FANPAYA
Knowledge Based Company
(PUBLISHERS)

Journal of Environmental Sciences Studies (JESS)
Volume 10, Number 2, Summer, (2025)

Journal Homepage: www.jess.ir
Print ISSN: 2588-6851 Online ISSN: 2645-520X

Predicting Lead Removal by Biochar and Hydrochar from Canola Residues using a Dimensionality Reduction Approach and Gene Expression Programming

Mehri saeidinia[*1]; Laleh Divband Hafshejani [2]

[*]1. Department of Water Engineering, Faculty of Agriculture, University of Lorestan, Lorestan, Iran.
2. Department of Environmental Engineering, Faculty of Water and Environmental Engineering, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

*Email Address: saeedinia.m@lu.ac.ir

Article Info

Article Type:
Research Paper

Article History:

Received Date:
2024/07/25
Revised Date:
2024/08/09
Accepted Date:
2024/08/14
Published Date:
2025/07/21

Keywords:
Contact time,
Initial concentration,
pH,
Sensitivity analysis,

ABSTRACT

In this study, rapeseed stalks were used to produce hydrochar and biochar. Biochar was produced by heating the stalks at 500°C for four hours. Hydrochar was prepared by putting milled canola in teflon-covered autoclave containers made of stainless steel, along with deionized water at a temperature of 200 degrees Celsius. The absorption of lead was evaluated using different parameters such as pH, contact time, initial concentration of lead and amount of adsorbent. An advanced modelling technique called gene expression programming (GEP) was used to predict absorption efficiency. The results showed that for both adsorbents, with the increase of contact time, lead absorption efficiency gradually increased, and finally, biochar reached the maximum absorption efficiency at the equilibrium time of approximately 120 minutes and hydrochar at the equilibrium time of 420 minutes. By increasing the initial concentration of lead, the amount absorbed by the adsorbents increased, but the absorption efficiency decreased due to the saturation of the capacity of the adsorbents. The results of modelling with gene expression programming showed that reducing the number of input parameters from contact time, initial concentration, adsorbent mass and pH to contact time, adsorbent mass and pH has improved the accuracy of the model so that the value of R^2 in The training phase increased from 0.92 to 0.95 and in the test phase from 0.90 to 0.91. By continuing to further reduce the input parameters to the model to the two parameters of contact time and pH, the accuracy of the model reached the highest level. This simplification led to more accurate predictions, reduced model complexity and reduced costs. The results of the sensitivity analysis also showed that pH and contact time have a significant effect on lead absorption, while the initial concentration of lead had the opposite effect.

Cite this article: Mehri saeidinia , Laleh Divband Hafshejani (2025) , Predicting Lead Removal by Biochar and Hydrochar from Canola Residues using a Dimensionality Reduction Approach and Gene Expression Programming , Journal of Environmental Sciences Studies,10(2) ,Pages 10027-10037.

EXTENDED ABSTRACT

Introduction

Contamination of water sources by heavy metals is a global ecological issue. These metals can accumulate in ecosystems and enter the human food chain, leading to serious health problems such as neurological disorders, organ damage, Alzheimer's disease, and cancer. Effective and precise methods for removing these metals are therefore essential. Surface adsorption is an effective method due to its simplicity, cost-effectiveness, and versatility. Utilizing agricultural waste as adsorbents is beneficial because of its efficiency, cost-effectiveness, and renewability. Additionally, developing mechanistic and predictive models is crucial for optimizing the adsorption process and designing high-capacity adsorbents. Machine learning methods can enhance model clarity, interpretability, and efficiency by reducing input features while maintaining prediction accuracy.

Materials and methods

In this research, rapeseed stalks were used to produce biochar (500 C) and hydrochar (200 C). The effect of different parameters such as pH, contact time, adsorbent amount and initial lead concentration on lead absorption by adsorbents was investigated. The removal efficiency and the amount of lead absorption in each step were calculated using specific relationships. Gene Expression Programming was used for modelling. We investigated different combinations of parameters affecting lead absorption, such as genotype, and the results of lead absorption as a phenotype. In this study, input data including parameters such as pH, contact time, initial concentration of lead, and adsorbent amount, were used, with the output data being adsorption efficiency. Lead adsorption data on biochar were used for training and lead adsorption data by hydrochar were used for testing. All data (input and output) were normalized to avoid fluctuations and correctly identify the relationships between variables. The root mean square error (RMSE) and mean absolute error (MAE), coefficient of determination (R2) were used to measure the accuracy and efficiency of the absorption efficiency prediction by the gene expression programming model.

Results and discussion

The effect of initial lead concentration on the adsorption efficiency by hydrochar and biochar from rapeseed stems shows that as the initial concentration of lead increases, the number of lead ions in the solution rises. Each adsorbent has a limited adsorption capacity, and when this capacity becomes saturated, the adsorption efficiency decreases. Increasing the pH causes functional groups on the adsorbent surface (such as carboxyl and hydroxyl groups) to dissociate more into negative ions. This increase in negative charge on the adsorbent surface enhances the electrostatic attraction for positively charged lead ions, thus increasing the adsorption efficiency. The results of predicting lead adsorption by hydrochar and canola stem biochar using a gene expression programming model show that reducing the number of input parameters from four (contact time, initial concentration, adsorbent mass, and pH) to three parameters (contact time, adsorbent mass, and pH) improved the model's accuracy. This improvement in accuracy was observed with an increase in R^2 in the training phase (0.95 compared to 0.92) and the testing phase (0.91 compared to 0.90). Further reducing the input parameters from three (contact time, adsorbent mass, and pH) to two (contact time and pH) led to an even greater improvement in prediction accuracy. Reducing input features simplified the model, leading to faster training and more accurate predictions.These results highlight the importance of optimizing input parameters in modelling complex processes and reducing associated costs.The computed correlation coefficient for all parameters affecting lead adsorption predicted by the gene expression programming model on hydrochar and biochar showed that the parameters pH and contact time had the most positive impact on lead adsorption. On the other hand, the initial concentration of lead had an inverse effect on the adsorption process. As the initial concentration of lead increased, the number of lead ions in the solution also increased, leading to rapid saturation of the adsorbent’s capacity and a decrease in adsorption efficiency.

Conclusion

The study showed that by optimizing and reducing the number of input parameters in the gene expression programming model, the accuracy and efficiency of lead adsorption predictions could be significantly improved. Selecting the right input parameters not only simplifies the model and reduces training time but also enhances prediction accuracy and reduces overfitting. Consequently, using the two key parameters (contact time and pH) yielded the best results in the study.

