طراحی سامانه شبکه عصبی آموزش آن است. داده‌های یادگیری شامل متغیرهای ورودی و خروجی فرایند است و ارتباط بین آن‌ها در بردار وزن نورون‌ها و بایاس هستند که در طول آموزش به دست می‌آیند [۱۵].

۲-۳ الگوریتم کلونی زنبور عسل (Bee Colony Algorithm)

الگوریتم کلونی زنبورهای عسل یکی از الگوریتم‌های بهینه‌سازی الهام‌شده از طبیعت است که بر مبنای رفتار جستجوگرانه زنبورهای عسل، شبیه‌سازی شده است. این الگوریتم با تولید تصادفی جمعیت اولیه زنبور عسل آغاز می‌شود که شامل سه نوع زنبور عسل است، یعنی زنبورهای کارگر، ناظر و پیشاهنگ. زنبورهای کارگر فضای جستجو را کاوش می‌کنند و اطلاعات به دست آمده خود را با زنبوران ناظر به اشتراک می‌گذارند تا منابع مناسب را با توجه به عملکرد مناسب (تابع برازندگی) انتخاب کنند. مقدار تابع برازندگی بهبود می‌یابد، زنبور ناظر موقعیت به‌روز شده را می‌پذیرد. زنبور پیشاهنگی موقعیت‌های جدید را به‌طور تصادفی برای یافتن منبع غذایی جدید

مهندسی ارائه کرده است. شبکه‌های عصبی مصنوعی گزینه‌هایی عالی برای بسیاری از کاربردها مانند مدل‌سازی و کنترل در مهندسی شیمی هستند که دلیل آن مستقل بودن آن‌ها از فهم فیزیکی مسائل، توانایی بررسی مقادیر بالای داده‌های با ابعاد بزرگ و پیش‌بینی‌های دقت است. به‌عنوان مثال، مدل فازی MIMO (Multi Input Multi Output) به‌منظور مدل‌سازی رفتار انتشار گازهای خروجی از اگزوزها و خصوصیات احتراق در موتورهای احتراق تراکمی طراحی شده است [۹].

در پژوهش پتیت و همکاران [۱۰] فرایند آلکیلاسیون تولوئن با متانول در حضور کاتالیست ZSM-5 انجام گرفت، با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی بازدهی فرایند تحت شرایط خاص پیش‌بینی شد؛ علاوه بر این، شیائو و همکاران [۱۱] با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی (ANN) بازدهی و توزیع محصولات را در فرایند آلکیلاسیون بنزن با پروپیلن مورد بررسی قرار دادند، همبستگی بالای نتایج آزمایشگاهی و پیش‌بینی شده دلیلی بر عملکرد بالای ANN در برآورد توزیع محصول، واکنش آلکیلاسیون را نشان می‌دهد. در تحقیق محمودیان و همکاران [۱۲] اثرات سه پارامتر شامل دما، طول راکتور و فشار بر روند آلکیلاسیون بررسی شد، در این فرایند از شبکه عصبی برای مدل‌سازی راکتور آلکیلاسیون و از الگوریتم ژنتیک برای بهینه‌سازی فرایند استفاده شد.

در این مقاله، با استفاده از شبکه عصبی، به شبیه‌سازی فرایند آلکیلاسیون متاکروزول با ایزوپروپانول، پرداخته می‌شود. با هدف طراحی شبکه عصبی با کارکرد مطلوب، تعداد مناسب نورون‌های پنهان با روش حدس و خطا حاصل شد. نتایج حاصل نشان‌دهنده دقت بالای مدل مورد استفاده است. سپس به‌منظور تعیین مقدار بهینه بازده فرایند و مقادیر شرایط عملیاتی متناظر با آن بازده، از الگوریتم کلونی زنبورهای عسل استفاده شده است. این الگوریتم به‌عنوان یکی از الگوریتم‌های ابتکاری است که به‌منظور دستیابی به نقطه بهینه سراسری مورد استفاده قرار گرفته است. در این مقاله، به‌منظور دستیابی به نتایج مناسب، پارامترهای این الگوریتم تنظیم شده است.

