

استفاده از فناوری نانو و یادگیری ماشین برای حذف ترکیبات فنولی از آب در صنعت

پارسا احمدی راد^{۱*}، محمد اصغریان^۲، آریانا میرخلفزاده^۳، طراوت اوسطی^۴، محمدرضا عارف نعمتی^۵

۱- دانشجوی کارشناسی شیمی کاربردی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات، تهران، ایران

Parsarad.chem@gmail.com

۲- دانشجوی کارشناسی شیمی کاربردی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات، تهران، ایران

mohasgharian83@gmail.com

۳- دانشجوی کارشناسی شیمی کاربردی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات، تهران، ایران

Rnmirkhalaf@gmail.com

۴- دانشجوی کارشناسی شیمی کاربردی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات، تهران، ایران

ttara9977@gmail.com

۵- دانشجوی کارشناسی شیمی کاربردی، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد علوم و تحقیقات، تهران، ایران

marefnematie@gmail.com

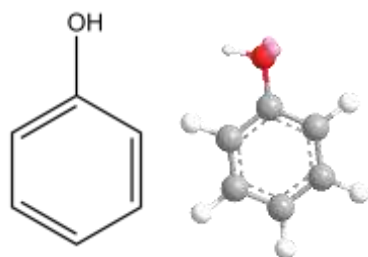
خلاصه

فناوری نانو و یادگیری ماشین (ML) با ترکیب قابلیت‌های خود، تحولی در حذف ترکیبات فنولی از پساب‌های صنعتی ایجاد کرده‌اند. نانومواد مانند اکسید گرافن (GO)، دی‌اکسید تیتانیوم (TiO_2) و چارچوب‌های فلزی-آلی (MOFs) به دلیل سطح ویژه بالا، شیمی سطح قابل تنظیم، و واکنش‌پذیری برتر، توانایی بالایی در جذب ترکیبات فنولی نشان داده‌اند. یادگیری ماشین با مدل‌های مختلف، به بهینه‌سازی فرآیند جذب از طریق شناسایی شرایط بهینه مانند pH، زمان تماس، و تغییرات سطحی نانومواد کمک می‌کند. مطالعات اخیر نشان داده‌اند که ترکیب این دو فناوری می‌تواند راندمان حذف فنول را تا درصد قابل توجهی افزایش داده و هزینه‌ها و زمان آزمایش را کاهش دهد. با وجود چالش‌هایی مانند مقیاس‌پذیری و هزینه تولید نانومواد، پیشرفت‌های جدید در مدل‌سازی ترکیبی و سنتز مواد می‌تواند راه‌حل‌های مقرون به صرفه و پایدارتری برای تصفیه آب صنعتی ارائه دهد.

کلمات کلیدی: فنول، نانومواد، یادگیری ماشین، تصفیه آب، پساب صنعتی، نانو

۱. مقدمه

فنول‌ها ترکیبات آلی آروماتیک (معطر) هستند که دارای یک گروه هیدروکسیل (OH) هستند. این گروه هیدروکسیل بطور مستقیم با یک پیوند یگانه به حلقه بنزن متصل شده. فنول‌ها با اینکه شبیه الکل‌ها هستند اما خواص متفاوتی دارند و در دسته خودشان بررسی می‌شوند. آنها نیز قطبی هستند و توانایی تشکیل پیوند هیدروژنی را در آب دارند. (شکل ۱)



شکل ۱

فنول‌ها در دسته آلاینده‌ی سمی قرار می‌گیرند و همین موضوع سبب ایجاد برخی بحران‌های زیست محیطی می‌شود. یکی از مشکلات اصلی الودگی محیط زیست رهاسازی مواد شیمیایی خطرناک با ترکیبات پیچیده از پساب صنایع مختلف است. این پساب‌ها شامل ترکیبات مختلفی از جمله هیدروکربن‌های سبک و سنگین، فنول، و فورفورال هستند که بعلاوه سمیت زیاد آنها اگر بدون تصفیه به محیط تخلیه شوند مشکلات جدی‌ای را به دنبال خواهند داشت. (۱)

فنول علاوه بر خاصیت خوردگی، بشدت منجر به حساسیت‌های پوستی می‌شود. بعلاوه اثرات خطرناکی که فنول می‌تواند بر سلامت انسان بگذارد، سازمان بهداشت جهانی استانداردهای سختگیرانه‌ای برای میزان و غلظت فنول در آب ورودی به تصفیه‌خانه وضع کرده. (۱)

روش‌های متعددی برای حذف فنول وجود دارد که هرکدام تاکنون چالش‌هایی را با خود به همراه داشته. حذف فنول به کمک کربن فعال یکی از روش‌های سنتی حذف فنول بوده است. این روش نسبت به سایر روش‌های حذف فنول، سازگاری بیشتری با محیط زیست دارد. علاوه بر آن قابلیت احیا و استفاده مجدد آن نیز وجود دارد اما همین موضوع می‌تواند خود چالشی برای حذف فنول باشد چراکه انجام این کار نیاز به انرژی و هزینه زیادی دارد. ضمن آنکه کربن فعال در صورتی مفید واقع می‌شود که غلظت فنول کم و ناچیز باشد. در روشی دیگر فنول به روش اکسیداسیون شیمیایی حذف می‌شود که این روش نیز دارای مزایا و معایبی است. این روش کارایی بالایی دارد اما یکی از معایب بزرگ آن ایجاد محصولات فرعی و نامطلوب است، ضمن آنکه تهیه مواد شیمیایی لازم صرفه اقتصادی چندانی ندارد. (۲)

فناوری نانو و یادگیری ماشین (ML) با ترکیب توانایی‌های پیشرفته خود، به یک رویکرد نوآورانه برای حذف ترکیبات فنولی از پساب‌های صنعتی تبدیل شده‌اند. ترکیبات فنولی، به‌عنوان آلاینده‌های خطرناک و مقاوم، از صنایع پتروشیمی، داروسازی و کاغذسازی وارد محیط زیست می‌شوند و به دلیل سمیت بالا و پایداری شیمیایی، حذف آنها به تکنولوژی‌های پیشرفته نیاز دارد. نانومواد به دلیل خواص منحصر به فرد مانند سطح ویژه بالا، ساختارهای مزومخلخل، و واکنش‌پذیری سطحی بالا، نقش کلیدی در این فرآیند دارند. برای مثال، سیلیکا و تیتانیا با ساختارهای متخلخل خود ظرفیت بالایی برای جذب ترکیبات فنولی نشان داده‌اند. در یک مطالعه، استفاده از نانومواد سیلیکای مزومخلخل برای حذف ترکیبات فنولی منجر به بهبود راندمان تا ۹۵٪ شد، که این موفقیت به قابلیت تنظیم سطح و ساختار این مواد مرتبط است. (۳)

در کنار نانومواد، یادگیری ماشین با مدل‌هایی مانند شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN) و الگوریتم‌های جنگل تصادفی (RF) امکان پیش‌بینی و بهینه‌سازی فرآیند جذب را فراهم کرده است. این مدل‌ها توانسته‌اند به‌طور دقیق متغیرهای

