

## کاربرد شبکه های عصبی مصنوعی در مدل سازی و بهینه سازی حذف رنگزای اسید بلاک ۱ با استفاده از نانوکامپوزیت $\text{TiO}_2\text{-Ni}$

کمال صالحی<sup>۱</sup>، بهزاد شاهمرادی<sup>۲</sup>، افشین ملکی<sup>۳</sup>، برهان منصوری<sup>۴</sup>، فردین غریبی<sup>۵</sup>

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی بهداشت محیط، دانشکده بهداشت، دانشگاه علوم پزشکی کردستان، سنندج، ایران  
ایمیل: kamalsalehi1366@gmail.com - شماره موبایل: ۰۹۱۹۲۰۰۸۱۳۳

۲- استادیار مهندسی بهداشت محیط، مرکز تحقیقات بهداشت محیط، دانشگاه علوم پزشکی کردستان، سنندج، ایران

۳- دانشیار مهندسی بهداشت محیط، مرکز تحقیقات بهداشت محیط، دانشگاه علوم پزشکی کردستان، سنندج، ایران

۴- دانشجوی دکتری سم شناسی، مرکز تحقیقات آب و مواد غذایی، دانشگاه علوم پزشکی کردستان، سنندج، ایران

۵- کارشناسی ارشد مدیریت خدمات بهداشتی، معاونت تحقیقات، دانشگاه علوم پزشکی کردستان، سنندج، ایران

### چکیده

**زمینه و هدف:** شبکه‌های عصبی مصنوعی، ساختاری غیر خطی بوده که عملکرد آن‌ها بر مبنای مغز انسان می باشد. این شبکه ها ابزاری قوی برای مدل سازی، خصوصاً برای زمانی که ارتباط بین داده‌ها نامعلوم باشد، می باشند. بنابراین هدف این مطالعه استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی برای مدل سازی و بهینه سازی حذف رنگزای اسید بلاک ۱ از محلول‌های آبی با استفاده از نانوکامپوزیت  $\text{TiO}_2\text{-Ni}$  می باشد.

**روش بررسی:** این تحقیق، یک مطالعه کاربردی- توسعه ای است که طی آن نانوکامپوزیت  $\text{TiO}_2\text{-Ni}$  سنتز و خصوصیات شیمیایی آن توسط تصویر میکروسکوپ الکترونی ارزیابی شد. برای طراحی آزمایشات، پیش بینی و مدل سازی حذف رنگدانه، به ترتیب از روش تاگوچیو شبکه‌های عصبی مصنوعی استفاده شد.

**یافته‌ها:** نتایج نشان داد که شبکه با تابع انتقال سیگموئیدی، الگوریتم آموزش مارکورات، یک لایه پنهان و ۵ نورون در لایه پنهان، بهتر می تواند میزان حذف رنگزای اسید بلاک ۱ را پیش بینی کند.

**بحث و نتیجه گیری:** با توجه به نتایج بدست آمده، نتیجه می گیریم که مدل شبکه‌های عصبی می تواند رفتار فرایند فوتوکاتالیستی را در شرایط مختلف آزمایشگاهی پیش بینی کند.

**واژه‌های کلیدی:** اسید بلاک ۱، شبکه‌های عصبی مصنوعی، نانوکامپوزیت  $\text{TiO}_2\text{-Ni}$

## مقدمه

رنگزاهای آلی مصنوعی، یکی از مهم ترین آلاینده های فاضلاب های صنایعی همچون: نساجی، چرم سازی، رنگرزی، پلاستیک سازی و سایر آرایشی، کاغذ سازی، صنایع رنگ سازی و غذایی است<sup>(۱)</sup>. سالیانه بیش از  $7 \times 10^5$  تن در ۱۰۰۰۰ نوع رنگزاهای مصنوعی آلی در سراسر جهان تولید می شوند. تحقیقات نشان دادند که حدود ۰/۱۲ از رنگزاهای مصرفی در صنایع نساجی وارد پساب می شوند و حدود ۲۰٪ این مقدار به همراه پساب تصفیک شده به آب های پذیرنده وارد می شوند. این رنگزاهای نور برخوردی به سطح آب را جذب و منعکس<sup>(۲-۴)</sup> و از رشد آبزیان در آب جلوگیری می کنند و می توانند اثرات خطرناکی را بر زنجیره غذایی داشته باشند؛ اما مهمتر از همه، بسیاری از مواد موجود در این پساب ها، سمی و حتی سرطانزا هستند<sup>(۵،۶)</sup>.

روش های متعدد فیزیکی، شیمیایی و بیولوژیکی به منظور حذف رنگزاهای از پساب های نساجی بکار می روند. روش های تجزیک بیولوژیکی، به دلیل سمی بودن زیاد اغلب رنگزاهای میکروارگانیسم های موجود در فرایند و مقاوم بودن رنگزاهای برابر تجزیک بیولوژیکی بازده پایینی در تجزیک رنگ دارند<sup>(۷)</sup>.