مجله مطالعات علوم محیط زیست
جلد ۱۰، شماره ۲
Journal Homepage:www.jess.ir
شاپای چاپی: 2588-6851 شاپای الکترونیکی: 2645-520X

FANPAYA
Knowledge Based Company
(PUBLISHERS)

پیش‌بینی حذف سرب توسط بیوچار و هیدروچار بقایای کلزا با استفاده از رویکرد کاهش ابعاد و برنامه‌ریزی بیان ژن

مهری سعیدی‌نیا [۱*]، لاله دیوبند هفشجانی [۲]

[*]۱- گروه مهندسی آب، دانشکده کشاورزی، دانشگاه لرستان، لرستان، ایران.
۲- گروه مهندسی محیط زیست، دانشکده مهندسی آب و محیط زیست، دانشگاه شهید چمران اهواز
[*]ایمیل نویسنده مسئول: saeedinia.m@lu.ac.ir

اطلاعات مقاله

نوع مقاله:
مقاله علمی پژوهشی

تاریخ دریافت:
۱۴۰۳/۰۵ /۴
تاریخ بازنگری:
۱۴۰۳/۰۵ /۱۹
تاریخ پذیرش:
۱۴۰۳/۰۵ /۲۴
تاریخ انتشار:
۱۴۰۴/۰۴ /۳۰

کلید واژه ها:
زمان تماس،
غلظت اولیه،
pH،
آنالیز حساسیت.

چکیده

در این تحقیق از ساقه‌های کلزا برای تولید هیدروچار و بیوچار استفاده شد. بیوچار با حرارت دادن ساقه‌ها در دمای ۵۰۰ درجه سانتی‌گراد به مدت چهار ساعت تولید شد. هیدروچار از قرار گرفتن کلزای آسیاب شده درون ظروف تفلون درپوش‌دار اتوکلاو به همراه آب دیونیزه در دمای ۲۰۰ درجه سانتی‌گراد تهیه شد. جذب سرب با استفاده از پارامترهای pH، زمان تماس، غلظت اولیه سرب و مقدار جاذب ارزیابی گردید. برای پیش‌بینی راندمان جذب از مدل برنامه‌ریزی بیان ژن استفاده شد. نتایج نشان داد برای هر دو جاذب، با افزایش زمان تماس، راندمان جذب سرب افزایش یافت و بیوچار در زمان تعادل تقریباً ۱۲۰ دقیقه و هیدروچار در زمان تعادل ۴۲۰ دقیقه به حداکثر راندمان جذب رسیدند. با افزایش غلظت اولیه سرب، راندمان جذب به دلیل اشباع شدن ظرفیت جاذب‌ها کاهش یافت. نتایج مدل‌سازی نشان داد که کاهش تعداد پارامترهای ورودی از زمان تماس، غلظت اولیه، جرم جاذب و pHبه زمان تماس، جرم جاذب و pH باعث بهبود دقت مدل شده است، به طوری که مقدار R^2 در مرحله آموزش از ۰/۹۲ به ۰/۹۵ و در مرحله تست از ۰/۹۰ به ۰/۹۱ افزایش یافت. با ادامه کاهش بیشتر پارامترهای ورودی به مدل به دو پارامتر زمان تماس و pH دقت مدل به بالاترین میزان رسید. این ساده‌سازی منجر به پیش‌بینی‌های دقیق‌تر، کاهش پیچیدگی مدل و کاهش هزینه‌ها شد. نتایج تجزیه و تحلیل حساسیت نیز نشان داد که pH و زمان تماس تأثیر قابل‌توجهی بر جذب سرب دارند، در حالی که غلظت اولیه سرب اثر معکوس داشته است.

ناشر: انتشارات فن پایا

DOI: 10.22034/jess.2024.469713.2279

۱-مقدمه

آلودگی منابع آب به فلزات سنگین یک مسئله اکولوژیکی جهانی است. فلزات سنگین از طریق منابع مختلفی مانند رواناب سطحی، فاضلاب، تخلیه پساب و زهکشی معادن وارد آب‌ها می شوند. فعالیت‌های انسانی، به ویژه در کشورهای آسیایی، به طور قابل توجهی به افزایش هجوم فلزات سنگین در بدنه‌های آبی کمک می‌کند. فلزات سنگین می توانند در اکوسیستم انباشته شده و از طریق غذا وارد بدن انسان شوند و خطرات جدی سلامتی را برای مصرف کنندگان به همراه آورند. سمیت فلزات سنگین در انسان می‌تواند منجر به اختلالات عصبی، آسیب اندام‌ها، بیماری آلزایمر و سرطان شود. به همین دلیل در سال‌های اخیر نیاز به روش‌های کارآمد، سریع، قابل اعتماد و دقیق برای حذف فلزات سنگین به دلیل سمیت زیاد و تهدید برای انسان و اکوسیستم از اهمیت بالایی برخوردار است. روش‌های مختلفی از جمله رسوب، اولترافیلتراسیون، انعقاد و جذب برای حذف فلزات سنگین مورد بررسی قرار گرفته است که از میان آن‌ها جذب سطحی به دلیل سادگی، مقرون به صرفه بودن و تطبیق‌پذیری، روشی موثری می‌باشد. علاوه بر این، جاذب‌های ارزان قیمتی که به راحتی در مناطق مختلف در دسترس هستند استفاده از روش جذب سطحی برای حذف آلاینده‌ها را امکان‌پذیرتر می‌نمایند. در این میان استفاده از پسماندهای کشاورزی در تولید جاذب‌های آلاینده آب به دلیل کارایی، مقرون به صرفه بودن و تجدیدپذیری اهمیت بالایی دارند. بخش‌های مختلف بقایای کشاورزی مانند ساقه، برگ، پوسته و ریشه دارای ترکیب شیمیایی یکسانی از سلولز، همی‌سلولز و لیگنوسلولز هستند که آن‌ها را برای اهداف جذب مناسب‌تر می‌کند. علاوه بر این اصلاح شیمیایی این ضایعات کشاورزی می‌تواند ظرفیت جذب آن‌ها را بیشتر افزایش دهد و یک رویکرد پایدار و سازگار با محیط زیست برای حذف آلاینده‌های آب ارائه دهد. اگرچه مطالعات زیادی در مورد توسعه جاذب‌های جدید برای حذف موثر مولکول‌ها و آلاینده‌ها از محلول‌های آبی انجام شده است، اما توسعه مدل‌های مکانیکی برای درک فرآیند و تعامل بین جاذب و املاح برای بهینه‌سازی فرآیند جذب بسیار مهم هستند. علاوه بر این، توسعه مدل‌های پیش‌بینی می‌تواند به طراحی جاذب‌های جدید با ظرفیت جذب بالا کمک کند. مدل‌ها را می‌توان در سطوح و شرایط مختلف از جمله مدل‌های مکانیکی و مدل‌های آماری مانند یادگیری ماشین توسعه داد. روش‌های یادگیری ماشین برای آموزش شبکه بر داده‌های بزرگ تکیه می‌کنند و سپس از شبکه آموزش‌دیده در شبیه‌سازی فرآیند استفاده می‌کنند. کاهش ابعاد یا ویژگی‌های ورودی در مدل‌های هوش مصنوعی از اهمیت بالایی برخوردار است زیرا می‌تواند شفافیت، تفسیرپذیری و کارایی مدل‌ها را بهبود بخشد. این روش‌ها با هدف شناسایی ویژگی‌های ورودی کلیدی و بهبود قابلیت توضیح مدل‌ها، موجب افزایش اعتماد به پیش‌بینی‌ها می‌شوند، به‌ویژه در کاربردهای حیاتی ایمنی. با کاهش تعداد ویژگی‌های ورودی و حفظ دقت پیش‌بینی، این تکنیک‌ها نه تنها تفسیرپذیری مدل‌های هوش مصنوعی را بهبود می‌بخشند، بلکه کارایی مسیر را در مدل‌های یادگیری ماشین نیز افزایش می‌دهند. هدف اصلی تحقیق حاضر بررسی کارایی هیدروچار و بیوچار ساقه کلزا در جذب سرب از محلول‌های آبی و سپس توسعه یک مدل برنامه ریزی بیان ژن برای پیش‌بینی فرآیند جذب سرب با جاذب‌های مورد مطالعه است. در این مدل ورودی‌ها در مرحله اول شامل دما و غلظت اولیه سرب، زمان تماس و pH هستند. در مرحله بعد تعیین موثرترین پارامترهای ورودی به منظور حفظ آن‌ها در فرایند پیش‌بینی و حذف پارامترهای کم اثر با رویکرد کاهش هزینه‌های آزمایشگاهی انجام شد.