۲ نظری

۱-۲ آلکیلاسیون متاکروزول با ایزوپروپانول

استفاده از C_p -الکل‌ها و C_p -اترها به‌عنوان عامل آلکیل‌کننده جایگزین، بر روی کاتالیست‌های مختلف مورد مطالعه قرار گرفته است. استفاده از ایزوپروپانول به‌عنوان عامل آلکیل‌کننده، ایزوپروپانول را قادر می‌سازد تا با سازوکار SN-2 با آلکیلاسیون و حذف هم‌زمان آب واکنش دهد. همچنین می‌تواند با

در صورتی که بعد از چند مرحله، بهبودی در تابع برازندگی متغیرهای قابل تنظیم اتفاق نیفتد، مجدداً مقادیر تصادفی به آن‌ها داده شده و مراحل الگوریتم تکرار می‌شود تا شرط اتمام الگوریتم ارضا شود. در این تحقیق، بیشینه تکرار برابر با ۲۰، به‌عنوان شرط پایان الگوریتم در نظر گرفته شده است.

۲-۴ شاخص‌های ارزیابی مدل شبکه عصبی

در این تحقیق، به‌منظور ارزیابی شبکه عصبی طراحی شده، دو شاخص آماری مورد استفاده قرار گرفته است. میانگین مربعات خطا (MSE) که با رابطه زیر به دست می‌آید.

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^P \sum_{n=1}^N (y_{exp,i}(n) - y_{pre,i}(n))^2 \quad (8)$$

که y_{exp} داده خروجی واقعی و y_{pre} داده خروجی از شبکه عصبی است. P ، نشان‌دهنده تعداد خروجی‌های فرایند و N ، تعداد داده‌های به‌کارگرفته شده برای آموزش شبکه عصبی است. ضریب رگرسیون (R^2):

$$R_i^2 = 100 - 100 * \frac{\sum_{n=1}^N (y_{exp,i}(n) - y_{pre,i}(n))^2}{\sum_{n=1}^N (\bar{y}_{exp,i} - y_{pre,i}(n))^2} \quad (9)$$

که $\bar{y}_{exp,i}$ میانگین آمین داده‌های واقعی است. R_i^2 ضریب رگرسیون خروجی نام است. هرچه ضریب رگرسیون به یک نزدیک‌تر باشد، شبکه عصبی طراحی شده از دقت بیشتری برخوردار است.

۳ نتایج و بحث

نتایج حاصل در این تحقیق مشتمل بر دو بخش پیش‌بینی فرایند آلکیلایون با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی و بهینه‌سازی بازده فرایند مذکور با استفاده از الگوریتم کلونی زنبورها است.

۳-۱ نتایج حاصل از شبیه‌سازی شبکه عصبی مصنوعی

۱۲۰ داده آزمایشگاهی از فرایند، مورد استفاده قرار گرفته است که ۲۵٪ آن برای آزمون شبکه عصبی و بقیه، برای آموزش این شبکه به‌کار برده شده است. روش گرادیان مزدوج پس از انتشار (Back-Propagation Conjugate Gradient) برای آموزش شبکه عصبی در نظر گرفته شده است. ابتدا بردار داده‌های ورودی و خروجی فرایند را نرمال کرده، به‌طوری‌که بین ۰ و ۱+ تغییر کنند. توابع انتقال به‌کار برده شده برای لایه‌های پنهان و خروجی، Logsig هستند.

به‌منظور دستیابی به ساختار مناسب شبکه عصبی، با تغییر تعداد نورون‌های لایه پنهان، میزان خطاهای

جستجو می‌کند. یک زنبور عسل کارگر در حالت رکود تابع برازندگی به زنبوری پیشاهنگی تبدیل می‌شود. روند تکرار تا زمان تأیید معیار توقف ادامه می‌یابد [۱۵].

