پر و اسفند ۱۳۹۷ ، بهمن و اسفند ۱۳۹۷

# مدلسازی پیش بینی پارامترهای شار و گرفتگی غشاهای نانو کامپوزیت اولترافیلتراسیون PVDF عامل دار شده با نانولولههای کربنی با استفاده از سیستمهای شبکههای هوشمند

مهران مفخمی مهر آبادی، علیرضا آقایی<sup>\*</sup> و مازیار صهبا یغمایی پژوهشکده سرامیک، پژوهشگاه مواد و انرژی، کرج، ایران

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

### چکیدہ

۱۸

در ایـن تحقیـق عملکـرد و خـواص ضـد گرفتگـی و شـار غشـاهای نانوکامپوزیـت پلـی وینیلیـدن فلورایـد (PVDF) بـا غلظتهـای ۱۵ و ۱۸٪ وزنی که با نانو لولههای 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، زاویـه تمـاس، تخلخـل و نـرخ پسدهـی پروتئیـن انجـام شـده اسـت. بـا اسـتفاده از نتایـج تسـتهای تجربـی، مدلسازی پارامترهای شار و گرفتگی براساس متغیرهای ورودی که شامل درصد نانوذره، درصد پلیمر، تخلخل و زاویه تماس هستند؛ انجام شد. در ایـن مـدل از ۴ سیسـتم هوشـمند شـبکه عصبـی چنـد لایـه، شـبکه عصبـی بـا مـدار شـعاعی، کمینـه مربعات بردار پشتیبان و سیستم هیبریدی تطبیقی عصبی- فازی و ۳ الگوریتم بهینهسازی ژنتیک، شبیهسازی تبریدی 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، مدل های 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 نانوكامپوزيت ٠/٠٧٪ وزني نانولوله كربني تك ديواره عاملدار شده با گروه هيدروكسيل و غشاي نانوكامپوزيت ٠/١٧٪ وزني 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 نانوکامپوزیات، نانولوله های کربنی، مدل سازی، شابکه های هوشامند، الگوریتم بهینه سازی

<sup>\*</sup>مسؤول مكاتبات

آدرس الكترونيكي a-aghaei@merc.ac.ir شناسه ديجيتال: (DOI: 10.22078/pr.2018.3174.2459)

مقدمه

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. روش های مختلفی برای افزایش آبدوستی غشاهای پلیمری گزارش شده است. از میان روش های اصلاح غشاهای پلیمری، استفاده از نانوساختارهای معدنی [۱] در ساختار غشاها بهدلیل کارآیے بالا و سےولت تطبیق آن با روش ہای متداول ساخت غشاء مورد توجه قرار گرفتهاند. نانولولههای کرہنے بەدلیل ویژگی ہای مطلوبے از قبیل چگالے جرم کم، انعطاف پذیری زیاد و برهم کنش مؤثر بین پیوندهای نانولولههای کربنے و گروههای عاملی دارای ویژگی های مناسب برای بهبود عملکرد غشاهای پلیمری بوده و مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفتهاست [۲ و ۳]. با توجه به اینکه متغیرهای زیادی در مدلسازی غشاها برروی هدف اصلے غشا کے ہمان افزایش شار، کاہش گرفتگے و افزایے ش راندمان جداسازی است، تاثیے می گذارنے و اینکه رفتار متغیرها لزوماً خطی نبوده و بهصورت غیر خطی هستند و نیز این متغیرها ممکن است با هم برهم کنش داشته و یاسخهای این متغیرها متفاوت هستند، لـذا از مدلسازی بـر پایـه هـوش مصنوعـی در این تحقیق استفاده شد که از ۴ سیستم هوشمند شبکه عصبی چند لایه (MLP)، شبکه عصبی با مدار شعاعی (RBF)، کمینه مربعات بردار پشتیبان (LSSVM)<sup>۳</sup>، سیستم هیبریدی تطبیقی عصبی-فازی (ANFIS)<sup>\*</sup> و ۳ الگوریتم بهینهسازی ژنتیک (GA)<sup>6</sup>, ازدحام ذرات (PSO)<sup>6</sup> و شبیهسازی تبریدی (SA) برای مدل سازی استفاده گردید. شبکههای هوشــمند بهخصـوص شــبكههاى عصبــى مصنوعــى بهطـور موفقيـت آميـزي بـه منظـور مدلسازي