۲-روش انجام تحقیق

- **تولید بیوچار و هیدروچار ساقه‌های کلزا**

در این تحقیق برای تولید بیوچار از ساقه های کلزا استفاده گردید. پس از برداشت محصول کلزا، ساقه های کلزا را از زمین قطع کرده و پس از شستشوی کامل در هوای آزاد خشک گردید. پس از آسیاب شدن در ظروف درپوش‌دار مخصوصی ریخته شد و در کوره به مدت چهار ساعت با نرخ ۱۰ درجه سلسیوس بر دقیقه قرار گرفت. کوره در دمای ۵۰۰ درجه سلسیوس تنظیم گردید و ساقه کلزا در این دماها به بیوچار تبدیل شد. برای تولید هیدروچار، کلزای آسیاب شده، درون ظروف تفلون درپوش‌دار اتوکلاو سنتز که از جنس فولاد ضد زنگ ساخته شده است، به همراه آب دیونیزه قرار داده شد. اتوکلاو در درجه حرارت ۲۰۰ درجه سانتی گراد به مدت ۴ ساعت در کوره الکتریکی قرار گرفت. پس از این مرحله و رسیدن دمای ظرف به دمای اتاق آزمایشگاه، پس از عبور محتویات ظرف از کاغذ صافی، ذرات جامد را با آب دیونیزه شده شستشو داده و در نهایت در آون به مدت ۲۴ ساعت در دمای ۷۰ درجه سانتی‌گراد خشک گردید.

- **تعیین اثر فاکتورهای زمان، غلظت اولیه سرب، مقدار جاذب و pH بر روی راندمان جذب سرب توسط بیوچار و هیدروچار ساقه‌های کلزا**

محلول استاندارد سرب (۱۰۰۰ میلی گرم بر لیتر)، با استفاده از نمک نیترات سرب و آب دیونیزه تهیه شد و سپس سایر غلظت‌های مورد نیاز با رقیق‌سازی محلول استاندارد آماده گردید. در این تحقیق اثر پارامترهای مختلف pH (۲، ۴، ۶، ۸، ۱۰)، زمان تماس (۱۰ و ۳۰ دقیقه، ۱، ۲، ۷، ۱۸ و ۲۴ ساعت)، مقدار جاذب و (۰/۰۱، ۰/۰۵، ۰/۵ و ۱ گرم) و غلظت اولیه سرب (۱، ۲، ۷ و ۱۰ میلی گرم بر لیتر) بر روی میزان جذب سرب توسط جاذب‌های مورد مطالعه بررسی گردید. در هر مرحله راندمان حذف سرب و میزان جذب آن توسط جاذب‌های مورد مطالعه به ترتیب با استفاده از رابطه (۱) و (۲) تعیین گردید.

$$R = \frac{C_0 - C_f}{C_0} \times 100 \quad (۱)$$

$$q_e = \frac{C_0 - C_f}{\mathrm{m}} \quad (۲)$$

در روابط بالا، C_0 = غلظت اولیه سرب (mg/L)، C_f = غلظت نهایی سرب (mg/L)، m = جرم جاذب (g)، q_e = ظرفیت جذب (mg/g) و R = راندمان حذف سرب است.

- **کاربرد مدل برنامه‌ریزی بیان ژن در پیش بینی جذب سرب توسط بیوچار و هیدروچار ساقه‌های کلزا**

برنامه‌ریزی بیان ژن (GEP)، نسخه تکامل یافته روش‌های برنامه‌ریزی ژنتیک (GP) و الگوریتم ژنتیک (GA) است که در سال ۱۹۹۹ توسط فریرا (Ferreira) بر اساس نظریه داروین ایجاد شد. ترکیبات مختلف ژن‌ها را ژنوتیپ (در این مطالعه ترکیبات مختلف پارامترهای موثر بر جذب سرب) و نتایج حاصل از این ترکیبات را فنوتیپ (در این مطالعه، نتایج ترکیبات مختلف پارامترهای موثر بر جذب برای پارامتر راندمان جذب) می‌نامند. در روش GEP، کروموزوم‌های خطی و ساده با طول ثابت، مشابه با الگوریتم ژنتیک و ساختارهای شاخه‌ای با اندازه و شکل‌های مختلف، مشابه با درختان تجزیه در برنامه‌ریزی ژنتیک ترکیب می‌شوند. در این روش، ژنوتیپ و فنوتیپ از یکدیگر جدا شده و سیستم قادر است از تمام مزایای تکاملی بهره‌مند شود. با اینکه فنوتیپ در GEP مشابه ساختار شاخه‌ای در GP است، اما ساختار شاخه‌ای در GEP که به آن بیان درختی نیز گفته می‌شود، بیانگر تمام ژنوم‌های مستقل است. به طور کلی در GEP بهسازی در یک ساختار خطی انجام می‌شود و سپس به صورت ساختار درختی بیان می‌شود. این امر باعث می‌شود که تنها ژنوم اصلاح‌شده به نسل بعد منتقل شود و نیازی به ساختارهای سنگین تکثیر و جهش نباشد. برنامه‌ریزی بیان ژن برخلاف الگوریتم ژنتیک روی ساختار درختی رابطه‌ها به جای سلسله ارقام دودویی عمل می‌کند. این ساختارهای درختی از مجموعه توابع (عملگرهای ریاضی مورد استفاده در رابطه‌ها) و ترمینال‌ها (متغیرهای مسئله و اعداد ثابت) ایجاد می‌شوند. در این پژوهش برای اجرای مدل GEP از نرم‌افزار Genexprotools 5 استفاده شد. علاوه بر چهار عملگر اصلی، حالت‌هایی نیز بر اساس عملگرهای ریاضی پیش‌فرض برنامه در نظر گرفته شد. در ساخت درخت تجزیه و تولید جمعیت اولیه، از راه‌حل‌هایی که از ترکیب تصادفی مجموعه توابع و ترمینال‌ها ایجاد می‌شوند، استفاده شد.