برای شروع الگوریتم، جمعیت اولیه به‌طور تصادفی به تعداد P (اندازه جمعیت) تولید می‌شود.

$$x_{ij} = f_{rand}(x_{min,i}, x_{max,i}) \quad i = 1, 2, \dots, M \quad j = 1, 2, \dots, P \quad (1)$$

که x_{ij} ، i آمین متغیر از Z آمین جمعیت است. $x_{min,i}$ و $x_{max,i}$ نشان‌دهنده کمترین و بیشترین مقدار متغیر i ام است. f_{rand} تابع تولیدکننده مقدار تصادفی و M ، تعداد متغیرهای قابل تنظیم برای بهینه‌سازی در فرایند است. برای تعیین مقادیر جدید، رابطه (۲) ارائه می‌شود.

$$x_{new,ij} = \begin{cases} x_{min,ij} + \phi(Step_{ij}) \times (x_{max,ij} - x_{min,ij}) & Step_{ij} > 0 \\ x_{max,ij} + \phi(Step_{ij}) \times (x_{max,ij} - x_{min,ij}) & Step_{ij} \leq 0 \end{cases} \quad (2)$$

$x_{new,ij}$ مقادیر جدیدی از متغیرهای قابل تنظیم هستند. ϕ تابعی از $Step_{ij}$ است که به‌صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$Step_{ij} = \phi_j \times (x_{ij} - x_{ik}) \quad k \neq j \quad (3)$$

اندیس k به‌طور تصادفی انتخاب می‌شود.

ϕ_{ij} برای هر متغیر و در هر جمعیت به‌صورت تصادفی و با استفاده از رابطه (۴) انتخاب می‌شود که α ضریب شتاب (Acceleration Coefficient) و عددی مثبت است.

$$\phi_{ij} = f_{rand}(-\alpha, \alpha) \quad (4)$$

به‌منظور اینکه متغیرهای قابل تنظیم بین صفر و یک هستند، ϕ به‌صورت زیر تعریف می‌شود.

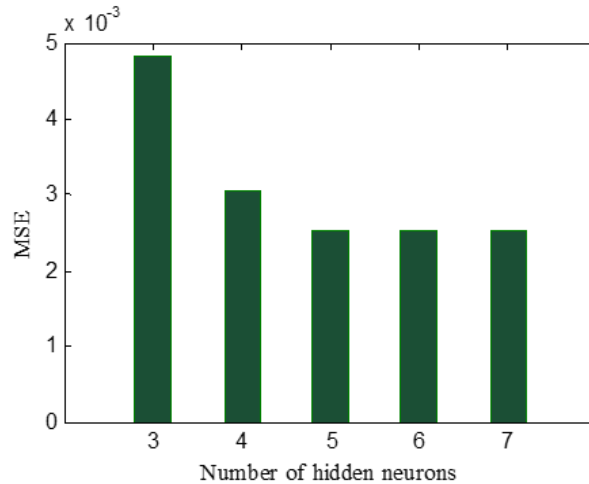
$$\phi(Step_{ij}) = \begin{cases} \frac{1}{Step_{ij}} |Step_{ij}| > 1 \\ e^{-Step_{ij}} & 0 \leq Step_{ij} \leq 1 \\ -e^{Step_{ij}} & -1 \leq Step_{ij} < 0 \end{cases} \quad (5)$$

برای انتخاب منابع جدید غذایی، تابع احتمالی بر حسب تابع برازندگی ارائه می‌شود که متغیرهای قابل تنظیمی که میزان احتمال بیشتری دارند، به‌عنوان منابع جدید انتخاب می‌شوند. تابع احتمال (P_j) برای جمعیت Z ام به‌صورت رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$P_j = \frac{Fit_j}{\sum_{j=1}^P Fit_j} \quad (6)$$

