Applied Research in Chemical - Polymer Engineering

Vol. 5, No.4
page 69-78 ,winter 2022

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

Hamid Karami[1], Saeed Soltanali[2*], Shokoufe Tayyebi[3]

1Department 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

[Downloaded from arcpe.modares.ac.ir on 2024-11-05]

پژوهش‌های کاربردی
مهندسی شیمی - پلیمر

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

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

حمید کرمی[1]، سعید سلطانعلی[2*]، شکوفه طیبی[3]

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
۱۴۱۱۵

چکیـــده

موضـــوع تحقیـــق: در دهه‌هـــای اخیـــر روش‌هـــای بهینه‌ســـازی مبتنـــی بـــر پدیده‌هـــای طبیعـــی بـــه دلیـــل عـــدم نیـــاز بـــه انجـــام محاســـبات ســـنگین ریاضـــی، عـــدم وابســـتگی بـــه نقـــاط انتخابـــی اولیـــه و قابلیـــت بهینه‌ســـازی نســـبت بـــه ســـایر روش‌هـــا، در زمینـــه بهینه‌ســـازی ترکیبـــی جایـــگاه ویـــژه‌ای پیـــدا کـــرده اســـت. عـــلاوه بـــر ایـــن شـــبکه عصبـــی مصنوعـــی به‌عنـــوان یکـــی از ابـــزار قدرتمنـــد هـــوش مصنوعـــی در شبیه‌ســـازی فرایندهـــا بـــه‌کار بـــرده می‌شـــود. به‌کارگیـــری شـــبکه عصبـــی بـــرای مدل‌ســـازی فرایـــند آلکیلاســـیون متاکـــروزل بـــا ایزوپروپانـــول و روش فـــرا ابتـــکاری در بـــه دســـت آوردن شـــرایط بهینـــه بـــرای کاتالیســـت و واکنـــش می‌توانـــد گام مؤثـــری، در جهـــت انجـــام فرایـــند بـــا بـــازده بـــالا فراهـــم ســـازد.

روش تحقیـــق: در ایـــن پژوهـــش شـــبکه عصبـــی بـــرای پیش‌بینـــی فرایند آلکیلاســـیون متاکـــروزل بـــا ایزوپروپانـــول و الگوریتـــم کلونـــی زنبورهـــای عســـل به‌منظـــور بهینه‌ســـازی بـــازده فرایـــند بـــه کار گرفتـــه شـــد. شـــبکه عصبـــی طراحی‌شـــده دارای ۵ نـــورون در لایـــه پنهـــان اســـت. به‌منظـــور بررســـی عملکـــرد الگوریتـــم پیشـــنهادی، شـــبکه عصبـــی مصنوعـــی بـــرای پیش‌بینـــی تبدیـــل متاکـــروزل و گزینش‌پذیـــری آن بـــه تیمـــول در فرایـــند آلکیلاســـیون متاکـــروزل بـــا ایزوپروپانـــول ۱۲۰ داده اســـتفاده شـــد. در ایـــن فرایـــند، ســـرعت فضایـــی (WHSV)، فشـــار و دمـــا، به‌عنـــوان متغیرهـــای ورودی و تبدیـــل متاکـــروزل و گزینـــش پذیـــری تیمـــول به‌عنـــوان متغیرهـــای خروجـــی شـــبکه عصبـــی در نظـــر گرفتـــه شـــده اســـت.

نتایـــج اصلـــی: ســـامانه شبیه‌ســـازی طراحـــی شـــده بـــا ضریـــب رگرســـیون (R^2) بالاتـــر از ٪۹۷/۵، نشـــان‌دهنده دقـــت بـــالای شـــبکه عصبـــی طراحـــی شـــده بـــرای ایـــن فرایـــند اســـت. میـــزان بیشـــینه بـــازده ایـــن فرایـــند بـــا اســـتفاده از الگوریتـــم کلونـــی زنبورهـــای عســـل ٪۲۸/۹ (بـــا متغیرهـــای قابـــل تنظیـــم $WHSV=۰/۰۶۲\ h^{-1}$، فشـــار ۱/۵ bar و دمـــای ۳۰۰ °C) حاصـــل شـــد. هم‌چنیـــن بـــرای دســـتیابی بـــه کارایـــی بهتـــر الگوریتـــم بهینه‌ســـازی، مقادیـــر مطلـــوب ضریـــب شـــتاب و جمعیـــت زنبورهـــا بـــا آزمـــون ســـعی و خطـــا ۱۰۰ و ۱۰حاصـــل شـــد.

