



Available online: <http://ijhe.tums.ac.ir>

مقاله پژوهشی

## استفاده از شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN) در مدل‌سازی جذب بیولوژیکی فلز کروم (VI) از محلول‌های آبی

فرزانه محمدی<sup>۱\*</sup>، سمیه رحیمی<sup>۲</sup>، زینب یآوری<sup>۳</sup>

- ۱- (نویسنده مسئول): دانشجوی دکتری مهندسی بهداشت محیط، دانشکده بهداشت، دانشگاه علوم پزشکی اصفهان
- ۲- دانشجوی دکتری مهندسی بهداشت محیط، دانشکده بهداشت، دانشگاه علوم پزشکی اصفهان
- ۳- دانشجوی دکتری مهندسی بهداشت محیط، دانشکده بهداشت، دانشگاه علوم پزشکی اصفهان

اطلاعات مقاله:	چکیده
تاریخ دریافت: ۹۴/۰۵/۲۴	زمینه و هدف: در این تحقیق میزان حذف فلز کروم شش ظرفیتی از محلول‌های آبی با استفاده از جاذب بیولوژیکی لجن دفعی فاضلاب‌های شهری مطالعه شد. همچنین کارایی شبکه‌های عصبی در پیش‌بینی جذب بیولوژیکی مورد بررسی قرار گرفت.
تاریخ پذیرش: ۹۴/۰۸/۱۸	روش بررسی: تاثیر پارامترهای غلظت اولیه، دز جاذب، pH، سرعت و زمان اختلاط در راکتور ناپیوسته بر جذب کروم بررسی و قسمتی از نتایج آزمایشگاهی توسط شبکه عصبی پس انتشار پیش خور مدل‌سازی شد و بخش دیگری از نتایج برای سنجش دقت مدل شبیه‌سازی شد. بهینه‌سازی تابع انتقال و تعداد نورون‌های لایه مخفی انجام شد.
واژگان کلیدی: جذب بیولوژیکی، فلز کروم، مدل‌سازی با شبکه عصبی، لجن دفعی، ایزوترم فروندلیچ	یافته‌ها: شرایط بهینه در غلظت اولیه $90 \text{ mg/L}$ ، دز جاذب $4 \text{ g/L}$ ، pH معادل ۲، سرعت اختلاط $200 \text{ rpm}$ و زمان اختلاط $120 \text{ min}$ حاصل شد و حداکثر میزان حذف ۹۶٪ و حداکثر ظرفیت جذب $41/69 \text{ mg/g}$ بدست آمد. سینتیک جذب کروم با مدل شبه مرتبه دوم و ایزوترم جذب آن با مدل فروندلیچ تطابق دارد. در شبکه عصبی طراحی شده بهترین تابع انتقال در لایه‌های مخفی و خروجی تابع تانژانت سیگموئید و تعداد نورون بهینه برابر ۱۳ عدد تعیین شد. خروجی مدل با بردار هدف همبستگی ( $R=0/984$ ) مناسبی دارد. شبیه‌سازی انجام شده با مدل شبکه عصبی، تطابق مناسبی با نتایج آزمایشگاهی دارد.
پست الکترونیکی نویسنده مسئول: fm_1363@yahoo.com	نتیجه‌گیری: لجن دفعی مورد استفاده در این تحقیق قادر به حذف کروم از محیط‌های آبی است. استفاده از شبکه عصبی پس‌انتشار، تابع آموزش <i>Levenberg-Marquardt</i> ، تابع انتقال تانژانت سیگموئید در لایه‌های مخفی و خروجی و تعداد نورون‌های بین ۱/۶ تا ۱/۸ داده‌های ورودی، نتایج مناسبی برای پیش‌بینی فرایند جذب در پی خواهد داشت.

## مقدمه

آلودگی محیط‌های آبی به یک مساله جدی زیست محیطی در سراسر جهان تبدیل شده است مخصوصاً زمانی که همراه با فاضلاب‌ها مقدار زیادی فلزات سنگین، بیش از سطح استاندارد به محیط تخلیه می‌شود (۱). از این رو تصفیه فاضلاب‌ها به خصوص فاضلاب‌های صنعتی به عنوان یک مساله جدی، اقتصادی و فنی مورد توجه واقع شده است. فلزات سنگینی مانند جیوه (Hg)، کادمیوم (Cd)، کروم (Cr)، آرسنیک (Ar)، و سرب (Pb) در مقادیر بسیار اندک نیز اثرات نامطلوب بر سلامت انسان و محیط‌زیست دارد (۲). فلز کروم یک آلاینده بسیار سمی است که توسط صنایعی چون آبکاری، تکمیل فلزات، دباغی چرم، عکاسی، رنگ و نساجی به محیط‌زیست تخلیه می‌شود (۳). فلز کروم به گروه VI-B در جدول تناوبی تعلق داشته، عدد اتمی آن ۲۴ است. فلز کروم چندین عدد اکسایش دارد که از ۲- تا ۶+ تغییر می‌کند اما کروم با عدد اکسایش ۳ (Cr(III)) و ۶ (Cr(VI)) در محیط زیست غالب است (۴). کروم شش ظرفیتی (Cr(VI)) بسیار سمی تر از کروم سه ظرفیتی است و حتی در مقادیر بسیار کم سرطانزا، جهش‌زا و تراژون است. کروم شش ظرفیتی توسط U.S.EPA در گروه A مواد سرطانزا برای انسان طبقه‌بندی شده است. از این رو حذف فلز کروم به یک چالش زیست محیطی ضروری و با اولویت بالا تبدیل شده است (۵). روش‌های مختلفی مانند ترسیب شیمیایی، خنثی‌سازی، فیلتراسیون غشایی و جذب برای حذف فلزات سنگین مورد استفاده قرار می‌گیرد. در بین این روش‌ها روش جذب بیولوژیکی با استفاده از زائادات کشاورزی توجه محققان را جلب کرده است. بازده بالا، قیمت ارزان، در دسترس بودن و سهولت کنترل از مزایای جذب بیولوژیکی است (۶). از جمله زائادات مورد استفاده برای جذب بیولوژیکی می‌توان از تفاله نیشکر، شلتوک برنج، خاک اره، پوست نارگیل، پوسته بادام و غیره نام برد (۷). مواد بیولوژیکی غیر زنده که دارای گروه‌های عاملی مناسب برای اتصال فلزات هستند نیاز به نگهداری و مراقبت کمتری در پروسه جذب دارند و این

نکته برای مناطق آلوده در سطح وسیع بسیار مناسب است (۶). پروسه جذب بیولوژیکی بسیار پیچیده است و این مساله به دلیل دخیل شدن پارامترهای زیاد با روابط غیر خطی در این پروسه است. مدلسازی پروسه جذب بیولوژیکی در سیستم Batch با مدل‌های ریاضیاتی معمول بسیار مشکل است (۸). به دلیل مشخصات برجسته، محکم و قابل اعتماد شبکه‌های عصبی مصنوعی (Artificial Neural Network) در به دست آوردن روابط غیر خطی بین داده‌های ورودی و خروجی، این مدل‌ها در دهه گذشته به طور وسیعی به مهندسی محیط زیست راه یافته است. بررسی این مدل‌ها و تعیین توانایی آن‌ها در پیش‌بینی فرایند جذب بیولوژیکی توسط محققان زیادی در حال انجام است (۹). مطالعات انجام شده در این مقاله نیز در همین راستا است. از جمله کاربردهای شبکه عصبی می‌توان به این موارد اشاره کرد:

- مدلسازی و بهینه‌سازی بالکینگ لجن در تصفیه خانه فاضلاب با استفاده از ANN (۱۰)
  - استفاده از شبکه عصبی و الگوریتم ژنتیک در پیش‌بینی کیفیت آب رودخانه (۱۱)
  - مدلسازی میزان انتشار NOx با استفاده از ANN (۱۲)
  - مدلسازی انتشار دیوکسین از یک زباله سوز مواد زائد جامد با استفاده از شبکه‌های عصبی (۱۳)
  - مدلسازی جذب بیولوژیکی Acid Black 172 و Congo Red از محلول‌های آبی با استفاده از ANN (۱۴)
- اگر چه تحقیقات زیادی برای حذف فلزات سنگین از محلول‌های آبی با جاذب‌های مختلف انجام شده است لیکن هر ماده ویژه‌ای به عنوان جاذب نیاز به تحقیقات خاصی بر روی خود دارد. در این کار پتانسیل جذب بیولوژیکی فلز کروم شش ظرفیتی توسط لجن دفعی فاضلاب‌های شهری از محلول‌های آبی، مورد بررسی قرار گرفت. تاثیر پارامترهای مختلف مانند دز جاذب، غلظت اولیه، pH، سرعت اختلاط و زمان اختلاط در راکتور ناپیوسته مطالعه شد. نتایج آزمایشگاهی توسط شبکه عصبی سه لایه پس انتشار پیش‌خور (Feed-Forward Back propagation)

سپس حجم آن به وسیله آب مقطر به ۱۰۰۰ mL رسانده شد. در دمای ۴ °C نگهداری گردید. سایر محلول‌ها با غلظت مورد نیاز به وسیله رقیق‌سازی تهیه شد. محلول‌های NaOH و HCl برای تنظیم pH به کار گرفته شد. وسایل آزمایشگاهی توسط اسید سولفوریک ۰/۰۰۵ N / مورد شستشو قرار گرفت و چندین بار با آب مقطر آب کشیده شد.

وسایل آزمایشگاهی مورد استفاده: وسایل مورد استفاده در این تحقیق شامل وسائل شیشه‌ای اعم از پیپت، بالن، استوانه مدرج، الک فلزی، ظروف نمونه‌برداری و فیلتر غشایی مارک wattman بوده و از دستگاه‌هایی از قبیل شیکر مدل Rotator R430 و pH متر مدل 3045 Ion Analyzer و همزن مغناطیسی MR3000 و ترازوی دیجیتالی مدل Sartorius UV- RAYLEIGH و اسپکتروفتومتر 1601- استفاده شد.

طراحی آزمایش‌های بهینه‌سازی پارامترهای جذب: طراحی آزمایش نقش مؤثری در بهبود عملکرد یک فرایند دارد. از میان روش‌های متفاوت موجود برای طراحی آزمایش، در این پژوهش از روش طراحی فاکتوریل کامل (Full factorial design) استفاده شد. در طراحی آزمایش فاکتوریل کامل تعداد انجام آزمایش برابر تعداد کل جایگشت‌های حاصل از کنار هم قرار دادن سطوح مختلف عوامل در نظر گرفته شده است (۱۷). با توجه به انتخاب عوامل و سطوح موردنظر (جدول ۱) با در نظر گرفتن تکرار آزمایش‌ها، جمعا ۲۹۶ آزمایش برای بهینه‌سازی پارامترهای جذب در این مطالعه انجام شد.

Neural Network) مدل‌سازی شد. نوع تابع انتقال در لایه‌های مخفی و خروجی و تعداد نورون‌ها در لایه مخفی بهینه‌سازی شد و نهایتاً خروجی مدل با نتایج آزمایشگاهی مقایسه گردید.

## مواد و روش‌ها

آماده‌سازی جاذب بیولوژیکی: برای این تحقیق از لجن دفعی تصفیه خانه فاضلاب جنوب اصفهان استفاده گردید. میزان لجن تولیدی این تصفیه خانه ۱۰۰ تن در شبانه روز است که بدون استفاده خاصی دفع می‌شود. میزان فلزات سنگین موجود در پساب این تصفیه خانه حدود ۰/۰۰۰۱ mg/L است. برای پیش تصفیه لجن مورد استفاده در این تحقیق، لجن فاضلاب به مدت ۲۴ h در دمای بین ۱۰۳ تا ۱۰۴ °C خشک گردید و پس از خنک شدن در دسیکاتور به عنوان جاذب بیولوژیکی مورد استفاده قرار گرفت. لازم به ذکر است از بخش عبوری از الک نمره ۱۰۰ (۱۵۰ μm) برای انجام آزمایشات استفاده گردید. این پروسه به دلیل بازده بالاتر جذب سطحی به وسیله کوتاه کردن مسیر دیفیوژن انجام شد (۱۵).

آماده‌سازی مواد شیمیایی: محلول کروم بر اساس روش ذکر شده در کتاب روش‌های استاندارد آزمایشات آب و فاضلاب (۱۶) آماده شد. آب مقطر برای تهیه همه محلول‌ها به کار گرفته شد. برای تهیه محلول ۱۰۰۰ mg/L کروم ۲/۸۲۹ g دی کرومات پتاسیم (K<sub>2</sub>Cr<sub>2</sub>O<sub>7</sub>) محصول شرکت Chemical Aldrich Company آمریکا با درجه خلوص ۹۹٪ با جرم مولکولی ۱۹/۲۹۴ g/mol به بالن ۱۰۰۰ mL منتقل شد و

جدول ۱- پارامترها و سطوح در نظر گرفته شده برای انجام آزمایشات در این تحقیق

پارامترها		هدف آزمایش
زمان نمونه‌برداری (min)	سرعت اختلاط (rpm)	غلظت اولیه محلول کروم (mg/L)
۱۲۰	۲۰۰	۹۰، ۵۰، ۲۰، ۵
۱۲۰	۲۰۰، ۱۵۰، ۱۰۰، ۵۰	۹۰، ۵۰، ۲۰، ۵
۴۸۰، ۳۰۰، ۱۸۰، ۱۲۰، ۶۰، ۳۰، ۱۵، ۵	۲۰۰	۹۰، ۵۰، ۲۰، ۵
۱۲۰	۲۰۰	۹۰، ۵۰، ۲۰، ۵

$C_0$  و  $C_e$  به ترتیب غلظت اولیه و نهایی محلول کروم هستند.

$$\%R = \frac{(C_0 - C_e) * 100}{C_0} \quad (1)$$

**نتایج آماری آزمایش‌های جذب بیولوژیکی:** آزمایش‌های مورد نظر تحت شرایط ذکر شده انجام شد و نرمال بودن داده‌ها بوسیله آزمون کولموگراف اسمیرنوف در نرم‌افزار SPSS بررسی شد. بر این اساس میانگین درصد حذف در کل آزمایشات، انحراف معیار و مقدار P-value به ترتیب برابر ۱۱/۵۹٪، ۱۴/۱۸ و ۰/۰۶۹ به دست آمد. نتیجه آزمون کولموگراف اسمیرنوف حاکی از پیروی داده‌ها از توزیع نرمال است.

**مدلسازی جذب بیولوژیکی کروم شش ظرفیتی با شبکه عصبی:** شبکه‌های عصبی مصنوعی مدل‌های کامپیوتری هستند که بر اساس مدل ساده شده فعالیت‌های بیولوژیکی مغز انسان مانند قابلیت یادگیری، تفکر، دلایل به یاد آوری و حل مسایل پایه‌ریزی شده‌اند. مدل‌های شبکه عصبی از سلول‌های عصبی و وزن‌ها تشکیل شده‌اند، این مدل‌ها بر این اساس اصل استوار است که یک سیستم پیوسته از عناصر پردازشگر ساده می‌تواند روابط پیچیده بین متغیرهای مستقل و وابسته را یاد بگیرد (۱۸). توسعه یک مدل شبکه عصبی ساده نیست و شامل گام‌هایی به این ترتیب است، ۱- انتخاب نحوه تولید داده‌ها ۲- تولید داده‌ها ۳- پردازش داده‌ها ۴- انتخاب ساختار شبکه عصبی ۵- انتخاب الگوریتم آموزش شبکه ۶- آموزش شبکه ۷- آزمایش شبکه عصبی آموزش دیده شده ۸- استفاده از شبکه عصبی آموزش دیده شده برای اعتبار بخشی و شبیه‌سازی (۱۹).