$$Fit_j = \frac{1}{1 + OF_j} \quad (7)$$

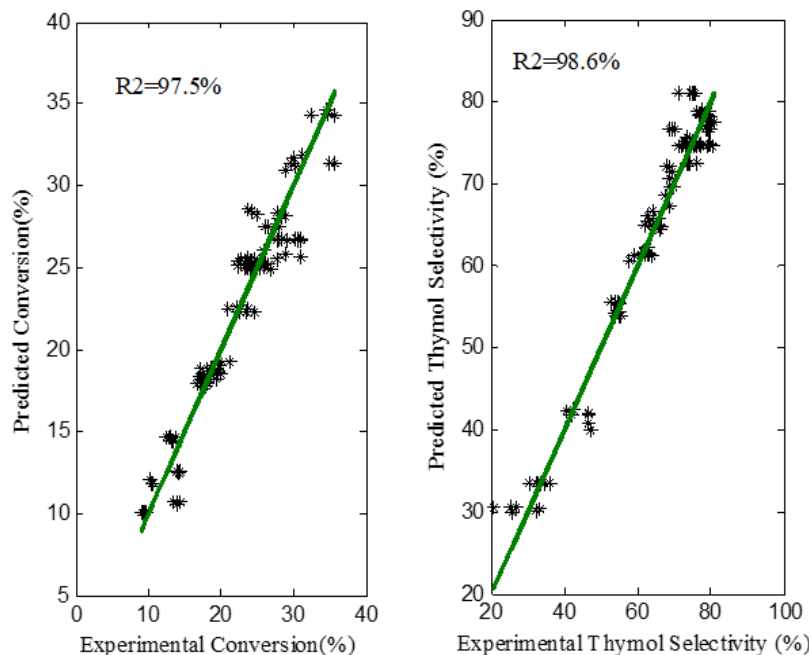
که OF_j مقدار تابع برازندگی برای جمعیت Z ام است.



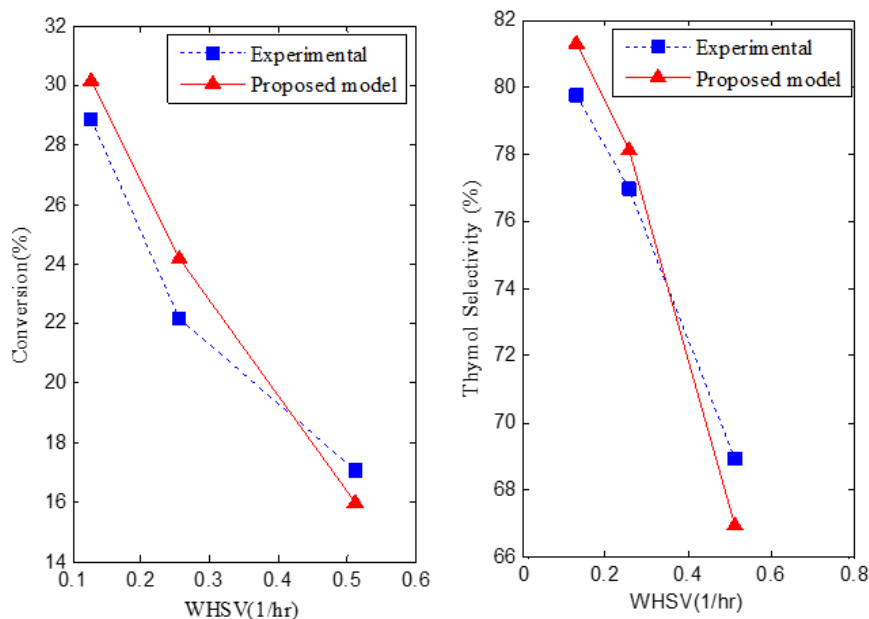
شکل ۱ تأثیر تعداد نورون‌های لایه پنهان بر خطای شبکه عصبی
Figure 1 Effect of hidden neuron numbers on MSE

گزینه‌پذیری به محصول مطلوب تیمول شده است. داده‌های مدل پیشنهادی در هر دو پارامتر تبدیل و گزینه‌پذیری با داده‌های تجربی هم‌پوشانی دارند. همان‌طور که در شکل ۳ نشان داده شده است، افزایش سرعت فضایی (کم شدن زمان اقامت خوراک بر روی بستر کاتالیست) سبب کاهش میزان تبدیل و گزینه‌پذیری به محصول مطلوب تیمول شده است. داده‌های مدل پیشنهادی در هر دو پارامتر تبدیل و گزینه‌پذیری با داده‌های تجربی هم‌پوشانی دارند. همان‌طور که در شکل ۴ نشان داده شده است، افزایش فشار اثر مثبتی بر میزان تبدیل دارد و بالعکس بر روی گزینه‌پذیری به محصول مطلوب اثری منفی ایجاد می‌کند و باعث کاهش گزینه‌پذیری به محصول

