

# مدل‌سازی پیش‌بینی پارامترهای شار و گرفتگی غشاهای نانوکامپوزیت اولترافیلتراسیون PVDF عامل‌دار شده با نانولوله‌های کربنی با استفاده از سیستم‌های شبکه‌های هوشمند

مهران مفخمی مهرآبادی، علیرضا آقایی\* و مازیار صهبا یغمایی

پژوهشکده سرامیک، پژوهشگاه مواد و انرژی، کرج، ایران

تاریخ دریافت: ۹۶/۹/۲۳ تاریخ پذیرش: ۹۷/۴/۳۱

## چکیده

در این تحقیق عملکرد و خواص ضد گرفتگی و شار غشاهای نانوکامپوزیت پلی وینیلیدن فلوراید (PVDF) با غلظت‌های ۱۵ و ۱۸٪ وزنی که با نانولوله‌های کربنی عامل‌دار شده با گروه‌های اسیدی، بازی و آمین مخلوط شده و با روش وارونگی فازی و حلال نرمال متیل پیرولیدون (NMP) در آزمایشگاه ساخته شده، مورد بررسی قرار گرفت. همچنین تست‌های شار، گرفتگی، زاویه تماس، تخلخل و نرخ پس‌دهی پروتئین انجام شده است. با استفاده از نتایج تست‌های تجربی، مدل‌سازی پارامترهای شار و گرفتگی براساس متغیرهای ورودی که شامل درصد نانوذره، درصد پلیمر، تخلخل و زاویه تماس هستند؛ انجام شد. در این مدل از ۴ سیستم هوشمند شبکه عصبی چند لایه، شبکه عصبی با مدار شعاعی، کمینه مربعات بردار پشتیبان و سیستم هیبریدی تطبیقی عصبی-فازی و ۳ الگوریتم بهینه‌سازی ژنتیک، شبیه‌سازی تبرییدی و ازدحام ذرات استفاده شده است. نتایج نشان داد که برای هر دو پارامتر شار و گرفتگی، بهترین مدل با توجه به ضریب همبستگی بالا، مدل‌های شبکه عصبی با مدار شعاعی و سیستم هیبریدی تطبیقی عصبی-فازی هستند. در بخش بعدی مدل‌سازی برای به‌دست آوردن مقادیر بهینه (کمترین گرفتگی و ماکزیمم شار) از بهترین مدل‌های ساخته شده برای هر دو خروجی استفاده شد. سپس از الگوریتم ترکیبی از الگوریتم ژنتیک و ازدحام ذرات مقادیر بهینه به‌دست آمد. سپس با استفاده از نتایج بهینه‌سازی برای هر نوع درصد پلیمر (۱۵٪ و ۱۸٪)، غشاها در آزمایشگاه ساخته شده و سپس تست‌های شار، گرفتگی، زاویه تماس و تخلخل انجام شده و نتایج آن با نتایج مدل مقایسه گردید. نتایج نشان داد که غشای نانوکامپوزیت ۰/۰۷٪ وزنی نانولوله کربنی تک دیواره عامل‌دار شده با گروه هیدروکسیل و غشای نانوکامپوزیت ۰/۱۷٪ وزنی نانولوله کربنی تک دیواره عامل‌دار شده با گروه هیدروکسیل به‌ترتیب بهترین عملکرد را با پلیمرهای ۱۵ و ۱۸٪ وزنی PVDF داشته است.

**کلمات کلیدی:** غشای نانوکامپوزیت، نانولوله‌های کربنی، مدل‌سازی، شبکه‌های هوشمند، الگوریتم

بهینه‌سازی

\*مسئول مکاتبات  
آدرس الکترونیکی: a-ghaei@merc.ac.ir  
شناسه دیجیتال: (DOI: 10.22078/pr.2018.3174.2459)

## مقدمه

پیش‌بینی شار و گرفتگی غشاهای مختلف استفاده شده‌اند. Delgrand و همکارانش [۱] گرفتگی غشاء در طی فرآیندهای میکروفیلتراسیون و اولترافیلتراسیون ترکیبات کلئیدی، پروتئین‌ها و همچنین تصفیه آب‌های شهری و صنعتی را بررسی نمودند که شبکه عصبی استفاده شده مقادیر گرفتگی را با تقریب خوبی مدل نمود. رضوی و همکارانش [۲-۴] مدل‌سازی دینامیکی اولترافیلتراسیون جریان عرضی شیر به منظور پیشگویی شار، مقاومت هیدرولیکی کل و دفع ترکیبات شیر (پروتئین، چربی، لاکتوز، خاکستر و مواد جامد کل) به‌عنوان تابعی از فشار و زمان فرآیند بررسی نمودند که نتایج مدل‌سازی با دقت خوبی با استفاده از تنها یک لایه مخفی و تعداد کمی داده‌های آموزش مقادیر شار، مقاومت هیدرولیکی و نرخ پس‌دهی را پیش‌بینی نمود. در مطالعه دیگری توسط Teodosiu و همکارانش [۵]، پیشگویی شار در طی اولترافیلتراسیون پساب صنعتی انجام گرفت که براساس داده‌های آزمایشگاهی شبکه‌های عصبی مصنوعی به‌طور موفقیت‌آمیزی برای پیش‌بینی شار در غشاهای فیبر توخالی به‌عنوان تابعی از زمان استفاده شد. همچنین Domier و همکارانش [۶] در مطالعه دیگری پیشگویی گرفتگی غشای میکروفیلتر جریان عرضی محلول‌های صمغ و شربت قند را بررسی نمودند. در این تحقیق اثرهای فشار اعمالی و سرعت خوراک با زمان فیلتراسیون تحت شرایط دما و غلظت خوراک ثابت بررسی شده است که نتایج موفقیت‌آمیزی داشته‌اند. در مطالعه دیگری که توسط موسوی و همکاران [۷] بررسی شد، نشان داد که مدل شبکه عصبی مصنوعی یکی از بهترین مدل‌ها جهت تصفیه آب در فرآیند نانوفیلتراسیون بوده و مدل پیش‌بینی خوبی برای شار و نرخ پس‌دهی در فرآیند تصفیه داشته است.

فرآیندهای غشایی در سال‌های اخیر به‌عنوان روش‌هایی کارآمد برای جداسازی، خالص‌سازی و تصفیه مطرح شده‌اند. از آنجایی که غشاهای آب‌دوست مقاومت به گرفتگی بالاتری نسبت به مواد کاملاً آب‌گریز دارند، افزایش آب‌دوستی غشاهای پلیمری یکی از راهکارهای اساسی برای اصلاح غشاها است. روش‌های مختلفی برای افزایش آب‌دوستی غشاهای پلیمری گزارش شده است. از میان روش‌های اصلاح غشاهای پلیمری، استفاده از نانو ساختارهای معدنی [۱] در ساختار غشاها به‌دلیل کارایی بالا و سهولت تطبیق آن با روش‌های متداول ساخت غشاء مورد توجه قرار گرفته‌اند. نانولوله‌های کربنی به‌دلیل ویژگی‌های مطلوبی از قبیل چگالی جرم کم، انعطاف‌پذیری زیاد و برهم‌کنش مؤثر بین پیوندهای نانولوله‌های کربنی و گروه‌های عاملی دارای ویژگی‌های مناسب برای بهبود عملکرد غشاهای پلیمری بوده و مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است [۲ و ۳]. با توجه به اینکه متغیرهای زیادی در مدل‌سازی غشاها بر روی هدف اصلی غشا که همان افزایش شار، کاهش گرفتگی و افزایش راندمان جداسازی است، تاثیر می‌گذارند و اینکه رفتار متغیرها لزوماً خطی نبوده و به‌صورت غیر خطی هستند و نیز این متغیرها ممکن است با هم برهم‌کنش داشته و پاسخ‌های این متغیرها متفاوت هستند، لذا از مدل‌سازی بر پایه هوش مصنوعی در این تحقیق استفاده شد که از ۴ سیستم هوشمند شبکه عصبی چند لایه (MLP)<sup>۱</sup>، شبکه عصبی با مدار شعاعی (RBF)<sup>۲</sup>، کمینه مربعات بردار پشتیبان (LSSVM)<sup>۳</sup>، سیستم هیبریدی تطبیقی عصبی-فازی (ANFIS)<sup>۴</sup> و ۳ الگوریتم بهینه‌سازی ژنتیک (GA)<sup>۵</sup>، ازدحام ذرات (PSO)<sup>۶</sup> و شبیه‌سازی تیریدی (SA)<sup>۷</sup> برای مدل‌سازی استفاده گردید. شبکه‌های هوشمند به‌خصوص شبکه‌های عصبی مصنوعی به‌طور موفقیت‌آمیزی به منظور مدل‌سازی

1. Multiple Layer Perceptron
2. Radial Basis Function
3. Least Squares Support Vector Machine
4. Adaptive Neuro Fuzzy Inference System
5. Generic Algorithm
6. Particle Swarm Optimization
7. Simulated Annealing

و نوع نانولوله کربنی عامل‌دار برای هر درصد پلیمر که بهترین عملکرد را با پلیمر پلی وینیلیدن فلوراید داشته باشد، به‌دست آمد.

تهیه غشاء نانو کامپوزیت: برای ساخت غشاهای اولترافیلتراسیون به روش وارونگی فاز، مقدار مشخصی از نانولوله‌های کربنی مختلف براساس تجربیات و مطالعات قبلی (۰/۱، ۰/۲، ۰/۳، ۰/۵) وزنی نسبت به پلیمر (۱۲ و ۱۱) به‌مدت ۳۰ min در حلال نرمال متیل پیرولیدون با استفاده از حمام اولتراسونیک توزیع و سپس پلیمر پلی وینیلیدن فلوراید با ۱۵٪ وزنی در محلول حل می‌گردد. سپس عامل حفره زای پلی وینیل پیرولیدون به مقدار ۱٪ (نسبت به وزن پلیمر) به محلول اضافه می‌گردد. پس از هم‌زدن محلول به‌مدت ۲۴ hr و ایجاد محلول همگن، محلول حاصل به‌مدت ۶ hr در خشک‌کن در دمای ۵۵°C قرار می‌گیرد تا حباب زدایی می‌شود. پس از عبور محلول از بستر شیشه‌ای صاف و رسیدن به دمای محیط، لایه غشا توسط فیلم کش با ضخامت ۱۵۰ μm و با سرعت ثابت بر روی بستر کشیده شده و بلافاصله در حمام انعقاد آب غوطه ور می‌گردد. بعد از حدود ۱۰ min، غشا از حمام آب در آورده شده و در ظرف حاوی آب مقطر نگهداری می‌شود [۱۳-۱۵].