پیش بینے شار و گرفتگی غشاهای مختلف استفاده شدہاند. Delgrand و ہمکارانےش [۱] گرفتگے غشاء در ط\_ی فرآیندهای میکروفیلتراسیون و اولترافیلتراسیون ترکیبات کلوئیدی، پروتئین، و همچنین تصفیه آب های شهری و صنعتی را بررسی نمودند که شـبکه عصبـی اسـتفاده شـده مقادیـر گرفتگـی را بـا تقریب خوبی مدل نمبود. رضوی و همکارانیش [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) به عنوان تابعی از فشار و زمان فرآیند بررسی نمودند کے نتایے مدلسازی با دقت خوبی با استفاده از تنها یک لایه مخفی و تعداد کمی دادههای آموزش مقادیـر شـار، مقاومـت هیدرولیکـی و نرخ پسدهی را پیشبینی نمود. در مطالعه دیگری توســط Teodosiu و همکارانــش [۵]، پیشگویی شار در طى اولترافيلتراسيون يساب صنعتى انجام گرفت كه براساس دادههای آزمایشگاهی شبکههای عصبی مصنوعي بهطور موفقيتآميزي براي پيشبيني شار درغشاهای فیبر توخالی بهعنوان تابعی از زمان اســتفاده شــد. همچنیــن Dornier و همکارانــش [۶] در مطالعه دیگری پیشگویی گرفتگی غشای میکروفیلتر جریان عرضی محلولهای صمغ و شربت قند را بررسی نمودند. در این تحقیق اثرهای فشاراعمالی و سرعت خـوراک بـا زمان فيلتراسيون تحت شرايط 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 تصفيه آب در فرآيند نانوفيلتراسيون بوده و مدل پیشبینی خوبی برای شار و نرخ یسدهــی در فرآینــد تصفیــه داشــته اســت.

- 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

<sup>1.</sup> Multiple Layer Percepton

و نوع نانولولـه کربنـی عامـلدار بـرای هـر درصـد پلیمـر کـه بهتریـن عملکـرد را بـا پلیمـر پلـی وینیلیـدن فلورایـد داشـته باشـد، بهدسـت آمـد.

تهیه غشاء نانو کامپوزیت: برای ساخت غشاهای اولترافيلتراسيون به روش وارونگی فاز، مقدار مشـخصی از نانولولههـای کربنـی مختلـف براسـاس تجربیات و مطالعات قبلی (۰/۰۵، ۰/۱، ۲/۰، ۳/۰، ۵/۰٪ وزنے نسبت به پلیمر) [۱۲ و ۱۱] بهمدت ۳۰ min در حلال نرمال متيل پيروليدون با استفاده از حمام اولتراسونيك توزيع و سيس پليمر پليي وينيليدن فلورایـد بـا ۱۵٪ وزنـی در محلـول حـل میگـردد. سپس عامل حفرہ زای پلی وینیل پیرولیدون به مقدار 1٪ (نسبت به وزن پلیمر) به محلول اضافه می گردد. پـس از همـزدن محلـول بهمـدت ۲۴ hr و ایجاد محلول همگن، محلول حاصل بهمدت ۶ hr در خشــک کــن در دمــای ۵۵°C قــرار می گیــرد تــا حباب زدایی می شود. 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 برروی بستر کشیده شده و بلافاصله در حمام انعقاد آب غوطه ور می گردد. بعد از حدود ۱۰ min، غشا از حمام آب در آورده شده و در ظرف حـاوی آب مقطـر نگهـداری میشـود [۱۳- ۱۵].

مدل سازی با شبکه عصبی مصنوعی برای ایجاد مدل پیش بینی کننده گرفتگی (FRR) <sup>۱</sup> و شار مدل سازی پارامتر گرفتگی کل داده های به دست آمده از تستهای مختلف برای شبیه سازی پارامتر گرفتگی در آزمایشگاه در جدول ۱ آورده شده است.