یکی دیگر از روش هایی که در چند سال اخیر توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است، اکسیداسیون پیشرفته می باشد. فرایندهای اکسیداسیون پیشرفته بر پایه تولید رادیکال های آزاد هیدروکسیل با قدرت اکسیداسون بالا بوده که سبب تبدیل آلاینده های آلی به مواد معدنی (دی اکسید کربن و آب) می شود<sup>(۸-۱۰)</sup>.

دارند. اکسیداسیون پیشرفته فرایندی پیچیده بوده و عوامل زیادی روی کارایی آن تأثیر دارند؛ از جمله این عوامل می توان به بالانس انرژی تابشی، توزیع انرژی تابشی و مکانیسم های انتقال جرم اشاره کرد. از این رو مدل سازی و پیش بینی این فرایند به دلیل تأثیر متغیرهای چندگانه بر فرایند، با استفاده از مدل های خطی و خطی چندگانه با مشکلاتی همراه است؛ به طوریکه این فرایندها قادر به پیش بینی روابط بین پدیده ها نمی باشد.

امروزه از شبکه های عصبی در بسیاری از رشته های مهندسی از جمله شیمی برای بهینه سازی، شبیه سازی، پیش بینی و مدل سازی روابط بین پدیده ها استفاده می شود. شبکه های عصبی اولین بار در سال ۱۹۴۳ توسط Culloch و Pitt استفاده شدند<sup>(۱۱)</sup>. این شبکه ها از عناصر عملیاتی ساده ساخته می شوند که به صورت موازی در کنار هم عمل می کنند. شبکه عصبی، شبیه سازی از دستگاه عصبی انسان بوده و در واقع، تقلیدی از مغز و شبکه اعصاب انسان می باشد<sup>(۱۲،۱۳)</sup>. در این شبکه، سعی بر این است، ساختاری تهیه شود که همانند مغز، قدرت یادگیری، تعمیم دهی و تصمیم گیری داشته باشد. در این گونه ساختارها هدف این است که با معرفی عملکرد یک سیستم دینامیکی، مدل را آموزش داده، نحوه عملکرد سیستم را در حافظه مدل ذخیره و از آن برای مواردی که قبلاً با آن مواجه نشده است استفاده شود<sup>(۱۴)</sup>. از مزیت های استفاده از شبکه های عصبی می توان به زمان مورد نیاز کمتر برای مدل سازی نسبت به روش های کلاسیک، عدم نیاز به محاسبات ریاضی برای پیش بینی رفتار پارامترهای دخیل در فرایند و همچنین توانایی پیش بینی تعداد محدودی آزمایش اشاره کرد<sup>(۱۵،۱۶)</sup>. در نتیجه این مطالعه با هدف استفاده از مدل های شبکه های عصبی برای

پیش بینی و مدل سازی حذف رنگزای اسید بلاک ۱ با استفاده از فرایند فوتوکاتالیستی نانو کامپوزیت دی-اکسیدتیتانیوم - نیکل در حضور نور تابش فرابنفش انجام شد.

## روش بررسی مواد

دی اکسید تیتانیوم خالص، اکسید نیکل، N- بوتیل آمین از شرکت مرک آلمان تهیه شدند. رنگدانه اسید

بلاک ۱ از شرکت الوند ثابت همدان تهیه شد و بدون خالص سازی مورد بررسی قرار گرفت. ساختار شیمیایی و همچنین بعضی خصوصیات دیگر آن در جدول ۱ نشان داده شده است. همچنین برای تشخیص کیفیت نانوذره سنتز شده از دستگاه میکروسکوپ الکترونی روبشی JEM 2000FX II استفاده شد.

جدول ۱: خصوصیات رنگزای اسید بلاک

|                 |                             |
|-----------------|-----------------------------|
| فرمول مولکولی   | $C_{22}H_{14}N_6Na_2O_9S_2$ |
| وزن مولکولی     | ۶۱۶/۴۹                      |
| $\lambda_{max}$ | ۶۱۸                         |
| ساختار مولکولی  |                             |

**سنتز نانو کامپوزیت دی اکسید تیتانیوم با اکسید نیکل**  
 برای سنتز نانومواد کاتالیستی، مقدار مشخصی از دی اکسید تیتانیوم و اکسید فلزی نیکل با نسبت های مختلف (۱/۱، ۱/۲، ۱/۳ دی اکسیدتیتانیوم به اکسید نیکل) با هم ترکیب، سپس حلال مناسب (HCl)، به میزان ۱۰ میلی لیتر به آن اضافه شد. در مرحله بعد مقدار ۱ میلی لیتر از سورفاکتانت N- بوتیل آمین به محلول اضافه و به مدت سه دقیقه بهم زده شد. پس از اطمینان از اندود بودن کامل، طبق روش هیدروترمال در کوره در دمای ۱۲۰ درجه سانتی گراد به مدت ۱۲ ساعت قرار داده شد تا واکنش های شیمیایی مورد نظر رخ دهد. پس از طی شدن زمان واکنش مناسب، ترکیب حاصل را با آب ۲ بار تقطیر، چند بار شست و شو می دهیم تا

آلودگی های احتمالی و سورفاکتانت برطرف شود؛ سپس در دمای محیط قرار داده شد تا خشک شود. بعد از خشک شدن در دسیکاتور قرار گرفت تا خصوصیات آن تعیین شود.