کلمـــات کلیـــدی

شبکه عصبی مصنوعی
الگوریتم کلونی زنبورها
بهینه‌سازی
آلکیلاسیون متاکروزل
تیمول

*مسئول مکاتبات:
soltanalis@ripi.ir

[Downloaded from arcpe.modares.ac.ir on 2024-11-05]

۱ مقدمه

تیمول سازنده بسیاری از روغن‌های اساسی طبیعی است که به‌طور معمول از مواد گیاهی مانند آویشن، نعناع و اوکالیپتوس استخراج می‌شود و به‌صورت مصنوعی نیز تولید می‌شود. این ماده خاصیت ضدعفونی‌کننده و فعالیت ضدمیکروبی 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 مورداستفاده قرار می‌گیرد [۳].

ساخت صنعتی تیمول در حال حاضر توسط فرایند بایر انجام می‌شود که شامل آلکیلاسیون فاز مایع متاکروزل با پروپن 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 به طور معمول حاوی ۴۰ درصد وزنی گاما آلومینا و ۳۵ درصد وزنی بوهمیت است. محصول این فرایند حاوی ۶۰٪ تیمول، ۲۵٪ متاکروزل واکنش نداده و ۱۵٪ محصولات دیگر است؛ بنابراین، فرایند بایر دارای ۷۵٪ تبدیل و گزینش‌پذیری (نسبت به تیمول) ۸۰٪ است [۴].

استفاده از پروپن به‌عنوان ماده آلکیلیت‌کننده، همانند فرایند بایر، دارای چندین محدودیت فنی است. استفاده از پروپن 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 پروپن به‌عنوان یکی از اجزای واکنش، خطرات احتمالی کار با پروپن نیز استفاده از آن را به‌عنوان آلکیلیت‌کننده دشوار می‌سازد [۵]. با توجه به ساختار مولکولی تیمول، مطالعاتی برای تعیین اینکه آیا زئولیت‌های شکل گزینش‌پذیر کاتالیزورهای بهتری برای سنتز هستند یا خیر انجام شده است. در مطالعه انجام‌شده، کاتالیزورهای زئولیتی مختلف از نوع Mordenite، Beta و ZSM-۵ با نسبت‌های مختلف Al_2O_3/SiO_2 با توجه به عملکرد آن‌ها به‌عنوان کاتالیزور برای آلکیلاسیون انتخابی m-Cresol با پروپن در سنتز تیمول مورد بررسی قرار گرفتند. در شرایط عملیاتی ۲۵۰ درجه سانتی‌گراد و ۱ اتمسفر، نمونه زئولیت 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 پروپن به‌عنوان عامل آلکیلیت‌کننده، به کارگیری ایزوپروپانول به جای پروپن می تواند مورد قبول واقع شود. شرایط عملیاتی (سرعت فضایی (WHSV)، فشار و دما) استفاده از ایزوپروپانول به عنوان 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)، شبکه عصبی، شبیه‌سازی 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

[Downloaded from arcpe.modares.ac.ir on 2024-11-05]

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-۵ 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 فرآیند آلکیلاسون 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 فرآیند استفاده شد.

در این مقاله، با استفاده از شبکه عصبی، به شبیه‌سازی فرایند آلکیلاسیون متاکروزل با ایزوپروپانول، پرداخته می‌شود. با هدف طراحی شبکه عصبی با کارکرد مطلوب، تعداد مناسب نورون‌های پنهان با روش حدس‌وخطا 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

۲-۱ آلکیلاسیون متاکروزل با ایزوپروپانول

استفاده از C_3- الکل‌ها و C_3- 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-۲ با آلکیلاسیون و حذف هم‌زمان آب واکنش دهد. همچنین می‌تواند با ایزوپروپانول در ابتدا واکنش دهد تا پروپن (و آب) تشکیل شود سپس متاکروزل را آلکیله کند.

دو واکنش ممکن است در آلکیلاسیون کاتالیستی متاکروزل 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-۱.

(ii) آلکیلاسیون مستقیم متاکروزل با ایزوپروپانول در واکنش SN-۲.