### مدل‌سازی با شبکه عصبی مصنوعی برای ایجاد مدل پیش‌بینی کننده گرفتگی (FRR) ۱ و شار

#### مدل‌سازی پارامتر گرفتگی

کل داده‌های به‌دست آمده از تست‌های مختلف برای شبیه‌سازی پارامتر گرفتگی در آزمایشگاه در جدول ۱ آورده شده است.

همچنین Bowen و همکارانش [۸] شبکه‌های عصبی برای مدل‌سازی میزان شار و زمان فیلتراسیون برای محلول سوسپانسیون سیلیکا تحت شرایط عملیاتی مختلف pH، استحکام یونی و فشار برای محلول خوراک اتانول و اسید استیک را مطالعه نمودند و در اکثر موارد توافق خوبی بین نتایج مدل و نتایج تجربی به‌دست آمده است. صالحی و همکارانش [۹ و ۱۰] مدل‌های شبکه عصبی مصنوعی و سیستم هیبریدی عصبی-فازی را برای پیشگویی شار و نرخ دفع نمک طعام از محلول آب نمک در فرآیند نانوفیلتراسیون بررسی نمودند که از غلظت‌های خوراک، دما و فشارهای مختلف به‌عنوان متغیرهای ورودی استفاده گردید که مدل شبکه عصبی با ۸ نرون و یک لایه مخفی پیشگویی خوبی برای شار و نرخ دفع نسبت به نتایج تجربی نشان داد. همچنین روش هیبرید (ترکیبی از میانگین مربعات و پس انتشار خطا) به‌عنوان روش آموزش در روش ANFIS استفاده گردید که این مدل نیز با دقت خوبی میزان شار و نرخ دفع را با کارایی بالایی نسبت به نتایج تجربی نشان داد. در تحقیق حاضر مدل‌سازی غشاهای نانوکامپوزیت اولترافیلتراسیون پلی وینیلیدن فلوراید با استفاده از نانولوله‌های کربنی عامل‌دار (چند دیواره اسیدی، چند دیواره و تک دیواره بازی و آمینی) که در آزمایشگاه ساخته شده و تست‌های مختلف شار، گرفتگی، زاویه تماس و تخلخل انجام گرفت. سپس با استفاده از ۴ نوع شبکه‌های هوشمند مدل‌سازی انجام گردید و مقایسه بین مدل‌ها انجام و بهترین مدل انتخاب گردید. سپس با استفاده از الگوریتم‌های ترکیبی ژنتیک و ازدحام ذرات با توجه به هدف تحقیق که بیشترین شار و کمترین گرفتگی هستند؛ بهینه‌سازی پارامترها انجام و سپس با استفاده از پارامترهای بهینه، مجدداً غشاها در آزمایشگاه ساخته شده و مقایسه بین مدل و نتایج تجربی صورت گرفت. سپس خطاها محاسبه گردید. با توجه به در نظر گرفتن مینیمم خطا، درصد بهینه

1. Flux Recovery Ratio

جدول ۱ داده‌های مورد استفاده برای شبیه‌سازی پارامتر گرفتگی

نوع نانولوله کربنی عامل‌دار	پلیمر (%)	نانولوله کربنی عامل‌دار (%)	زاویه تماس (°)	تخلخل (%)	گرفتگی (%)
نانولوله کربنی چند دیواره اسپیدی	۱۵	۰	۸۷/۲	۶۳	۳۹
	۱۵	۰/۰۵	۸۴/۳۳	۷۲	۴۱
	۱۵	۰/۱	۷۴/۱۷	۷۵	۴۸
	۱۵	۰/۲	۷۵/۳۷	۸۰	۵۲
	۱۵	۰/۳	۷۳/۳۷	۸۱	۴۰
	۱۵	۰/۵	۷۳/۱۳	۷۶	۴۰
	۱۸	۰	۹۳/۷۳	۴۹	۳۴
	۱۸	۰/۰۵	۸۷/۶۳	۶۳	۴۲
	۱۸	۰/۱	۹۰/۲۳	۶۳	۵۵
	۱۸	۰/۲	۸۱/۹۷	۷۲	۶۲
	۱۸	۰/۳	۸۲/۶	۶۸	۵۸
	۱۸	۰/۵	۸۰/۲	۶۶	۵۵
نانولوله کربنی چند دیواره بازی	۱۵	۰	۸۷/۲	۶۳	۳۹
	۱۵	۰/۰۵	۸۴/۳۷	۶۷	۷۴
	۱۵	۰/۱	۷۹/۹	۷۲	۷۰
	۱۵	۰/۲	۸۲/۲۳	۷۳	۶۹
	۱۵	۰/۳	۷۴/۵۷	۷۰	۵۸
	۱۵	۰/۵	۷۱/۷۷	۶۹	۶۰
	۱۸	۰	۹۳/۷۳	۴۹	۳۴
	۱۸	۰/۰۵	۹۰/۸۳	۶۶	۵۳
	۱۸	۰/۱	۸۹/۱۳	۶۷	۶۴
	۱۸	۰/۲	۸۵/۴۷	۶۹	۷۰
	۱۸	۰/۳	۸۳/۱۷	۶۷	۶۴
	۱۸	۰/۵	۸۴/۱۳	۶۵	۵۵
نانولوله کربنی تک دیواره بازی	۱۵	۰	۸۷/۲	۶۳	۳۹
	۱۵	۰/۰۵	۸۵	۷۱	۷۲
	۱۵	۰/۱	۸۴	۷۳	۷۴
	۱۵	۰/۲	۷۹/۸۳	۷۷	۷۰
	۱۵	۰/۳	۷۹/۶	۷۴	۶۹
	۱۵	۰/۵	۸۰	۷۳	۷۰
	۱۸	۰	۹۳/۷۳	۴۹	۳۴
	۱۸	۰/۰۵	۸۱/۶۳	۶۷	۵۸
	۱۸	۰/۱	۸۱/۴	۶۹	۷۲
	۱۸	۰/۲	۴۳/۸۱	۶۹	۷۳
	۱۸	۰/۳	۸۰/۶	۶۴	۶۸
	۱۸	۰/۵	۷۹/۶	۶۲	۶۵
نانولوله کربنی آمیبی	۱۵	۰	۸۷/۲	۶۳	۳۹
	۱۵	۰/۰۵	۷۹/۷۳	۷۳	۴۱
	۱۵	۰/۱	۷۹/۳۷	۷۴	۵۱
	۱۵	۰/۲	۷۸/۱	۷۹	۵۸
	۱۵	۰/۳	۷۴/۵۷	۸۰	۴۳
	۱۵	۰/۵	۷۱/۵۳	۷۵	۴۵
	۱۸	۰	۹۳/۷۳	۴۹	۳۴
	۱۸	۰/۰۵	۸۷/۳۷	۶۳	۴۴
	۱۸	۰/۱	۸۴/۱۳	۶۵	۵۷
	۱۸	۰/۲	۸۳/۶	۷۰	۶۱
	۱۸	۰/۳	۸۱/۲۷	۶۹	۵۷
	۱۸	۰/۵	۷۹/۷۳	۶۷	۵۳

شبکه‌های ساخته شده، مقدار بهینه برای تعداد نرون‌های لایه پنهان برابر با ۱۵ به دست آمد. پس از ساخته شدن شبکه با استفاده مجموعه داده‌های اختصاص داده شده برای آموزش، داده‌های تست نیز به شبکه ارائه شد. عملکرد شبکه MLP ساخته شده در شکل‌های ۱ و ۲ و همچنین پارامترهای آماری مرتبط در جدول ۲ ارائه شده است.

#### RBF

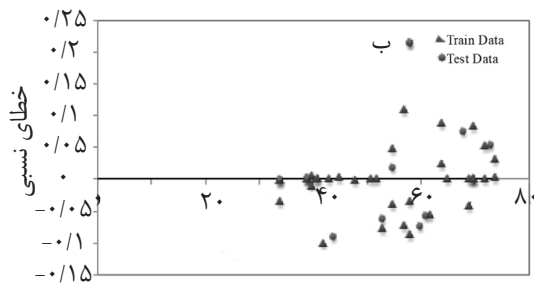
در این مرحله برای شبیه‌سازی داده‌های واقعی گرفتگی از شبکه عصبی پایه شعاعی استفاده شده است. این نوع شبکه دارای ساختار ثابت سه لایه‌ای است. همانند شبکه MLP، این شبکه دارای ۵ نرون در لایه ورودی و ۱ نرون در لایه خروجی است. در این مقاله، شبکه RBF با استفاده از نرم‌افزار متلب پیاده‌سازی شده است. در پیاده‌سازی نرم‌افزار متلب، این شبکه دارای دو پارامتر تنظیم به نام‌های spread و بیشینه مقدار نرون‌ها است. مقدار بهینه این دو پارامتر منجر به بهترین عملکرد این شبکه می‌شود. برای یافتن مقادیر بهینه از الگوریتم تکاملی ژنتیک بهره گرفته شده است. برای این منظور ابتدا ۵۰ راه حل تصادفی به‌عنوان جمعیت اولیه تعیین شدند. سپس با استفاده از یک تابع سنجش عملکرد (مجذور کمینه مربعات خطا) مورد بررسی قرار گرفتند و به ترتیب عملکرد رتبه‌بندی شدند. سپس شبکه عصبی با استفاده از ابزار خود (تقاطع و جهش) طی ۳۰ نسل، جواب بهینه را حاصل کرد. به این ترتیب پس از بررسی هوشمند و هدفمند تعداد زیادی راه حل، مقدار بهینه برای پارامترهای spread و بیشینه مقدار نرون‌ها به ترتیب برابر با ۰/۵ و ۳۵ به دست آمد. پس از ساخته شدن شبکه با استفاده مجموعه داده‌های اختصاص داده شده برای آموزش، داده‌های تست نیز به شبکه ارائه شد. عملکرد شبکه RBF ساخته شده در شکل‌های ۳ و ۴ و همچنین پارامترهای آماری مرتبط در جدول ۳ ارائه شده است.