شبکه‌های عصبی ساختار به هم پیوسته‌ای دارد که شامل لایه ورودی، لایه خروجی و لایه‌های میانگین است که به لایه‌های مخفی موسومند. هر لایه شامل المان‌های پردازشگر ساده ایست که نوروں نامیده می‌شوند. نوروں‌ها با لایه‌ها از طریق سیگنال‌های وزن‌های تنظیم شده در ارتباطند. لایه ورودی این سیگنال‌ها را از منابع خارجی دریافت می‌کند. وزن دهی در این لایه برای هر ورودی به صورت جداگانه انجام شده و این اطلاعات برای پردازش به لایه‌های مخفی ارسال می‌شود (۲۰). لایه‌های مخفی

آزمایشات ناپیوسته جذب بیولوژیکی: ابتدا محلول کروم با غلظت اولیه مورد نظر با کمک رقیق‌سازی ساخته شد؛ سپس pH محلول با استفاده از اسید هیدروکلریدریک و سود تنظیم گردید. پس از آن نمونه‌های ۲۵ میلی لیتری از محلول کروم تهیه شده و در غلظت‌های مورد نظر با زیست جرم خشک شده حاصل از لجن دفعی در جرم‌های معین در دمای آزمایشگاه  $20 \pm 25^\circ\text{C}$  تماس داده شد و نمونه به مدت ۲ h (یا زمان‌های متوالی در آزمایش سینتیک و بهینه سازی سرعت اختلاط) روی شیکر قرار گرفت. پس از طی شدن زمان اختلاط، نمونه‌ها از فیلتر عبور داده شد و غلظت کروم در نمونه‌های حاصل، از روش رنگ سنجی بر طبق استاندارد شماره ۳۵۰۰ روش‌های استاندارد (۱۶) و با دستگاه اسپکتروفتومتر در طول موج  $540 \text{ nm}$  اندازه‌گیری گردید. قابل ذکر است که دما یکی از عوامل مهم در فرایند جذب است، نوسانات آن در طی آزمایش می‌تواند باعث ایجاد خطا گردد، همچنین خطاهای ابزاری و اندازه‌گیری می‌تواند بر نتایج تاثیرگذار باشد. در این پژوهش سعی شده است تا این خطاها به حداقل خود کاهش یابد.

به دلیل زیاد شدن تعداد آزمایش‌ها از روش فاکتوریل کامل، سرعت اختلاط از بین عوامل آزمایشات فاکتوریل خارج گردید و بهینه‌سازی سرعت اختلاط به وسیله یک سری آزمایش، به طور جداگانه مطابق جدول ۱ انجام شد. پس از رسیدن به یک سرعت اختلاط بهینه کلیه آزمایش‌های فاکتوریل در این سرعت بهینه انجام گردید.

به منظور بررسی تغییرات میزان جذب کروم در طول زمان (سینتیک جذب)، آزمایش‌هایی با شرایط جدول ۱ بر روی نمونه‌های ۲۵ میلی لیتری از محلول کروم با غلظت مورد نظر و در دمای آزمایشگاه انجام گرفت. همچنین آزمایش‌های ایزوترم جذب با توجه به سطوح در نظر گرفته شده در جدول ۱، برای تعیین رابطه بین مقدار کروم جذب شده به ازای واحد جرم جاذب و غلظت تعادلی کروم در فاز محلول انجام شد.

درصد حذف کروم شش ظرفیتی که به عنوان پارامتر خروجی به مدل ANN معرفی گردید با معادله ۱ تعیین شد. که در آن

عدد است که برابر تعداد متغیرهای ورودی به مدل است. تعداد نورون‌ها در لایه مخفی در ابتدا ۱۰ نورون در نظر گرفته شد و پس از تعیین بهترین شبکه از چهار مدل ذکر شده، تعداد نورون‌های لایه مخفی بهینه‌سازی شد. تعداد نورون‌ها در لایه خروجی به تعداد پارامترهای خروجی شبکه بستگی دارد. در این تحقیق خروجی مدل درصد حذف کروم شش ظرفیتی است. بنابراین تعداد نورون‌های لایه خروجی یک عدد است. عملکرد شبکه عصبی از طریق میانگین مربعات خطا (MSE) و ضریب همبستگی (R)، ارزیابی می‌شود که معادلات آن‌ها در ادامه قابل مشاهده است.

$$MSE = \frac{\sum_{i=1}^n (y_{obs,i} - y_{model,i})^2}{n} \quad (2)$$

$$R = \frac{\sum_{i=1}^n (y_{obs,i} - y_{obs,mean})(y_{model,i} - y_{model,mean})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (y_{obs,i} - y_{obs,mean})^2 (y_{model,i} - y_{model,mean})^2}} \quad (3)$$

که در معادلات فوق، n تعداد داده‌ها،  $(y_{obs,i})$  و  $(y_{model,i})$  به ترتیب مقدار خروجی پیش‌بینی شده توسط مدل و مقدار خروجی اندازه‌گیری شده است و  $(y_{obs,mean})$  و  $(y_{model,mean})$  متوسط مقادیر خروجی اندازه‌گیری شده در آزمایشگاه و متوسط مقادیر پیش‌بینی شده توسط مدل است (۱۸).

برای آموزش شبکه از الگوریتم پس انتشار Levenberg-Marquardt (LMBP) استفاده شد. که در شکل ۱ مراحل این الگوریتم به صورت ساده آورده شده است. عموماً در مسائل تخمین تابع با پارامترهای شبکه کمتر از ۱۰۰ عدد، الگوریتم LMBP کارایی بالایی از خود نشان می‌دهد و سرعت بالایی دارد و البته دقت بالای آن کاملاً برجسته است زیرا در بسیاری از موارد این الگوریتم به حداقل خطا رسیده است (۲۱).

در طول آموزش خروجی پیش‌بینی شده توسط مدل با خروجی مورد انتظار مقایسه می‌شود و میانگین مربعات خطا محاسبه می‌گردد در صورتی که MSE بیشتر از مقدار مقرر شده باشد میزان خطا از خروجی به ورودی باز پخش شده و وزن‌ها بر اساس آن اصلاح می‌گردند تا زمانی این کار تکرار می‌شود که یا خطا به محدوده مجاز برسد یا تعداد سعی و خطا با حداکثر تعداد سعی و خطای مشخص شده برای مدل

پیش پردازش را انجام داده و نتایج را با کمک توابع انتقال به سایر لایه‌های مخفی و لایه خروجی منتقل می‌کند (۱۸). در شبکه عصبی پیش‌خور (feed forward) داده‌ها تنها در یک جهت و به سمت جلو انتقال داده می‌شوند و به ترتیبی که ذکر شد از لایه ورودی به مخفی و از مخفی به خروجی. هیچ حلقه یا سیکلی در این شبکه‌ها وجود ندارد.

در این مطالعه Neural Network Toolbox نرم افزار R2013a Matlab برای پیش‌بینی میزان حذف، مورد استفاده قرار گرفت. نتایج ۸۰ عدد از آزمایشات انجام شده، برای توسعه مدل شبکه عصبی (ANN) استفاده شد و نتایج ۲۰ آزمایش برای شبیه‌سازی در انتهای کار کنار گذاشته شد. نتایج آزمایشات انجام شده برای بهینه‌سازی زمان تماس و سرعت اختلاط وارد مدل نشد و تنها نتایج آزمایشات با بهینه‌سازی پارامترهای جذب و ایزوترم جذب به عنوان ورودی و خروجی وارد گردید.