مطالعه‌ای که مستلزم بررسی فعالیت و انتخاب شرایط بهینه عملیاتی (سرعت فضایی (WHSV)، فشار و دما) با استفاده از ایزوپروپانول به‌عنوان عامل آلکیلیت‌کننده تاکنون انجام نشده است. هدف از این مطالعه، دست‌یابی به شرایط بهینه عملیاتی آلکیلاسیون متاکروزل 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 زنبورعسل 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 به‌روزشده را می‌پذیرد. زنبور پیشاهنگی موقعیت‌های جدید را به‌طور تصادفی برای یافتن منبع غذایی جدید

[Downloaded from arcpe.modares.ac.ir on 2024-11-05]

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.

$$x_{ij} = f_{rand}(x_{min,i}, x_{max,i}) \quad i = 1,2,\dots,M \quad j = 1,2,\dots,P \qquad (۱)$$

که x_{ij}، i امین متغیر از j امین 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 قابل‌تنظیم برای بهینه‌سازی در فرایند است. برای تعیین مقادیر جدید، رابطه (۲) ارائه می‌شود.

$$x_{new,ij} = \begin{cases} x_{min,ij} + \emptyset(Step_{ij}) \times (x_{max,ij} - x_{min,ij}) Step_{ij} > 0 \\ x_{max,ij} + \emptyset(Step_{ij}) \times (x_{max,ij} - x_{min,ij}) Step_{ij} \le 0 \end{cases} \qquad (۲)$$

$x_{new,ij}$ مقادیر جدیدی از متغیرهای قابل‌تنظیم هستند. $\emptyset\ Step_{ij}$ تابعی از $Step_{ij}$ است که به‌صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$Step_{ij} = \varphi_j \times (x_{ij} - x_{ik}) \qquad k \neq j \qquad (۳)$$

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.

$$\varphi_{ij} = f_{rand}(-\alpha, \alpha) \qquad (۴)$$

به‌منظور اینکه متغیرهای قابل‌تنظیم بین صفر و یک هستند، $\emptyset\ Step_{ij}$ به‌صورت زیر تعریف می‌شود.

$$\emptyset(Step_{ij}) = \begin{cases} \frac{1}{Step_{ij}} \quad |Step_{ij}| > 1 \\ e^{-Step_{ij}} \quad 0 \le Step_{ij} \le 1 \\ -e^{Step_{ij}} \quad -1 \le Step_{ij} < 0 \end{cases} \qquad (۵)$$

برای انتخاب منابع جدید غذایی، تابع احتمالی بر حسب تابع برازندگی ارائه می‌شود که متغیرهای قابل‌تنظیمی که میزان احتمال بیشتری دارند، به عنوان منابع جدید انتخاب می‌شوند. تابع احتمال (P_j) برای جمعیت j ام به‌صورت رابطه زیر محاسبه می‌شود.

$$P_j = \frac{Fit_j}{\sum_{j=1}^{P} Fit_j} \qquad (۶)$$

$$Fit_j = \frac{1}{1+OF_j} \qquad (۷)$$

که OF_j مقدار تابع برازندگی برای جمعیت j ام است.

در صورتی‌که بعد از چند مرحله، بهبودی در تابع برازندگی متغیرهای قابل‌تنظیم 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 طراحی‌شده، دو شاخص آماری مورد استفاده قرار گرفته است.

میانگین مربعات خطا (MSE) که با رابطه زیر به دست می‌آید.

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^{P} \sum_{n=1}^{N} \left(y_{exp,i}(n) - y_{Pre,i}(n)\right)^2 \qquad (۸)$$

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):

$$R_i^2 = 100 - 100 * \frac{\sum_{n=1}^{N}\left(y_{\exp,i}(n) - y_{Pre,i}(n)\right)^2}{\sum_{n=1}^{N}\left(\bar{y}_{exp,i} - y_{Pre,i}(n)\right)^2} \qquad (۹)$$

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

۳ نتایج و بحث

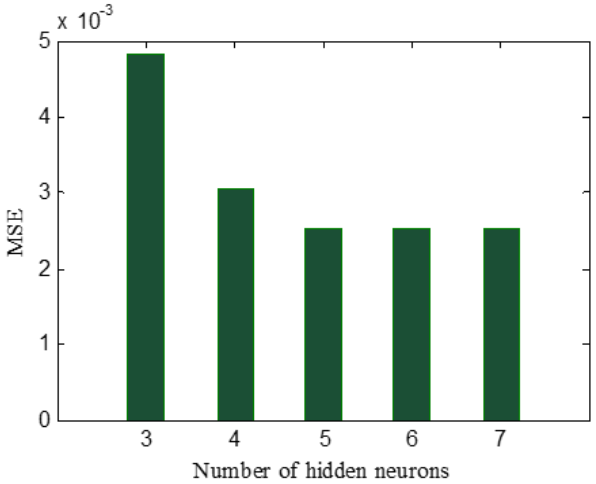
نتایج حاصل در این تحقیق مشتمل بر دو بخش پیش‌بینی فرایند آلکیلاسیون با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی و بهینه‌سازی بازده فرایند مذکور با استفاده از الگوریتم کلونی زنبورها است.