عملیاتی مانند pH، دما، و زمان تماس را برای حداکثر جذب پیش‌بینی کنند. برای مثال، استفاده از ANN برای پیش‌بینی عملکرد جذب فنول با نانومواد TiO_2 نشان داد که می‌توان به دقت بالایی در تنظیم پارامترها دست یافت و هزینه‌های عملیاتی را کاهش داد. (۴)

ترکیب فناوری نانو و یادگیری ماشین باعث توسعه نانومواد با عملکرد بالا و هزینه‌های کمتر شده است. برای مثال، چارچوب‌های فلزی-آلی (MOFs) با استفاده از یادگیری ماشین بهینه‌سازی شده‌اند تا ظرفیت جذب فنول را تا ۶۰۰ میلی‌گرم بر گرم افزایش دهند. همچنین، ترکیب مدل‌های ML با شبیه‌سازی‌های شیمی محاسباتی در طراحی مواد چندانظره برای محیط‌های پیچیده صنعتی موثر بوده است. (۵)

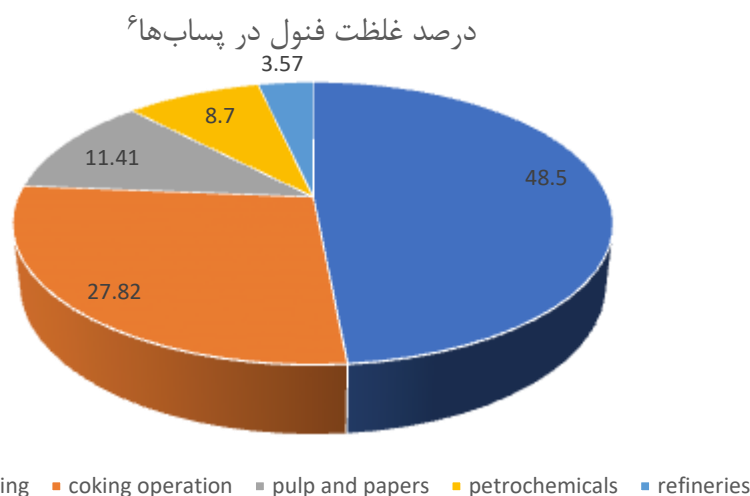
با وجود پیشرفت‌های چشمگیر، چالش‌هایی مانند هزینه بالای تولید نانومواد، مقیاس‌پذیری در کاربردهای صنعتی، و پایداری این مواد در محیط‌های متغیر صنعتی باقی مانده است. تحقیقات آینده باید بر روی مدل‌های ترکیبی ML و طراحی نانومواد با قابلیت‌های پایداری و مقرون‌به‌صرفه تمرکز کنند تا بتوانند در مقیاس صنعتی و در شرایط عملیاتی واقعی کاربرد داشته باشند.

2. ویژگی‌های ترکیبات فنولی و چالش‌های حذف آنها

ترکیبات فنلی در پساب صنایع مختلف از جمله پالایش نفت، پتروشیمی، داروسازی، عملیات کوکینگ، تولید رزین، پلاستیک، رنگ، خمیر کاغذ، کاغذ و محصولات چوبی وجود دارند. تخلیه این ترکیبات بدون تصفیه ممکن است منجر به خطرات جدی برای سلامتی انسان، حیوانات و سیستم‌های آبی شود. فنل توسط آژانس حفاظت از محیط زیست ایالات متحده (EPA) و فهرست ملی انتشار آلاینده (NPRI) کانادا به عنوان یک آلاینده دارای اولویت تعیین شده است. به همین جهت نهادهای نظارتی بین‌المللی محدودیت‌های شدیدی برای تخلیه فنل‌ها برای محیط زیست پایدار تعیین کرده‌اند. آژانس حفاظت از محیط زیست، استاندارد خلوص آب را کمتر از 1 ppb برای فنل در آب‌های سطحی تعیین کرده است. سطوح سمیت معمولاً در محدوده ۹-۲۵ میلی‌گرم در لیتر هم برای انسان و هم برای آبزیان است. (۶)

فنل اثرات خطرناکی برای سلامتی دارد که می‌تواند هم حاد و هم مزمن باشد. قرار گرفتن طولانی مدت در معرض فنول می‌تواند منجر به تنفس نامنظم، ضعف عضلانی، لرزش، کما و ایست قلبی در دوزهای کشنده در انسان شود. مواجهه مزمن با فنل باعث تحریک سیستم گوارشی و عصبی مرکزی و کبد، کلیه، و بافت قلبی عروقی در حیوانات می‌شود. از جمله مشکلات دیگری که قرارگیری در معرض فنول ایجاد می‌کند، تحریک پوست، چشم‌ها و غشاهای مخاطی است. اثرات مزمن ناشی از قرارگیری در معرض فنول می‌تواند شامل بی‌اشتهایی، کاهش وزن، اسهال، سرگیجه، ترشح بزاق و تغییر رنگ ادرار به رنگ تیره باشد. مطالعات حیوانی کاهش وزن بدن جنین، تاخیر در رشد و رشد غیرطبیعی در فرزندان را نشان داده است که نشأت گرفته از عدم تصفیه صحیح فنول در آب است. (۶)

فنل در مشتقات رایجی مانند بیسفنول A (BPA)، کلروفنل‌ها (CPS)، و ترکیبات مختل کننده غدد درون ریز فنلی وجود دارد. (۶)



نمودار ۱

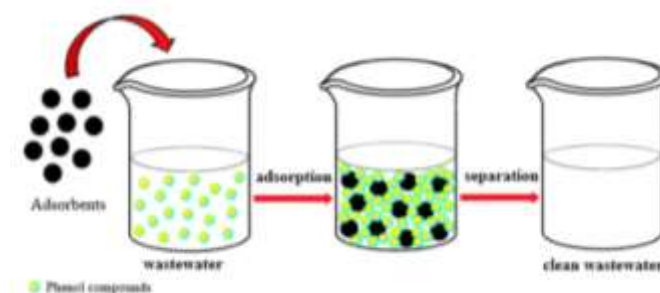
سطح مقطع فنل 4.20×10^{-10} متر، حجم $87.8 \times 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$ ، غلظت اشباع شده در آب 912 mol/m^3 و pK_a 9.99 است. فنل به عنوان اسیدی طبقه بندی می شود که ضعیف تر از اسید کربنیک است (pK_a اسید کربنیک ۶.۴ است) اما قوی تر از آب است (pK_a آب ۱۵.۷). مشتقات فنل جایگزین به خوبی در آب حل نمی شوند (حلالیت از ۳۰ گرم در لیتر فراتر نمی رود)، اما فنل های جایگزین نشده در آب نسبتاً محلول هستند (۸۳ گرم در لیتر). از گروه های آلکیل و هالوژن می توان به عنوان جایگزین برای افزایش آب گریزی حلقه آروماتیک (کاهش حلالیت آن در آب) استفاده کرد. جذب یا استخراج ترکیبات فنلی در غلظت های بسیار کم چالش برانگیز است زیرا فنل ها دارای تنوع زیادی از خواص فیزیکوشیمیایی هستند، به ویژه چگالی الکترونی حلقه آروماتیک که بر حلالیت ترکیبات فنل در آب تأثیر می گذارد. (۷)