شبکه عصبی در شکل ۱، گزارش شده است. همان‌طور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، تعداد نورون لایه پنهان برابر با ۵ برای شبکه عصبی مورد بررسی، با میزان میانگین مربعات خطای ۰/۰۰۲۳، مناسب است. به منظور بررسی عملکرد شبکه عصبی طراحی شده، منحنی رگرسیون تبدیل و گزینه‌پذیری در شکل ۲ بر مبنای داده‌های آزمون، نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود مقادیر R^2 بالاتر از ۹۷/۵٪، نمایانگر تطابق مناسب و دقیق مدل شبکه عصبی طراحی شده با داده‌های آزمایشگاهی است. همان‌طور که در شکل ۳ نشان داده شده است، افزایش سرعت فضایی (کم شدن زمان اقامت خوراک بر روی بستر کاتالیست) سبب کاهش میزان تبدیل و



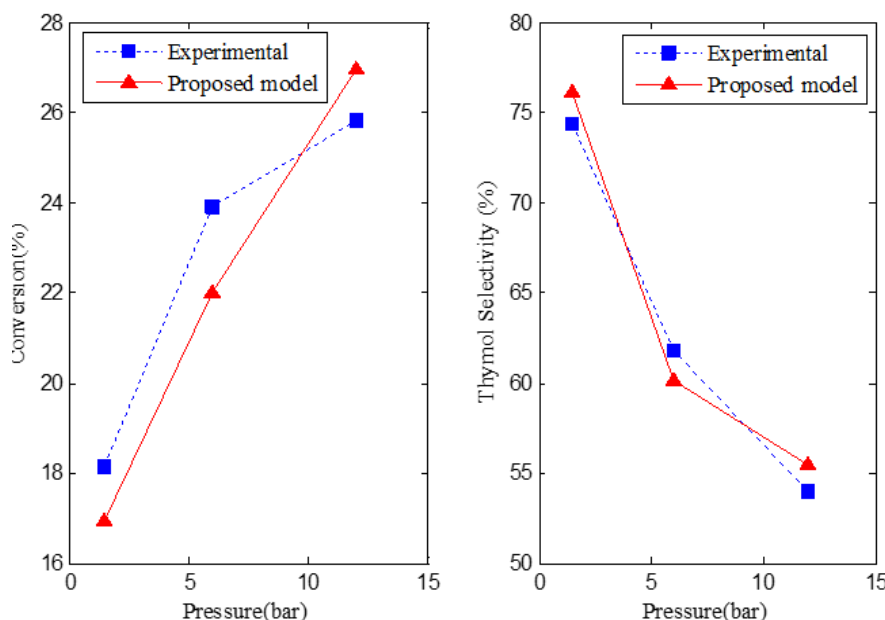
شکل ۲ منحنی رگرسیون متغیرهای خروجی با استفاده از مدل شبکه عصبی
Figure 2 Regression plots of output variables for designed neural network.



شکل ۳ مقایسه متغیرهای خروجی بین مدل ارائه‌شده و داده‌های آزمایشگاهی بر حسب WHSV در فشار ۳ بار و دمای ۲۵۰ درجه سانتی‌گراد.
Figure 3 Output Comparisons between proposed model and experimental data versus WHSV at Pressure = 3 bar, Temperature = 250°C.