در این تحقیق ۸۰٪ داده‌های بخش مدل‌سازی برای آموزش و ۲۰٪ برای تست شبکه به صورت تصادفی انتخاب شده است. با توجه به اینکه ۴ نوع نانولوله کربنی عامل‌دار مختلف (چند دیواره اسیدی، چند دیواره و تک‌دیواره بازی و آمینی) در ساخت غشاها استفاده گردید و نوع نانولوله را نمی‌توان برای نرم‌افزار متلب تعریف نمود، لذا نوع نانولوله‌ها در مدل‌سازی یکسان در نظر گرفته شد. همان‌طور که مشخص است تعداد داده‌های بخش آموزش شبکه از موارد دیگر بیشتر است، این بدان دلیل است که شبکه براساس این داده‌ها ساخته می‌شود و باید معرف کل داده‌های مورد استفاده باشد. مرحله بعدی در آماده‌سازی داده‌ها نرمال کردن آن‌ها است. پیش از ورود داده‌ها به شبکه هوشمند، تمام داده‌ها در بازه [۱-، ۱] نرمال شدند. همسان‌سازی محدوده داده‌ها باعث بهبود عملکرد شبکه‌های هوشمند می‌شود. مرحله بعدی، انتخاب ورودی مناسب برای شبکه هوشمند است. این کار تأثیر زیادی در ساخت شبکه دارد. در حالت کلی ورودی‌هایی که با خروجی ضریب همبستگی بالاتری دارند، باعث ایجاد تخمین‌های بهتری می‌شوند.

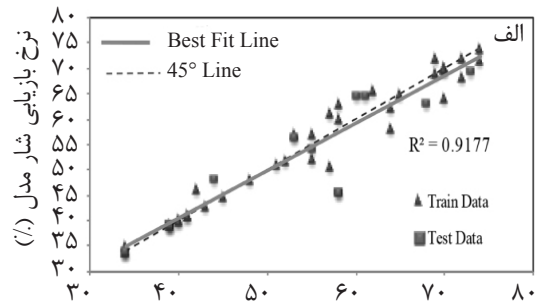
#### MLP

در این مرحله برای شبیه‌سازی از یک شبکه عصبی سه لایه استفاده شد. این شبکه عصبی سه لایه، در لایه ورودی شامل ۵ نرون (درصد پلیمر، درصد نانوذره، زاویه تماس، تخلخل و نرخ پس‌دهی پروتئین) و در لایه خروجی شامل ۱ نرون است. برای هر دو لایه پنهان و خروجی از تابع فعال‌سازی سیگموئید استفاده شد. تابع هدف نیز کمینه مربعات خطا (RMSE)<sup>۱</sup> در نظر گرفته شد. برای یافتن تعداد بهینه نرون‌های لایه پنهان، شبکه‌های عصبی متعددی ساخته شد و عملکرد آن‌ها مورد بررسی قرار گرفت. برای این کار، برای تعداد نرون‌های ۲ تا ۳۰ عدد در لایه پنهان ساخته شد و در نهایت پس از مقایسه نتایج حاصل از

1. Root Mean Square Error

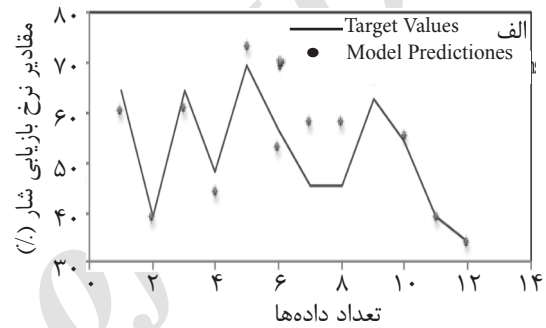
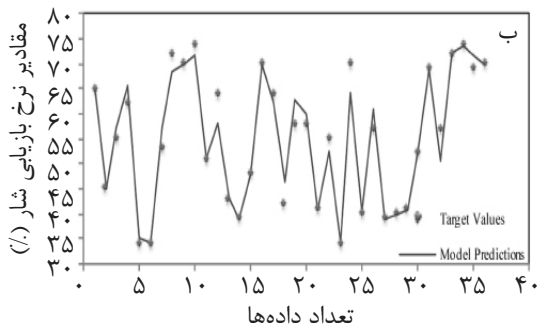


نرخ بازیابی شار تجربی (%)



نرخ بازیابی شار تجربی (%)

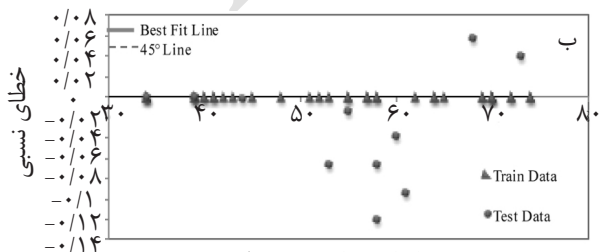
شکل ۱ الف) نمودار متقاطع نشان‌دهنده ضریب همبستگی بین مقادیر پیش‌بینی شده و داده‌های واقعی توسط شبکه MLP برای داده‌های آموزش و تست. و ب) نمودار نشان‌دهنده خطای نسبی برای داده‌های آموزش و تست مربوط به شبکه طراحی شده MLP



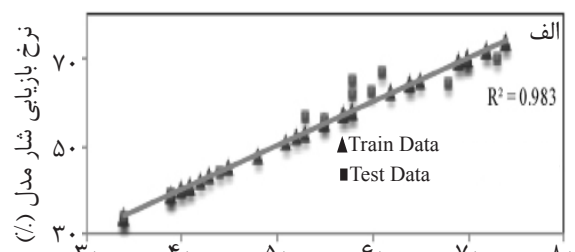
شکل ۲ مقایسه بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه MLP با داده‌های واقعی الف) داده‌های آموزش و ب) داده‌های تست

جدول ۲ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی MLP

تعداد داده‌ها	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبی متوسط	ضریب همبستگی	
۳۶	۲/۵۸۷۵۲۷	۰/۰۴۴۹۶	۲/۸۰۷۰۲۵	۰/۹۶۰۵۹	داده آموزش
۱۲	۵/۸۱۵۵۳۶	۰/۱۰۱۷۹۶	۷/۱۴۹۲۳۶	۰/۷۷۵۵۶۱	داده تست
۴۸	۳/۶۷۱۰۴۷	۰/۰۶۳۷۴۱	۳/۸۹۲۵۷۷	۰/۹۱۷۶۶۲	کل داده‌ها

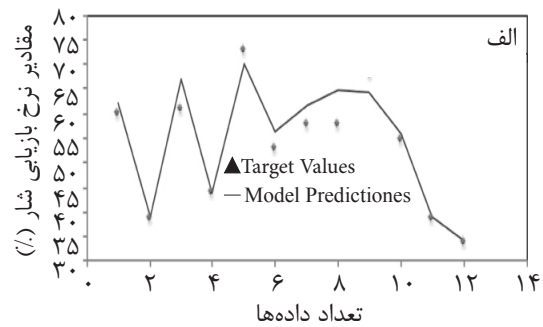
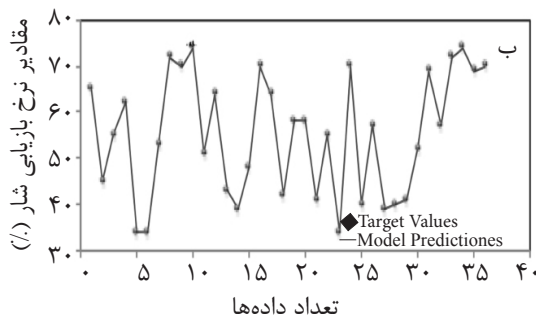


نرخ بازیابی شار تجربی (%)



نرخ بازیابی شار تجربی (%)

شکل ۳ الف) نمودار متقاطع نشان‌دهنده ضریب همبستگی بین داده‌های واقعی و مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه RBF برای داده‌های آموزش و تست. و ب) نمودار نشان‌دهنده خطای نسبی برای داده‌های آموزش و تست مربوط به شبکه طراحی شده RBF.



شکل ۴ مقایسه بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه RBF با داده‌های واقعی RBF (الف) داده‌های آموزش و (ب) داده‌های تست.

جدول ۳ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی RBF.

تعداد داده‌ها	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبی متوسط	ضریب همبستگی	
۳۶	$7/87 \times 10^{-14}$	$1/61 \times 10^{-15}$	$23 \times 10^{-14}$	۱	داده آموزش
۱۲	۳/۴۰۳۹۳۷	۰/۰۵۳۱۵۶	۴/۱۷۱۷۴۴	۰/۹۳۲۴۶۴	داده تست
۴۸	۱/۷۰۱۹۶۸	۰/۰۲۸۰۲۶	۱/۰۴۲۹۳۶	۰/۹۸۲۹۵۶	کل داده‌ها

گفته می‌شود. همچنین روش دومی که برای آموزش وجود دارد استفاده از الگوریتم بهینه‌سازی به نام الگوریتم بهینه‌سازی ازدحام ذرات است. در این روش ساختار سیستم استنتاج فازی ابتدایی به‌عنوان یک مسئله بهینه‌سازی تلقی می‌شود. اما در تحقیق حاضر از یک روش جدید که ترکیب دو روش یاد شده است برای آموزش استفاده شده است. این روش دارای ۵۰ مرحله است که هر مرحله آن ترکیبی از ۵ مرحله روش هیبرید و ۱ مرحله روش PSO است. هر مرحله از روش هیبرید دارای ۱۰ اگر-آن‌گاه و هر مرحله از روش PSO دارای ۲۰۰ اگر-آن‌گاه است. پس از ساخته شدن شبکه با استفاده از مجموعه داده‌های اختصاص داده شده برای آموزش، داده‌های تست نیز به شبکه ارائه شد. عملکرد شبکه LSSVM ساخته شده در شکل‌های ۵ و ۶ و همچنین پارامترهای آماری مرتبط در جدول ۴ ارائه شده است.