همچنین Bowen و همکارانش [۸] شبکههای عصبی برای مدلسازی میران 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 امده است. صالحی و همکارانــش [۹ و ۱۰] مدلهـای شـبکه عصبـی مصنوعی و سیستم هیبریدی عصبی- فازی را برای پیشـگویی شـار و نـرخ دفع نمـک طعام از محلـول آب نمـک در فرآینـد نانوفیلتراسـیون بررسـی نمودنـد کـه از غلظتهای خـوراک، دما و فشارهای مختلـف 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) به عنوان روش آموزش در روش ANFIS استفاده گردید که این مدل نیز با دقت خوبی میزان شار و نرخ دفع را با کارآیی بالایی نسبت به نتایج تجربی نشان داد. در تحقیق حاضر مدلسازی غشاهای نانوکامپوزیت اولترافیلتراسیون پلے وینیلیدن فلوراید با استفادہ نانولولہ ہای 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 کے بیشترین شار و کمترین گرفتگے هستند؛ بهینهسازی پارامترها انجام و سیس با استفاده از پارامترهای بهینه، مجددا غشاها در آزمایشگاه ساخته شده و مقایسه بین مدل و نتایج تجربی صورت گرفت. سیس خطاها محاسبه گردید. با توجه به درنظر گرفتن مینیمم خطا، درصد بهینه

<sup>1.</sup> Flux Recovery Ratio

نوع نانولوله كربنى عاملدار	پليمر (./)	نانولوله کربنی عاملدار (٪)	زاویه تماس (°)	تخلخل (٪)	گرفتگی (٪)
	۱۵	•	λ٧/٢	۶۳	٣٩
	۱۵	•/•۵	እኖ/٣٣	٧٢	۴۱
	۱۵	• / \	YF/1Y	۷۵	۴۸
نانولول	۱۵	٠/٢	۲۵/۳۷	٨٠	۵۲
ب. کر ه	۱۵	۰ /٣	۷۳/۳۷	٨١	۴.
ზე 	۱۵	٠/۵	٧٣/١٣	٧۶	۴.
	۱۸	•	٩٣/٧٣	49	٣۴
الم	١٨	•/•۵	۸۷/۶۳	۶۳	47
بلى	١٨	•/1	۹۰/۲۳	۶۳	۵۵
	١٨	• /٢	۸۱/۹۷	۷۲	57
	١٨	• /٣	۸۲/۶	۶۸	۵۸
	۱۸	• /۵	٨٠/٢	<i><b>۶</b>۶</i>	۵۵
	۱۵	•	۸۷/۲	۶۳	۳۹
	۱۵	•/•۵	۸۴/۳۷	۶۷	٧۴
نانولول	۱۵	• / \	٧٩/٩	۷۲	٧٠
له کرب	۱۵	• /٢	۸۲/۲۳	٧٣	۶۹
· ۲۵	۱۵	۰ /٣	۷۴/۵۷	٧٠	۵۸
	۱۵	• /۵	Y 1/YY	۶٩	۶۰
٨>	١٨	•	٩٣/٧٣	49	٣۴
	١٨	۰/۰۵	۹۰/۸۳	88	۵۳
واره با	١٨	•/1	۸۹/۱۳	۶۷	54
	١٨	• /٢	۸۵/۴۷	<i>۶</i> ۹	٧٠
	١٨	۰ /٣	۸۳/۱۷	۶۷	54
	١٨	• / ۵	۸۴/۱۳	۶۵	۵۵
	۱۵	•	λ٧/٢	۶۳	٣٩
	۱۵	•/•۵	٨۵	۷۱	۷۲
	۱۵	•/1	٨۴	٧٣	٧۴
نانولول	۱۵	• /٢	۲۹/۸۳	٧٧	٧.
ب. کر	۱۵	۰ /٣	٧٩/۶	٧۴	69
ै७ ¦२	۱۵	• /۵	٨٠	٧٣	٧٠
ی با دی	١٨	•	٩٣/٧٣	49	٣۴
رہ باز	١٨	•/•۵	۸۱/۶۳	۶۷	۵۸
3	١٨	•/\	۸۱/۴	۶٩	۷۲
	١٨	• /٢	۲ ۸/۳۶	۶٩	۷۳
	١٨	• /٣	λ • /۶	54	۶۸
	١٨	• /۵	۷۹/۶	۶۲ ا	۶۵
	۱۵	•	٨٧/٢	۶۳	٣٩
	۱۵	•/•۵	¥٩/٧٣	۷۳	41
	۱۵	•/1	Y9/WY	٧۴	۵١
	۱۵	•/٢	۲۸/۱	٧٩	۵۸
انولوله	۱۵	• /٣	۲۴/۵۷	٨٠	۴۳
ىز. م	۱۵	•/۵	۷۱/۵۳	۷۵	۴۵
ا ی	١٨	•	٩٣/٧٣	49	774
	١٨	•/•۵	٨٧/٣٧	۶۳	44
	١٨	•/1	٨۴/١٣	۶۵	۵۷
	١٨	• /٢	۸۳/۶	γ.	۶۱
	١٨	۰ /٣	٨١/٢٧	۶٩	۵۷
	١٨	• /۵	Y9/YW	۶۷	۵۳

