

رتبه سوم چهارمین دوره مسابقه پایان نامه برتر سال ۱۳۹۸ در مقطع دکتری
(برگزار شده توسط انجمن آب و فاضلاب ایران)



دانشگاه خواجه نصرالدین طوسی

دانشکده مهندسی عمران

عنوان: حذف (او ۲- دی کلرو اتان از پساب به روش فتوکاتالیستی با استفاده از نانوکامپوزیت سنتز شده بر پایه TiO_2 و

مدل سازی آن

نگارش: مهدی محسن زاده

استاد راهنما: دکتر سید احمد میرباقری

استاد مشاور: دکتر صمد صبغی

تاریخ: تیر ۱۳۹۸

چکیده

او ۲- دی کلرو اتان ۸۸/۸۴ درصد بود و تجزیه فتوکاتالیستی کامل پس از ۳۶۰ دقیقه به دست آمد. سینتیک تجزیه فتوکاتالیستی در شرایط بهینه از مدل واکنش مرتبه اول لانگمویر-هینشلوود با ضریب K برابر ۰/۰۰۹۵ و R^2 برابر ۰/۹۴۵۵ به دست آمد. از یک شبکه عصبی مصنوعی پرسپترون چندلایه با الگوریتم یادگیری پس انتشار خطا برای مدل سازی نتایج آزمایشگاهی استفاده شد. توابع فعال سازی tansig و logsig در لایه پنهان مورد استفاده قرار گرفتند و تابع خطی purelin در لایه خروجی استفاده شد. توابع Bayesian Regulation و Scaled Conjugate Gradient و Resilient Back Propagation و Marquardt Levenberg به عنوان توابع آموزش استفاده شدند. با استفاده از تکنیک مدل سازی شبکه عصبی مصنوعی، ساختارهای مختلف شبکه عصبی ایجاد شده، آموزش داده شده و با استفاده از داده های آزمایشگاهی مورد اعتبارسنجی قرار گرفتند. هر ساختار شبکه عصبی ۴۰ بار با استفاده از وزن های تصادفی اولیه آموزش داده شده و نتایج ذخیره شد. برای حل مشکل بیش برازش، از روش متوقف کردن زود هنگام استفاده شد. عملکرد شبکه های عصبی بر اساس خطاهای آماری میانگین خطای مطلق، خطای میانگین مربعات، میانگین درصد خطای مطلق، جذر ریشه میانگین خطای نرمال شده و ضریب رگرسیون R^2 بررسی شد. مقایسه مدل سطح پاسخ و مدل شبکه عصبی مصنوعی بهینه نشان داد که برای دامنه و سطح پارامترهای استفاده شده در مطالعه حاضر، با این که هر دو مدل توانایی پیش بینی خوبی داشتند، مدل شبکه عصبی مصنوعی بهینه از اندکی برتری نسبت به مدل سطح پاسخ برای پیش بینی تجزیه فتوکاتالیستی او ۲- دی کلرواتان برخوردار بود.

کلمات کلیدی: او ۲- دی کلرو اتان، PANI-TiO_2 فتوکاتالیست لایه نشانی شده، تجزیه فتوکاتالیستی، راکتور فتوکاتالیستی، طراحی راکتور، روش سطح پاسخ، شبکه عصبی مصنوعی

او ۲- دی کلرو اتان یکی از مهم ترین آلاینده های زیست محیطی در پساب صنایع پتروشیمی است. این ماده عمدتاً برای تولید مونومر وینیل کلراید که پیش ماده اصلی تولید PVC است، استفاده می شود. این ماده احتمالاً سرطان زا بوده و توسط سازمان حفاظت محیط زیست آمریکا به عنوان یک آلاینده دارای اولویت حذف از پساب مشخص شده است. در تحقیق حاضر با توجه به پایداری شیمیایی بالا و تجزیه پذیری پایین، روش اکسیداسیون فتوکاتالیستی برای تجزیه این هیدروکربن کلرینه استفاده شد. نانوکامپوزیت PANI-TiO_2 به عنوان فتوکاتالیست انتخاب شد. این فتوکاتالیست با استفاده از روش پلیمریزاسیون اکسیداسیون با رسوب درجا سنتز شد و با استفاده از یک روش لایه نشانی غوطه وری و اتصال گرمایی اصلاح شده بر روی سطح دانه های شیشه پوشش دهی شد. مشخصات نانوذرات PANI-TiO_2 سنتز شده با استفاده از تست های مورفولوژی شامل طیف سنجی تبدیل فوریه مادون قرمز، طیف سنجی پراش پرتو ایکس، سنجش اندازه ذرات، طیف سنجی مرئی فرابنفش، میکروسکوپ الکترونی روبشی و طیف سنجی پراکندگی انرژی پرتو ایکس تأیید شد. راندمان تجزیه فتوکاتالیستی او ۲- دی کلرو اتان با استفاده از نانوکامپوزیت PANI-TiO_2 در راکتور فتوکاتالیستی طراحی و ساخته شده در مقیاس پایلوت تحت تابش نور مرئی زنون بررسی شد. از روش سطح پاسخ بر اساس طراحی مرکب مرکزی برای ارزیابی و بهینه سازی اثر غلظت اولیه او ۲- دی کلرو اتان، زمان ماند، pH درصد آلاینش و ضخامت پوشش به عنوان متغیرهای مستقل در تجزیه فتوکاتالیستی او ۲- دی کلرو اتان به عنوان متغیر وابسته استفاده شد. نتایج مدل سازی به روش سطح پاسخ نشان داد که نتایج واقعی و مقادیر پیش بینی شده با R^2 برابر ۰/۹۸۷۰، R^2 تنظیم شده ۰/۹۷۱۸ و R^2 پیش بینی ۰/۹۴۲۲ همبستگی داشته است. در شرایط بهینه شامل غلظت اولیه او ۲- دی کلرواتان برابر ۲۵۰ میلی گرم در لیتر، زمان ماند ۲۴۰ دقیقه، pH محلول برابر ۵ و ضخامت پوشش ۰/۵ میلی گرم بر سانتی متر مربع، تجزیه فتوکاتالیستی