## طراحی آزمایش

در این مطالعه، برای طراحی آزمایشات از روش تاگوچی استفاده شد. گام اول در طراحی آزمایشات به روش تاگوچی، تعیین عوامل مؤثر و سطوح آنها می باشد؛ در میان عوامل مؤثر بر فرایند حذف رنگدانه، ۳ عامل و برای هر عامل هم، ۵ سطح نوع نانوذره در نظر گرفته شد (جدول ۲). برای جلوگیری از بروز خطا و براساس اصول آماری بعد از طراحی آزمایشات، عمل تصادفی داده ها انجام شد.

جدول ۲: سطوح متغیرهای انتخاب شده برای طراحی آزمایش توسط روش تاگوچی

| متغیر                         | سطوح متغیر |    |     |    |     |
|-------------------------------|------------|----|-----|----|-----|
|                               | ۲          | ۱  | ۰   | -۱ | -۲  |
| غلظت نانوذره (گرم در لیتر)    | ۰/۵        | ۱  | ۱/۵ | ۲  | ۲/۵ |
| غلظت رنگزا (میلی گرم در لیتر) | ۲۵         | ۴۰ | ۶۰  | ۸۰ | ۱۰۰ |
| PH                            | ۳          | ۵  | ۷   | ۹  | ۱۱  |

### روش انجام آزمایش

برای انجام آزمایشات فوتوکاتالیستی، ابتدا محلول مادر اسید بلاک ۱ (۱۰۰۰ میلی گرم در لیتر) با حل کردن ۱ گرم از رنگدانه در ۱ لیتر آب مقطر تهیه شد. سپس فاکتورهای مؤثر بر انجام فرایندهای مورد مطالعه شامل pH، غلظت رنگزا و دوز نانو کامپوزیت در مراحل جداگانه در طول تحقیق، مطالعه شد. همه آزمایشات در حالت ناپیوسته در بشر به حجم ۲۰۰ میلی لیتر با استفاده از شیکر انجام شد. در هر مرحله بعد از ساخت محلول رنگزا با غلظت های ۲۰ تا ۸۰ میلی گرم در لیتر از محلول مادر و تنظیم pH بین ۱۱-۳، مقدار مشخصی از نانو کامپوزیت (۲/۵-۰/۵ گرم در لیتر) به آن اضافه شد و محلول به مدت ۲ ساعت در معرض اشعه فرابنفش (UV) قرار داده شد. طی آزمایشات فوتوکاتالیست در فواصل زمانی مشخص (بازه زمانی ۲۰ دقیقه)، از محلول ساخته شده نمونه برداری انجام شد. نمونه های گرفته شده از محلول در سانتریفوژ (با دور ۲۰۰۰) قرار داده شدند و در نهایت با استفاده از دستگاه اسپکتروفتومتر (UV-VIS) مقدار تخریب رنگدانه در طول موج ۶۱۸ nm خوانده

شد. میزان تخریب رنگدانه قبل و پس از افزودن نانو ذره و گذشت زمان مورد نیاز برای رسیدن به تعادل با در نظر گرفتن کلیه شرایط، اندازه گیری و بازده حذف مواد رنگدانه (R) با استفاده از معادله (۱) محاسبه شد.

$$R (\%) = \frac{A_0 - A}{A_0} \times 100 \quad (1)$$

که  $A_0$ ، تخریب رنگدانه در زمان صفر و  $A_t$ ، تخریب رنگدانه پس از گذشت زمان  $t$  دقیقه می باشد. در این تحقیق از مقدار حذف مطلق استفاده شد (۱۷).

### تدوین مدل

در این تحقیق برای بهینه سازی مقدار تخریب رنگدانه توسط نانو کامپوزیت دی اکسید تیتانیوم با اکسید نیکل از مدل شبکه عصبی مصنوعی با ساختار پیش، استفاده شد. در طراحی ساختار مدل با توجه به تعداد متغیرهای ورودی و خروجی، تعداد نورون های لایه ورودی و خروجی به ترتیب تعیین شد. سپس برای پارامترهای قابل تنظیم و در نتیجه تعیین بهترین ساختار شبکه عصبی، تعداد زیادی شبکه عصبی با ساختار مختلف طراحی و ارزیابی شد. این شبکه های عصبی با تغییر پارامترهای قابل تنظیم (شامل: تابع انتقال، قانون

یادگیری، مقدار مومنتوم، تعداد لایه میانی، تعداد نورون لایه میانی) ساخته و اجرا شدند. دقت این شبکه‌ها به وسیله معیارهای آماری محاسبه و در مرحله آزمون بررسی شد و در نهایت شبکه‌ای که نزدیکترین نتیجه را با واقعیت داشت، به عنوان شبکه اصلی انتخاب شد.