#### مقایسه مدل‌ها برای پارامتر گرفتگی

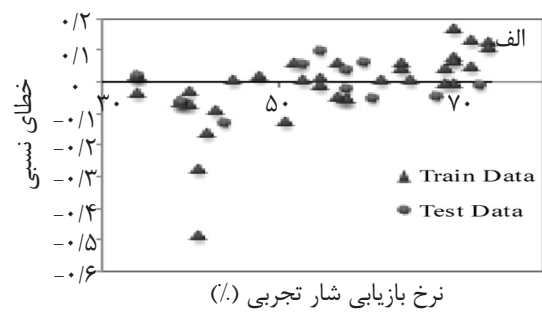
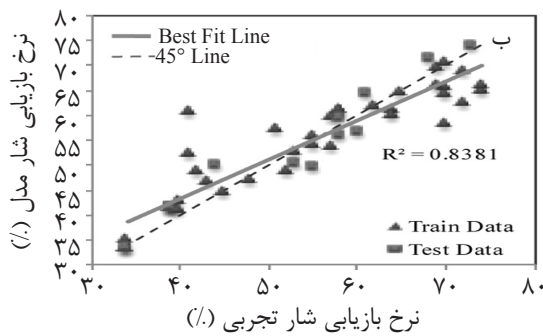
نتایج کلی مدل‌سازی پارامتر گرفتگی در جدول ۶ ارائه شده است. مقایسه مدل‌های مختلف در شکل ۹ آورده شده است.

#### LSSVM

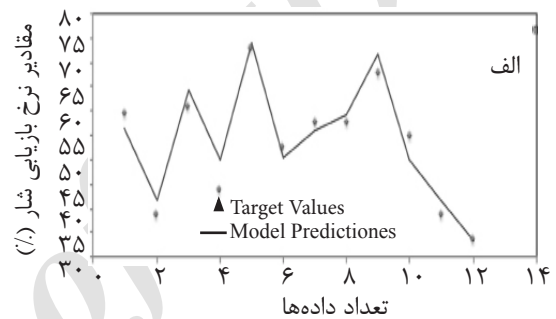
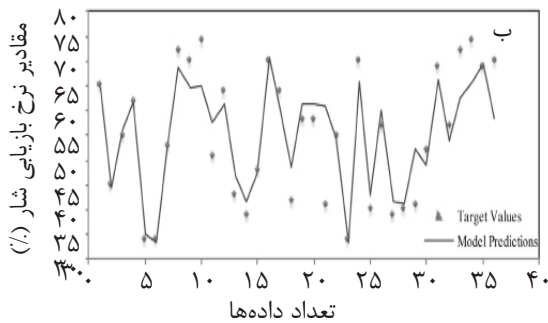
در این مرحله برای پیش‌بینی مقدار گرفتگی از سیستم هوشمند کمینه مربعات بردار پشتیبان استفاده شده است. این شبکه دارای دو پارامتر تنظیم به نام‌های  $\gamma$  و  $\sigma$  است. مقدار بهینه برای این دو پارامتر با استفاده از الگوریتم شبیه‌سازی تبرید مورد محاسبه قرار گرفتند و به ترتیب برابر با  $15/31$  و  $6/62$  تعیین شدند. پس از ساخته شدن شبکه با استفاده از مجموعه داده‌های اختصاص داده شده برای آموزش، داده‌های تست نیز به شبکه ارائه شد. عملکرد شبکه LSSVM ساخته شده در شکل‌های ۵ و ۶ و همچنین پارامترهای آماری مرتبط در جدول ۴ ارائه شده است.

#### ANFIS

برای پیش‌بینی مقادیر هدف توسط این روش ابتدا با استفاده از روش Subclast Clustering (SC) یک سیستم استنتاج فازی ابتدایی ساخته شد. در مرحله بعد باید با استفاده از یک روش مناسب این سیستم ابتدایی آموزش داده شود تا بهترین عملکرد را برای مدل فراهم کرد. به‌طور کلی دو روش برای آموزش وجود دارد. روش اول یک روش از پیش تعیین شده توسط نرم‌افزار متلب است که به آن روش هیبرید



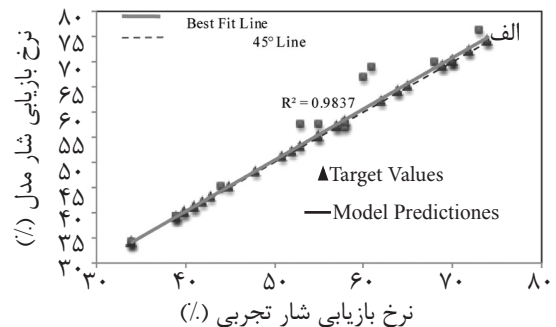
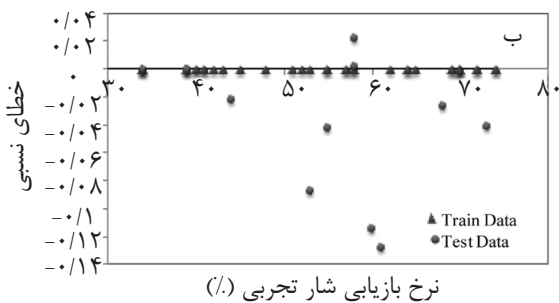
شکل ۵ الف) نمودار متقاطع نشان‌دهنده ضریب همبستگی بین مقادیر واقعی و مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه LSSVM برای داده‌های آموزش و تست و ب) نمودار نشان‌دهنده خطای نسبی برای داده‌های آموزش و تست مربوط به شبکه طراحی شده LSSVM.



شکل ۶ مقایسه بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه LSSVM با داده‌های واقعی الف) داده‌های آموزش و ب) داده‌های تست.

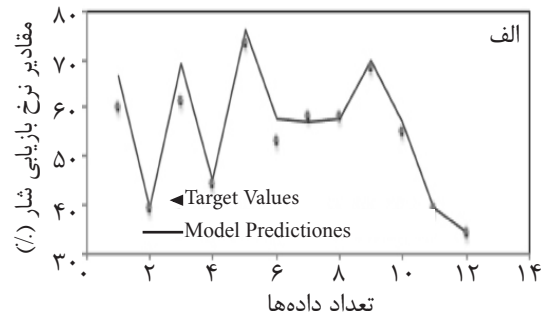
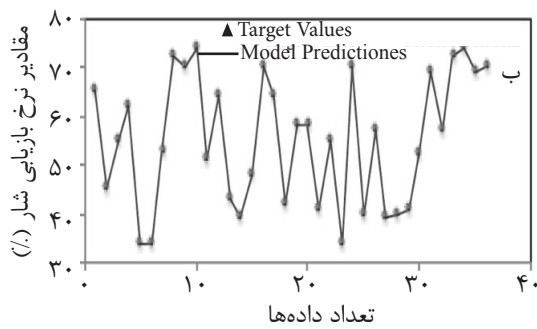
جدول ۴ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی LSSVM

تعداد داده‌ها	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبی متوسط	ضریب همبستگی	
۳۶	۵/۶۸۶۱۷۸	۰/۱۱۶۶۹۷	۷/۳۶۵۸۱۵	۰/۸۱۹۵۱	داده آموزش
۱۲	۳/۲۲۹۱۷۷	۰/۰۶۵۶۷	۵/۵۱۳۲۰۵	۰/۹۲۶۵۴	داده تست
۴۸	۵/۱۸۲۳۱۳	۰/۱۰۵۶	۶/۹۰۲۶۶۳	۰/۸۳۸۱۴۴	کل داده‌ها



شکل ۷ الف) نمودار متقاطع نشان‌دهنده ضریب همبستگی بین مقادیر واقعی و مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه ANFIS برای داده‌های آموزش و تست و ب) نمودار نشان‌دهنده خطای نسبی برای داده‌های آموزش و تست مربوط به شبکه طراحی شده ANFIS.





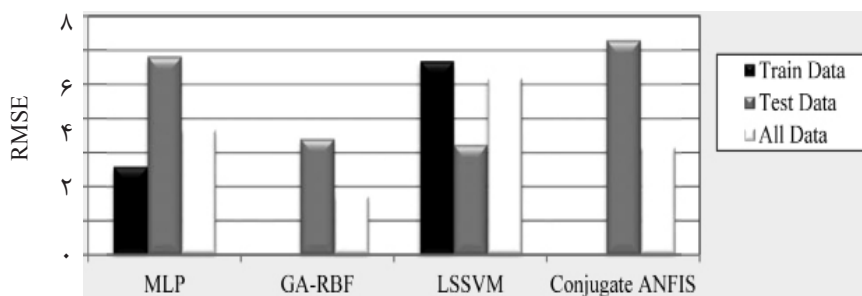
شکل ۸ مقایسه بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه ANFIS با داده‌های واقعی (الف) داده‌های آموزش و (ب) داده‌های تست.

جدول ۵ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی ANFIS

تعداد داده‌ها	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبی متوسط	ضریب همبستگی	
۳۶	$3/13 \times 10^{-15}$	$6/26 \times 10^{-17}$	$2/04 \times 10^{-15}$	۱	داده آموزش
۱۲	۳/۵۳۱۳۵۹	۰/۰۴۸۸۴۵	۴/۰۳۸۹۸۸	۰/۹۶۳۸۳۵	داده تست
۴۸	۱/۷۶۵۶۸	۰/۰۲۸۵۰۶	۱/۰۰۹۷۴۷	۰/۹۸۳۷۲۶	کل داده‌ها

جدول ۶ نتایج کلی مدل‌سازی با استفاده از شیوه‌های مختلف.

تعداد داده‌ها	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبی متوسط	ضریب همبستگی	
شبکه چند لایه	داده آموزش	۲/۵۸۷۵۲۷	۰/۰۴۴۹۶	۲/۸۰۷۰۲۵	۰/۹۶۰۵۰۹
	داده تست	۵/۸۱۵۵۳۶	۰/۱۰۱۷۹۶	۷/۱۴۹۲۳۶	۰/۷۷۵۵۶۱
	کل داده‌ها	۳/۶۷۱۰۴۷	۰/۰۶۳۷۴۱	۳/۸۹۲۵۷۷	۰/۹۱۷۶۶۲
شبکه مدار شعاعی	داده آموزش	$87/7 \times 10^{-14}$	$61/1 \times 10^{-15}$	$23/8 \times 10^{-14}$	۱
	داده تست	۳/۴۰۳۹۳۷	۰/۰۵۳۱۵۶	۴/۱۷۱۷۴۴	۰/۹۳۲۴۶۴
	کل داده‌ها	۱/۷۰۱۹۶۸	۰/۰۲۸۰۲۶	۱/۰۴۲۹۳۶	۰/۹۸۲۹۵۶
شبکه کم‌ترین مربعات پشتیبان	داده آموزش	۵/۶۸۶۱۷۸	۰/۱۱۶۶۹۷	۷/۳۶۵۸۱۵	۰/۸۱۹۵۱
	داده تست	۳/۲۲۹۱۷۷	۰/۰۶۵۶۷	۵/۵۱۳۲۰۵	۰/۹۲۶۵۴
	کل داده‌ها	۵/۱۸۲۳۱۳	۰/۱۰۵۶	۶/۹۰۲۶۶۳	۰/۸۳۸۱۴۷
شبکه هیبرید عصبی-فازی	داده آموزش	$3/13 \times 10^{-15}$	$6/26 \times 10^{-17}$	$2/04 \times 10^{-15}$	۱
	داده تست	۳/۵۳۱۳۵۹	۰/۰۴۸۸۴۵	۴/۰۳۸۹۸۸	۰/۹۶۳۸۳۵
	کل داده‌ها	۱/۷۶۵۶۸	۰/۰۲۸۵۰۶	۱/۰۰۹۷۴۷	۰/۹۸۳۷۲۶



شکل ۹ مقایسه مدل‌های مختلف

۳۲ به‌دست آمد. عملکرد شبکه RBF ساخته شده در شکل‌های ۱۲ و ۱۳ و همچنین پارامترهای آماری مرتبط در جدول ۹ ارائه شده است.