- **پیش پردازش داده‌ها**

در این مطالعه از پارامترهای pH، زمان تماس، غلظت اولیه سرب و مقدار جاذب به عنوان داده‌های ورودی و راندمان جذب به عنوان داده خروجی (پارامتر هدف) استفاده شد. سپس داده‌های حاصل از جذب سرب بر روی بیوچار برای آموزش و داده‌های حاصل از جذب سرب توسط هیدروچار برای تست به کار برده شدند. به منظور جلوگیری از نوسانات شدید در حین آموزش و شناسایی درست روابط بین متغیرها، تمامی داده‌ها (ورودی و خروجی) با استفاده از رابطه (۳) در محدوده ۰ و ۱ نرمال سازی شدند:

$$\mathrm{x}_i^* = \frac{(x_i - x_{min})}{(x_{max} - x_{min})} \quad (۳)$$

- **معیارهای ارزیابی برنامه‌ریزی بیان ژن در پیش بینی جذب سرب توسط بیوچار و هیدروچار ساقه‌های کلزا**

برای سنجش دقت و کارایی پیش‌بینی راندمان جذب توسط مدل برنامه ریزی بیان ژن از ریشه میانگین مربعات خطا (RMSE) و میانگین خطای مطلق (MAE)، ضریب تعیین (R^2) استفاده شد که به شرح زیر تعریف می‌شوند:

$$\mathrm{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{\mathrm{n}}\sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{n}}(Y_i^{exp} - Y_i^{pred})^2} \quad (۴)$$

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^{n}\left|Y_i^{exp} - Y_i^{pred}\right|}{n} \quad (۵)$$

$$\mathrm{R}^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_i^{exp} - Y_i^{pred}\right)^2}{\sum_{i=1}^{n}\left(Y_I^{exp} - Y_{ave}^{exp}\right)^2} \quad (۶)$$

در روابط بالا Y_i^{pred} و Y_i^{exp} به ترتیب مقادیر محا سباتی و م شاهداتی در گام زمانی i ام، n تعداد گام‌های زمانی، Y_{ave}^{exp} نیز میانگین مقادیر مشاهداتی می‌باشد. برای یک الگوریتم کارا، مقادیر RMSE، MAE و R^2 به ترتیب ۰، ۰ و ۱خواهد بود .

تجزیه و تحلیل حساسیت جذب سرب توسط بیوچار و هیدروچار ساقه‌های کلزا

برای ارزیابی میزان تأثیر پارامترهای ورودی بر حذف سرب پیش‌بینی‌شده توسط برنامه‌ریزی بیان ژن، تجزیه و تحلیل حساسیت انجام شد. در این تحلیل، مقدار ضریب ربط $(r(I_i, \omega))$ نشان‌دهنده میزان تأثیر هر پارامتر ورودی بر جذب سرب است. ضریب ربط (r) می‌تواند مقداری مثبت یا منفی باشد. مقدار مثبت برای داده‌های ورودی مشخص می‌کند که متغیر خروجی مستقیماً با آن داده ورودی تعامل دارد، در حالی که مقدار منفی نشان‌دهنده تعامل معکوس بین متغیر خروجی و ورودی است. همچنین، هرچه مقدار مطلق ضریب ربط برای یک پارامتر ورودی بیشتر باشد، تأثیر آن پارامتر بر خروجی مدل بیشتر است .

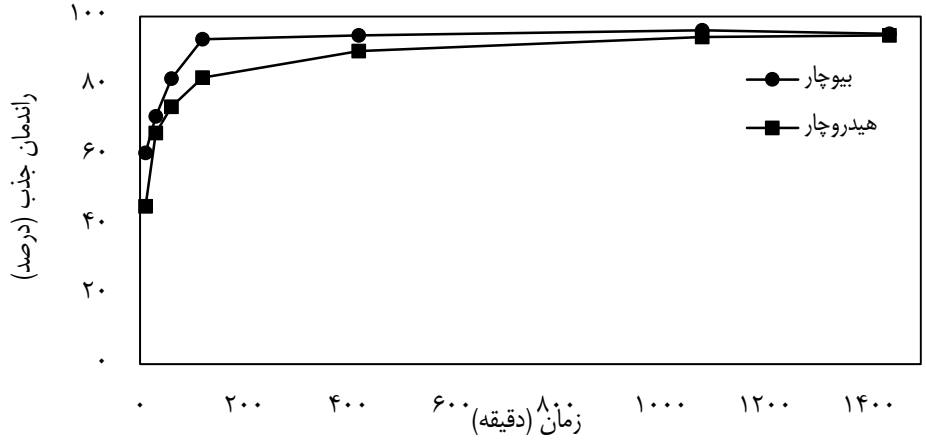
$$r(I_i, \omega) = \frac{\sum_{j=1}^{n}(I_{ij}-\bar{I}_i)(\omega_j-\bar{\omega})}{\sqrt{\sum_{j=1}^{n}(I_{ij}-\bar{I}_i)^2}\sqrt{\sum_{j=1}^{n}(\omega_j-\bar{\omega})^2}} \quad (۷)$$

که در آن ωj و $\bar{\omega}$ به ترتیب jامین و مقدار میانگین حذف سرب پیش‌بینی‌شده، Iij و Ii به ترتیب نشان دهنده ith و مقدار میانگین متغیر ورودی ith و n تعداد کل داده‌ها می‌باشد.