جدول ۱ دادههای مورد استفاده برای شبیهسازی پارامتر گرفتگی

شبکههای ساخته شده، مقدار بهینه برای تعداد نرونهای لایه پنهان برابر با ۱۵ بهدست 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 شبیه سازی داده های واقعی گرفتگے از شبکه عصبی پایے شعاعی استفادہ شدہ است. این نوع شبکه دارای ساختار ثابت سه لایهای است. همانند شبکه MLP، این شبکه دارای ۵ نرون در لایه ورودی و ۱ نیرون در لایه خروجی است. در ایـن مقالـه، شـبکه RBF بـا اسـتفاده از نرمافـزار متلـب پیادهسـازی شــده اسـت. در پیادهسـازی نرمافــزار متلب، این شبکه دارای دو پارامتر تنظیم به نامهای spread و بیشینه مقدار نرون ها است. مقدار بهینه این دو پارامتر منجر به بهترین عملکرد این شبکه می شود. 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 جهـش) طـی ۳۰ نسل، جـواب بهینـه را حاصـل کـرد. به این ترتیب پس از بررسی هوشمند و هدفمند تعداد زیادی راه حل، مقدار بهینه برای پارامترهای spread و بیشینه مقدار نرون ها بهترتیب برابر با ۰/۵ و ۳۵ بهدست آمد. یس از ساخته شدن شبکه با استفاده مجموعه دادههای اختصاص داده شده برای آمـوزش، دادههـای تسـت نیـز بـه شـبکه ارائـه شـد. عملک\_رد شـبکه RBF سـاخته شـده در شـکلهای ۳ و ۴ و همچنین یارامترهای 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 دیتواره و تکدیتواره بازی و امینی) در ساخت غشاها استفاده گردید و نوع نانولوله را نمى توان براى نرمافزار متلب تعريف نمود، لذا نوع نانولولهها در مدلسازی یکسان در نظر گرفته شـد. همانطـور کـه مشـخص اسـت تعـداد دادههـای بخـش آمـوزش شـبکه از مـوارد دیگـر بیشـتر اسـت، ایـن بـدان دلیـل اسـت کـه شـبکه براسـاس ایـن دادههـا ساخته می شود و باید معرف کل دادههای مورد استفاده باشد. مرحله بعدی در آمادهسازی دادهها نرمال کردن آن ها است. پیش از ورود داده ها به شـبکه هوشـمند، تمـام دادهها در بازه [۱ و ۱–] نرمـال شـدند. همسانسـازی محـدوده دادههـا باعـث بهبـود عملکرد شبکههای هوشمند می شود. مرحله بعدی، انتخاب ورودی مناسب برای شبکه هوشمند است. ایـن کار تأثیـر زیـادی در سـاخت شـبکه دارد. در حالـت کلے ورودی ھایے کے با خروجے ضریب ھمبستگی بالاتری دارند، باعث ایجاد تخمین های بهتری می شــوند.