#### LSSVM

در این مرحله نیز شبیه‌مراحل مدل‌سازی برای پیش‌بینی پارامتر گرفتگی انجام شد. مقدار بهینه برای دو پارامتر  $\gamma$  و  $c$  با استفاده از الگوریتم شبیه‌سازی تبرید مورد محاسبه قرار گرفتند و به‌ترتیب برابر با  $1566/22$  و  $8/62$  تعیین شدند. عملکرد شبکه LSSVM ساخته شده در شکل‌های ۱۴ و ۱۵ و همچنین پارامترهای آماری مرتبط در جدول ۱۰ ارائه شده است.

#### ANFIS

در این مدل‌سازی هم شبیه‌مدل‌سازی برای پیش‌بینی پارامتر گرفتگی انجام شد. این روش دارای ۵۰ مرحله است که هر مرحله آن ترکیبی از ۵ مرحله روش هیبرید و ۱ مرحله روش PSO است. هر مرحله از روش هیبرید دارای ۱۰ اگر-آنگاه و هر مرحله از روش PSO دارای ۲۰۰ اگر-آنگاه است. پس از ساخته شدن شبکه با استفاده از مجموعه داده‌های اختصاص داده شده برای آموزش، داده‌های تست نیز به شبکه ارائه شد. عملکرد شبکه ANFIS ساخته شده در شکل‌های ۱۶ و ۱۷ و همچنین پارامترهای آماری مرتبط در جدول ۱۱ ارائه شده است.

#### مقایسه مدل‌ها برای پارامتر شار

نتایج کلی مدل‌سازی پارامتر شار در جدول ۱۲ و همچنین مقادیر RMSE در شکل ۱۸ ارائه شده است. بنابراین از جدول ۱۱ با توجه به پارامترهای خطا کاملاً مشخص است که شبکه‌های GA-RBF و ANFIS با توجه به پارامترهای آماری فوق که ضریب همبستگی نزدیک به عدد یک داشته و میانگین مربعات خطای آنها به عدد صفر نزدیک‌تر هستند، از دقت بالاتری نسبت به شبکه‌های دیگر برخوردار هستند.

بنابراین از جدول ۶ و شکل ۹ با توجه به پارامترهای خطا مشاهده می‌شود که شبکه‌های GA-RBF و ANFIS با توجه به پارامترهای آماری فوق که ضریب همبستگی نزدیک به عدد یک داشته و میانگین مربعات خطای آنها به عدد صفر نزدیک‌تر هستند، توانایی و کارایی بسیار بیشتری نسبت به شبکه‌های دیگر از خود نشان داده است.

#### مدل‌سازی پارامتر شار

کل داده‌های به‌دست آمده از تست‌های مختلف در آزمایشگاه در جدول ۷ آورده شده است. در این حالت نیز ۸۰٪ داده‌های بخش مدل‌سازی برای آموزش و ۲۰٪ برای تست شبکه به‌صورت تصادفی انتخاب شده است. با توجه به اینکه ۴ نوع نانولوله کربنی عامل‌دار مختلف (اسیدی، بازی و آمینی) در ساخت غشاها استفاده گردید و نوع نانولوله را نمی‌توان برای نرم‌افزار متلب تعریف نمود، لذا نوع نانولوله‌ها در مدل‌سازی یکسان در نظر گرفته شد.

#### MLP

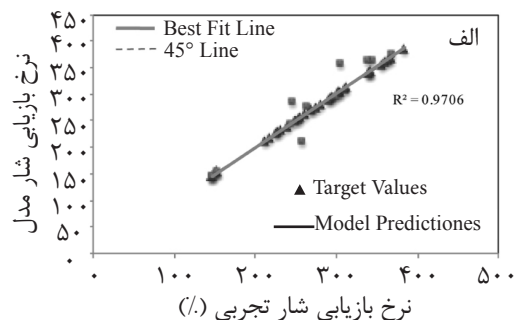
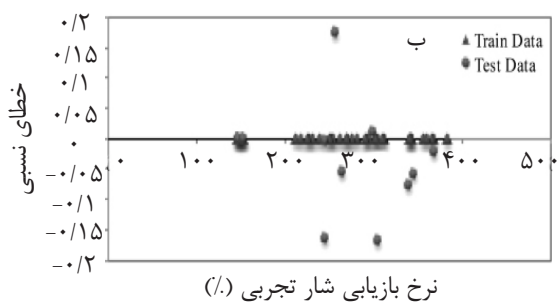
در این مرحله شبیه‌مراحل مدل‌سازی برای پیش‌بینی گرفتگی انجام شد. در این حالت، برای تعداد نرون‌های ۲ تا ۳۰ عدد در لایه پنهان ساخته شد و در نهایت پس از مقایسه نتایج حاصل از شبکه‌های ساخته شده، مقدار بهینه برای تعداد نرون‌های لایه پنهان برابر با ۳ به‌دست آمد. عملکرد شبکه MLP ساخته شده در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ و همچنین پارامترهای آماری مرتبط در جدول ۸ ارائه شده است.

#### RBF

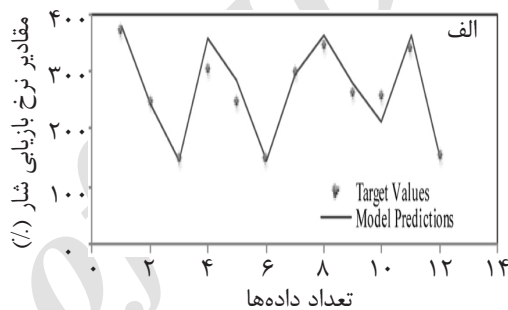
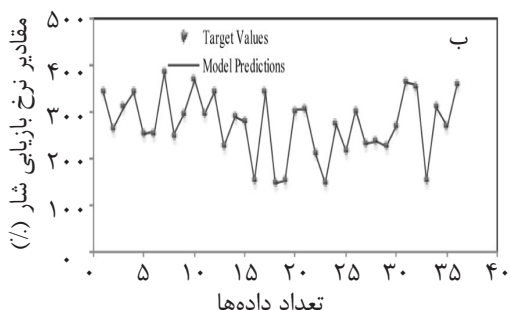
در این مرحله نیز شبیه‌مراحل مدل‌سازی برای پیش‌بینی گرفتگی انجام شد. برای این منظور ابتدا ۵۰ راه حل تصادفی به‌عنوان جمعیت اولیه تعیین شدند. سپس شبکه عصبی با استفاده از ابزار خود (تقاطع و جهش) طی ۳۰ نسل، جواب بهینه را حاصل کرد. مقدار بهینه برای پارامترهای spread و بیشینه مقدار نرون‌ها به‌ترتیب برابر با  $1/08$  و

جدول ۷ داده‌های مورد استفاده در شبیه‌سازی برای پارامتر شار

نوع نانولوله کربنی عامل‌دار	پلیمر (%)	نانولوله کربنی عامل‌دار (%)	زاویه تماس (°)	تخلخل (%)	شار	
نانولوله کربنی چند دیواره اسپیدی	۱۵	۰	۸۷/۲	٪۶۳	۱۴۶	
	۱۵	۰/۰۵	۸۴/۳۳	٪۷۲	۲۵۳	
	۱۵	۰/۱	۷۴/۱۷	٪۷۵	۳۳۸	
	۱۵	۰/۲	۷۵/۳۷	٪۸۰	۳۴۴	
	۱۵	۰/۳	۷۳/۳۷	٪۸۱	۳۵۶	
	۱۵	۰/۵	۷۳/۱۳	٪۷۶	۳۰۴	
	۱۸	۰	۹۳/۷۳	٪۴۹	۱۵۳	
	۱۸	۰/۰۵	۸۷/۶۳	٪۶۳	۲۴۴	
	۱۸	۰/۱	۹۰/۲۳	٪۶۳	۲۶۲	
	۱۸	۰/۲	۸۱/۹۷	٪۷۲	۳۴۱	
	۱۸	۰/۳	۸۲/۶	٪۶۸	۲۹۸	
	۱۸	۰/۵	۸۰/۲	٪۶۶	۲۲۶	
	نانولوله کربنی چند دیواره بازی	۱۵	۰	۸۷/۲	٪۶۳	۱۴۶
		۱۵	۰/۰۵	۸۴/۳۷	٪۶۷	۲۱۷
۱۵		۰/۱	۷۹/۹	٪۷۲	۲۸۱	
۱۵		۰/۲	۸۲/۲۳	٪۷۳	۲۶۴	
۱۵		۰/۳	۷۴/۵۷	٪۷۰	۲۵۷	
۱۵		۰/۵	۷۱/۷۷	٪۶۹	۲۳۲	
۱۸		۰	۹۳/۷۳	٪۴۹	۱۵۳	
۱۸		۰/۰۵	۹۰/۸۳	٪۶۶	۲۱۲	
۱۸		۰/۱	۸۹/۱۳	٪۶۷	۳۰۳	
۱۸		۰/۲	۸۵/۴۷	٪۶۹	۳۴۳	
۱۸		۰/۳	۸۳/۱۷	٪۶۷	۲۹۴	
۱۸		۰/۵	۸۴/۱۳	٪۶۵	۲۴۵	
نانولوله کربنی تک دیواره بازی		۱۵	۰	۸۷/۲	٪۶۳	۱۴۶
		۱۵	۰/۰۵	۸۵	٪۷۱	۲۳۹
	۱۵	۰/۱	۸۴	٪۷۳	۳۰۵	
	۱۵	۰/۲	۷۹/۸۳	٪۷۷	۳۰۳	
	۱۵	۰/۳	۷۹/۶	٪۷۴	۲۷۰	
	۱۵	۰/۵	۸۰	٪۷۳	۲۲۸	
	۱۸	۰	۹۳/۷۳	٪۴۹	۱۵۳	
	۱۸	۰/۰۵	۸۱/۶۳	٪۶۷	۲۵۰	
	۱۸	۰/۱	۸۱/۴	٪۶۹	۳۴۲	
	۱۸	۰/۲	۸۱/۴۳	٪۶۹	۳۶۸	
	۱۸	۰/۳	۸۰/۶	٪۶۴	۳۱۰	
	۱۸	۰/۵	۷۹/۶	٪۶۲	۲۹۰	
	نانولوله کربنی آمیننی	۱۵	۰	۸۷/۲	٪۶۳	۱۴۶
		۱۵	۰/۰۵	۷۹/۷۳	٪۷۳	۲۷۰
۱۵		۰/۱	۷۹/۳۷	٪۷۴	۳۶۵	
۱۵		۰/۲	۷۸/۱	٪۷۹	۳۸۴	
۱۵		۰/۳	۷۴/۵۷	٪۸۰	۳۶۸	
۱۵		۰/۵	۷۱/۵۳	٪۷۵	۳۴۱	
۱۸		۰	۹۳/۷۳	٪۴۹	۱۵۳	
۱۸		۰/۰۵	۸۷/۳۷	٪۶۳	۲۷۵	
۱۸		۰/۱	۸۴/۱۳	٪۶۵	۲۹۳	
۱۸		۰/۲	۸۳/۶	٪۷۰	۳۶۰	
۱۸		۰/۳	۸۱/۲۷	٪۶۹	۳۱۲	
۱۸		۰/۵	۷۹/۷۳	٪۶۷	۲۵۵	