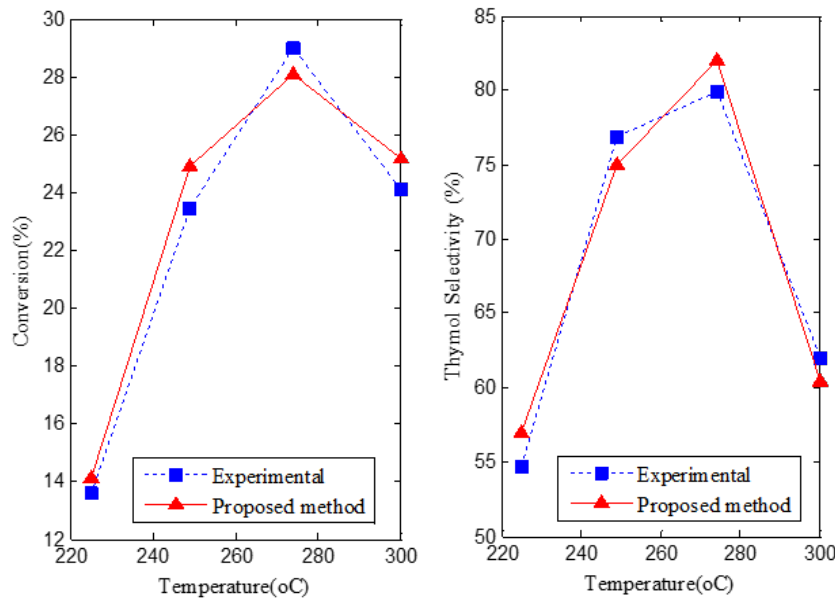
مطلوب تیمول شده است. افزایش بیش‌ازحد دما باعث پدیده‌هایی مانند الیگومریزاسیون و کک می‌شود که همین امر سبب کاهش میزان تبدیل و گزینش‌پذیری به محصول مطلوب می‌شود. داده‌های مدل پیشنهادی در هر دو پارامتر تبدیل و گزینش‌پذیری با داده‌های تجربی هم‌پوشانی دارند.

تیمول می‌شود. داده‌های مدل پیشنهادی در هر دو پارامتر تبدیل و گزینش‌پذیری با داده‌های تجربی هم‌پوشانی دارند. همان‌طور که در شکل ۵ نشان داده‌شده است، افزایش دمای واکنش سبب به وجود آمدن نقطه‌ای بهینه برای میزان تبدیل و گزینش‌پذیری به محصول



شکل ۴ مقایسه متغیرهای خروجی بین مدل ارائه‌شده و داده‌های آزمایشگاهی بر حسب فشار در سرعت فضایی 0.508 h^{-1} و دمای ۲۷۵ درجه سانتی‌گراد.

Figure 4 Output Comparisons between proposed model and experimental data versus pressure at WHSV = 0.508 h⁻¹, Temperature = 275 °C.



شکل ۵ مقایسه متغیرهای خروجی بین مدل ارائه شده و داده‌های آزمایشگاهی بر حسب دما در سرعت فضایی 0.257 h^{-1} و فشار ۳ بار.
Figure 5 Output Comparisons between proposed model and experimental data versus temperature at WHSV=0.257 h⁻¹, Pressure =3 bar.

نیز، سرعت فضایی، فشار و دما در نظر گرفته می‌شوند. در این تحقیق، بیشینه تکرار برابر با ۲۰، به‌عنوان شرط پایان الگوریتم در نظر گرفته شده است.

۳-۳ تعیین پارامترهای مؤثر الگوریتم بهینه‌سازی

ضریب شتاب (α) و اندازه جمعیت زنبورها (P)، نقش مؤثری در عملکرد الگوریتم کلونی زنبورها دارد. برای دستیابی به عملکرد مناسب الگوریتم به کار گرفته شده در این تحقیق، دو پارامتر مذکور در سطوح مختلف تغییر داده شده است. هم‌چنین برای کاستن تأثیر پارامترها تصادفی مورد استفاده در الگوریتم، الگوریتم را سه بار اجرا کرده و نتایج در جداول ۱ و ۲ گزارش شده است. همان‌طور که در جداول ۱ و ۲ مشاهده می‌شود مقادیر مطلوب برای α و P ، ۱۰۰ و ۱۰ است.

۲-۳ نتایج حاصل از بهینه‌سازی با استفاده از الگوریتم کلونی زنبورها

برای بهینه‌سازی این فرایند، تابع برازندگی (OF) در این تحقیق به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$OF = -(Conversion * Selectivity) = -Yield \quad (10)$$

از آنجایی که الگوریتم کلونی زنبور عسل بر اساس کمینه‌کردن کدنویسی شده است و در این تحقیق، هدف بیشینه‌کردن میزان بازده است، تابع برازندگی به صورت منفی حاصل ضرب میزان تبدیل و گزینش‌پذیری تعریف می‌شود. متغیرهای قابل تنظیم

جدول ۱ مقادیر بازده بر حسب تغییرات ضرایب شتاب.