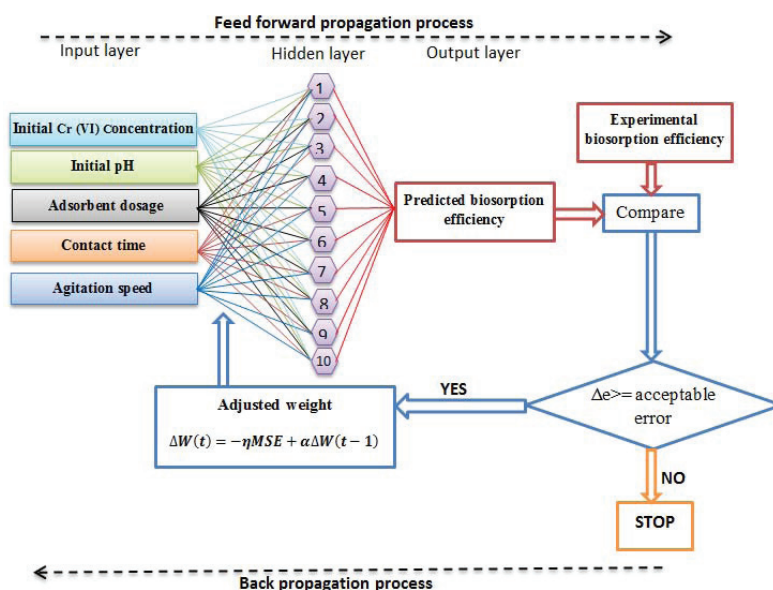
با توجه به اینکه راهبرد جهانی خاصی برای انتخاب معماری و الگوریتم شبکه عصبی در مسایل مختلف وجود ندارد (۸)، محققان برای دستیابی به مناسبترین مدل در مسائل مورد بررسی خود، بر روی قسمت‌های متنوع شبکه عصبی کار می‌کنند. در این تحقیق، برای تعیین مناسبترین توابع انتقال در لایه‌های مخفی و خروجی در پیش‌بینی میزان جذب، چهار مدل شبکه عصبی پس انتشار (BPNN) با سه لایه ورودی، مخفی و خروجی و با توابع انتقال مختلف در این لایه‌ها توسعه داده شد. در این چهار مدل به ترتیب در لایه مخفی و خروجی توابع انتقال purelin-purelin، purelin-tansig، tansig-purelin، tansig-tansig و tansig-tansig به کار برده شد. داده‌های بدست آمده در آزمایشگاه، به صورت ماتریس ورودی  $5 \times 80$  و ماتریس خروجی  $1 \times 80$  به شبکه معرفی شد. ۷۰٪ داده‌های مورد نظر برای طراحی شبکه، برای آموزش شبکه و ۱۵٪ برای اعتبار سنجی و ۱۵٪ برای آزمایش شبکه تخصیص داده شد. انتخاب داده‌ها برای موارد مذکور توسط نرم افزار به صورت تصادفی انجام می‌شود. در معماری شبکه عصبی در این تحقیق تعداد نورون‌ها در لایه ورودی برابر ۵

اول آموزش خطا رو به کاهش می‌گذارد تا شبکه به مینیمم خطا می‌رسد و سپس با دادن داده‌های بیشتر مجددا خطا رو به افزایش می‌گذارد در این مرحله آموزش شبکه متوقف شده و وزن‌ها در مینیمم خطا بازگردانیده می‌شود (۲۲). در شکل ۱ معماری شبکه عصبی همراه با دیاگرام الگوریتم LMBP برای پیش‌بینی درصد حذف کروم قابل مشاهده است.

برابر شود. اصلاح وزن‌ها در هر بار سعی با معادله زیر انجام می‌شود.

$$\Delta W(t) = -\eta MSE + \alpha \Delta W(t-1) \quad (4)$$

که در آن  $\eta$  برابر نرخ آموزش و  $\alpha$  نیز ضریب مومنتم است که هر دو در محدوده ۰ تا ۱ قرار دارند. میانگین مربعات خطا در طول دوره آموزش پایش می‌شود. در فاز

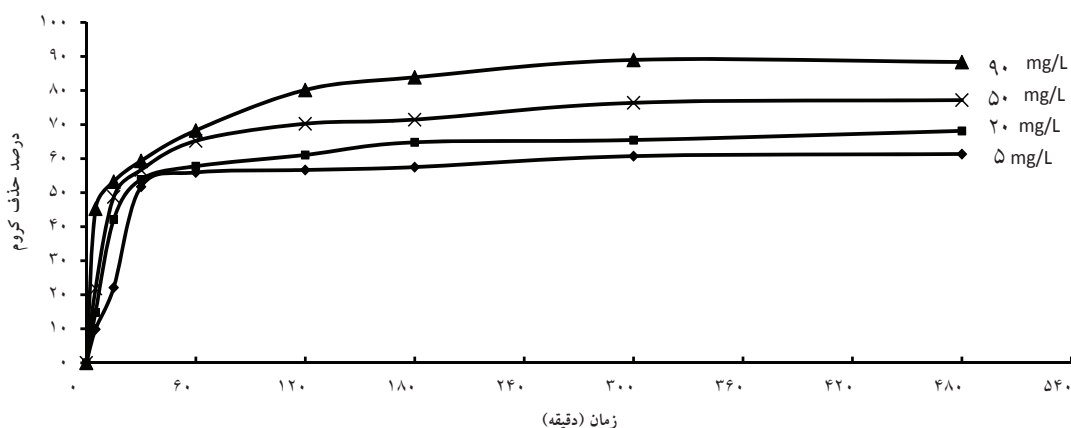


شکل ۱- معماری شبکه عصبی همراه با دیاگرام الگوریتم LMBP برای پیش‌بینی درصد حذف کروم

داده شده است. در مطالعات انجام شده از ثابت سرعت شبه مرتبه اول و شبه مرتبه دوم برای توصیف سینتیک جذب بر جاذب‌ها استفاده شد.

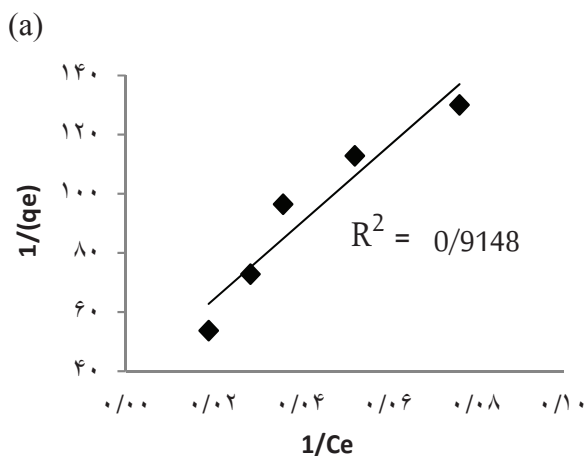
### یافته‌ها

سینتیک و ایزوترم جذب کروم: نمودار سینتیک جذب کروم در غلظت‌های اولیه ۵، ۲۰، ۵۰، و ۹۰ mg/L در شکل ۲ نشان

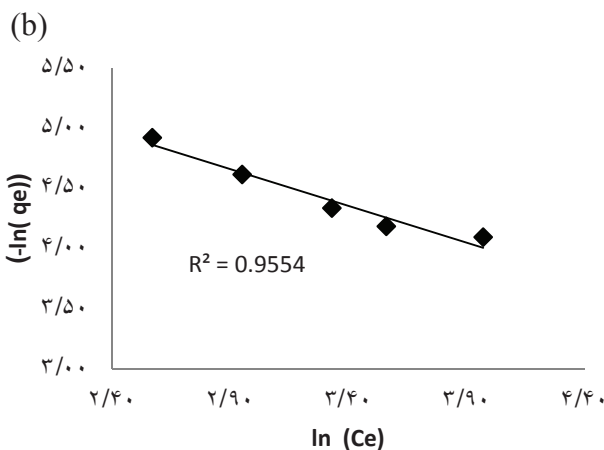


شکل ۲- مقایسه درصد حذف کروم نسبت به زمان در غلظت‌های اولیه مختلف

در جدول ۲ و نمودارهای ایزوترم لانگمویر و فرندلیچ در غلظت اولیه ۹۰ mg/L، در شکل ۳-a و ۳-b قابل مشاهده است.