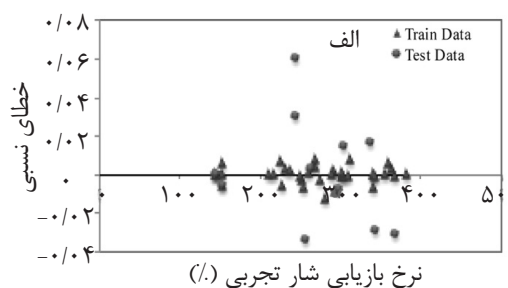
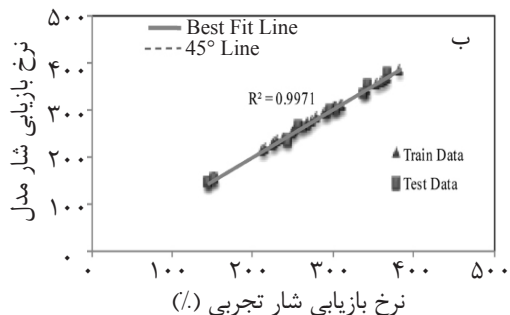
شکل ۱۰ الف) نمودار متقاطع نشان‌دهنده ضریب همبستگی بین مقادیر پیش‌بینی شده و داده‌های واقعی توسط شبکه MLP برای داده‌های آموزش و تست و ب) نمودار نشان‌دهنده خطای نسبی برای داده‌های آموزش و تست مربوط به شبکه طراحی شده MLP



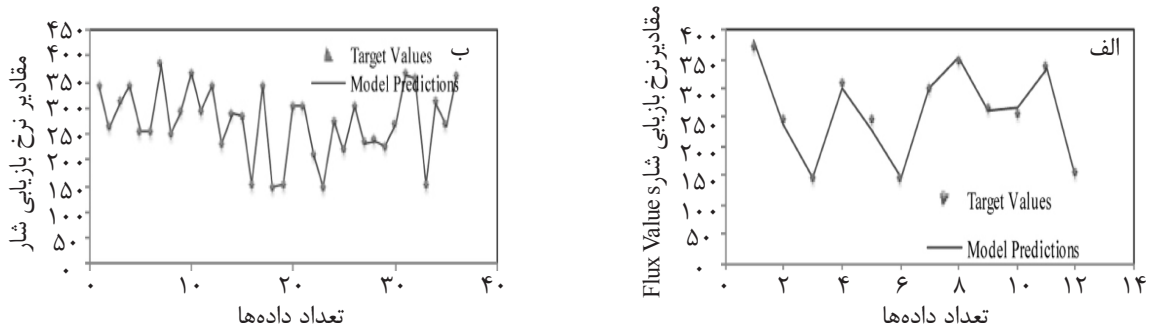
شکل ۱۱ مقایسه بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه MLP با داده‌های واقعی الف) داده‌های آموزش و ب) داده‌های تست

جدول ۸ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی MLP.

تعداد داده‌ها	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبی متوسط	ضریب همبستگی	
۳۶	۰/۰۰۱۱۸۸	$۴/۱۵ \times 10^{-6}$	۰/۰۰۰۱۴۷	۱	داده آموزش
۱۲	۲۵/۱۹۴۷۶	۰/۰۸۹۴۹۴	۶/۱۰۲۰۷۴	۰/۹۲۹۹۰۲	داده تست
۴۸	۱۲/۵۹۷۳۸	۰/۰۴۵۱۹۸	۱/۵۲۵۶۲۹	۰/۹۷۰۶۰۳	کل داده‌ها



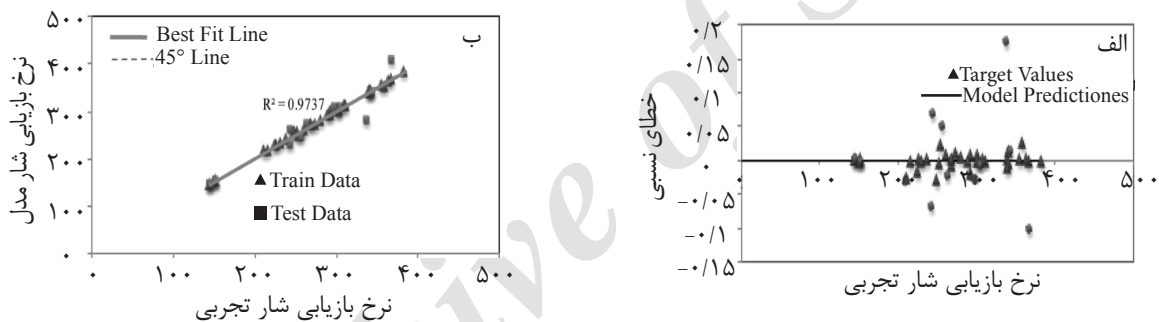
شکل ۱۲ الف) نمودار متقاطع نشان‌دهنده ضریب همبستگی بین داده‌های واقعی و مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه RBF برای داده‌های آموزش و تست و ب) نمودار نشان‌دهنده خطای نسبی برای داده‌های آموزش و تست مربوط به شبکه طراحی شده RBF



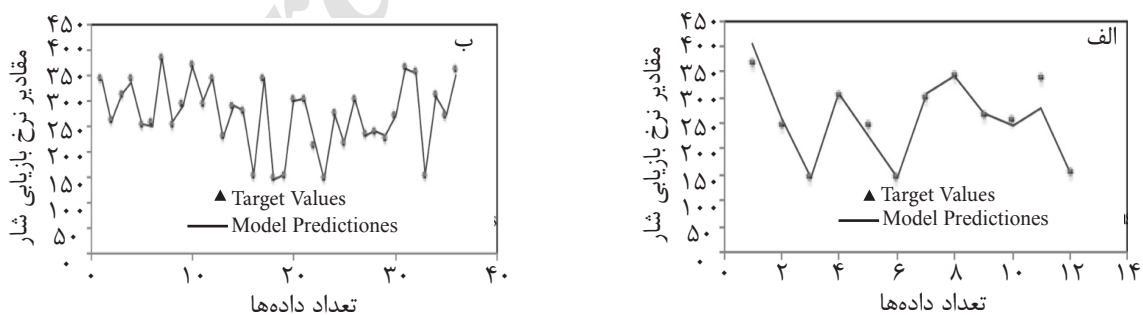
شکل ۱۳ مقایسه بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه RBF با داده‌های واقعی (الف) داده‌های آموزش و (ب) داده‌های تست

جدول ۹ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی RBF

تعداد داده‌ها	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبی متوسط	ضریب همبستگی	
۳۶	۱/۲۱۲۸۱۸	۰/۰۰۴۴۵۷	۰/۳۰۳۱۱۷	۰/۹۹۹۶۷۱	داده آموزش
۱۲	۷/۲۸۷۸۱۱	۰/۰۲۷۱۲۸	۱/۹۵۲۴۷۵	۰/۹۹۱۵۹۸	داده تست
۴۸	۳/۷۹۲۲۶۱	۰/۰۱۳۶۹۳	۰/۷۱۵۴۵۷	۰/۹۹۷۰۰۹	کل داده‌ها



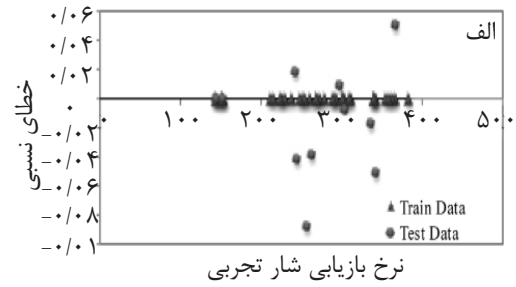
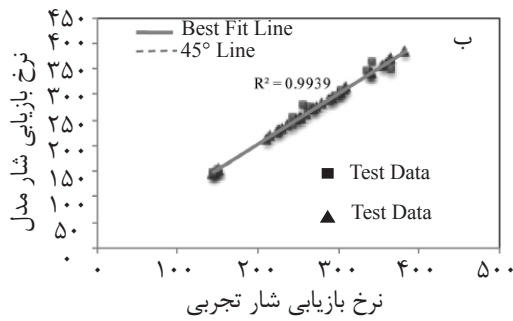
شکل ۱۴ نمودار متقاطع نشان‌دهنده ضریب همبستگی بین مقادیر واقعی و مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه LSSVM برای داده‌های آموزش و تست و (ب) نمودار نشان‌دهنده خطای نسبی برای داده‌های آموزش و تست مربوط به شبکه طراحی شده LSSVM