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

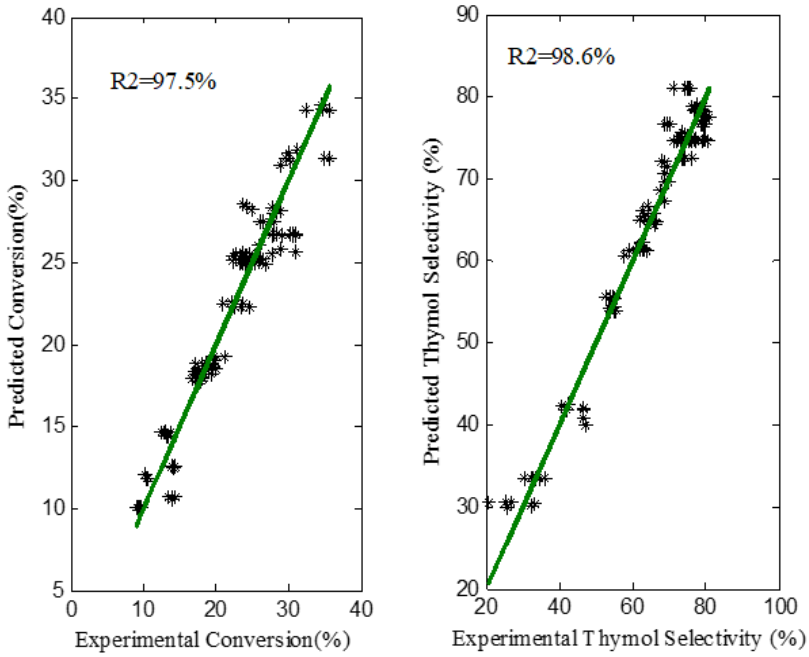
[Downloaded from arcpe.modares.ac.ir on 2024-11-05]



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

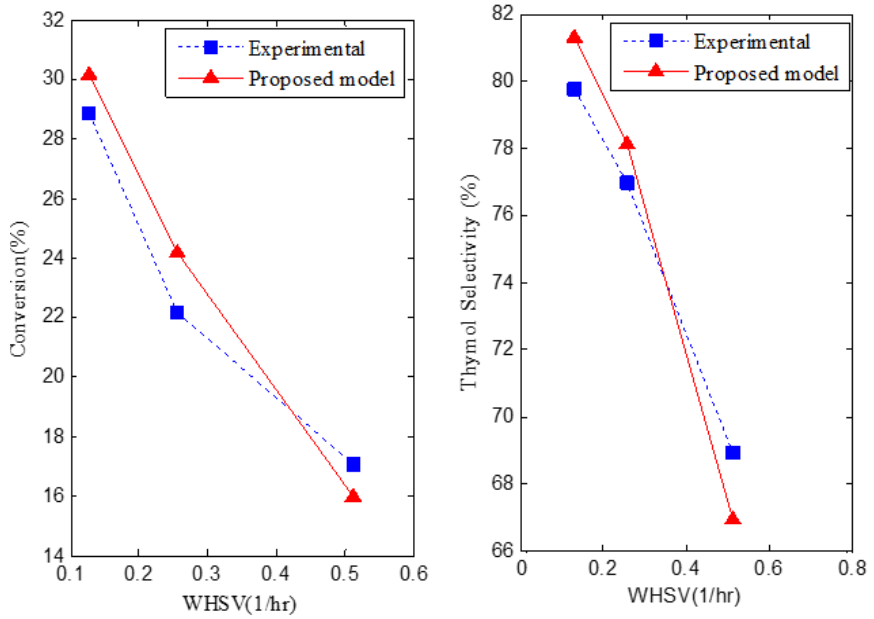
شبکه عصبی در شکل ۱، گزارش شده است. همان‌طور که در شکل ۱ مشاهده می‌شود، تعداد نورون لایه پنهان برابر با ۵ برای شبکه عصبی مورد بررسی، با میزان میانگین مربعات خطای ۰/۰۰۲۳، مناسب است. به منظور بررسی عملکرد شبکه عصبی طراحی شده، منحنی رگرسیون تبدیل و گزینش‌پذیری در شکل ۲ بر مبنای داده‌های آزمون، نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود مقادیر R^2 بالاتر از ۹۷/۵٪، نمایانگر تطابق مناسب و دقیق مدل شبکه عصبی طراحی‌شده 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 گزینش‌پذیری به محصول مطلوب تیمول شده است. داده‌های مدل پیشنهادی در هر دو پارامتر تبدیل و گزینش‌پذیری 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 گزینش‌پذیری به محصول مطلوب تیمول شده است. داده‌های مدل پیشنهادی در هر دو پارامتر تبدیل و گزینش‌پذیری 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 گزینش‌پذیری به محصول مطلوب اثری منفی ایجاد می‌کند و باعث کاهش گزینش‌پذیری به محصول