در این تحقیق از مدل‌های لانگمویر، فرندلیچ برای توصیف ایزوترم‌های جذب استفاده شد. ضرایب ایزوترم‌های مورد مطالعه



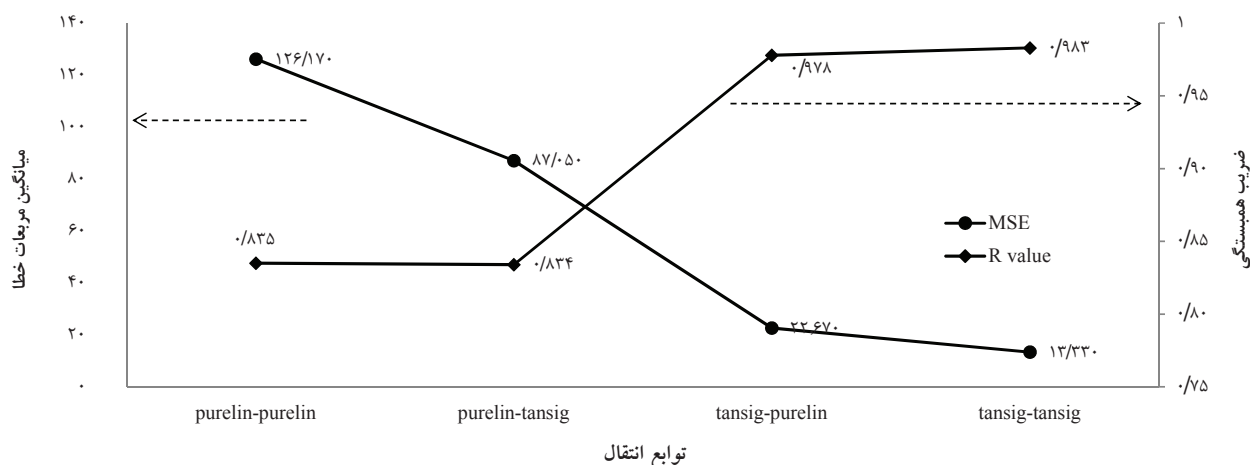
شکل ۳- a- ایزوترم لانگمویر و b- ایزوترم فرندلیچ جذب کروم بر جاذب در غلظت اولیه ۹۰ mg/L

جدول ۲- ضرایب ایزوترم‌های مورد مطالعه

ضرایب ایزوترم فرندلیچ				ضرایب ایزوترم لانگمویر			
R <sup>2</sup>	n	K <sub>f</sub>	C <sub>0</sub>	R <sup>2</sup>	a	b	C <sub>0</sub>
۰/۹۶۹	۰/۲۱۱	۲۱/۱۱	۵	۰/۹۴۴	۰/۳۲	۰/۰۰۰۲۰	۵
۰/۹۴۲	۰/۲۵۲	۳۴/۱۳	۲۰	۰/۹۲۵	۰/۱۱	۰/۰۰۱۰	۲۰
۰/۹۶	۰/۸۳۵	۹۳۶/۸	۵۰	۰/۹۵۸	۰/۰۰۹	۰/۰۲۰	۵۰
۰/۹۵۵	۱/۵۶	۵۸۵/۶	۹۰	۰/۹۱۴	۰/۰۳	۰/۰۲۶	۹۰

انتقال در لایه مخفی و لایه خروجی مشخص گردد. در شکل ۴ مقادیر حداقل مربعات خطا و ضریب همبستگی در چهار مدل ساخته شده قابل مشاهده است. همانطور که در شکل ۴ دیده می‌شود مدل چهارم با تابع انتقال تانژانت سیگموئید در لایه مخفی و خروجی و تعداد ۱۰ نرون در لایه مخفی، کمترین میانگین مربعات خطا و بیشترین ضریب همبستگی را داشته است.

در نمودارها و جدول فوق،  $q_e$  غلظت در فاز جامد در حالت تعادل و بر حسب  $mg/g$ ،  $C_e$  غلظت در فاز مایع در حالت تعادل بر حسب  $mg/L$ ،  $a$  ثابت تعادل جذب لانگمویر بر حسب  $L/mg$ ،  $b$  ظرفیت نهایی جذب تک لایه بر حسب  $mg/g$  و  $K_f$  و  $n$  ثابت‌های تعادلی مدل فرندلیچ هستند. مدل سازی جذب فلز کروم با ANN: در گام اول چهار شبکه عصبی با ترکیب تابع انتقال‌های tangent sigmoid و purelin مدل سازی شد تا به کمک نتایج، بهترین تابع



شکل ۴- مقادیر حداقل خطا و ضریب همبستگی در چهار مدل ساخته شده برای تعیین بهترین ترکیب تابع انتقال

ادامه جدول ۳- مقادیر حداقل خطا و ضریب همبستگی در شبکه‌های عصبی طراحی شده برای تعیین تعداد نورون بهینه

تعداد نورون	میانگین مربعات خطا	ضریب همبستگی
۱۱	۰/۹۷۳	۳۶/۱۰
۱۲	۰/۹۷۰	۲۹/۵۳
۱۳	۰/۹۸۴	۷/۴۲
۲۰	۰/۹۷۲	۲۷/۸۷
۵۰	۰/۹۳۶	۲۳۱/۳
۱۰۰	۰/۷۰۳	۳۴۸/۸

مدل شبکه عصبی طراحی شده با ۱۳ نورون در لایه مخفی و تابع تانژانت سیگموئید در لایه مخفی و خروجی کمترین میانگین مربعات خطا و بیشترین ضریب همبستگی را نشان داده است.

نتایج ۲۰ آزمایش در ابتدای مدل سازی از بین آزمایشات کنار گذاشته شد تا در این مرحله برای شبیه‌سازی مورد استفاده قرار بگیرد. قابل ذکر است که شبکه با این داده‌ها آموزش دیده نشده است و در صورتی که بتواند نتایج درست را پیش‌بینی کند می‌توان گفت، شبکه قابل اعتماد و قابل استفاده است.

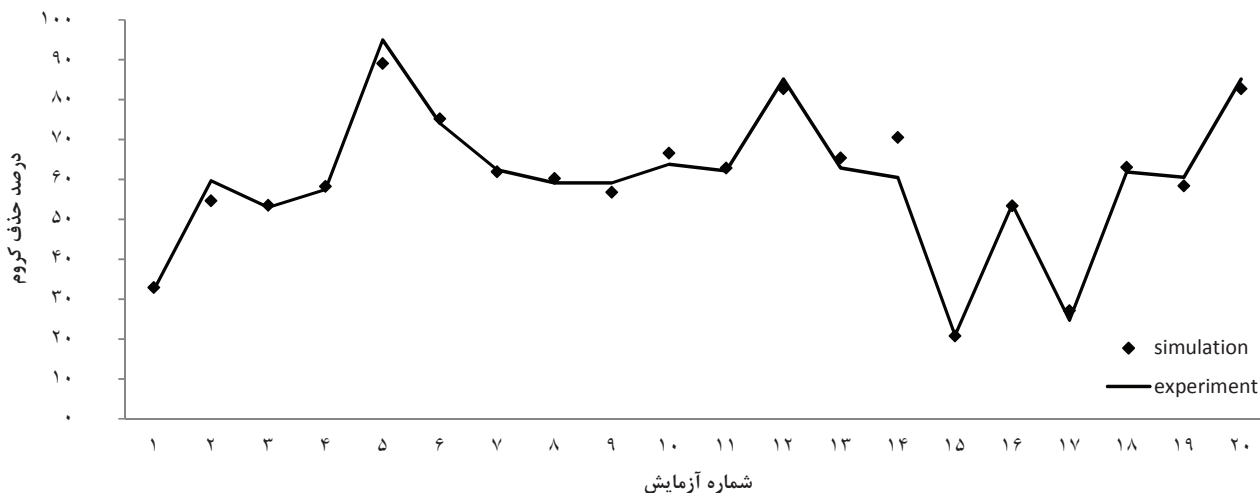
برای تعیین تعداد بهینه نورون در لایه مخفی، شبکه عصبی معماری ذکر شده و تنها با تعداد نورون متفاوت از ۱ تا ۱۰۰ نورون ایجاد شد و حداقل میانگین مربعات خطا و ضریب همبستگی هر کدام از شبکه‌ها بدست آمد که در جدول ۳ قابل مشاهده است.