۳- نتایج

- **تاثیر فاکتورهای زمان تماس، غلظت اولیه سرب، مقدار جاذب و pH بر روی راندمان جذب سرب**

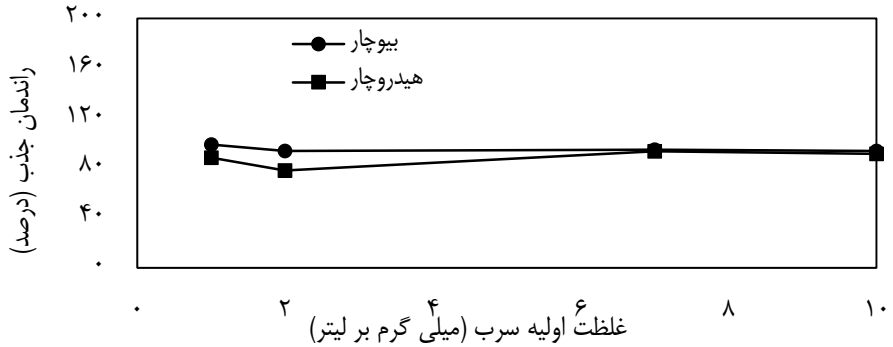
در این مطالعه، با بررسی تاثیر هر یک از فاکتورهای زمان تماس، غلظت اولیه سرب، مقدار جاذب و pH بر راندمان جذب سرب، می‌توان شرایط بهینه برای حذف حداکثر سرب از محلول‌های آبی را تعیین کرد. تاثیر زمان تماس بر جذب سرب توسط هیدروچار و بیوچار ساقه کلزا در شکل (۱) نشان داده شده است. انتخاب زمان تماس بهینه برای فرآیند جذب سرب از اهمیت بالایی برخوردار است. زمان تماس بهینه، زمانی است که در آن حداکثر راندمان جذب با کمترین زمان به دست می‌آید.



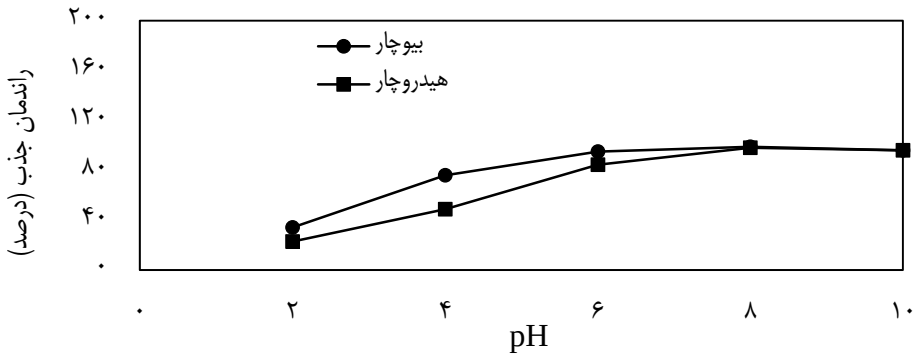
شکل ۱. تاثیر زمان تماس بر راندمان جذب سرب توسط هیدروچار و بیوچار ساقه کلزا

براساس شکل (۱) رابطه بین زمان تماس و میزان جذب سرب برای هر دو جاذب غیر خطی است. در هر دو جاذب، با افزایش زمان تماس، راندمان جذب سرب به تدریج افزایش می‌یابد و در نهایت بیوچار در زمان تعادل تقریباً ۱۲۰ دقیقه و هیدروچار در زمان تعادل ۴۲۰ دقیقه به یک مقدار ثابت (حداکثر میزان جذب) می‌رسد. شیب منحنی جذب سرب در بیوچار در ابتدای فرآیند بیشتر از هیدروچار است که نشان دهنده بالاتر بودن سرعت جذب توسط بیوچار است. تفاوت در زمان تماس جذب سرب بین بیوچار و هیدروچار به دلیل گروه های عاملی حاوی اکسیژن، اجزای معدنی و اثرات pH متفاوت است که بر سینتیک جذب رقابتی تأثیر می گذارد. علاوه بر این بیوچار تثبیت سرب را از طریق کمپلکس شدن سطح، رسوب و جذب فیزیکی افزایش می دهد که منجر به افزایش راندمان جذب در طول زمان در مقایسه با هیدروچار می شود. بیوچار معمولاً دارای سطح ویژه بالایی است که اجازه می‌دهد تعداد بیشتری یون سرب به‌طور همزمان جذب شوند، که منجر به کاهش زمان تماس می‌شود. تاثیر غلظت اولیه سرب در محلول بر راندمان جذب توسط هیدروچار و بیوچار ساقه کلزا در شکل (۲) نشان داده شده است. غلظت اولیه سرب در محلول، بیانگر میزان سرب قابل جذب توسط جاذب است. با افزایش غلظت اولیه، تعداد یون‌های سرب موجود در محلول افزایش می‌یابد. از طرفی هر جاذب دارای ظرفیت مشخصی برای جذب آلاینده‌هاست، وقتی غلظت آلاینده به حدی برسد که ظرفیت جاذب اشباع شود، نمی‌تواند تمامی آلاینده‌های موجود در محلول را جذب کند. بنابراین راندمان حذف کاهش می‌یابد . نتایج مطالعه‌ای

بر روی جذب فلزات سنگین نظیر سرب و کادمیم توسط جاذب‌هایی مانند کربن فعال و بیوچار نیز نشان داد که با افزایش غلظت اولیه فلزات، مقدار جذب‌شده توسط جاذب افزایش می‌یابد، اما راندمان حذف به دلیل اشباع شدن ظرفیت جاذب کاهش می‌یابد.