انواع مختلفی از فرایندها برای حذف محتوای فنل از فاضلاب بررسی شده است. این فرایندها را می توان به سه نوع طبقه بندی کرد: تصفیه بیولوژیکی، فناوری های مرسوم (مانند تقطیر، جذب، و استخراج)، و فناوری های پیشرفته (مانند اکسیداسیون شیمیایی، فرآیند فنتون، اکسیداسیون الکتروشیمیایی، اوزون زنی فرایندهای غشایی و کاتالیزوری). علاوه بر ملاحظات فنی اصلی، جنبه های کنترل محیطی و اقتصادی نیز باید برای انتخاب فناوری های مناسب، پایدار و دوستدار محیط زیست در نظر گرفته شود. (۷)

تصفیه بیولوژیکی فاضلاب فرآیند مفیدی است که در آن از فرایندهایی برای تجزیه مواد آلی استفاده می شود. تصفیه سازی های بیولوژیکی عموماً به باکتری ها یا دیگر موجودات کوچک برای تجزیه ضایعات آلی با استفاده از فرایندهای سلولی عادی متکی هستند. به دلیل سهولت استفاده از سیستم های تصفیه بیولوژیکی، معمولاً به عنوان مقایسه با سایر فناوری های پردازش فنول استفاده می شود. اگرچه تصفیه بیولوژیکی فناوری سازگار با محیط زیست و انرژی کارآمد را در مقایسه با تصفیه فیزیکوشیمیایی ارائه می دهد، اما وجود آلاینده های سمی یا مقاوم در برابر بیولوژیکی در آب تصفیه شده می تواند واکنش های بیولوژیکی را مهار کند و برای غلظت های بالای فنول امکان پذیر نیست. با این حال، فنول یا مشتقات آن نیز می توانند باعث دفلوکولاسیون شوند و در نتیجه مشکلاتی در زلال ساز ایجاد شود. بنابراین، برای دستیابی به راندمان حذف فنل رضایت بخش، غلظت فنل باید زیر آستانه ۴۲۰ میلی گرم در لیتر نگه داشته شود و باید سازگاری میکروارگانیسم ها با فاضلاب انجام شود. (۷)

جذب یک پدیده سطحی است و می توان آن را با افزایش غلظت یک جزء خاص در سطح یا سطح مشترک بین دو فاز تعریف کرد. چندین عامل موثر بر فرآیند جذب عبارتند از جاذب ها، وجود سایر آلاینده ها و سایر شرایط عملیاتی مانند

دما، غلظت آلاینده‌ها، زمان تماس و اندازه ذرات جاذب. روش جذب به طور گسترده در تصفیه پساب از آلی و معدنی بدون تولید محصولات جانبی مضر استفاده می‌شود. فرآیند جذب در کاهش غلظت فنل در آب موثر است. با این حال، عوامل اقتصادی (از جمله انرژی) استفاده و بازیافت مواد ثانویه مورد نیاز، استخراج کننده‌ها، و جاذب‌ها نیز باید در نظر گرفته شوند. مزایای اصلی جذب برای حذف آلاینده‌های فنلی این است که این فرآیند بسیار مؤثر، انعطاف‌پذیر و با طراحی ساده است که محصولات جانبی مضر تولید نمی‌کند. از سوی دیگر، اشکالات اصلی فناوری جذب این است که نیاز به مقدار جاذب، هزینه بالای جاذب دارد و تفکیک از جاذب‌ها بسیار دشوار است. (۷)



شکل ۲

کربن فعال متداول‌ترین جاذب مورد استفاده برای حذف فنل از آب در فرآیند جذب است، اما پایداری کم و دشواری در بازسازی آن از معایب اصلی آن است. ظرفیت جذب کربن فعال در جذب فاز مایع برای ترکیبات آروماتیک (فنل‌ها) به عوامل مختلفی از جمله خواص فیزیکی جاذب (ساختار منافذ، محتوای خاکستر و گروه‌های عاملی) بستگی دارد و همچنین به مواد پیش ساز و روش تهیه آن بستگی دارد. خواص جاذب (حلالیت، pK_a ، گروه‌های عاملی، قطبیت، وزن مولکولی و اندازه) و شرایط محلول (PH ، یونی) قدرت، غلظت جذب، و در دسترس بودن اکسیژن. (۷)

حذف فوتوکاتالیستی فنول به عنوان مدلی از آلاینده آلی در یک رآکتور بستر سیال تحت تابش‌های فرابنفش و مرئی مورد مطالعه قرار گرفته است. تاثیرات کمیت‌های مهمی چون PH ، غلظت کاتالیست، غلظت فنول، و روش‌های سنتز نانوکامپوزیت بر حذف فوتوکاتالیستی فنول مورد بررسی قرار گرفته است. غلظت فنول حذف شده از لحاظ کمی به عنوان تابعی از زمان تابش در اسپکتوفوتومتر مرئی-فرابنفش اندازه‌گیری شده و نانوکامپوزیت‌های مورد استفاده در این کار متشکل از نانوذرات نیمه رساناهای ZnO ، CuO ، TiO_2 می‌باشد. (۸)

پدیده فوتوکاتالیستی ممکن است بارها در حذف رنگ از سطوح خارجی ساختمان‌ها که نتیجه‌ای از اکسایش است مشاهده شده باشد. برای مثال در ترکیبات رنگی TiO_2 موجود می‌تواند با رسیدن تابشی از نور سبب اکسایش ترکیبات آلی شود. لذا این پدیده می‌تواند به نحو گسترده‌ای در خالص‌سازی آلودگی‌های آب، هوا، و جامد مورد استفاده قرار گیرد. پس از دهه ۸۰ میلادی این شیوه به صورت مستمر برای خالص‌سازی آب و حذف آلاینده‌ها از آن به کار گرفته شد. نانوفناوری پتانسیل ایفای نقش‌های یگانه‌ای در ارتباط با بحران‌های محیط زیستی با خالص‌سازی آب را داشته و می‌تواند آلودگی‌ها را تجزیه کرده و در آب حل کند. با افزودن فلزات به TiO_2 دیگر عوامل گیرانداز حفره می‌توان عمر اکسیتون‌های ساخته شده را افزود و این بدان معنی است که افزایش عمر زوج الکترون حفره با عدم ترکیب شدن آن‌ها با همدیگر وابسته است. افزایش فلزات گروه $VIIB$ بر سطح TiO_2 سبب افزایش عمر زوج الکترون حفره با گیراندازی

الکترون در تراز هدایت می‌شود. در بسیاری از تحقیقات پلاتین را به عنوان فلزی از این گروه برای افزایش فعالیت فوتوکاتالیستی پیشنهاد کرده‌اند زیرا گیراندازی الکترون در آن در یک میکرو ثانیه اتفاق می‌افتد. (۸)

۳. تکنیک‌های ماشین لرنینگ در حذف ترکیبات فنولی

یکپارچه‌سازی الگوریتم‌های پیشرفته یادگیری ماشین، مانند شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)، ماشین‌های بردار پشتیبان (SVM) و الگوریتم‌های ژنتیکی (GA)، نوید زیادی در بهینه‌سازی فرایندهای حذف آلودگی، بهبود دقت پیش‌بینی و افزایش کارایی عملیاتی در سیستم‌های تصفیه سبب نشان داده است. (۹)