جدول ۳- مقادیر حداقل خطا و ضریب همبستگی در شبکه‌های عصبی طراحی شده برای تعیین تعداد نورون بهینه

تعداد نورون	میانگین مربعات خطا	ضریب همبستگی
۱	۰/۸۴۱	۸۰/۹۳
۲	۰/۹۱۶	۱۰۰/۷
۳	۰/۹۲۳	۸۵/۶۶
۴	۰/۹۲۸	۴۸/۴۸
۵	۰/۹۱۲	۶۶/۴۸
۶	۰/۹۶۱	۱۸/۸۷
۷	۰/۹۳۳	۵۷/۷۸
۸	۰/۹۷۱	۲۱/۹۶
۹	۰/۹۷۶	۱۷/۱۸
۱۰	۰/۹۸۳	۱۳/۳۳

مدل و نتایج آزمایشات که نشان دهنده درصد حذف فلز کروم است، در مقابل شماره آزمایشات در شکل ۵ ترسیم شد.

مقادیر pH، غلظت اولیه کروم، سرعت اختلاط، زمان اختلاط و دز جاذب این ۲۰ آزمایش به عنوان ورودی به مدل شبکه عصبی طراحی شده، جهت شبیه‌سازی وارد شد و پیش‌بینی



شکل ۵- مقایسه نتایج شبیه سازی شبکه عصبی طراحی شده برای پیش بینی میزان حذف فلز کروم شش ظرفیتی و نتایج آزمایشگاهی

مدل‌های لانگمویر و فروندلیچ معمولترین مدل‌های مورد استفاده برای توصیف فرایند جذب است که در این پژوهش نیز مورد بررسی قرار گرفتند. با استفاده از فرم خطی آن‌ها و رگرسیون خطی، ضرایب مدل به دست آمد که در جدول ۲ آورده شده است. بر این اساس میزان حداکثر جذب کروم برابر  $41/69 \text{ mg Cr/g}$  در شرایط بهینه است. نمودارهای ایزوترم لانگمویر و فروندلیچ در غلظت اولیه  $90 \text{ mg/L}$  در شکل ۳-a و ۳-b رسم شد. در تمامی غلظت‌های اولیه ضریب  $R^2$  در ایزوترم فروندلیچ و لانگمویر تطابق خوبی با نتایج دارد ولی ایزوترم فروندلیچ تطابق بالاتری را نشان می‌دهد. Michalak و همکاران در سال ۲۰۰۷ و Ullah و همکاران در سال ۲۰۱۳ نشان دادند که ایزوترم لانگمویر با جذب بیولوژیکی فلز کروم مطابقت دارد (۶، ۲۵). پس از انجام آزمایشات طرح فاکتوریل، شرایط بهینه در غلظت اولیه  $90 \text{ mg/L}$ ، دز جاذب  $4 \text{ g/L}$ ، pH معادل ۲، سرعت

## بحث

در نمودار سینتیک جذب کروم (شکل ۲) میزان جذب با افزایش زمان تماس جاذب با محلول مورد نظر افزایش می‌یابد و پس از رسیدن به زمان تعادل ثابت می‌ماند. بر این اساس زمان تعادل جذب کروم در محدوده غلظت مورد مطالعه معادل  $120 \text{ min}$  به دست آمد. برای مدلسازی سینتیک جذب از مدل‌های شبه درجه اول و شبه درجه دوم استفاده شد. نتایج مدل‌ها نشان‌دهنده تطابق بالای سینتیک جذب کروم با مدل شبه درجه دوم است. Subbaiah و همکاران در سال ۲۰۰۸ با تحقیقاتی که بر روی جذب بیولوژیکی کروم شش ظرفیتی انجام دادند مشخص نمودند که سینتیک جذب کروم با مدل شبه درجه دوم همخوانی دارد (۲۳). Arris و همکاران در سال ۲۰۱۴ با بررسی جذب بیولوژیکی کروم شش ظرفیتی توسط پسماندهای حبوبات نشان دادند که سینتیک جذب کروم با مدل شبه درجه دوم مطابقت است (۲۴).

زیرا خطا روی مجموعه ارزیابی و آزمایشی دارای خصوصیات مشابهی است و به نظر می‌رسد مشکل بیش برآزش روی نداده است.

مرحله بعد انجام یک سری تحلیل بر روی پاسخ شبکه است، در این راستا کلیه داده‌های آموزشی ارزیابی و آزمایشی را به شبکه اعمال کرده و رگرسیون خطی بین خروجی شبکه و بردار هدف که همان نتایج آزمایشگاهی است، را به دست می‌آوریم. همچنین ضریب همبستگی بین خروجی‌های پیش‌بینی شده توسط مدل و خروجی‌های آزمایشگاهی داده شده به مدل، برابر  $0/983$  نشان داده شده است. این نتیجه نیز معقول است زیرا  $R$  value نزدیک به ۱ است و همبستگی مناسبی بین خروجی شبکه و بردار هدف وجود دارد.

با یافتن مناسب‌ترین تابع انتقال در لایه مخفی و لایه خروجی، در گام بعدی هدف تعیین تعداد نورون بهینه در لایه مخفی شبکه است در صورتی که طبق نتیجه به دست آمده در مرحله قبل تابع انتقال در لایه مخفی و خروجی تابع تانژانت سیگموئید باشد.

با توجه به جدول ۳ کمترین میزان مربعات خطا و بیشترین ضریب همبستگی در تعداد ۱۳ نورون اتفاق افتاده است. از ۱ تا ۱۳ نورون به صورت کلی مقدار میانگین مربعات خطا رو به کاهش گذاشته است و پس از آن افزایش داشته است. میزان ضریب همبستگی نیز از ۱ تا ۱۳ نورون به آهستگی افزایش می‌یابد و با افزایش تعداد نورون ضریب همبستگی کاهش یافته است. ضمناً با افزایش تعداد نورون‌ها به بیش از ۲۰ عدد میزان مربعات خطا به شدت افزایش یافته و ضریب همبستگی با شیب زیادی کاهش می‌یابد. این بدان معناست که افزایش تعداد نورون‌ها همواره باعث بهبود کارایی شبکه نمی‌شود بلکه تعداد نورون‌ها با توجه به تعداد داده‌های ورودی به شبکه عصبی باید میزان متناسبی داشته باشد در این تحقیق تعداد داده‌های ورودی ۸۰ عدد است و تعداد نورون‌های مناسب بین ۱۰ تا ۱۳ عدد بدست آمد. بنابراین تعداد نورون‌ها می‌بایست بین  $1/6$  تا  $1/8$  داده‌های ورودی باشد.

اختلاط  $200$  rpm و زمان اختلاط  $120$  min حاصل شد و حداکثر میزان حذف  $96\%$  بدست آمد. Şahin و همکاران در سال  $2005$  به  $pH$  بهینه جذب کروم برابر ۲ دست یافتند (۲۶). همچنین Zhou و همکاران در سال  $2007$ ،  $pH$  بهینه جذب کروم شش ظرفیتی را با استفاده از نوعی میکروارگانیزم، برابر  $2/5$  و زمان اختلاط برای رسیدن به تعادل را برابر  $120$  min به دست آوردند (۲۷). Sen و همکار در سال  $2011$  (۲۸) شرایط بهینه جذب بیولوژیکی فلز کروم را برابر دز جاذب  $4/5$  g/L،  $pH$  معادل ۲، زمان تعادل  $24$  h و ظرفیت جذب  $63/9$  mg/g بدست آوردند. Zhong و همکاران در سال  $2014$  (۲۹) با استفاده از جاذب بیولوژیکی غنی از سلولز،  $pH$  بهینه جذب کروم شش ظرفیتی را برابر  $2/2$  تا ۳ و ظرفیت جذب را برابر  $49/20$  mg/g به دست آوردند.

در این مطالعه مدل‌های شبکه عصبی برای پیش‌بینی میزان جذب بیولوژیکی فلز کروم مورد بررسی قرار گرفت. یکی از مهم‌ترین قسمت‌های طراحی یک شبکه مناسب تعیین نوع توابع انتقال و تعیین تعداد نورون‌ها در لایه‌های مخفی شبکه است. توابع انتقال به دلیل نقشی که در تبدیل داده‌های داخلی شبکه به خروجی مورد نظر دارند از اهمیت بالایی برخوردارند. در بیشتر کارهای تحقیقاتی بدون بررسی اولیه توابع انتقال انتخاب می‌شوند. در این تحقیق در گام اول با ایجاد چهار مدل شبکه عصبی FFBP با ترکیبی از توابع انتقال خطی و سیگموئیدی بهترین توابع انتقال انتخاب شدند. با توجه به شکل ۴، مدل اول با داشتن تابع انتقال خطی در لایه مخفی و خروجی، کمترین ضریب همبستگی ( $0/835$ ) و بیشترین خطا ( $126/17$ ) را داشته است. مدل چهارم با به کار بردن تابع انتقال تانژانت سیگموئید در لایه مخفی و لایه خروجی کمترین میزان میانگین مربعات خطا ( $13/33$ ) و بیشترین ضریب همبستگی ( $0/983$ ) را نشان داده است.