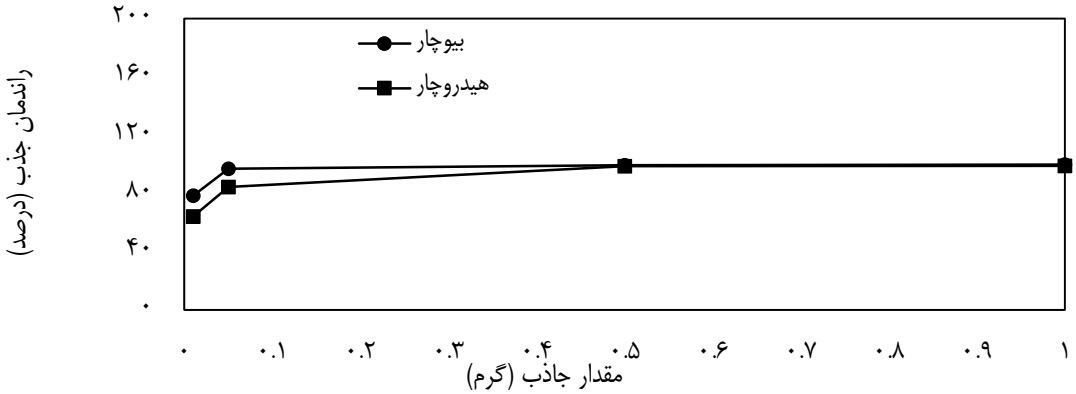


شکل ۲. تاثیر غلظت اولیه بر راندمان جذب سرب توسط هیدروچار و بیوچار ساقه کلزا



شکل ۳. تاثیر pH بر راندمان جذب سرب توسط هیدروچار و بیوچار ساقه کلزا

pH محلول، بر تمایل یون‌های سرب به جذب بر روی سطح جاذب تاثیرگذار است. با افزایش pH محلول، گروه‌های عاملی روی سطح جاذب (مانند گروه‌های کربوکسیل و هیدروکسیل) بیشتر تفکیک می‌شوند و به یون‌های منفی تبدیل می‌شوند. این افزایش بار منفی روی سطح جاذب باعث افزایش جذابیت الکترواستاتیکی برای یون‌های سرب با بار مثبت می‌شود. در نتیجه، یون‌های سرب بیشتری به سطح جاذب جذب می‌شوند و راندمان جذب افزایش می‌یابد. در pH های پایین، یون‌های هیدروژن (H^+) در محلول غالب هستند و با یون‌های سرب برای مکان‌های جذب روی سطح جاذب رقابت می‌کنند. این رقابت منجر به کاهش جذب یون‌های سرب می‌شود . با افزایشpH ، غلظت یون‌های هیدروژن کاهش می‌یابد و رقابت کمتر می‌شود، که این امر باعث افزایش جذب یون‌های سرب می‌شود . مقدار جاذب به کار رفته در فرایند جذب، یکی از پارامترهای مهمی است که بر راندمان جذب سرب تاثیر مستقیم دارد. این تاثیر از طریق افزایش سطح فعال در دسترس و تعداد نقاط اتصال برای یون‌های سرب صورت می‌گیرد. با افزایش مقدار جاذب، سطح فعال بیشتری برای جذب یون‌های سرب فراهم می‌شود. سطح فعال بیشتر به معنای تعداد بیشتری از نقاط اتصال است که می‌توانند با یون‌های سرب واکنش دهند .این افزایش سطح فعال منجر به افزایش ظرفیت جذب جاذب و بهبود راندمان جذب می‌شود.



شکل ۴. تاثیر pH بر راندمان جذب سرب توسط هیدروچار و بیوچار ساقه کلزا

- **پیش بینی جذب سرب با استفاده از مدل برنامه ریزی بیان ژن و پارامترهای ورودی مختلف**

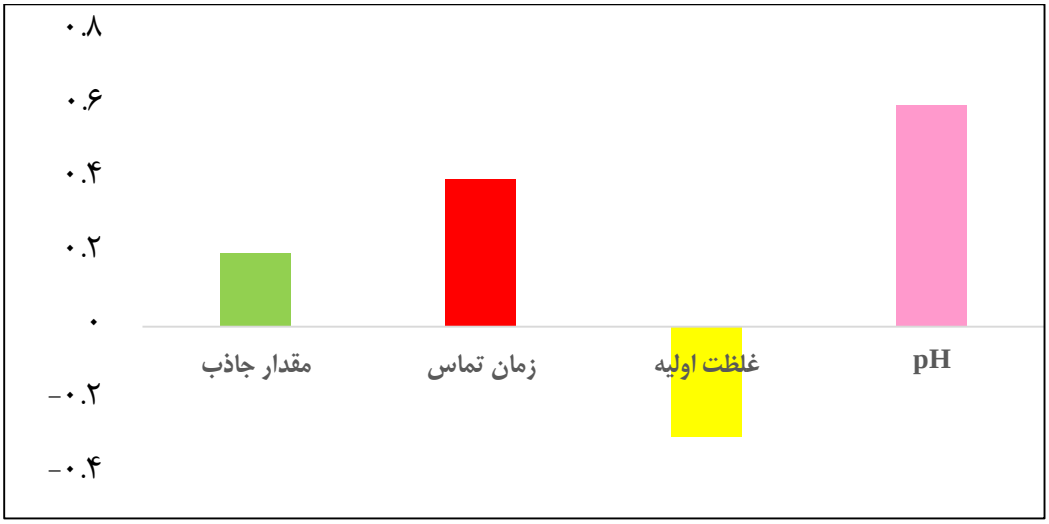
نتایج پیش‌بینی جذب سرب توسط هیدروچار و بیوچار ساقه کلزا با استفاده از مدل برنامه‌ریزی بیان ژن و پارامترهای مختلف ورودی و R^2 بزرگتر از ۰/۵ در آموزش و تست در جدول (۱) ارائه شده است. با توجه به مطالعات قبلی، بهترین جمعیت از ۳۰ تا ۵۰ کروموزوم و پاسخ مناسب از انتخاب ۲ یا ۳ ژن به دست می‌آید. بنابراین، در این پژوهش جمعیت اولیه شامل ۳۰ کروموزوم و ۳ ژن در ترکیب کروموزوم‌ها بود. همچنین تابع پیوند (+) به علت برتری بر دیگر توابع انتخاب شد. حداکثر تکرار تابع برازش نیز ۱۰۰۰ تعیین شد. مقادیر نرخ عملگرهای ژنتیکی ترانهش درج متوالی و ترانهش ریشه درج متوالی برابر ۰،۱، نرخ جهش و نرخ وارون‌سازی به مقدار پیش‌فرض مدل، و مجموع نرخ سه عملگر ترکیب تک نقطه‌ای، ترکیب دو نقطه‌ای و ترکیب ژن برابر ۰/۷ طبق نظر فریرا تعیین شد.در این پژوهش، چهار پارامتر ورودی شامل زمان تماس، غلظت اولیه سرب، جرم جاذب و pH محلول به عنوان ورودی‌های اولیه در نظر گرفته شدند، اما کاهش تعداد ویژگی های ورودی از چهار پارامتر (زمان تماس– غلظت اولیه– جرم جاذب– pH) به سه پارامتر (زمان تماس– جرم جاذب– pH) موجب بهبود کارایی و دقت مدل گردید. این افزایش دقت هم در بخش آموزش با R^2 بالاتر (۰/۹۵ نسبت به ۰/۹۲) و هم در بخش تست (R^2 برابر با ۰/۹۱ نسبت به ۰/۹۰) مشاهده گردید. بنابراین می‌توان عنوان کرد با حذف ویژگی‌های نامربوط یا زائد، پیچیدگی مدل کاهش می‌یابد که منجر به آموزش سریع‌تر می‌شود. علاوه بر این، کاهش ویژگی‌های ورودی می‌تواند منجر به پیش‌بینی‌های دقیق‌تر شود، زیرا مدل بر مهم‌ترین اطلاعات تمرکز می‌کند، در نتیجه پتانسیل بیش از حد برازش را به حداقل می‌رساند و تعمیم به داده‌های جدید را بهبود می‌بخشد. بررسی و ارزیابی عملکرد مدل با تعداد ورودی‌های مختلف، نتایج نشان داد که ترکیبی از دو پارامتر ورودی، یعنی زمان تماس و pH، بالاترین کارایی را برای پیش‌بینی جذب سرب توسط هیدروچار و بیوچار ساقه کلزا داشت. این نتیجه نشان‌دهنده اهمیت انتخاب پارامترهای کلیدی و کاهش پیچیدگی مدل برای بهبود دقت پیش‌بینی است. کاهش تعداد پارامترهای ورودی در مدل برنامه‌ریزی بیان ژن برای پیش‌بینی جذب سرب، علاوه بر بهبود دقت مدل، به کاهش هزینه‌های آزمایشگاهی و عملیاتی منجر می‌شود. با کاهش پارامترهای ورودی از سه پارامتر به دو پارامتر (زمان تماس و pH) مدل با دقت بالاتری آموزش دیده و پیش‌بینی‌های دقیق‌تری ارائه می‌دهد. این افزایش دقت هم در بخش آموزش با R^2 بالاتر (۰/۹۶ نسبت به ۰/۹۵) و هم در بخش تست (R^2 برابر با ۰/۹۴ نسبت به ۰/۹۱) مشاهده گردید. این کاهش پارامترها باعث کاهش مصرف مواد شیمیایی، استفاده کمتر از تجهیزات آزمایشگاهی و صرفه‌جویی در زمان و نیروی انسانی می‌شود. همچنین، مدل با تمرکز بر پارامترهای کلیدی و حذف ویژگی‌های غیرضروری، از پیچیدگی کاسته و خطر بیش‌برازش را کاهش می‌دهد، که نتیجه آن بهبود تعمیم‌پذیری و کارایی مدل در کاربردهای عملی و صنعتی است. این نتایج نشان‌دهنده اهمیت انتخاب بهینه پارامترهای ورودی در مدل‌سازی فرایندهای پیچیده و کاهش هزینه‌های مرتبط با آن است .