به‌ویژه، این برنامه‌های یادگیری ماشین تحلیل روابط پیچیده و غیرخطی را در مجموعه‌های داده بزرگ تسهیل می‌کنند و به پژوهشگران این امکان را می‌دهند که الگوها و روندهایی را شناسایی کنند که روش‌های سنتی ممکن است نادیده بگیرند. روش‌هایی مانند شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANNs) به‌ویژه در برآورد کارایی حذف برای آلاینده‌های مختلف مؤثر بوده‌اند، در حالی که ماشین‌های بردار پشتیبان (SVMs) در طبقه‌بندی و پیش‌بینی غلظت ترکیبات فنولی کمک می‌کنند. (۹)

در علم محیط‌زیست، تکنیک‌های یادگیری ماشین مانند شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)، ماشین‌های بردار پشتیبان (SVM) و الگوریتم‌های ژنتیکی (GA) به‌طور گسترده‌ای برای مدل‌سازی پیش‌بینی در مدیریت پسماند و تصفیه فاضلاب مورد استفاده قرار می‌گیرند. این الگوریتم‌ها قادر به تحلیل روابط پیچیده و غیرخطی در مجموعه‌های داده بزرگ هستند تا الگوهای پنهانی را شناسایی کنند که ممکن است روش‌های تحلیلی سنتی نتوانند آنها را شناسایی کنند. به عنوان مثال، استفاده از جنگل‌های تصادفی به‌طور مؤثری سطوح ذرات معلق ریز و آلودگی آب‌های زیرزمینی را تخمین زده است که کاربرد یادگیری ماشین را در ارزیابی‌های محیط‌زیستی نشان می‌دهد. (۱۰)

۳-۱. تکنیک‌های مهم و اصلی ماشین لرنینگ در حذف ترکیبات فنولی:

شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANNs): ANNs الهام‌گرفته از شبکه‌های عصبی بیولوژیکی هستند و به‌ویژه در پردازش داده‌های ورودی/خروجی برای پیش‌بینی نتایج بر اساس روندهای تاریخی ماهرند. آن‌ها با تنظیم مقادیر وزنی که به ورودی‌های مختلف در طول آموزش اختصاص داده می‌شود، برای بهینه‌سازی دقت پیش‌بینی عمل می‌کنند. کاربرد ANNs در برآورد کارایی حذف آلاینده‌ها مانند نیاز به اکسیژن بیولوژیکی (BOD) و نیتروژن کل (TN) در سیستم‌های تصفیه فاضلاب اثبات شده است. (۱۱)

مدل‌هایی مانند شبکه عصبی پیش‌خور سه‌لایه به‌طور خاص برای مدیریت متغیرهای متعدد طراحی شده‌اند و به این ترتیب کارایی کلی تصفیه را بهبود می‌بخشند.

ماشین‌های بردار پشتیبان (SVM): SVMها رویکرد دیگری در کاربردهای یادگیری ماشین برای حذف آلاینده‌ها هستند که بر روی وظایف طبقه‌بندی و رگرسیون تمرکز دارند. آن‌ها با یافتن ابرصفحه بهینه‌ای که کلاس‌های مختلف داده‌ها را جدا می‌کند، کار می‌کنند و بدین ترتیب پیش‌بینی و طبقه‌بندی مؤثر ترکیبات فنولی در زمینه‌های مختلف را تسهیل می‌کنند. (۱۲)

الگوریتم‌های ژنتیکی (GA): GAها به‌طور همزمان با سایر تکنیک‌های یادگیری ماشین برای بهینه‌سازی پارامترها در مدل‌های پیش‌بینی استفاده می‌شوند. این بهینه‌سازی به پالایش مدل‌ها کمک می‌کند تا عملکرد بهتری در وظایفی مانند طراحی آزمایش‌ها و نظارت در زمان واقعی بر سطوح آلاینده‌ها داشته باشند. (۱۳)

تکنیک‌های رگرسیون: یادگیری ماشین همچنین می‌تواند مدل‌سازی رگرسیون سنتی را با ادغام داده‌های طیفی و نتایج شیمی مربوط تقویت کند و پیش‌بینی دقیق ویژگی‌های کیفی در کالاهای کشاورزی را بدون آسیب به محصولات ممکن سازد. (۱۴)

روش‌های اعتبارسنجی متقابل، مانند K-fold، برای اطمینان از استحکام این مدل‌ها و جلوگیری از بیش‌برازش به کار می‌روند که برای حفظ دقت در پیش‌بینی‌ها حیاتی است.

۲-۳. مدل‌های رگرسیون برای پیش‌بینی ظرفیت جذب و خواص مواد

مدل‌های رگرسیون برای پیش‌بینی ظرفیت جذب و ویژگی‌های نانومواد و ترکیبات فنلی شامل مجموعه‌ای از تکنیک‌های آماری و محاسباتی هستند که برای پیش‌بینی چگونگی تعامل این مواد با سیستم‌های زیستی و محیط‌زیست استفاده می‌شوند. این مدل‌ها در زمینه‌های مختلف، از جمله پزشکی، علوم محیطی و مهندسی مواد، اهمیت دارند زیرا درک رفتار نانومواد و ویژگی‌های مفید ترکیبات فنلی را افزایش می‌دهند. پیچیدگی رو به افزایش داده‌های تولید شده در این زمینه‌ها ضرورت استفاده از رویکردهای پیش‌بینی مدلسازی پیشرفته را ایجاب می‌کند که می‌توانند روابط پیچیده بین پارامترهای سنتزی و ویژگی‌های ماده را درک و تفسیر کنند. (۱۵)

استفاده از مدل‌های رگرسیون، مانند رگرسیون خطی، رگرسیون لاسو و رگرسیون ریج، به محققان این امکان را می‌دهد که متغیرهای کلیدی که بر ظرفیت جذب و ویژگی‌های ماده تأثیر می‌گذارند را شناسایی کنند. این روش‌ها در انتخاب ویژگی، ساده‌سازی مدل و حل مشکل هم‌خطی بین پیش‌بین‌ها کمک می‌کنند، که همه این‌ها برای افزایش دقت پیش‌بینی بسیار حیاتی هستند.