در مدل چهارم بهترین حالت رخ داده در epoch چهاردهم یا به عبارتی در چهاردهمین بار ورود کلیه داده‌ها به مدل برای اصلاح وزن‌ها رخ داده است. نتیجه معقول به نظر می‌رسد

### نتیجه گیری

زیست جرم خشک شده حاصل از لجن دفعی مورد استفاده در این تحقیق قادر به حذف کروم از محیط‌های آبی است و می‌تواند به عنوان گزینه‌ای کارآمد و به صرفه، به جای جاذب‌های متداول در تصفیه فاضلاب‌های آلوده به کروم مورد استفاده قرار گیرد. زمان تعادل جذب کروم توسط لجن دفعی فاضلاب، در کلیه غلظت‌ها ۱۲۰ min به دست آمد که سینتیک جذب آن از مدل شبه درجه دو پیروی می‌کند. همچنین در این مطالعه pH بهینه جذب کروم معادل ۲ و سرعت اختلاط بهینه برابر ۲۰۰ rpm به دست آمد. میزان حداکثر ظرفیت جذب کروم توسط لجن دفعی خشک شده ۴۱/۶۹ mgCr/g جاذب به است که با مدل‌های فروندلیچ و لانگمویر تطابق دارد. همچنین در این تحقیق، یک شبکه عصبی پس انتشار پیش خور (Feed-Forward Back Propagation Neural Network (FFBPANN) برای پیش‌بینی میزان جذب بیولوژیکی فلز کروم شش ظرفیتی از محلول‌های آبی با استفاده از لجن دفعی فاضلاب‌های شهری به عنوان جاذب، طراحی شد. شبکه بهینه یک شبکه سه لایه است که تعداد نورون در لایه مخفی آن برابر ۱۳ عدد به دست آمد. استفاده از تابع آموزش Levenberg-Marquardt و تابع انتقال تانژانت سیگموئید در لایه‌های مخفی و خروجی و تعداد نورون‌های بین ۱/۶ تا ۱/۸ داده‌های ورودی، نتایج مناسبی برای پیش‌بینی فرایند جذب در پی خواهد داشت. ضریب همبستگی بین خروجی‌های پیش‌بینی شده توسط مدل و خروجی‌های آزمایشگاهی داده شده به مدل، برابر ۰/۹۸۳ بدست آمد. نتایج مدل بسیار به نتایج آزمایشات نزدیک است. بنابراین شبکه عصبی می‌تواند تکنیک مناسبی برای مدل‌سازی، تخمین و پیش‌بینی پروسه جذب بیولوژیکی باشد.

### تشکر و قدردانی

این مقاله حاصل (بخشی از) تحقیقات نویسندگان است که با حمایت دانشگاه صنعتی اصفهان و دانشگاه علوم پزشکی اصفهان اجرا شده است.

در این گام شبکه بهینه با توابع انتقال تانژانت سیگموئید و ۱۳ نورون در لایه مخفی ایجاد شد. با توجه به نتایج این شبکه از کارایی بالایی برخوردار است زیرا مقدار خطای میانگین مربعات نهایی کوچک و در حدود ۷/۴۲ است. همچنین خطای مجموعه آزمایشی با خطای مجموعه ارزیابی دارای رفتار و خصوصیات مشابهی است. تا تکرار ۵ که بهترین کارایی در مورد مجموعه ارزیابی به وقوع می‌پیوندد هیچ بیش برآزشی رخ نداده است. همچنین شبکه دچار آموزش زود رس نیز نشده است. خروجی مجموعه‌های آزمایشی، ارزیابی و تست به خوبی بر روی بردارهای هدف منطبق شده‌اند و دارای R value نزدیک به ۱ هستند. با توجه به اینکه عکس العمل شبکه مناسب به نظر می‌رسد، می‌توان شبکه را در مورد داده‌های قبلی یا داده‌های جدید شبیه‌سازی نمود.

Podstawczyk و همکاران در سال ۲۰۱۵ (۳۰) برای پروسه جذب بیولوژیکی مس یک شبکه سه لایه FFBP طراحی کردند که ضریب همبستگی را  $R = 0.998$  و حداقل میانگین مربعات خطا را ۰/۳۴ بدست آوردند. Ahmad و همکاران در سال ۲۰۱۴ (۸) و Hossain و همکاران در سال ۲۰۱۵ (۳۱) برای جذب فلز کادمیوم با ساخت شبکه عصبی FFBP به ضریب همبستگی ۰/۹۹۷ و ۰/۹۲۴ رسیدند. Oladipo و همکار در سال ۲۰۱۴ (۳۲) با مدل‌سازی جذب فلز نیکل با شبکه عصبی پس انتشار پیش‌خور، ضریب همبستگی ۰/۹۲ را به دست آوردند. Ghaedi و همکاران در سال ۲۰۱۴ (۳۳) با ساخت شبکه عصبی برای کروم شش ظرفیتی به ضریب همبستگی ۰/۹۸۲ دست یافتند.

شبیه‌سازی با شبکه آموزش دیده انجام می‌شود و داده‌هایی به شبکه وارد می‌شود که نتایج آزمایشگاهی آن موجود است اما این داده‌ها در زمان آموزش به شبکه داده نشده است. در این تحقیق ۲۰ عدد از آزمایشات برای شبیه‌سازی کنار گذاشته شد و وارد شبکه آموزش دیده گردید. بر اساس شکل ۵ پیش‌بینی مدل برای این داده‌ها و نتایج آزمایشات کاملاً روند مشابهی دارند و تطابق مناسبی بین آن‌ها وجود دارد.