### معیارهای آماری

برای مقایسه مدل‌های مختلف تدوین شده توسط شبکه عصبی مصنوعی از معیارهای آماری ضریب همبستگی و مجذور میانگین مربعات خطا استفاده شد.

$$R = \frac{\sum_{i=1}^n ((y_{obs})_i - (y_{obs}^-)) \times ((y_{est})_i - (y_{est}^-))}{\sqrt{\sum_{i=1}^n ((y_{obs})_i - (y_{obs}^-))^2 \sum_{i=1}^n ((y_{est})_i - (y_{est}^-))^2}}$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n ((y_{est})_i - (y_{obs})_i)^2}{n}}$$

$y_{obs}$ : مقادیر مشاهده شده (واقعی)،  $y_{obs}^-$ : میانگین مقادیر مشاهده شده،  $y_{est}$ : مقادیر برآورد شده (خروجی مدل)،  $y_{est}^-$ : میانگین مقادیر برآورد شده و  $n$ : تعداد خروجی می باشد (۱۸).

### داده‌های ورودی و خروجی مدل

ابتدا داده‌های ورودی که شامل: غلظت رنگزا، غلظت نانوکامپوزیت، pH و زمان به صورت ستونی وارد یک پوشه از صفحات گسترده اکسل شد و به عنوان داده‌های ورودی<sup>۱</sup> برای مدل تعریف شدند. سپس داده‌های مقدار تخریب رنگزا، به صورت ستونی وارد پوشه مربوط به آن شد و به عنوان داده‌های خروجی برای مدل تعریف شد.

بعد از مشخص شدن داده‌های ورودی و خروجی مدل، عمل چیدن تصادفی داده‌ها روی صفحه گسترده انجام شد. داده‌ها به سه قسمت داده‌های آموزش، اعتبار سنجی و تست تقسیم شدند. ۸۰٪ داده‌ها برای آموزش، ۱۰٪ برای اعتبار سنجی و ۱۰٪ داده‌ها برای آزمون در نظر گرفته شدند. همچنین برای کاهش خطاها و افزایش دقت در برآورد وزن‌های شبکه و مقادیر پیش بینی شده برای هر یک از مراحل آموزش، اعتبار سنجی و تست شبکه، ۱۰ مرتبه تکرار در نظر گرفته شد.

### یافته‌ها

#### الگوریتم‌های آموزش و تابع انتقال قانون آموزش

در این مطالعه، برای تعیین مناسب‌ترین مقدار مومنتوم برای دو تابع انتقال تانژانت هیپربولیک و سیگموئیدی مدل‌های مختلف شبکه عصبی که در آن‌ها مقدار مومنتوم ۰/۱، ۰/۲، ۰/۳، ۰/۴، ۰/۵، ۰/۶، ۰/۷، ۰/۸، ۰/۹ و ۱ در نظر گرفته شد. نتایج نشان داد که توابع انتقال تانژانت هیپربولیک و تابع انتقال سیگموئیدی به ترتیب با مقدار مومنتوم ۰/۸ و ۰/۸ در تدوین مدل، عملکرد بهتری داشته است؛ همچنین برای انتخاب نوع تابع انتقال و قانون آموزش مناسب، شبکه‌های عصبی مختلف با تغییر تابع انتقال و قانون آموزش ساخته و اجرا شد. نتایج آن در جدول ۳ ارائه شده است. با بررسی جدول ۴ ملاحظه می‌شود که تابع انتقال سیگموئیدی و قانون آموزش مارکورات، عملکرد بالایی در پیش‌بینی میزان حذف رنگزا توسط فرایند فوتوکاتالستی را دارا می‌باشد.

#### تعداد لایه میانی و تعداد نورون‌های لایه پنهان

در این مطالعه برای یافتن بهترین تعداد لایه پنهان، شبکه‌های عصبی مختلفی با تعداد ۴-۱ ساخته و اجرا شدند. نتایج نشان داد که شبکه‌ای با یک لایه پنهان،

شد. با بررسی جدول ۳ ملاحظه شد که کمترین مقدار خطا و بیشترین ضریب همبستگی، مربوط به تابع انتقال سیگموئیدی و قانون آموزش مارکورات می باشد. به این ترتیب، شبکه ای با تابع انتقال سیگموئیدی و قانون آموزش مارکورات به عنوان شبکه بهینه انتخاب شد. همچنین در مطالعه ای که توسط Gheadi و همکاران انجام شد، مشخص شد که شبکه ای با قانون آموزش مارکورات و تابع انتقال سیگموئیدی بهتر، توانست میزان حذف رنگزای متیلن بلو و بریلیانت گرین را پیش بینی کند<sup>(۱۳)</sup>. در مطالعه ای دیگر، Kardam و همکاران نشان دادند که شبکه ای با قانون آموزش مارکورات، عملکرد بالایی در مدل سازی جذب سرب با استفاده از نانوفیبرهای سلولزی دارد<sup>(۱۹)</sup>.