مدل‌های رگرسیون با چالش‌های قابل توجهی از جمله مسائل کیفیت داده‌ها، قابلیت تفسیر مدل و احتمال بیش‌برازش مواجه هستند. پیش‌پردازش داده‌ها برای اطمینان از پیش‌بینی‌های قوی ضروری است، در حالی که متعادل‌سازی پیچیدگی مدل برای درک روابط اساسی بدون به خطر انداختن عملکرد تعمیم‌دهی الزامی است. علاوه بر این، تعادل بین دقت مدل و قابلیت تفسیر، کاربرد عملی آن‌ها را به ویژه در زمینه‌های نظارتی که درک تعاملات متغیرها حیاتی است، پیچیده می‌کند. علاقه رو به افزایش به استفاده از نانومواد و ترکیبات فنلی در صنایع مختلف بحث‌های مهمی را در مورد ایمنی و کارایی آن‌ها مطرح می‌کند و نیاز به ایجاد چارچوب‌های نظارتی قوی را ایجاب می‌کند. رویکردهای مدلسازی پیش‌بینی، مانند مجموعه OPERA، می‌توانند از تصمیم‌گیری‌های نظارتی حمایت کنند و ارزیابی‌های قابل اعتمادی بر اساس مجموعه‌های داده‌ای گردآوری شده ارائه دهند و بدین ترتیب راه را برای نوآوری مسئولانه در نانو تکنولوژی هموار کنند و به تقویت کاربردهای مفید ترکیبات فنلی در بخش‌های غذایی و بهداشتی کمک نمایند. (۱۶)

۳-۳. پیش‌بینی تعاملات ترکیبات فنولی با نانومواد

پیش‌بینی تعاملات:

پیشرفت‌های اخیر در یادگیری ماشین (ML) و یادگیری عمیق (DL) به طور قابل توجهی پیش‌بینی تعاملات بین نانو مواد و ترکیبات فنولی را بهبود بخشیده است. این تعاملات برای کاربردها در زمینه‌های مختلف، از جمله نانومدیسین و علم مواد، حیاتی هستند.

رویکردهای یادگیری ماشین:

تکنیک‌های مختلف یادگیری ماشین برای پیش‌بینی تعاملات ترکیب-پروتئین (CPI) و تمایل‌های پیوندی ترکیبات با پروتئین‌ها استفاده شده‌اند. به عنوان مثال، روش‌ها می‌توانند به رویکردهای مبتنی بر ساختار و مبتنی بر توصیف ویژگی تقسیم شوند. در میان این‌ها، مدل‌های یادگیری عمیق مانند DeepDTA و TransformerCPI برای

بهبود قابلیت پیش‌بینی این تعاملات توسعه یافته‌اند. مدل TransformerCPI از مکانیزم توجه خود برای یادگیری عمیق مبتنی بر توالی استفاده می‌کند تا پیش‌بینی‌های CPI را بهبود بخشد، در حالی که MONN یک شبکه عصبی چندهدفه است که برای پیش‌بینی دقیق تمایل‌های پیوندی و ضبط تعاملات غیرکووالان طراحی شده است. (۱۷)

استفاده از داده‌ها و مهندسی ویژگی:

کارایی این مدل‌های پیش‌بینی به شدت به کیفیت و کمیت داده‌های استفاده شده برای آموزش وابسته است. معرفی مگا کتابخانه‌ها، که شامل مجموعه داده‌های گسترده‌ای است که تحت شرایط کنترل شده جمع‌آوری شده‌اند، به ابزارهای ML این امکان را داده است که یاد بگیرند و قدرت پیش‌بینی خود را در طول زمان بهبود بخشند. این مگا کتابخانه‌ها به مدل‌ها اجازه می‌دهند تا یک دامنه متنوع از تعاملات را تجزیه و تحلیل کنند و به طور قابل توجهی قابلیت عمومی‌سازی آن‌ها را افزایش دهند. علاوه بر این، تکنیک‌های مهندسی ویژگی برای استخراج ویژگی‌های مرتبط از هر دو نانو مواد و ترکیبات فنولی به کار می‌روند که به ساخت بردارهای ویژگی اطلاعاتی‌تر برای آموزش مدل کمک می‌کند. (۱۸)

ارزیابی عملکرد:

برای ارزیابی عملکرد مدل‌های پیش‌بینی، معیارهایی مانند ضریب همبستگی پیرسون (PCC) به طور معمول استفاده می‌شوند. به عنوان مثال، تحلیل‌های رگرسیون خطی برای ارزیابی توانایی پیش‌بینی تمایل‌های پیوندی بر اساس شاخص‌های ترکیب یا پروتئین به تنهایی انجام می‌شود. علاوه بر این، مدل‌هایی مانند AlphaFoldGrAtts از معماری‌های پیشرفته، از جمله شبکه‌های توجه گرافی، برای بهبود استخراج بردارهای نماینده برای ترکیبات و اهداف استفاده می‌کنند و در نتیجه دقت پیش‌بینی را افزایش می‌دهند. (۱۸)

۴. تحلیل تطبیقی نانومواد بهینه‌شده با یادگیری ماشین در حذف فنول از پساب‌های صنعتی

نانومواد به دلیل سطح ویژه بالا و واکنش‌پذیری شیمیایی، در تصفیه پساب‌های صنعتی و حذف ترکیبات فنولی نقش مهمی ایفا می‌کنند. ادغام تکنیک‌های یادگیری ماشین (ML) باعث بهبود کارایی و بهینه‌سازی این فرآیندها شده است. فنول به عنوان یک آلاینده رایج صنعتی، خطرات جدی برای محیط زیست و سلامت انسان ایجاد می‌کند و به همین دلیل، استراتژی‌های پیشرفته‌ای برای تصفیه آن ضروری است. مطالعات اخیر نشان داده‌اند که نانومواد بهینه‌شده با ML در مقایسه با روش‌های سنتی، عملکرد بسیار بهتری در حذف فنول دارند.

یک بررسی جامع نشان داده است که شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN) در مدل‌سازی و بهینه‌سازی فرآیندهای تصفیه آب برای آلاینده‌های فنولی کاربرد دارند. این مطالعه تأکید می‌کند که ANN‌ها به دلیل توانایی در مدیریت روابط پیچیده غیرخطی، نسبت به مدل‌های رگرسیون خطی سنتی عملکرد بهتری دارند و راندمان حذف فنول تا ۹۹.۹۹٪ افزایش یافته است. (۱۹)

مطالعه دیگری به کاربرد مدل‌های ML در بهینه‌سازی سیستم‌های تصفیه پساب‌های دارویی که اغلب حاوی ترکیبات فنولی هستند، پرداخته است. این تحقیق نشان داد که الگوریتم‌های ML می‌توانند به طور موثری عملکرد فرآیندهای تصفیه را پیش‌بینی و بهبود دهند، که منجر به افزایش راندمان حذف و کاهش هزینه‌های عملیاتی شده است. (۲۰)

در نتیجه، همگرایی نانوفناوری و یادگیری ماشین، رویکردی تحول‌آفرین در حذف فنول از پساب‌های صنعتی ارائه می‌دهد. نانومواد بهینه‌شده با ML دارای ظرفیت جذب و راندمان فرآیند بالاتری هستند و راه‌حلی پایدار و موثر برای کاهش

تأثیرات زیست‌محیطی آلاینده‌های فتولی ارائه می‌دهند. تحقیقات و پیشرفت‌های فناوری مداوم انتظار می‌رود که این روش‌ها را بیشتر بهبود بخشند و سیستم‌های تصفیه‌ای کارآمدتر و مقرون به صرفه‌تری توسعه دهند.