## منابع

1. Zhong Q, Yue Q, Li Q, Gao B, Xu X. Removal of Cu(II) and Cr(VI) from wastewater by an amphoteric sorbent based on cellulose-rich biomass. *Carbohydrate Polymers*. 2014;111:788-96.
2. Meziane F, Raimbault V, Hallil H, Joly S, Conédéra V, Lachaud J, et al. Study of a polymer optical microring resonator for hexavalent chromium sensing. *Sensors and Actuators B: Chemical*. 2015;209:1049-56.
3. Chakraborty S, Dasgupta J, Farooq U, Sikder J, Drioli E, Curcio S. Experimental analysis modeling and optimization of chromium (VI) removal from aqueous solutions by polymer-enhanced ultrafiltration. *Journal of Membrane Science*. 2014;456:139-54.
4. Choppala G, Bolan N, Park G. Chromium contamination and its risk management in complex environmental settings. *Advances in Agronomy*. 2013;120:129-72.
5. Shi M, Li Z, Yuan Y, Yue T, Wang J, Li R, et al. In situ oxidized magnetite membranes from 316L porous stainless steel via a two-stage sintering process for hexavalent chromium [Cr(VI)] removal from aqueous solutions. *Chemical Engineering Journal*. 2015;265:84-92.
6. Ullah I, Nadeem R, Iqbal M, Manzoor Q. Biosorption of chromium onto native and immobilized sugarcane bagasse waste biomass. *Ecological Engineering*. 2013;60:99-107.
7. Hegazi H. Removal of heavy metals from wastewater using agricultural and industrial wastes as adsorbents. *Housing and Building National Research Center Journal*. 2013;9:276-82.
8. Ahmad M, Haydar S, Bhatti A, Bari A. Application of artificial neural network for the prediction of biosorption capacity of immobilized *Bacillus subtilis* for the removal of cadmium ions from aqueous solution. *Biochemical Engineering Journal*. 2014;84:83-90.
9. Yetilmezsoy K, Demirel S. Artificial neural network (ANN) approach for modeling of Pb(II) adsorption from aqueous solution by Antep pistachio (*Pistacia Vera L.*) shells. *Journal of Hazardous Materials*. 2008;153:1288-300.
10. Bagheri M, Mirbagheri S, Bagheri Z, Kamarkhani A. Modeling and optimization of activated sludge bulking for a real wastewater treatment plant using hybrid artificial neural networks-genetic algorithm approach. *Process Safety and Environmental Protection*. 2015;95:12-25.
11. Ding Y, Cai Y, Sun P, Chen B. The use of combined neural networks and genetic algorithms for prediction of river water quality. *Journal of Applied Research and Technology*. 2014;12(3):493-99.
12. Joo S, Yoon J, Kim J, Lee M, Yoon M. NOx emissions characteristics of the partially premixed combustion of H<sub>2</sub>/CO/CH<sub>4</sub> syngas using artificial neural networks. *Applied Thermal Engineering*. 2015;80(5):436-44.
13. Bunsana S, Chenc W, Chenc H, Chuangc Y, Grisdanurak N. Modeling the dioxin emission of a municipal solid waste incinerator using neural networks. *Chemosphere*. 2013;92(3):258-64.
14. Yang Y, Wang G, Wang B, Li Z, Jia X, Zhou Q, et al. Biosorption of Acid Black 172 and Congo Red from aqueous solution by nonviable *Penicillium YW 01*: Kinetic study equilibrium isotherm and artificial neural network modeling. *Bioresource Technology*. 2011;102:828-34.
15. Adeyinka A, Liang H, Tina G. Removal of metal ion form from wastewater with natural waste. *School of Engineering and Technology*. 2007;33(2):1-8.
16. APHA, AWWA, WEF. *Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater*. 21st ed. Washington DC: American Public Health Association; 2005.
17. Montgomery D. *Design and Analysis of Experiments*. New York: John Wiley & Sons; 2000.
18. Shanmugaprakash M, Sivakumar V. Development of experimental design approach and ANN-based models for determination of Cr(VI) ions uptake rate from aqueous solution onto the solid biodiesel waste residue. *Bioresource Technology*. 2013;148:550-59.
19. Rafiq M, Bugmann G, Easterbrook D. Neural network design for engineering applications. *Computers & Structures*. 2001;79(17):1541-52.
20. Ozdemir U, Azbay B, Veli S, Zor S. Modeling adsorption of sodium dodecyl benzene sulfonate (SDBS) onto polyaniline (PANI) by using multi linear regression and artificial neural networks. *Chem-*

- cal Engineering Journal. 2011;178:183-90.
21. Hegan M, Menhaj H. Training feed forward networks with the marquardt algorithm. Institute of Electrical and Electronics Engineers Transactions on Neural Network. 1994;5(6):989-93.
22. Giri A, Patel A, Mahapatra S. Artificial neural network (ANN) approach for modelling of arsenic(III) biosorption from aqueous solution by living cells of *Bacillus cereus* biomass. Chemical Engineering Journal. 2011;178:15-25.
23. Subbaiah MV, Kalyani S, Reddy GS, Boddu M, Krishnaiah A. Biosorption of Cr(VI) from aqueous solutions using *Trametes versicolor* polyporus fungi. E-Journal of Chemistry. 2008;5(3):499-510.
24. Arris S, Lehocine MB, Meniai A. Sorption study of chromium sorption from wastewater using cereal by-products. International journal of hydrogen energy. 2014; doi: <http://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2014.09.147> (in Press).
25. Michalak I. Biosorption of Cr(III) by microalgae and macroalgae: Equilibrium of the process. American Journal of Agricultural and Biological Sciences. 2007;2(4):284-90.
26. Şahin Y, Öztürk A. Biosorption of chromium(VI) ions from aqueous solution by the bacterium *Bacillus thuringiensis*. Process Biochemistry. 2005;40:1895-901.
27. Zhou M, Liu Y, Zeng G, Li X, Xu W, Fan T. Kinetic and equilibrium studies of Cr(VI) biosorption by dead *Bacillus licheniformis* biomass. World Journal of Microbiology and Biotechnology. 2007;8:23-43.
28. Sen M, Dastidar MG. Biosorption on Cr (VI) by resting cells of *fusarium solani*. Iranian Journal of Environmental Health Science and Engineering. 2011;8(2):153-58.
29. Zhong Q, Yue Q, Li Q, Gao B, Xu X. Removal of Cu(II) and Cr(VI) from wastewater by an amphoteric sorbent based on cellulose-rich biomass. Carbohydrate Polymers. 2014;111:788-96.
30. Podstawczyk D, Witek-Krowiak A, Dawiec A, Bhatnagar A. Biosorption of copper(II) ions by flax meal: Empirical modeling and process optimization by response surface methodology (RSM) and artificial neural network (ANN) simulation. Ecological Engineering. 2015;83:364-79.
31. Hossain A, Bhattacharyya S, Aditya G. Biosorption of cadmium from aqueous solution by shell dust of the freshwater snail *Lymnaea luteola*. Environmental Technology & Innovation. 2015;4:82-91.
32. Oladipo AA, Gazi M. Nickel removal from aqueous solutions by alginate-based composite beads: Central composite design and artificial neural network modeling. Journal of Water Process Engineering. 2015;8:e81-e91.
33. 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(5):264-77.



Available online: <http://ijhe.tums.ac.ir>

Original Article



## Application of artificial neural network (ANN) in Biosorption modeling of Chromium (VI) from aqueous solutions

F. Mohammadi<sup>1\*</sup>, S. Rahimi<sup>2</sup>, Z. Yavari<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Ph.D. student of environmental health engineering, school of health, Isfahan University of medical sciences

<sup>2</sup> Ph.D. student of environmental health engineering, school of health, Isfahan University of medical sciences

<sup>3</sup> Ph.D. student of environmental health engineering, school of health, Isfahan University of medical sciences

### ARTICLE INFORMATIONS:

**Received:** 15 August 2015;

**Accepted:** 9 November 2015

**Key words:** biosorption, Chromium (VI), neural network modeling, Excess municipal sludge, Freundlich isotherm

**\*Corresponding Author:**

*fm\_1363@yahoo.com*

**Tel:** +989366556792

### ABSTRACT

**Background and Objectives:** In this work, biosorption of hexavalent chromium from aqueous solution with excess municipal sludge was studied. Moreover, the performance of neural networks to predict the biosorption rate was investigated.

**Materials and Methods:** The effect of operational parameters including initial metal concentration, initial pH, agitation speed, adsorbent dosage, and agitation time on the biosorption of chromium was assessed in a batch system. A part of the experimental results was modeled using Feed-Forward Back propagation Neural Network (FFBP-ANN). Another part of the test results was simulated to assess the model accuracy. Transfer function in the hidden layers and output layers and the number of neurons in the hidden layers were optimized.

**Results:** The maximum removal of chromium obtained from batch studies was more than 96% in 90 mg/L initial concentration, pH 2, agitation speed 200 rpm and adsorbent dosage 4 g/L. Maximum biosorption capacity was 41.69 mg/g. Biosorption data of Cr(VI) are described well by Freundlich isotherm model and adsorption kinetic followed pseudo-second order model. Tangent sigmoid function determined was the most appropriate transfer function in the hidden and output layer. The optimal number of neurons in hidden layers was 13. Predictions of model showed excellent correlation ( $R=0.984$ ) with the target vector. Simulations performed by the developed neural network model showed good agreement with experimental results.

**Conclusion:** Overall, it can be concluded that excess municipal sludge performs well for the removal of Cr ions from aqueous solution as a biological and low cost biosorbent. FFBP-ANN is an appropriate technique for modeling, estimating, and prediction of biosorption process. If the Levenberg-Marquardt training function, tangent sigmoid transfer function in the hidden and output layers and the number of neurons is between 1.6 to 1.8 times the input data, proper prediction results could be achieved.

Please cite this article as: Mohammadi F, Rahimi S, Yavari Z. Application of artificial neural network (ANN) in Biosorption modeling of Chromium (VI) from aqueous solutions. Iranian Journal of Health and Environment. 2016;8(4):433-46.