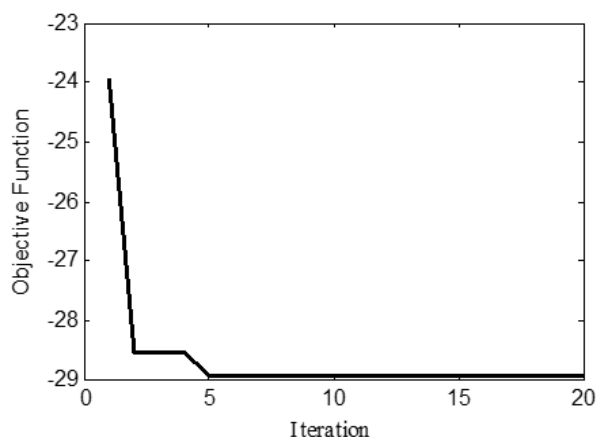
Table 1 Yield values based on various acceleration coefficient.

α	1	5	10	100	200
Run1#: Yield(%)	24.5	27.1	27.3	28.9	28.4
Run2#: Yield(%)	22.3	23.3	26.5	27.6	28.9
Run3#: Yield(%)	25.8	26.9	25.8	28.8	27.2

جدول ۲ مقادیر بازده بر حسب تغییرات اندازه جمعیت زنبورها.

Table 2 Obtained results from different bee population size.

P	Bee population size	5	10	20	30
Run1#: Yield(%)	Run1#: Yield(%)	24.1	26.3	27.1	26.9
Run2#: Yield(%)	Run2#: Yield(%)	22.8	27.1	26.3	27.1
Run3#: Yield(%)	Run3#: Yield(%)	23.9	26.8	26.9	26.4



شکل ۶ تغییرات تابع هدف بر حسب متغیر تکرار در الگوریتم بهینه‌سازی کلونی زنبورها
Figure 6 Objective function of bee colony optimization versus iteration.

جدول ۳ متغیرهای قابل تنظیم فرایند در شرایط بهینه

Table 3 Values of adjustable variables in the optimum condition.

Variable	Value
WHSV (h^{-1})	0.062
Pressure (bar)	1.5
Temperature ($^{\circ}C$)	300

متغیرهای خروجی شبکه عصبی در نظر گرفته شده است. در شبکه عصبی طراحی شده یک لایه پنهان با پنج نورون و روش آموزش گرادیان مزدوج پس انتشار به کار برده شده است. میانگین مربعات خطا کمتر از 0.0023 ، نشان دهنده عملکرد مناسب شبکه عصبی طراحی شده است. به منظور تعیین مقدار بهینه بازده در این فرایند، الگوریتم کلونی زنبورهای عسل به کار گرفته شده است. با تعیین ضریب شتاب برابر با ۱۰۰ و جمعیت کلونی برابر با ۱۰ به عملکرد مناسبی برای این الگوریتم دست یافته شد. بدین ترتیب با به کارگیری الگوریتم بهینه‌سازی مذکور، با تعیین متغیرهای قابل تنظیم (سرعت فضایی برابر با $0.062 h^{-1}$ ، فشار $1/5$ بار و دمای 300 درجه سانتی‌گراد)، مقدار بهینه بازده برابر با $28/9\%$ حاصل شده است.

در شکل ۶، منحنی تغییرات تابع هدف در الگوریتم کلونی زنبورها مشاهده می‌شود. در این تحقیق تابع هدف، منفی بازده فرایند تعریف شده است و همان‌طور که مشاهده می‌شود مقدار بهینه بازده این فرایند $28/9\%$ به دست آمده است. مقادیر متغیرهای قابل تنظیم متناظر با میزان بازده بهینه در جدول ۳، ارائه شده است.