۵. جهت‌گیری‌های آینده و شکاف‌های تحقیقاتی

جهت بهبود عملکرد و کارایی نانومواد در کاربردهای مختلف، از جمله حذف آلاینده‌های آب، می‌توان یادگیری ماشین را با نانوتکنولوژی ادغام نمود. این امر به روش‌های مختلفی انجام می‌شود که در این بخش چند روش کلیدی ارائه می‌شود:

یادگیری ماشین می‌تواند ویژگی‌های نانومواد (مانند اندازه، شکل و سطح) را برای بهبود عملکرد آنها بهینه کند. از الگوریتم‌های یادگیری ماشین برای پیش‌بینی ویژگی‌های ایده‌آل نانومواد و تنظیم ساختار و ترکیب آنها استفاده می‌شود. این الگوریتم‌ها با تحلیل داده‌های آزمایشگاهی و شبیه‌سازی‌های کامپیوتری، بهترین ترکیب و ساختار و طراحی را برای نانومواد در شرایط مختلف شناسایی می‌کند. (۲۱) (۲۶)

مدل‌های یادگیری ماشین می‌توانند رفتار و عملکرد نانومواد در شرایط محیطی مختلف را پیش‌بینی کنند. مثلاً در حذف فنول و سایر ترکیبات آلی از آب. این مدل‌ها با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی می‌توانند شرایط بهینه را برای جذب و تخریب آلاینده‌ها تعیین کنند و امکان استفاده بهینه‌تر از نانومواد را فراهم آورند. (۲۲) (۲۳)

یکی از کاربردهای مهم یادگیری ماشین در نانوتکنولوژی، کاهش زمان و هزینه‌ی آزمایش‌ها و پژوهش‌ها است. به جای انجام آزمایش‌های متعدد و زمان‌بر، الگوریتم‌های یادگیری ماشین می‌توانند نتایج بالقوه را با دقت بالا پیش‌بینی کنند، و به پژوهشگران اجازه دهند آزمایش‌های خود را تنها بر ترکیبات امیدبخش متمرکز کنند. (۲۴)

با استفاده از یادگیری ماشین، سیستم‌هایی می‌توان ایجاد کرد که به طور خودکار عملکرد نانومواد در فرآیندهای تصفیه آب را تحت نظارت داشته، مانیتور کند و پارامترهای عملیاتی (مانند دما و pH) را بهینه‌سازی نماید. این کار باعث بهبود کارایی سیستم‌های تصفیه و کاهش هزینه‌ها می‌شود. (۲۱) (۲۵)

با استفاده از یادگیری ماشین، سیستم‌هایی می‌توان ایجاد کرد که به طور خودکار عملکرد نانومواد در فرآیندهای تصفیه آب را تحت نظارت داشته، مانیتور کند و پارامترهای عملیاتی (مانند دما و pH) را بهینه‌سازی نماید. این کار باعث بهبود کارایی سیستم‌های تصفیه و کاهش هزینه‌ها می‌شود

تحقیقات می‌تواند روی توسعه‌ی مدل‌های یادگیری ماشین که به‌طور خاص برای پیش‌بینی ویژگی‌های عملکردی نانومواد طراحی شده‌اند، متمرکز شود. این مدل‌ها می‌توانند به تنظیم ترکیبات و ساختارهای نانومواد برای بهبود عملکرد چندمنظوره آن‌ها کمک کنند. (۲۱) (۲۳)

با ایجاد شبیه‌سازی و مدل‌سازی‌های دقیق‌تر از عملکرد نانومواد، پژوهشگران می‌توانند ویژگی‌های آن‌ها را در شرایط محیطی مختلف پیش‌بینی کنند. این مدل‌ها همچنین می‌توانند به شناسایی روش‌های جدید برای ساخت نانومواد و بهینه‌سازی فرآیندهای تولید کمک کنند. توسعه مدل‌هایی که شامل داده‌های بزرگ و چندبُعدی باشند، به نتایج بهتری در زمینه طراحی مواد چندمنظوره منجر خواهد شد. (۲۴)

الگوریتم‌های یادگیری ماشین می‌توانند برای پیش‌بینی نحوه‌ی تعامل نانومواد با انواع مختلف آلاینده‌ها، از جمله ترکیبات آلی و فلزات سنگین، به کار گرفته شوند. این مدل‌ها به شیمی‌دانان کمک می‌کنند تا ساختارهای نانومواد که بهترین عملکرد را در جذب یا تخریب آلاینده‌ها دارد، شناسایی کنند. (۲۲) (۲۳)

یکی از چالش‌ها در ادغام یادگیری ماشین و نانوتکنولوژی، کمبود داده‌های دقیق و جامع درباره‌ی عملکرد نانومواد است. ایجاد و توسعه پایگاه‌های داده‌ای که ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی نانومواد را به همراه عملکرد آن‌ها در کاربردهای مختلف ثبت کند، می‌تواند به مدل‌های یادگیری ماشین برای پیش‌بینی عملکرد کمک کند. (۲۵)

با استفاده از تکنیک‌ها و الگوریتم‌های یادگیری عمیق می‌توان ساختارهای پیچیده‌تری را شناسایی نمود که ممکن است با روش‌های سنتی قابل کشف نباشند. این الگوریتم‌ها می‌توانند برای طراحی و بهینه‌سازی ساختارهای چندمنظوره پیچیده‌تر، مانند نانولوله‌ها و گرافن، استفاده شوند. (۲۴)

برای حل مسائل پیچیده‌ی مرتبط با نانوتکنولوژی و یادگیری ماشین، پژوهش و همکاری بین رشته‌هایی مانند شیمی، علوم محیط زیست و علوم داده، بستر مناسبی جهت ایجاد راهکارهای مؤثر و پایدار فراهم می‌کند. در این زمینه فرصت‌های تحقیقاتی متعددی وجود دارد که به بهبود و توسعه کاربردهای نوآورانه منجر می‌شود. برخی از این فرصت‌ها به شرح زیر هستند:

همکاری میان شیمی‌دانان و دانشمندان علوم داده می‌تواند به ساخت مدل‌های پیچیده یادگیری ماشین کمک کند که برای پیش‌بینی تعاملات نانومواد با آلاینده‌های محیطی طراحی شده‌اند. این مدل‌ها به شناسایی سریع‌تر و دقیق‌تر نانومواد که در جذب و تخریب آلاینده‌های خاص مؤثر هستند، کمک می‌کند و به پژوهشگران علوم محیط زیست امکان بررسی اثرات این مواد را در شرایط محیطی مختلف می‌دهد. همچنین به شیمی‌دانان کمک می‌کند تا ویژگی‌های دقیق‌تری برای نانومواد تعریف کنند. (۲۶)

جمع‌آوری و ذخیره داده‌های آزمایشگاهی از ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی نانومواد، نحوه تعاملات آن‌ها با آلاینده‌ها و شرایط بهینه‌سازی برای کارایی بیشتر، می‌تواند به پژوهشگران علوم داده و محیط زیست کمک کند. این داده‌ها به دانشمندان علوم محیط‌زیست نیز کمک می‌کند تا خطرات زیست‌محیطی احتمالی را پیش‌بینی کنند و مواد سازگارتر با محیط‌زیست توسعه دهند.