جدول ۱. نتایج پیش‌بینی جذب سرب توسط هیدروچار و بیوچار ساقه کلزا با استفاده از مدل برنامه‌ریزی بیان ژن و پارامترهای مختلف ورودی

ورودی	مرحله	R^2	RMSE	MAE
زمان تماس– غلظت اولیه– جرم جاذب– pH	آموزش	۰/۹۲	۴/۶۵	۳/۸
	تست	۰/۹۰	۶/۷۶	۴/۹
زمان تماس– جرم جاذب– pH	آموزش	۰/۹۵	۳/۷	۲/۸
	تست	۰/۹۱	۶/۴	۳/۹۶
غلظت اولیه– pH	آموزش	۰/۶۸	۹/۰۸	۶/۰۸
	تست	۰/۵۶	۱۲/۵۳	۷/۳
زمان تماس – pH	آموزش	۰/۹۶	۳/۰۸	۲/۲۲
	تست	۰/۹۴	۵/۶۸	۴/۳۶
جرم جاذب– pH	آموزش	۰/۶۸	۹/۱۷	۶/۳۴
	تست	۰/۵۵	۱۲/۶۷	۷/۷۴
pH	آموزش	۰/۶۵	۹/۵۵	۶/۶۱
	تست	۰/۵۱	۱۳/۱۹	۰/۳

- **تجزیه و تحلیل حساسیت جذب سرب**

ضریب ربط محاسبه‌شده برای همه پارامترهای موثر بر جذب سرب پیش‌بینی‌شده توسط مدل برنامه‌ریزی بیان ژن بر روی هیدروچار و بیوچار ساقه کلزا در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۵. ضریب ربط پارامترهای موثر در جذب سرب بر روی هیدروچار و بیوچار ساقه کلزا

همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، پارامترهای ورودی شامل مقدار جاذب، غلظت سرب، زمان تماس و pH محلول هستند pH و زمان تماس بیشترین تأثیر مثبت را بر جذب سرب نشان دادند. به طور دقیق‌تر، افزایش pH محلول موجب افزایش بار منفی سطح جاذب می‌شود که منجر به جذب الکترواستاتیکی بیشتری برای یون‌های سرب با بار مثبت می‌شود. این اثر باعث بهبود راندمان جذب سرب می‌گردد. همچنین، زمان تماس بیشتر امکان دسترسی بهتر یون‌های سرب به سطح جاذب را فراهم می‌کند که این امر نیز راندمان جذب را افزایش می‌دهد. از سوی دیگر، غلظت اولیه سرب تأثیر معکوسی بر فرآیند جذب دارد. با افزایش غلظت اولیه سرب، تعداد یون‌های سرب موجود در محلول افزایش می‌یابد و در نتیجه، ظرفیت جذب جاذب به سرعت اشباع می‌شود و راندمان جذب کاهش می‌یابد. این پدیده ناشی از محدودیت ظرفیت جاذب است که در غلظت‌های بالاتر نمی‌تواند تمامی یون‌های سرب را جذب کند. سایر پارامترها مانند مقدار جاذب اثرات ناچیزی بر خروجی مدل دارند. اگرچه افزایش مقدار جاذب می‌تواند سطح فعال بیشتری برای جذب فراهم کند، اما تاثیر آن نسبت به پارامترهای pH و زمان تماس کمتر است. در مقادیر جاذب بسیار زیاد، ممکن است به دلیل عدم توازن بین مقدار جاذب و حجم محلول، کارایی جذب بهینه نباشد. به طور کلی، این نتایج نشان می‌دهد که برای بهبود راندمان جذب سرب، تمرکز بر تنظیم pH و زمان تماس مهم‌تر از تنظیم سایر پارامترها است. این یافته‌ها می‌تواند به کاهش هزینه‌های آزمایشگاهی و بهینه‌سازی فرآیندهای جذب کمک کند، زیرا با تمرکز بر پارامترهای کلیدی، می‌توان بهبود راندمان جذب را با هزینه کمتر و بهره وری بیشتر حاصل کرد.

۴- نتیجه‌گیری

این مطالعه نشان داد که با بهینه‌سازی و کاهش تعداد پارامترهای ورودی به مدل برنامه‌ریزی بیان ژن، می‌توان دقت و کارایی پیش‌بینی جذب سرب را به طور قابل توجهی افزایش داد. انتخاب مناسب پارامترهای ورودی نه تنها موجب کاهش پیچیدگی و زمان آموزش مدل می‌شود، بلکه باعث بهبود دقت پیش‌بینی و کاهش بیش‌برازش می‌شود. در نتیجه، استفاده از دو پارامتر کلیدی زمان تماس و pH، بهترین نتایج را در این مطالعه ارائه داد.

تشکر و قدردانی

این اثر تحت حمایت مادی دانشگاه لرستان، برگرفته شده از طرح درون دانشگاهی با عنوان " ارزیابی کارایی بیوچار و هیدروچارکلزا در بالا بردن کیفیت زهآب، به منظور استفاده مجدد برای آبیاری" انجام شده است. نویسندگان مقاله، از جناب آقای پروفسور محسن عادلی، استاد گروه شیمی دانشگاه لرستان و سرکار خانم مهندس صفورا قزوینه دانشجوی دکتری گروه شیمی دانشگاه لرستان، به دلیل راهنمایی های باارزش و موثر، کمال تشکر و قدردانی را دارند.