برای یافتن بهترین تعداد لایه پنهان، شبکه های عصبی مختلفی با تعداد ۴-۱ ساخته و اجرا شدند. در آموزش این شبکه ها از قانون آموزش مارکورات و تابع انتقال سیگموئیدی که در مرحله قبل انتخاب شده بودند، استفاده شد. با توجه به نتایج آماری ارائه شده در جدول ۴ ملاحظه می شود که مدلی با یک لایه پنهان، دقت پیش بینی بالایی در حذف رنگزای اسید بلاک ۱ دارد. ختایی و همکاران نشان دادند که شبکه ای با یک لایه پنهان، بهتر توانست میزان حذف رنگزای بازیک بلو ۳ را با استفاده از فرایند فرابنفش ترکیبی با پراکسید سولفات پیش بینی کند که عملکرد بالایی در مدل سازی فرایند دارد<sup>(۲۰)</sup>.

یکی از مسائل پر اهمیت و اثرگذار بر عملکرد مدل های شبکه عصبی، تعداد نورون در لایه مخفی مدل می باشد. در اغلب موارد راهکار عمومی و جامعی برای تعیین تعداد نورون ها در لایه مخفی وجود ندارد. چنانچه تعداد نورون های لایه مخفی، کم انتخاب شود

عملکرد بالایی در پیش بینی میزان حذف رنگزا دارد. همچنین برای یافتن بهترین تعداد نورون در لایه پنهان شبکه عصبی، سعی شد با تعداد کمی نورون (۱۰-۱) که بیشترین عملکرد را برای شبکه فراهم می کند، انتخاب شود. نتایج آماری آموزش این شبکه ها در جدول ۷-۴ ارائه شده است؛ همان طوریکه در این جدول مشاهده می شود، مدل شبکه عصبی با ۵ نورون در لایه پنهان به عنوان شبکه ای با بهترین ساختار معرفی شد.

### آزمون مدل

پس از مشخص شدن قانون آموزش، تابع انتقال، تعداد لایه پنهان و تعداد نورون مناسب، لازم است که شبکه ساخته شده از نظر عملکرد مورد ارزیابی قرار گیرد. همان طوریکه در جدول شماره ۷-۴ مشاهده می شود، پس از آزمون شبکه مشخص شد که شبکه ساخته شده عملکرد بالایی در پیش بینی میزان حذف توسط فرایند فوتوکاتالیستی دارد.

### بحث و نتیجه گیری

برای تدوین مدل و بدست آوردن بهترین مدل پیش بینی کننده حذف رنگزا توسط فرایند فوتوکاتالیستی، ابتدا از قانون های آموزش مومنتوم، گرادیان مزدوج و مارکورات استفاده شد. نتایج نشان داد که قانون آموزش مومنتوم با مقدار ۱۰ تابع انتقال سیگموئیدی در تدوین مدل عملکرد بهتری دارد. همچنین برای انتخاب نوع تابع انتقال و قانون آموزش مناسب، شبکه های عصبی مختلف با تغییر تابع انتقال و قانون آموزش ساخته و اجرا شدند.

قانون آموزش و تابع انتقالی که کمترین مقدار جذر میانگین مربعات خطا و ضریب همبستگی بالایی داشته باشد، به عنوان قانون و تابع یکینه انتخاب خواهد

میزان خطای عمومی مدل افزایش یافته و منجر به ایجاد بایاس قابل توجه و در نتیجه کم‌برازش یافتن مدل می‌شود؛ همچنین در صورتی که تعداد نورون‌ها در لایه مخفی از حد مطلوبی بیشتر شود، مقدار خطای آموزش کاهش می‌یابد؛ اما باید در مقابل، در نتیجه بیش‌برازش شدن مدل، خطای عمومی و بایاس آماری و واریانس افزایش یابند (۲۱،۲۲).

در این مطالعه، برای یافتن بهترین تعداد نورون در لایه پنهان شبکه عصبی، سعی شد با تعداد کمی نورون (۱۰-۱) که بیشترین عملکرد را برای شبکه فراهم می‌کند انتخاب شود. در اجرای این شبکه‌ها از همان داده‌های ورودی اولیه با قانون آموزش مارکورات و تابع انتقال سیگموئیدی و همچنین از یک لایه پنهان که در مراحل قبل انتخاب شده بودند، استفاده شد. نتایج آماری آموزش این شبکه‌ها در جدول ۵ ارائه شده است؛ همان‌طوری که در این جدول مشاهده می‌شود، کمترین مقدار خطا و بالاترین ضریب همبستگی مربوط به ۴ نورون در لایه پنهان می‌باشد. به این ترتیب، شبکه‌ای با قانون آموزش مارکورات، تابع انتقال سیگموئیدی، یک لایه پنهان و ۵ نورون در لایه پنهان به عنوان شبکه‌ای با بهترین ساختار معرفی شد.