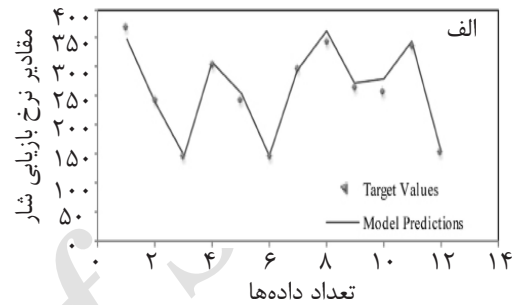
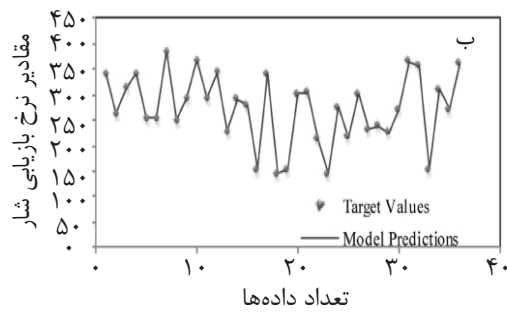
شکل ۱۵ مقایسه بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه LSSVM با داده‌های واقعی (الف) داده‌های آموزش و (ب) داده‌های تست

جدول ۱۰ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی LSSVM

تعداد داده‌ها	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبی متوسط	ضریب همبستگی	
۳۶	۳/۰۲۴۱۰۲	۰/۰۱۰۹۰۷	۰/۶۶۲۰۱۸	۰/۹۹۸۰۰۶	داده آموزش
۱۲	۲۱/۹۳۱۱۸	۰/۰۷۰۱۸۹	۴/۴۸۸۴۲۱	۰/۹۱۹۲۶۲	داده تست
۴۸	۱۱/۲۷۴	۰/۰۳۵۳۵۷	۱/۶۱۸۶۱۸	۰/۹۷۳۷۳۱	کل داده‌ها



شکل ۱۶ الف) نمودار متقاطع نشان‌دهنده ضریب همبستگی بین مقادیر واقعی و مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه ANFIS برای داده‌های آموزش و تست و ب) نمودار نشان‌دهنده خطای نسبی برای داده‌های آموزش و تست



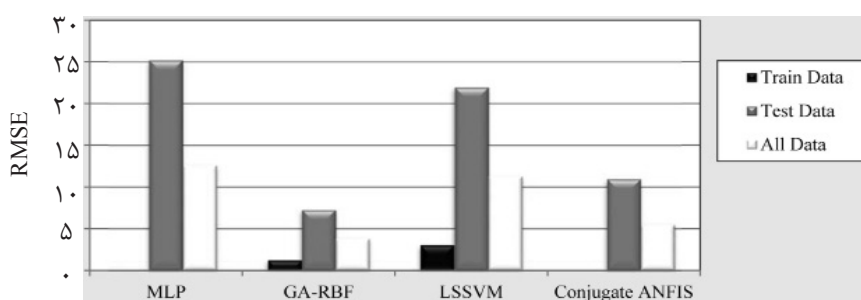
شکل ۱۷ مقایسه بین مقادیر پیش‌بینی شده توسط شبکه ANFIS با داده‌های واقعی الف) داده‌های آموزش و ب) داده‌های تست

جدول ۱۱ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی ANFIS

تعداد داده‌ها	ضریب همبستگی	انحراف نسبی متوسط	انحراف استاندارد	ریشه میانگین مربعات خطا	تعداد داده‌ها
داده آموزش	۱	$1/9 \times 10^{-4}$	$2/59 \times 10^{-4}$	$6/48 \times 10^{-4}$	۳۶
داده تست	۰/۹۸۱۰۰۲	۲/۷۰۵۳۸۴	۰/۰۳۶۳۷۶	۱۰/۹۸۴۵۴	۱۲
کل داده‌ها	۰/۹۹۳۸۶۹	۰/۶۷۶۳۴۶	۰/۰۱۸۶۸۳	۵/۴۹۲۲۷۲	۴۸

جدول ۱۲ نتایج کلی مدل‌سازی با استفاده از شیوه‌های مختلف

تعداد داده‌ها	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبی متوسط	ضریب همبستگی	شبکه چند لایه
۳۶	۰/۰۰۱۱۸۸	$4/15 \times 10^{-6}$	۰/۰۰۰۱۴۷	۱	شبکه چند لایه
۱۲	۲۵/۱۹۴۷۶	۰/۰۸۹۴۹۴	۶/۱۰۲۰۷۴	۰/۹۲۹۹۰۲	
۴۸	۱۲/۵۹۷۳۸	۰/۰۴۵۱۹۸	۱/۵۲۵۶۲۹	۰/۹۷۰۶۰۳	
۳۶	۱/۲۱۲۸۱۸	۰/۰۰۴۴۵۷	۰/۳۰۳۱۱۷	۰/۹۹۹۶۷۱	شبکه مدار شعاعی
۱۲	۷/۲۸۷۸۱۱	۰/۰۲۷۱۲۸	۱/۹۵۲۴۷۵	۰/۹۹۱۵۹۸	
۴۸	۳/۷۹۲۲۶۱	۰/۰۱۳۶۹۳	۰/۷۱۵۴۵۷	۰/۹۹۷۰۹	
۳۶	۳/۰۲۴۱۰۲	۰/۰۱۰۹۰۷	۰/۶۶۲۰۱۸	۰/۹۹۸۰۰۶	شبکه کم‌ترین مربعات پشتیبان
۱۲	۲۱/۹۳۱۱۸	۰/۰۷۰۱۸۹	۴/۴۸۸۴۲۱	۰/۹۱۹۲۶۲	
۴۸	۱۱/۲۷۴	۰/۰۳۵۳۵۷	۱/۶۱۸۶۱۸	۰/۹۷۳۷۳۱	
۳۶	$6/48 \times 10^{-4}$	$2/59 \times 10^{-4}$	$1/9 \times 10^{-4}$	۱	شبکه هیبرید عصبی-فازی
۱۲	۱۰/۹۸۴۵۴	۰/۰۳۶۳۷۶	۲/۷۰۵۳۸۴	۰/۹۸۱۰۰۲	
۴۸	۵/۴۹۲۲۷۲	۰/۰۱۸۶۸۳	۰/۶۷۶۳۴۶	۰/۹۹۳۸۶۹	



شکل ۱۸ مقایسه مدل‌های مختلف

مشهود است.

### نتایج به‌دست آمده از ساخت مجدد غشا در آزمایشگاه با استفاده از نتایج بهینه به‌دست آمده از مدل و محاسبه خطاها

با استفاده از نتایج شبیه‌سازی برای هر نوع درصد پلیمر (۱۵٪ و ۱۸٪) غشاهای نانوکامپوزیت با استفاده از نانولوله‌های کربنی (چند دیواره اسیدی، چند دیواره بازی و تک دیواره بازی) مجدداً در آزمایشگاه ساخته شده و سپس تست‌های شار، گرفتگی، زاویه تماس و تخلخل انجام گردید. جهت مقایسه نتایج مدل با نتایج تجربی با توجه به اینکه نوع نانولوله کربنی را در مدل‌سازی نمی‌توان در نرم‌افزار متلب تعریف نمود، لذا نتایج خروجی از مدل برای همه نانولوله کربنی مختلف در هر درصد پلیمر یکسان در نظر گرفته شد و سپس نتایج آن با نتایج مدل مقایسه و خطاها به شرح جدول ۱۴ محاسبه گردید. با توجه به در نظر گرفتن مینیمم خطا، ۰/۰۷٪ وزنی نانولوله کربنی تک دیواره بازی برای غشای نانوکامپوزیت پلیمری ۱۵٪ PVDF و ۰/۱۹٪ وزنی نانولوله کربنی تک دیواره بازی برای غشای پلیمری ۱۸٪ PVDF بهترین عملکرد را داشته است.

### یافتن شرایط بهینه پارامترهای آزمایشگاهی

در این بخش هدف به‌دست آوردن مقادیر بهینه برای شرایطی است که طی آن گرفتگی به کمینه خود برسد و همزمان مقادیر شار نیز بالا باشد. برای این کار از بهترین مدل‌های ساخته شده برای هر دو خروجی استفاده خواهد شد. یک الگوریتم ترکیبی از ژنتیک و ازدحام ذرات کار یافتن مقادیر بهینه را انجام می‌دهد. از مجذور کمینه مربعات خطای مربوط به هر سه پارامتر به‌عنوان تابع هدف استفاده شده است. نزدیک شدن پارامتر گرفتگی به کمترین مقدار نسبت به ماکزیمم شدن مقدار شار دارای اهمیت بیشتری در نظر گرفته شده است. یکی از پارامترها نوع پلیمر است. در مسئله حال حاضر از دو نوع پلیمر استفاده شده است. به همین علت یافتن مقادیر بهینه در دو حالت پلیمر PVDF ۱۵٪ و PVDF ۱۸٪ انجام گرفته است. در ابتدا جمعیتی تصادفی از پاسخ‌ها محتمل به تعداد ۳۰۰ مورد ایجاد شد. سپس بعد از ۵۰ نسل به شرایط بهینه همگرا می‌شود. تابع هدف مقدار مجذور کمینه مربعات پارامتر گرفتگی و شار در نظر گرفته شده است. شرایط بهینه هر دو پلیمر جهت به حداقل رسیدن گرفتگی و حداکثر رسیدن شار در جدول ۱۳

جدول ۱۳ مقادیر بهینه پیش بینی شده

درصد پلیمر	درصد نانوذره	زاویه تماس (درجه)	درصد تخلخل	درصد میزان پس دهی پروتئین	درصد نرخ بازیابی شار	میزان شار (کیلوگرم/ساعت/مترمربع)
۱۵	۰/۰۷۲۴۳۵۶۴	۸۸/۱۳۶۷۱۰۹۷	۰/۸۲۴۷۷۲۴	۹۹/۶۵۲۵۴۶۷	۷۸/۰۶	۲۶۷/۳
۱۸	۰/۱۹۱۳۲۴۵۶	۷۹/۹۰۷۹۰۶۶۴	۰/۷۸۴۷۳۴	۹۹/۷۴۶۳۴۵۴۲۸	۶۸/۳۱	۴۰۱/۱