منابع

- Abdi, J., & Mazloom, G. 2022. Machine learning approaches for predicting arsenic adsorption from water using porous metal–organic frameworks. Scientific Reports, Vol. 5, P. 12 (1), 16458.
- Al-Janabi, M. B., Mohammed, M. A., Alobaidy, A. A., & Al-Furaiji, M. H. (2023). Use of low-cost adsorbent for copper and lead removal from aqueous solutions. Journal of Ecological Engineering, Vol. 24 (9).
- Aziz, K. H. H., Mustafa, F. S., Omer, K. M., Hama, S., Hamarawf, R. F., & Rahman, K. O. (2023). Heavy metal pollution in the aquatic environment: efficient and low-cost removal approaches to eliminate their toxicity: a review. RSC Advances, Vol. 13 (26), P. 17595-17610.
- Chen, D., Liu, W., Wang, Y., & Lu, P. (2022). Effect of biochar aging on the adsorption and stabilization of Pb in soil. Journal of Soils and Sediments, Vol. 22, P. 56-66.
- Cheng, Z., Li, J., Wang, B., Zeng, J., Xu, J., Gao, W., Zhu, S., Hu, F., Dong, J., & Chen, K. (2020). Scalable and robust bacterial cellulose carbon aerogels as reusable absorbents for high-efficiency oil/water separation. ACS Applied Bio Materials, Vol. 3 (11), P. 7483-7491.
- Dehghani, M. H., Afsari Sardari, S., Afsharnia, M., Qasemi, M., & Shams, M. (2023). Removal of toxic lead from aqueous solution using a low-cost adsorbent. Scientific Reports, Vol. 13 (1), P. 3278.
- Divband Hafshejani, L., Boroomand Nasab, S., Moradzadeh, M., Divband, S., & Abedi Koupai, J. (2016). Cadmium removal from aqueous solution using nano/milli-sized particles of cedar leaf ash. Desalination and Water Treatment, Vol. 57 (7), P. 3283-3291.
- Divband Hafshejani, L., Naseri, A. A., Moradzadeh, M., Daneshvar, E., & Bhatnagar, A. (2022). Applications of soft computing techniques for prediction of pollutant removal by environmentally friendly adsorbents (case study: the nitrate adsorption on modified hydrochar). Water Science & Technology, Vol. 86 (5), P. 1066-1082.
- Hafshejani, L. D., Naseri, A. A., Hooshmand, A., Mohammadi, A. S., & Abbasi, F. (2024). Prediction of nitrate leaching from soil amended with biosolids by machine learning algorithms. Ain Shams Engineering Journal, Vol. 15 (7), P. 102783.
- Han, L., Qian, L., Liu, R., Chen, M., Yan, J., & Hu, Q. (2017). Lead adsorption by biochar under the elevated competition of cadmium and aluminum. Scientific Reports, Vol. 7 (1), P. 2264.
- Ji, W., Guo, X., Pan, S., Long, F., Ho, T.-Y., Schlichtmann, U., & Yao, H. (2024). GNN-based Concentration Prediction with Variable Input Flow Rates for Microfluidic Mixers. IEEE Transactions on Biomedical Circuits and Systems.
- Khairudin, N. I. B., Ahmad, N., Ah-Ya, M. K., Puasa, S. W., & Abdul Ghani, F. S. (2023). Effect of pH on Removal of Lead Using Plant-Based Surfactant Impregnated on Activated Carbon. Advances in Science and Technology, Vol. 123, P. 23-30.
- Kumar, U. (2006). Agricultural products and by-products as a low cost adsorbent for heavy metal removal from water and wastewater: A review. Science Research Essay, Vol. 1 (2), P. 33-37.
- Maroufi, H., & Mehdinejadiani, B. (2021). A comparative study on using metaheuristic algorithms for simultaneously estimating parameters of space fractional advection-dispersion equation. Journal of Hydrology, Vol. 602, P. 126757.
- Mousavi, S.-P., Atashrouz, S., Amar, M. N., Hadavimoghaddam, F., Mohammadi, M.-R., Hemmati-Sarapardeh, A., & Mohaddespour, A. (2021). Modeling surface tension of ionic liquids by chemical structure-intelligence based models. Journal of Molecular Liquids, Vol. 342, P. 116961.
- Mukkamala, S., & Sung, A. H. (2003). Feature selection for intrusion detection with neural networks and support vector machines. Transportation Research Record, Vol. 1822(1), P. 33-39.
- Organization, W. H. (2004). Guidelines for drinking-water quality (Vol. 1). World Health Organization.
- Pandey, S., & Kumari, N. (2023). Impact assessment of heavy metal pollution in surface water bodies. Metals in Water, Vol. 129-154.
- Sabir, A., Altaf, F., Batool, R., Shafiq, M., Khan, R. U., & Jacob, K. I. (2021). Agricultural waste absorbents for heavy metal removal. Green adsorbents to remove metals, dyes and boron from polluted water, 195-228.
- Sang, Y., Li, F., Gu, Q., Liang, C., & Chen, J. (2008). Heavy metal-contaminated groundwater treatment by a novel nanofiber membrane. Desalination, Vol. 223 (1-3), P. 349-360.
- Syah, R., Al-Khowarizmi, A., Elveny, M., & Khan, A. (2021). Machine learning based simulation of water treatment using LDH/MOF nanocomposites. Environmental Technology & Innovation, Vol. 23, P. 101805.

- Wen, H.-T., Wu, H.-Y., & Liao, K.-C. (2022). Using XGBoost Regression to Analyze the Importance of Input Features Applied to an Artificial Intelligence Model for the Biomass Gasification System. Inventions, Vol. 7 (4), P. 126.
- Xie, S., Pan, C., Yao, Y., Yu, X., Xu, Z., Yuan, W., Zhang, Y., Guo, N., Li, X., & Mao, X. (2023). Ultra-high-efficiency capture of lead ions over acetylenic bond-rich graphdiyne adsorbent in aqueous solution. Proceedings of the National Academy of Sciences, Vol. 120 (16), P. e2221002120.
- Zhang, W., Huang, W., Tan, J., Huang, D., Ma, J., & Wu, B. (2023). Modeling, optimization and understanding of adsorption process for pollutant removal via machine learning: Recent progress and future perspectives. Chemosphere, Vol. 311, P. 137044.
- Abdi, J., & Mazloom, G. (2022). Machine learning approaches for predicting arsenic adsorption from water using porous metal–organic frameworks. Scientific Reports, Vol. 12 (1), P.16458.