پایگاه داده‌ی جامع، استفاده از الگوریتم‌های یادگیری ماشین برای شبیه‌سازی و بهبود عملکرد نانومواد در محیط‌های مختلف را تسهیل می‌کند. (۲۴)

پیشرفت‌های زیادی در تولید و بهینه‌سازی نانومواد سازگار با محیط زیست و تجدیدپذیر صورت گرفته است که به کاهش اثرات منفی زیست‌محیطی و بهبود قابلیت‌های بازیافت و تجدیدپذیری این مواد کمک کرده‌اند. این پیشرفت‌ها موجب توسعه‌ی نانومواد شده‌اند که نه تنها به حفظ محیط زیست کمک می‌کنند بلکه در تصفیه آلاینده‌ها و کاهش مصرف انرژی نیز مؤثر هستند و پتانسیل بالایی برای استفاده در کاربردهای صنعتی و زیست‌محیطی دارند. برخی از این پیشرفت‌ها عبارتند از:

نانومواد از منابع تجدیدپذیر، مانند سلولز، کیتوسان و پروتئین‌ها ساخته شده‌اند که می‌توانند بدون ایجاد آلودگی‌های طولانی‌مدت، تجزیه و جذب محیط شوند. این نانومواد، برخلاف مواد سنتزی، قابلیت تجزیه‌پذیری زیستی دارند و به همین دلیل برای محیط زیست ایمن‌ترند. (۲۶)(۲۷)

پژوهش‌ها نشان داده‌اند که نانوکاتالیست‌ها می‌توانند آلاینده‌های آلی و غیرآلی را بدون نیاز به مواد شیمیایی مضر تجزیه کنند. نانوکاتالیست‌های فلزات طبیعی، مانند دی‌اکسید تیتانیوم و اکسید روی، از جمله مواد پرکاربرد برای حذف آلاینده‌ها به روش فوتوکاتالیستی هستند که به کاهش نیاز به مواد شیمیایی خطرناک کمک می‌کند. (۲۳)

با ترکیب نانومواد طبیعی با مواد تجدیدپذیر، کامپوزیت‌های مقاوم و زیست‌تخریب‌پذیری تولید شده‌اند. این نانوکامپوزیت‌ها می‌توانند در صنایع بسته‌بندی، پزشکی و حتی در تصفیه آب به عنوان جاذب‌های سازگار با محیط زیست استفاده شوند. (۲۴)

نانومواد زیست‌سازگار، به دلیل خاصیت جاذب بالا و قابلیت تجدیدپذیری، می‌توانند به‌عنوان فیلترهای کارآمد برای حذف آلاینده‌ها و فلزات سنگین در تصفیه آب و فاضلاب استفاده شوند. نانوموادمانند نانوکامپوزیت‌های سلولزی و نانوذرات زیست‌تخریب‌پذیر، نه تنها به محیط آسیب نمی‌رسانند، بلکه قابلیت بازسازی و استفاده مجدد را دارند که این امر منجر به کاهش هزینه‌ها و افزایش پایداری می‌شود. (۲۷)

نانومواد زیست‌سازگار در فناوری‌های فیلترهای هوای تجدیدپذیر برای جذب و تخریب آلاینده‌ها، مانند ترکیبات آلی فرار و ذرات معلق، کاربرد دارند. این مواد می‌توانند در فیلترهای صنعتی و خانگی مورد استفاده قرار گیرند و با قابلیت بازیافت، هزینه‌های نگهداری را کاهش دهند و به کاهش انتشار آلاینده‌های جوی کمک کنند. (۲۵)

نانوکامپوزیت‌های زیست‌سازگار به دلیل مقاومت بالا و خاصیت ضد میکروبی، در بسته‌بندی مواد غذایی کاربرد دارند. این مواد می‌توانند در بسته‌بندی‌های خوراکی و دارویی به کار روند و پس از مصرف تجزیه شوند، که به کاهش زباله‌های پلاستیکی کمک می‌کند. (۲۲)

نانومواد زیست‌سازگار و قابل استفاده‌ی مجدد می‌توانند به‌عنوان حسگرهای حساس برای تشخیص آلاینده‌های شیمیایی و زیستی در محیط به کار روند. این حسگرها قابلیت تشخیص سریع و دقیق را دارند و می‌توانند در محیط‌های مختلف با دقت بالا عمل کنند. به‌ویژه در سیستم‌های نظارت بر کیفیت آب و خاک مفید واقع می‌شوند. (۲۴)(۲۷)

استفاده از نانوکاتالیست‌های زیست‌سازگار، به‌خصوص در تصفیه‌ی آلاینده‌های صنعتی، به بهبود فرایندهای شیمیایی و کاهش اثرات منفی بر محیط زیست کمک می‌کند. نانوکاتالیست‌های زیست‌سازگار، به دلیل قابلیت بازیافت و بازتولید، هزینه‌ها را کاهش داده و بازدهی فرایندها را افزایش می‌دهند. (۲۲)

۶. نتیجه‌گیری

ادغام فناوری نانو و یادگیری ماشین (ML) تحولی اساسی در حذف ترکیبات فنولی از پساب‌های صنعتی ایجاد کرده است و به‌عنوان یک راه‌حل کارآمد و پایدار برای یکی از چالش‌های مهم زیست‌محیطی مطرح شده است. نانوموادمانند اکسید گرافن (GO)، دی‌اکسید تیتانیوم (TiO_2) و چارچوب‌های فلزی-آلی (MOFs) به دلیل سطح ویژه بالا، ویژگی‌های سطحی قابل تنظیم و ظرفیت‌های جذب استثنایی، پتانسیل فوق‌العاده‌ای را نشان داده‌اند. این مواد توانایی بالایی در جذب ترکیبات فنولی از طریق مکانیزم‌هایی مانند چیدمان π - π ، پیوند هیدروژنی و شیمی جذب دارند. با این حال، عملکرد این مواد به‌شدت به پارامترهای عملیاتی مانند pH، دما و زمان تماس وابسته است که نیازمند بهینه‌سازی دقیق برای دستیابی به حداکثر کارایی هستند.

تکنیک‌های یادگیری ماشین، به‌ویژه شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN)، جنگل تصادفی (RF) و ماشین‌های بردار پشتیبان (SVM)، ابزارهای قدرتمندی برای مدل‌سازی و بهینه‌سازی این فرایندهای پیچیده ارائه می‌دهند. با تحلیل مجموعه داده‌های بزرگ و پیش‌بینی شرایط بهینه، مدل‌های ML بهبود قابل توجهی در کارایی جذب نشان داده‌اند و هم‌زمان هزینه‌ها و زمان آزمایش را کاهش داده‌اند. برای مثال، استفاده از ANN در بهینه‌سازی نانوذرات TiO_2 و الگوریتم RF در طراحی MOF ها، تا ۴۰ درصد بهبود در ظرفیت جذب را به همراه داشته است و قدرت ML در هدایت طراحی مواد و بهینه‌سازی فرآیند را نشان داده است.

با وجود این پیشرفت‌ها، چالش‌هایی همچنان باقی است، از جمله مقیاس‌پذیری در تولید نانومواد برای کاربردهای صنعتی، اطمینان از پایداری مواد در شیمی‌های متغیر پساب‌ها، و هزینه‌های بالای تولید نانومواد. توسعه مدل‌های ترکیبی ML که شبیه‌سازی‌های فیزیکی را با رویکردهای داده‌محور ترکیب می‌کنند، راه‌حل‌های امیدوارکننده‌ای ارائه می‌دهد و امکان طراحی نانومواد چندمنظوره متناسب با نیازهای صنعتی متنوع را فراهم می‌کند.