۴ نتیجه‌گیری

در این تحقیق، شبکه عصبی مصنوعی برای شبیه‌سازی فرایند آلکیلاسیون متاکروزل با ایزوپروپانول مورد استفاده قرار گرفته است. بدین منظور ۱۲۰ داده آزمایشگاهی برای آموزش شبکه عصبی به کار برده شده است. سرعت فضایی، فشار و دما به‌عنوان متغیرهای ورودی و تبدیل متاکروزل و گزینش‌پذیری تیمول به‌عنوان

مراجع

- [1] Shapiro S., The Inhibitory Action of Fatty Acids on Oral Bacteria, *Oral Microbiology and Immunology*, 1996 ,355-350 ,(5)11.
- [2] Didry N.P., Dubreuil L. and Pinkas M., Antibacterial Activity of Thymol, Carvacrol and Cinnamaldehyde Alone or in Combination, *Die Pharmazie*, 1993 ,304-301 ,(4)48.
- [3] Teissedre P.L. and Waterhouse A.L., Inhibition of Oxidation of Human Low-Density Lipoproteins by Phenolic Substances in Different Essential Oils Varieties, *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, -3801 ,(9)48 2000 ,3805.
- [4] Biedermann W., Koller H. and Wedemeyer K., Process for Preparing Thymol, United States Patent US 1978 ,4,086,283.
- [5] Yadav G.D., Pathre G.S., Novel Mesoporous Solid Superacidic Catalysts: Activity and Selectivity in the Synthesis of Thymol by Isopropylation of m-Cresol with -2Propanol over UDCaT5-,4-, and6-. *Journal of Physical Chemistry A*, 2005 ,8-11080 ,109.
- [6] Malkar R.S., Yadav G.D. Selectivity Engineering in Synthesis of Thymol Using Sulfated ZrO₂-TiO₂. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 2017 ,47-8437 ,56.
- [7] Shelokar P., Kulkarni A., Jayaraman VK., Siarry P., *Metaheuristics in Process Engineering: A Historical Perspective (Chap. 1) in: Applications of metaheuristics in process engineering*. Springer, Berlin, 2014.
- [8] Ganesan T., Vasant P., Elamvazuthi I., *Advances in Metaheuristics: Applications in Engineering Systems*. 1st Edition, Boca Raton: CRC Press; 2016.
- [9] Sakthivel G., Prediction of CI Engine Performance, Emission and Combustion Characteristics Using Fish Oil as a Biodiesel at Different Injection Timing Using Fuzzy Logic, *Fuel*, 2016 ,229-214 ,183.
- [10] Petit J., Zupan J., Leherte L., Vercauteren D.P., Application of a Kohonen Neural Network to the Analysis of Data Regarding the Alkylation of Toluene with Methanol Catalyzed by ZSM5-Type Zeolites. *Computers & Chemistry*, -557 ,26 2002 ,72.
- [11] Sun X.Y., Xiang S.G., Product Distributions of Benzene Alkylation with Propylene Estimation Using Artificial Neural Network (ANN). *Advanced Materials Research*, 772, Trans Tech Publications, Ltd., ,32-227 2013.
- [12] Mahmoudian F., Moghaddam A.H., Davachi S.M., Genetic-Based Multi-Objective Optimization of Alkylation Process by a Hybrid Model of Statistical and Artificial Intelligence Approaches. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, 2022 ,102-90 ,100.
- [13] Afreen G., Pathak S., Upadhyayula S., Gas Phase Alkylation of Biomass-Derived m-Cresol with iso-Propanol over Zinc Modified HY Zeolite: Elucidating Reaction Mechanism and Kinetics Including Deactivation. *Chemical Engineering Journal*, 2020 ,125824 ,400.
- [14] Ncanana Z.S., Pullabhotla V.S.R.R., Oxidative Degradation of m-Cresol Using Ozone in the Presence of Pure γ -Al₂O₃, SiO₂ and V₂O₅ Catalysts. *Journal of Environmental Chemical Engineering* 2019 ,103072 ,7.
- [15] Shahhosseini S., Vakili S., Optimization of Styrene Reactor Using Tabu Search and Genetic Algorithm Methods. *International Journal of Chemical Reactor Engineering*, 9 , A2012 ,64.