پس از مشخص ساختن قانون آموزش، تابع انتقال، تعداد لایه پنهان و تعداد نورون مناسب، لازم است که شبکه ساخته شده از نظر عملکرد مورد ارزیابی قرار گیرد. به همین دلیل از ۱۰٪ کل داده‌هایی که قبلاً بطور تصادفی انتخاب و برای آزمون شبکه به کار برده نشده بودند، برای ارزیابی شبکه استفاده شد و برای مقایسه عملکرد مدل‌های پیشنهادی از شاخص‌های آماری مانند جذر میانگین مربعات خطا (RMSE)، میانگین و ضریب همبستگی (R) استفاده شد. همان‌طوری که در جدول ۶ مشاهده می‌شود، پس از آزمون شبکه مشخص شد که شبکه ساخته شده عملکرد بالایی در پیش‌بینی میزان حذف، توسط فرایند فوتوکاتالیستی دارد.

بر اساس نتایج بدست آمده، استنباط می‌شود که مدل شبکه‌های عصبی، دقت بالایی در پیش‌بینی حذف رنگزای اسید بلاک ۱ توسط فرایند فوتوکاتالیستی دارند. این ممکن است به دلیل روابط غیر خطی موجود میان شاخص‌های مؤثر بر مقدار حذف رنگزا و همچنین به دنبال آن افزایش دقت در پیش‌بینی حذف توسط مدل شبکه‌های عصبی باشد.

جدول ۳: ضریب همبستگی و مجذور مربعات خطا برای داده‌های آموزش و اعتبار سنجی  
توابع مختلف انتقال با قانون آموزش مونتوم

| داده‌های اعتبار سنجی |        | داده‌های آموزش |        | تعداد نورون | لایه پنهان | قانون آموزش | تابع انتقال |
|----------------------|--------|----------------|--------|-------------|------------|-------------|-------------|
| R <sup>2</sup>       | RMS E  | R <sup>2</sup> | RMSE   |             |            |             |             |
| ۰/۸۸                 | ۰/۰۸۲۷ | ۰/۹۱           | ۰/۰۴   | ۴           | ۱          | مونتوم      | تانزان      |
| ۰/۹۴۸                | ۰/۰۱۸۱ | ۰/۹۳           | ۰/۰۱۹۵ | ۴           | ۱          | مونتوم      | سیگموئیدی   |

جدول ۴: مقدار جذر میانگین مربعات، ضریب همبستگی، برای داده های آموزش و اعتبار سنجی از تابع مختلف آموزش با توابع مختلف انتقال

| تابع انتقال | قانون آموزش | لایه پنهان | تعداد نورو | داده های آموزش      | داده های اعتبار سنجی |
|-------------|-------------|------------|------------|---------------------|----------------------|
|             |             |            |            | R <sup>2</sup> RMSE | R <sup>2</sup> RMSE  |
| تانژانت     | مومنتوم     | ۱          | ۴          | ۰/۰۲۴ ۰/۰۹۲۳        | ۰/۰۲۲۶ ۰/۰۹۳۱        |
| تانژانت     | گرادیان شیب | ۱          | ۴          | ۰/۰۱۴ ۰/۰۹۴۳        | ۰/۰۱۳ ۰/۰۹۶          |
| تانژانت     | مارکورات    | ۱          | ۴          | ۰/۰۱۲ ۰/۰۹۴۸        | ۰/۰۰۹۴ ۰/۰۹۶۴        |
| سیگموئیدی   | مومنتوم     | ۱          | ۴          | ۰/۰۱۷ ۰/۰۹۵         | ۰/۰۱۰ ۰/۰۹۶          |
| سیگموئیدی   | گرادیان شیب | ۱          | ۴          | ۰/۰۲۸ ۰/۰۹۲۹        | ۰/۰۲۱ ۰/۰۹۳          |
| سیگموئیدی   | مارکورات    | ۱          | ۴          | ۰/۰۱۶ ۰/۰۹۷         | ۰/۰۰۴ ۰/۰۹۸          |