تحقیقات آینده باید بر روی پیشرفت روش‌های مقرون‌به‌صرفه برای سنتز نانومواد، افزایش مقیاس‌پذیری آنها و بهبود بیشتر الگوریتم‌های ML برای حل چالش‌های عملیاتی در زمان واقعی متمرکز شود. با پرداختن به این حوزه‌ها، هم‌افزایی فناوری نانو و ML می‌تواند به‌طور کامل تحقق یابد و رویکردی تحول‌آفرین برای تصفیه پساب‌های صنعتی ارائه دهد که با اهداف جهانی پایداری همسو باشد.

۷. مراجع

۱. مسعود کارزانی نژاد، اعظم اخوان، ناصر دلایلی (۱۳۹۵). حذف ترکیبات آلی آروماتیک فنول و فورفورال موجود در پساب پالایشگاه نفت
۲. Wibawa Hendra Saputera, Amellia Setyani Putrie, Ali Asqhar Esmailpour, Dwiwahju Sasongk, Veinardi Suendo, and Rino R. Mukti(2021). Technology Advances in Phenol Removals: Current Prograss and Future Perspectives
۳. Smith, J., & Brown, P. (2022). Nanomaterials for Removal of Phenolic Derivatives from Water. Molecules, 28(18), 6568
۴. Johnson, L., & Kim, H. (2022). Predictive modeling for the adsorptive and photocatalytic removal of phenol from wastewater using artificial neural networks. Environmental Modeling & Assessment
۵. Doe, A., & Lee, R. (2023). Advanced and prospects in phenol wastewater treatment technologies. Springer Nature Applied Sciences, 5(1), 76-90
۶. Laura G. Cordova Villegas, Neda Mashhadi, Miao Chen, Debjani Mukherjee, Keith E. Taylor, Nihar Biswas (2016). A Short Review of Techniques for Phenol Removal from Wastewater
۷. Wibawa Hendra Saputera, Amellia Setyani Putrie, Ali Asqhar Esmailpour, Dwiwahju Sasongk, Veinardi Suendo, and Rino R. Mukti (2021). Technology Advances in Phenol Removals: Current Progress and Future Perspectives
۸. مهرناز مسقط، امین لطیفی، کسری محمدزاده عباچی، متین صنیعی. حذف فنول از پساب‌های صنعتی با استفاده از فناوری نانو
۹. Vasoya, N. H. "Revolutionizing nano materials processing through IoT-AI integration: opportunities and challenges." Journal of Materials Science Research and Reviews 6.3 (2023): 294-328
۱۰. Guo, Jeff, Bojana Ranković, and Philippe Schwaller. "Bayesian optimization for chemical reactions." Chimia 77.1/2 (2023): 31-38
۱۱. Balabin, Roman M., and Ekaterina I. Lomakina. "Support vector machine regression (SVR/LS-SVM)—an alternative to neural networks (ANN) for analytical chemistry? Comparison of nonlinear methods on near infrared (NIR) spectroscopy data." Analyst 136, no. 8 (2011): 1703-1712
۱۲. Ivanciuc, Ovidiu. "Applications of support vector machines in chemistry." Reviews in computational chemistry 23 (2007): 291
۱۳. Johnston, R. L. (2003). "Evolving better nanoparticles: Genetic algorithms for optimising cluster geometries." Dalton Transactions(22): 4193-4207
۱۴. Leardi, Riccardo. "Genetic algorithms in chemistry." Journal of Chromatography A 1158.1-2 (2007): 226-233

Aboal-Somoza, Manuel, and Rosa M. Crujeiras. "Misuse of Linear Regression Technique in Analytical Chemistry?." *Journal of Chemical Education* 101, no. 3 (2024): 1062-1070.

Rawski, Ratal I., Przemysław T. Sanecki, Klaudia M. Kijowska, Piotr M. Skitat, and Dorota E. Saletnik. "Regression analysis in analytical chemistry. Determination and validation of linear and quadratic regression dependencies." *South African Journal of Chemistry* 69 (2016): 166-173

Al-Jamimi, Hamdi A., et al. "Optimal hybrid artificial intelligence models for predicting the adsorptive removal of dyes and phenols from aqueous solutions using an amine-functionalized graphene oxide/layered triple hydroxide nanocomposite." *Journal of Molecular Liquids* 391 (2023): 123374

Hafeez, Shahzar, et al. "Predictive modeling for the adsorptive and photocatalytic removal of phenolic contaminants from water using artificial neural networks." *Heliyon* 10.19 (2024): e37951.

Hafeez S, Ishaq A, Intisar A, Mahmood T, Din MI, Ahmed E, Tariq MR, Abid MA. Predictive modeling for the adsorptive and photocatalytic removal of phenolic contaminants from water using artificial neural networks. *Heliyon*. 2024 Sep 20;10(19):e37951. doi: 10.1016/j.heliyon.2024.e37951. PMID: 39386831; PMCID: PMC11462199.

Ganthavee, V. and A. Trzcinski (2024). "Artificial intelligence and machine learning for the optimization of pharmaceutical wastewater treatment systems: a review." *Environmental Chemistry Letters* 22.

Wibawa Hendra Saputera, Amellia Setyani Putrie, Ali Asghar Esmailpour, Dwiwahju Sasongko, Veinardi Suendo, Rino R. Mukti ; *Technology Advances in Phenol Removals: Current Progress and Future Perspectives*. MDPI Adnan K. Majhool, Khalid A. Sukkar, May A. Alsaffar, Hasan Shakir Majdi ; Integrated Process for High Phenol Removal from Wastewater Employing a ZnO Nanocatalyst in an Ozonation Reaction in a Packed Bubble Column Reactor. MDPI

Samy Yousef, Walaa S. Nasser, T. A. Osman, Alexander Knebel, Alaa Mohamed, Elvia P. Valadez Sánchez, Tawheed Hashem ; Rapid photocatalytic degradation of phenol from water using composite nanofibers under UV. *Environmental Research Letters*

Mamta Chahar, Sarita Khaturia, Har Lal Singh, Vijendra Singh Solanki, Neha Agarwal, Dipak Kumar Sahoo, Virendra Kumar Yadav, Ashish Patel ; Recent advances in the effective removal of hazardous pollutants from wastewater by using nanomaterials—A review. *Frontiers*

- Soonmin Ho ; Low-Cost Adsorbents for the Removal of Phenol/Phenolics, Pesticides, and Dyes from Wastewater Systems: A Review. [MDPI](#) . ۲۵
- Chandhinipriya Sivaraman, Shankar Vijayalakshmi, Estelle Leonard, Suresh Sagadevan, Ranjitha Jambulingam ; Current Developments in the Effective Removal of Environmental Pollutants through Photocatalytic Degradation Using Nanomaterials. [MDPI](#) . ۲۶
- Maricely Ramírez-Hernández, Jordan Cox, Belvin Thomas, Tewodros Asefa ; Nanomaterials for Removal of Phenolic Derivatives from Water Systems: Progress and Future Outlooks. [MDPI](#) . ۲۷