جدول ۱۴ نتایج تست های مدل و اعداد تجربی

PVDF %۱۸			PVDF %۱۵			نوع غشا
%۰/۱۹ نانولوله تک دیواره بازی	%۰/۱۹ چند دیواره اسیدی	%۰/۱۹ چند دیواره بازی	%۰/۰۷ تک دیواره بازی	%۰/۰۷ چند دیواره اسیدی	%۰/۰۷ نانولوله چند دیواره بازی	
۴۰/۱/۱	۴۰/۱/۱	۴۰/۱/۱	۲۶۷/۳	۲۶۷/۳	۲۶۷/۳	شار مدل
۳۶۵	۳۴۱	۳۵۰	۲۶۱	۲۴۰	۲۵۹	شار اندازه گیری شده
۱۰	۱۵	۱۳	۲	۱۰	۳	درصد خطا
۶۸/۳	۶۸/۳	۶۸/۳	۷۸	۷۸	۷۸	گرفتگی مدل
۷۰	۶۲	۷۴	۷۳	۵۱	۷۰	گرفتگی اندازه گیری شده
۲	۹	۸	۶	۳۴	۱۰	درصد خطا
۷۹/۹	۷۹/۹	۷۹/۹	۸۸/۱	۸۸/۱	۸۸/۱	زاویه تماس مدل
۸۰	۸۲	۸۴	۸۲	۷۵	۸۱	زاویه تماس اندازه گیری شده
۰	۳	۵	۷	۱۵	۸	درصد خطا
۷۸/۴	۷۸/۴	۷۸/۴	۸۲/۴	۸۲/۴	۸۲/۴	تخلخل مدل
۷۲	۶۸	۶۹	۷۵	۷۰	۷۲	تخلخل اندازه گیری شده
۸	۱۳	۱۲	۹	۱۵	۱۳	درصد خطا

## نتیجه گیری

به اینکه ۴ نوع نانولوله کربنی عامل دار مختلف (اسیدی، بازی و آمینی) در ساخت غشاها استفاده گردید و نوع نانولوله را نمی توان برای نرم افزار متلب تعریف نمود، لذا نوع نانولوله ها در مدل سازی یکسان در نظر گرفته شد. همان طور که شکل ها و جداول نشان می دهند هر یک از مدل ها با نسبتی مشخص توانایی لازم برای پیش بینی مقادیر شار و گرفتگی برای غشاها نانوکامپوزیت را دارا هستند لذا برخی از آنها برای پیش بینی پارامترهای فوق برای غشاها پیشنهاد می شود. با توجه به ضریب همبستگی به دست آمده برای هر سیستم و اینکه ضریب همبستگی نزدیک به عدد یک دقت خوبی

در تحقیق حاضر، غشاها ی اولترافیلتراسیون PVDF با دو غلظت ۱۵ و ۱۸٪ به روش وارونگی فاز و با استفاده از حلال NMP در آزمایشگاه ساخته شد. در ادامه برای بهبود خواص آبدوستی و کاهش گرفتگی این غشاها از نانولوله های کربنی (چند دیواره اسیدی، چند دیواره و تک دیواره بازی و آمینی) با غلظت های مختلف ۰/۰۵، ۰/۱، ۰/۲، ۰/۳ و ۰/۵ وزنی نسبت به وزن پلیمر استفاده شد. نتایج مدل سازی با استفاده از ۴ سیستم هوشمند شبکه عصبی چند لایه، شبکه عصبی پایه شعاعی، کمینه مربعات بردار پشتیبان و شبکه هیبرید عصبی - فازی انجام گرفت. با توجه



برای هر نوع درصد پلیمر، غشاهای نانوکامپوزیت (با نانولوله‌های کربنی عامل‌دار چند دیواره اسیدی، چند دیواره بازی و تک دیواره بازی) در آزمایشگاه مجدداً ساخته شده و سپس تست‌های شار، گرفتگی، زاویه تماس و تخلخل انجام شده و نتایج تجربی با نتایج مدل مقایسه و خطاها محاسبه گردید لذا به دلایل قبلی نتایج خروجی از مدل برای همه نانولوله‌های کربنی فوق در هر درصد پلیمر یکسان در نظر گرفته شد و سپس نتایج آن با نتایج مدل مقایسه و خطاها محاسبه گردید. با توجه به در نظر گرفتن مینیمم خطا، غشای نانوکامپوزیت ۰/۰۷٪ وزنی نانولوله کربنی تک دیواره عامل‌دار شده با گروه هیدروکسیل و غشای نانوکامپوزیت ۰/۱۹٪ وزنی نانولوله کربنی تک دیواره عامل‌دار شده با گروه هیدروکسیل به ترتیب بهترین عملکرد را با پلیمرهای ۰/۱۵٪ وزنی و ۰/۱۸٪ وزنی PVDF داشته است.

برای شبکه‌های هوشمند است (برای پارامتر گرفتگی مقدار  $R^2$  به ترتیب برای مدل‌های GA-RBF و ANFIS برابر ۰/۹۸۲ و ۰/۹۸۳) و همچنین با توجه به اینکه پارامتر میانگین مربعات خطا نزدیک به عدد صفر مناسب برای شبکه است، لذا برای پارامترهای شار و گرفتگی می‌توان نتیجه گرفت که بهترین مدل، مدل GA-RBF و ANFIS هستند. در بخش بعدی مدل‌سازی برای به دست آوردن مقادیر بهینه (بیشترین گرفتگی و ماکزیمم شار) از بهترین مدل‌های ساخته شده برای هر دو خروجی استفاده شد و سپس از الگوریتم ترکیبی از الگوریتم ژنتیک و ازدحام ذرات مقادیر بهینه به دست آمد. برای پلیمر PVDF ۰/۱۵٪ مقدار بهینه نانوذره ۰/۰۷٪ با مقدار شار  $267/3 \text{ L/m}^2\text{h}$ ، گرفتگی ۰/۷۸٪، زاویه تماس  $88^\circ$  و تخلخل ۸۲٪ و برای پلیمر PVDF ۰/۱۸٪ مقدار بهینه نانوذره ۰/۱۹٪ با مقدار شار  $401/1 \text{ L/m}^2\text{h}$ ، گرفتگی ۰/۶۸٪، زاویه تماس  $79/9^\circ$  و تخلخل ۷۸٪ به دست آمد. سپس با استفاده از نتایج پارامترهای بهینه

## مراجع

- [1]. Delgrange N., Cabassud C., Cabassud M., Durand-Bourlier L. and Lain J. M., "Neural network for prediction of ultrafiltration transmembrane pressure—application to drink water," *Journal of Membr. Sci.*, Vol. 150, Issue 111, pp. 111-123, 1998.
- [2]. Razavi S. M. A., Mortazavi S. A. and Mousavi S. M., "Dynamic modeling of milk ultrafiltration by artificial neural network," *Journal of Membr. Sci.*, Vol. 220, p. 47, 2003.
- [3]. Razavi S. M. A., Mousavi S. M. and Mortazavi S. A., "Dynamic prediction of milk ultrafiltration performance, A neural network approach," *J. Chem. Eng. Sci.*, Vol. 58, p. 4185, 2003.
- [4]. Razavi S. M., Mortazavi S. A., Mousavi S. M., "Application of neural networks for crossflow milk ultrafiltration simulation," *Internat. Dairy J.*, Vol. 14, p. 69, 2004.
- [5]. Teodosiu C., Pastravanu D. and Macoveanu M., "Neural network model for ultrafiltration and backwashing," *Water Research*, Vol. 34, p. 4371, 2000.
- [6]. Dornier M., Decloux M., Trystram G. and Lebert A., "Dynamic modeling of crossflow microfiltration using neural networks," *Journal of Membr. Sci.*, Vol. 98, p. 263, 1999.
- [7]. Mousavi M., Avami A., "Modeling and simulation of water softening by nanofiltration using artificial neural network," *Iran. J. Chem. Eng.*, Vol. 25, p. 37, 2006.
- [8]. Bowen W. R., Jones M. G. and Yousef H. N. S., "Prediction of the rate of crossflow membrane ultrafiltration of col

- oids: a neural network approach*,” J. of Chem. Eng. Sci., Vol. 53, p. 3793, 1998.
- [9]. Salehi v. and Razavi S. M. A., “*Modeling of waste brine nanofiltration process using artificial neural network and adaptive neuro- fuzzy inference system*,” Desaln. and Water Treat., Vol. 57, p. 14369, 2016.
- [10]. Razavi F. and Razavi S. M. M. A., “*Dynamic modeling of flux and total hydraulic resistance in nanofiltration treatment of regeneration waste brine using artificial neural networks*,” Desaln. and Water Treat., Vol. 41, No. 3, p. 95, 2012.
- [11]. Vatanpour V., Madaeni S. S., Moradian R., Zinadini S. and Astinchap B., “*Fabrication and characterization of novel antifouling nanofiltration membrane prepared from oxidized multiwalled carbon nanotube/polyethersulfone nanocomposite*,” J. Membr. Sci., Vol. 375, p. 284, 2011.
- [12]. Vatanpour V., Esmaeili M. and Farahani M. H., “*Fouling reduction and retention increment of polyethersulfone nanofiltration membranes embedded by amine-functionalized multi-walled carbon nanotubes*,” J. of Membr. Sci., Vol. 466, p. 70, 2014.
- [13]. Zhang X., Lang W. Z., Yan X., Lou Z.-Y. and Chen v., “*Influences of the structure parameters of multi-walled carbon nanotubes(MWNTs) on PVDF/PFSA/O-MWNTs hollow fiber ultrafiltration membranes*,” J. of Membr. Sci., Vol. 499, p. 179,2016.
- [14]. Madaeni S. S., Zinadini S. and Vatanpour V. , “*Convective flow adsorption of nickel ions in PVDF membrane embedded with multi-walled carbon nanotubes and PAA coating*,” Separ. and Puri. Tech., Vol. 80, p. 155, 2011.
- [15]. Majeed S., Fierro D., Buhr v., Wind J., Du B., Boschetti-de-Fierro A. and Abetz V., “*Multi-walled carbon nanotubes (MWCNTs) mixed polyacrylonitrile (PAN) ultrafiltration membranes*,” J. of Membr. Sci., Vol. 403–404, p. 101, 2012.

Archive of SID