جدول ۵: مقدار جذر میانگین مربعات، ضریب همبستگی، برای داده های آموزش و اعتبار سنجی با تابع آموزش مارکورات و تابع انتقال سیگموئیدی برای لایه های مختلف

| تابع انتقال | قانون آموزش | لایه پنهان | تعداد نورو | داده های آموزش      | داده های اعتبار سنجی |
|-------------|-------------|------------|------------|---------------------|----------------------|
|             |             |            |            | R <sup>2</sup> RMSE | R <sup>2</sup> RMSE  |
| سیگموئیدی   | مارکورات    | ۱          | ۴          | ۰/۰۰۷ ۰/۰۹۶۸        | ۰/۰۰۶۵ ۰/۰۹۷۷        |
| سیگموئیدی   | مارکورات    | ۲          | ۴          | ۰/۰۱۶ ۰/۰۹۳         | ۰/۰۱۵ ۰/۰۹۴۷         |
| سیگموئیدی   | مارکورات    | ۳          | ۴          | ۰/۰۲۶ ۰/۰۹۱۹        | ۰/۰۲۰ ۰/۰۹۲۸         |
| سیگموئیدی   | مارکورات    | ۴          | ۴          | ۰/۰۱۲ ۰/۰۹۵۷        | ۰/۰۰۹ ۰/۰۹۵۷         |

جدول ۶: مقدار جذر میانگین مربعات، ضریب همبستگی، برای داده های آموزش و اعتبار سنجی با تابع آموزش مارکورات و تابع انتقال سیگموئیدی برای نورو های مختلف

| تابع انتقال | قانون آموزش | لایه پنهان | تعداد نورو | داده های آموزش      | داده های اعتبار سنجی |
|-------------|-------------|------------|------------|---------------------|----------------------|
|             |             |            |            | R <sup>2</sup> RMSE | R <sup>2</sup> RMSE  |
| سیگموئیدی   | مارکورات    | ۱          | ۴          | ۰/۰۰۵ ۰/۰۹۷۶        | ۰/۰۰۳۶ ۰/۰۹۸۷        |

جدول ۷: ضریب همبستگی و مجذور مربعات خطا برای داده های آموزش و تست شبکه در مدل شبکه های عصبی مصنوعی

| تابع انتقال | قانون آموزش | لایه پنهان | تعداد نورو | داده های آموزش      | داده های اعتبار سنجی | داده های تست        |
|-------------|-------------|------------|------------|---------------------|----------------------|---------------------|
|             |             |            |            | R <sup>2</sup> RMSE | R <sup>2</sup> RMSE  | R <sup>2</sup> RMSE |
| سیگموئیدی   | مارکورات    | ۱          | ۴          | ۰/۰۰۵ ۰/۰۹۷۶        | ۰/۰۰۳۶ ۰/۰۹۸۷        | ۰/۰۰۳۱ ۰/۰۹۸۱       |

## References

1. Zheng Z, Levin RE, Pinkham JL, Shetty K. Decolorization of polymeric dyes by a novel *Penicillium* isolate. *Process Biochem.* 1999; 34: 7-31.
2. Ramakrishna KR, Viraraghavan T. Dye removal using low cost adsorbents. *Water Sci Technol.* 1997; 36: 96-189.
3. Koprivanac N, Kusic H. Hazardous organic pollutants in colored wastewaters: Nova Science Publishers Hauppauge, 2009.
4. Chowdhury S, Chakraborty S, Saha PD. Removal of crystal violet from aqueous solution by adsorption onto eggshells: Equilibrium, kinetics, thermodynamics and artificial neural network modeling. *Waste Biomass Valori.* 2013; 4: 64-655.
5. Mahmoodi NM, Hayati B, Arami M, Lan C. Adsorption of textile dyes on Pine Cone from colored wastewater: Kinetic, equilibrium and thermodynamic studies. *Desalination.* 2011; 268: 117-25.
6. Mahmoodi NM, Arami M, Limaee NY, Gharanjig K. Photocatalytic degradation of agricultural N-heterocyclic organic pollutants using immobilized nanoparticles of titania. *J Hazard Mater.* 2007;145: 65-71.
7. Karagozoglu B, Tasdemir M, Demirbas E, Kobya M. The adsorption of basic dye (Astrazon Blue FGRL) from aqueous solutions onto sepiolite, fly ash and apricot shell activated carbon: Kinetic and equilibrium studies. *J Hazard Mater.* 2007; 147: 297-306.
8. Miao J, Jia Z, Lu H-B, Habibi D, Zhang L.C. Heterogeneous photocatalytic degradation of mordant black 11 with ZnO nanoparticles under UV-Vis light. *J Taiwan Instit Chem Engin.* 2013; 45: 1636-41.
9. Zheng L, Zheng Y, Chen C, Zhan Y, Lin X, Zheng Q, et al. Network structured SnO<sub>2</sub>/ZnO heterojunction nanocatalyst with high photocatalytic activity. *Inorgan Chem.* 2009; 48: 819-25.
10. Kaur J, Bansal S, Singhal S. Photocatalytic degradation of methyl orange using ZnO nanopowders synthesized via thermal decomposition of oxalate precursor method. *Physica B: Condensed Matter.* 2013; 416: 8-33.
11. Aleboyeh A, Kasiri M, Olya M, Aleboyeh H. Prediction of azo dye decolorization by UV/H using artificial neural networks. *Dyes Pigmen.* 2008; 77: 94-288.
12. Karimi H, Ghaedi M. Application of artificial neural network and genetic algorithm to modeling and optimization of removal of methylene blue using activated carbon. *J Ind Engin Chem.* 2014; 20: 2471-6.
13. Ghaedi M, Zeinali N, Ghaedi A, Teimuori M, Tashkhourian J. Artificial neural network-genetic algorithm based optimization for the adsorption of methylene blue and brilliant green from aqueous solution by graphite oxide nanoparticle. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy,* 2014;125: 77-264.
14. Mehrotra K, Mohan C.K, Ranka S. Elements of artificial neural networks: MIT press, 1997.
15. Geyikçi F, Çoruh S, Kılıç E. Development of experimental results by artificial neural network model for adsorption of Cu<sup>2+</sup> using single wall carbon nanotubes. *Separa Sci Technol.* 2013; 48: 9-1490.
16. Ghaedi M, Ansari A, Assefi Nejad P, Ghaedi A, Vafaei A, Habibi MH. Artificial neural network and bees algorithm for removal of Eosin B using cobalt oxide nanoparticle-activated carbon: Isotherm and Kinetics study. *Environ Prog Sustainable Energ.* 2014; doi: 10.1002/ep.11981