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

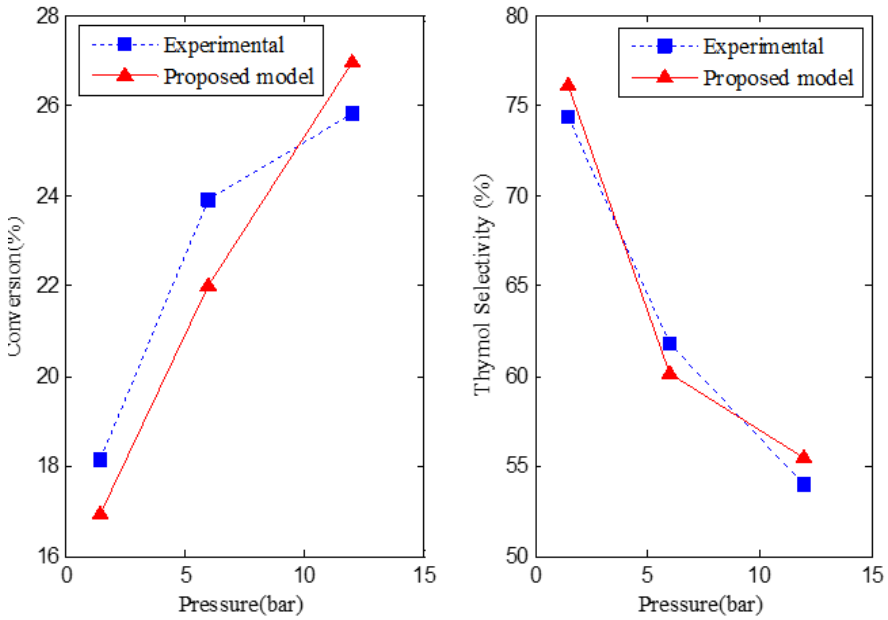
[Downloaded from arcpe.modares.ac.ir on 2024-11-05]



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

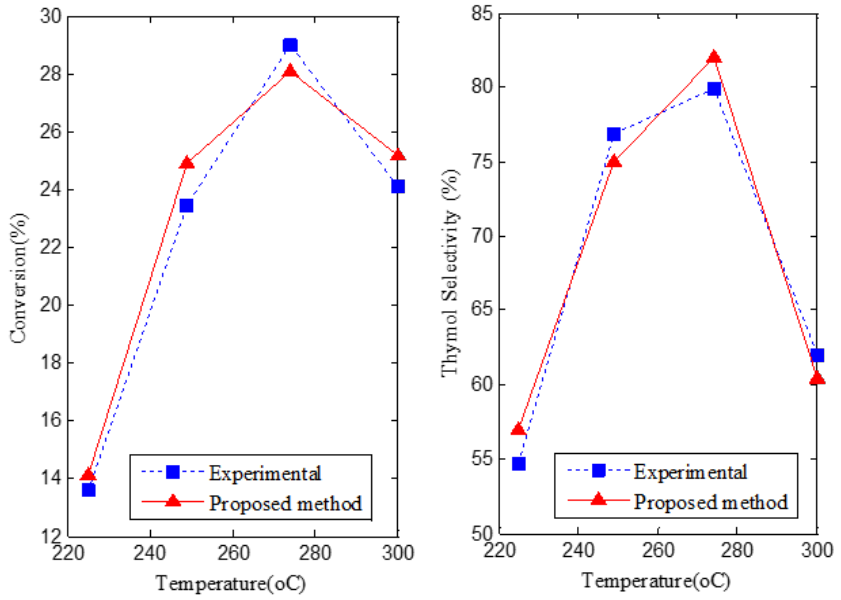
تیمول می‌شود. داده‌های مدل پیشنهادی در هر دو پارامتر تبدیل و گزینش‌پذیری با داده‌های تجربی هم‌پوشانی دارند.