### MLP

در این مرحله برای شبیه سازی 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 فعال سازی سیگموئید استفاده شد. تابع هدف نیز فعال سازی سیگموئید استفاده شد. تابع هدف نیز مینه مربعات خطا (RMSE)<sup>۱</sup> در نظر گرفته شد. برای یافتن تعداد بهینه نرون های لایه پنهان، شبکه های عصبی متعددی ساخته شد و عملکرد آن ها مورد بررسی قرار گرفت. برای این کار، برای تعداد نرون های ۲ تا ۳۰ عدد در لایه پنهان ساخته شد و در نهایت پس از مقایسه نتایج حاصل از

<sup>1.</sup> Root Mean Square Error



۲۳

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 پیش بینی شده توسط شبکه MLP با دادههای واقعی الف) دادههای آموزش و ب) دادههای تست

جدول ۲ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی MLP

تعداد دادەھا	ريشه ميانگين مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبى متوسط	ضریب همبستگی	
375	T/DAVDTV	•/• 4495	۲/۸۰۷۰۲۵	۰/٩۶۰۵٩	داده آموزش
١٢	۵/۸۱۵۵۳۶	۰/۱۰۱۷۹۶	٧/١۴٩٢٣۶	۰/۷۷۵۵۶۱	داده تست
۴۸	37/571047	•/•۶۳४۴١	W/1970VV	•/917557	کل دادەھا



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 پیش بینی شده توسط شبکه RBF با دادههای واقعی RBF الف) دادههای آموزش و ب) دادههای تست.

تعداد دادەھا	ريشه ميانگين مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبى متوسط	ضریب همبستگی	
۳۶	$V/\Lambda V \times 1 \cdot 1^{-15}$	1/81×1• -10	۲۳×۱۰ -۱۴	١	دادهآموزش
١٢	٣/۴•٣٩٣٧	•/•۵۳۱۵۶	4/111444	•/987858	داده تست
۴۸	١/٧٠١٩۶٨	•/• 71.78	1/082938	•/982408	کل دادەھا

جدول ۳ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی RBF.

### LSSVM

در ایـن مرحلـه بـرای پیش بینـی مقـدار گرفتگـی از سیسـتم هوشـمند کمینـه مربعـات بـردار پشـتیبان اسـتفاده شـده اسـت. ایـن شـبکه دارای دو پارامتـر تنظیـم بـه نامهـای γ و  $^2$  اسـت. مقـدار بهینـه بـرای ایـن دو پارامتـر بـا اسـتفاده از الگوریتـم شبیهسازی تبریـد مـورد محاسـبه قـرار گرفتنـد و بهترتیـب برابـر بـا ۱۵/۳۱ و ۶/۶۲ تعییـن شـدند. پـس از سـاخته شـدن شـبکه بـا اسـتفاده مجموعـه دادههـای اختصـاص داده شـبکه بـا اسـتفاده مجموعـه دادههـای اختصـاص داده شـده بـرای آمـوزش، دادههـای تسـت نیـز بـه شـبکه ارائـه شـد. عملکـرد شـبکه LSSVM سـاخته شـده در شـکلهای ۵ و ۶ و همچنیـن پارامترهـای آمـاری مرتبـط در جـدول ۴ ارائـه شـده اسـت.