17. Chakrabarti S, Dutta B.K. Photocatalytic degradation of model textile dyes in wastewater using ZnO as semiconductor catalyst. *Journal of hazardous materials*, 2004;112(3): 78-269.
18. Nourbakhsh H, Emam-Djomeh Z, Omid M, Mirsaeedghazi H, Moini S. Prediction of red plum juice permeate flux during membrane processing with ANN optimized using RSM. *Comput Electron Agri*. 2014; 20: 102:1-9.
19. Kardam A, Raj KR, Arora JK, Srivastava S. Artificial neural network modeling for biosorption of Pb (II) ions on nanocellulose fibers. *bionanosci*. 2012; 2: 60-153.
20. Khataee A, Movafeghi A, Torbati S, Salehi Lissar S, Zarei M. Phytoremediation potential of duckweed (*Lemna minor L.*) in degradation of CI Acid Blue 92: Artificial neural network modeling. *Ecotoxicol Environ Safet*. 2012; 80: 8-291.
21. Jin W, Li ZJ, Wei LS, Zhen H. The improvements of BP neural network learning algorithm. *Signal Processing Proceedings, 2000 WCCC-ICSP 2000 5<sup>th</sup> International Conference on*; 2000: IEEE.
22. Chen AS, Leung MT, Daouk H. Application of neural networks to an emerging financial market: forecasting and trading the Taiwan Stock Index. *Computers & Operations Research*, 2003; 30: 23-901.

## Application of artificial neural network to modeling and optimization of removal of acid black1 using TiO<sub>2</sub>-Ni nanocoposite

**Kamal Salehi<sup>1</sup>, Behzad Shahmoradi<sup>2</sup>, Afshin Maleki<sup>3</sup>, Borhan Mansouri<sup>4</sup>, Fardin Gharibi<sup>5</sup>**

1- Department of Environmental Health Engineering, School of Health, Kurdistan University of Medical Sciences, Sanandaj, Iran; E-mail: kamalsalehi1366@gmail.com; Mobile: 09192008133

2- Kurdistan Environmental Health Research Center, Kurdistan University of Medical Sciences, Sanandaj, Iran

3- Kurdistan Environmental Health Research Center, Kurdistan University of Medical Sciences, Sanandaj, Iran.

4- Kurdistan Environmental Health Research Center, Kurdistan University of Medical Sciences, Sanandaj, Iran

5- Deputy of Research, Kurdistan University of Medical Sciences, Sanandaj, Iran

### ABSTRACT

**Background and Aim:** Artificial Neural Network is non-liner mapping structure based on the function of the human brain. They are powerful tools for modelling, especially when the underlying data relationship is known. So, the aim of this study was the used of artificial neural network to modelling and optimization of removal of acid black1 using TiO<sub>2</sub>-Ni nanocoposite.

**Material and Methods:** This study was an applied research in which TiO<sub>2</sub>-Ni nanocoposite was synthesized and its chemical properties was evaluated by SEM. For experiments design, predicting, and modeling dye removal were used taguchi method, Artifial Nerual Network (ANNs).

**Result:** The results showed that network with tan sigmoid transfer functions, Levenberg –Marquardt algorithm, one hidden layer and four neuron in hidden layer estimated better removal dye of acid black1.

**Conclusion:** It is concluded that ANN model can estimate the behavior of the photocatalyst process under different experimental conditions.

**Keyword:** Acid Black 1, Artificial Neural Network, TiO<sub>2</sub>-Ni Nanocoposite.