همان‌طور که در شکل ۵ نشان داده‌شده است، افزایش دمای واکنش سبب به وجود آمدن نقطه‌ای بهینه برای میزان تبدیل و گزینش‌پذیری به محصول 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.



شکل ۴ مقایسه متغیرهای خروجی بین مدل ارائه‌شده و داده‌های آزمایشگاهی بر حسب فشار در سرعت فضایی h^{-1} ۰/۵۰۸ 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.

[Downloaded from arcpe.modares.ac.ir on 2024-11-05]



شکل ۵ مقایسه متغیرهای خروجی بین مدل ارائه‌شده و داده‌های آزمایشگاهی بر حسب دما در سرعت فضایی h^{-1} ۰/۲۵۷ 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.

۳-۲ 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.

$$OF = -(Conversion * Selectivuty) = -Yield \quad (۱۰)$$

از آنجایی که الگوریتم کلونی زنبور عسل بر اساس کمینه‌کردن کدنویسی شده است و در این تحقیق، هدف بیشینه‌کردن میزان بازده است، تابع برازندگی به‌صورت منفی حاصل‌ضرب میزان تبدیل و گزینش‌پذیری تعریف می‌شود. متغیرهای قابل‌تنظیم 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 گرفته‌شده در این تحقیق، دو پارامتر مذکور در سطوح مختلف تغییر داده‌شده 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.

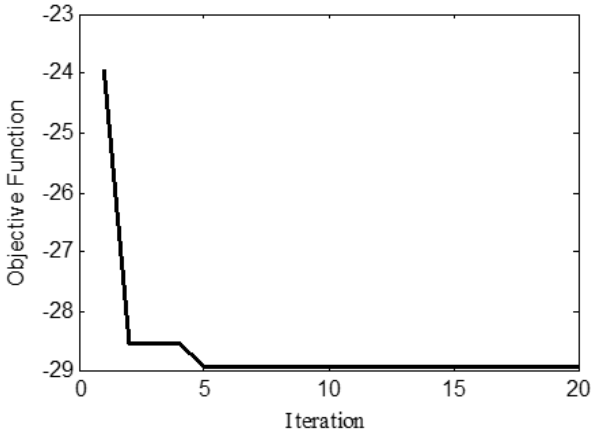
جدول ۱ مقادیر بازده بر حسب تغییرات ضرایب شتاب.
Table 1 Yield values based on various acceleration coefficient.

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

[Downloaded from arcpe.modares.ac.ir on 2024-11-05]



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 قابل‌تنظیم 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 (°C)	300

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 ۲۸/۹٪ به‌دست آمده است. مقادیر متغیرهای قابل‌تنظیم متناظر با میزان بازده بهینه در جدول ۳، ارائه‌شده 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 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 ۰/۰۰۲۳، نشان دهنده عملکرد مناسب شبکه عصبی طراحی شده است. به‌منظور تعیین مقدار بهینه بازده در این فرایند، الگوریتم کلونی زنبورهای عسل به کار گرفته‌شده است. با تعیین ضریب شتاب برابر با ۱۰۰ و جمعیت کلونی برابر با ۱۰ به عملکرد مناسبی برای این الگوریتم دست‌یافته شد. بدین‌ترتیب با به‌کارگیری الگوریتم بهینه‌سازی مذکور، با تعیین متغیرهای قابل‌تنظیم (سرعت فضایی برابر با h^{-1} ۰/۰۶۲، فشار ۱/۵ بار و دمای ۳۰۰ درجه سانتی‌گراد)، مقدار بهینه بازده برابر با ۲۸/۹٪ حاصل شده است.

[Downloaded from arcpe.modares.ac.ir on 2024-11-05]

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.

[Downloaded from arcpe.modares.ac.ir on 2024-11-05]