برای پیش بینی مقادیر هدف توسط این روش ابتدا با استفاده از روش (SC) Subclast Clustering 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. به طور کلی دو روش برای آموزش وجود دارد. روش اول یک روش از پیش تعیین شده توسط نرمافزار متلب است که به آن روش هیبرید

گفته می شود. همچنین روش دومی که برای آموزش وجـود دارد اسـتفاده از الگوریتـم بهینهسازی بـه نـام الگوریتم بهینهسازی ازدحام ذرات است. در این روش ساختار سیستم استنتاج فازی ابتدایی بهعنوان یک مسئله بهینهسازی تلقیی می شود. 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. هـ مرحله از روش هیبرید دارای ۱۰ اگـر- آن گاه و هـر مرحلـه از روش PSO دارای ۲۰۰ اگـر- آن گاه است. پـس از سـاخته شـدن شـبکه بـا اسـتفاده مجموعـه دادههای اختصاص داده شده برای آموزش، دادههای تسبت نیز به شبکه ارائه شد. عملکرد شبکه ANFIS ساخته شده در شکلهای ۷ و ۸ و همچنین پارامترهای آماری مرتبط در جدول ۵ ارائه شـده اسـت.

مقایسه مدلها برای پارامتر گرفتگی

نتایـج کلـی مدلسـازی پارامتـر گرفتگـی در جـدول ۶ ارائـه شـده اسـت. مقایسـه مدلهـای مختلـف در شـکل ۹ آورده شـده اسـت.



شکل ۵ الف) نمودار متقاطع نشاندهنده ضریب همبستگی بین مقادیر واقعی و مقادیر پیش بینی 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	ريشه ميانگين مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبى متوسط	ضریب همبستگی	
۳۶	۵/۶۸۶۱۷۸	•/118897	٧/٣۶۵٨١۵	۰/۸۱۹۵۱	داده آموزش
١٢	W/TT91VV	•/•909V	۵/۵۱۳۲۰۵	•/97524	داده تست
۴۸	۵/۱۸۲۳۱۳	۰/۱۰۵۶	۶/۹۰۲۶۶۳	•/\\\\\	کل دادەھا



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

مرم من المعند ١٣٩٧، بهمن و اسفند ١٣٩٧



28

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

تعداد دادهها	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبى متوسط	ضریب همبستگی	
۳۶	٣/١٣×١• -10	8/88×1 • -14	۲/•۴×۱۰ -۱۵	١	دادهآموزش
١٢	۳/۵۳۱۳۵۹	•/• ۴٨٨۴۵	۴/۰۳д٩лд	•/988780	داده تست
۴۸	1/78088	•/•780•8	1/••9747	•/9,1878	کل دادەھا

جدول ۵ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی ANFIS

		ضريب همبستگی	انحراف نسبی متوسط	انحراف استاندار د	ریشه میانگین مربعات خطا	تعداد دادهها
	داده آموزش	•/٩۶•۵•٩	۲/۸۰۷۰۲۵	•/•4498	7/01/01/	۳۶
شبکه چند لایه	داده تست	۰/۷۷۵۵۶۱	٧/١۴٩٢٣۶	•/1•1798	۵/۸۱۵۵۳۶	١٢
	کل دادەھا	•/917887	4/X970VV	•/•۶۳٧۴١	37/871087	۴۸
	داده آموزش	١	۲۳/۸×۱۰ - ۱۴	۶۱/۱×۱۰ -۱۵	$\lambda \gamma \gamma \cdot \gamma \cdot \gamma \cdot \gamma$	۳۶
شبکه مدار شعاعی	داده تست	•/987898	4/111444	•/•۵۳۱۵۶	r/f•r9rv	١٢
	کل دادہ ھا	•/912908	1/087988	•/•78•79	۱/۲۰۱۹۶۸	۴۸
	داده آموزش	٠/٨١٩۵١	۷/۳۶۵۸۱۵	•/118898	۵/۶۸۶۱۷۸	۳۶
شبکه کمترین	داده تست	•/97884	۵/۵۱۳۲۰۵	•/•959V	W/TT91VV	١٢
مربعات پشتيبان	کل دادہ ھا	•/٨٣٨١۴٧	F/9 • 7FFT	۰/۱۰۵۶	۵/۱۸۲۳۱۳	۴۸
	داده آموزش	١	7•4×1• -10	۶/۲۶×۱۰ -۱۷	٣/١٣×١• -10	۳۶
شبکه هیبرید	داده تست	•/988780	۴/۰۳л۹лл	•/• ۴٨٨۴۵	٣/۵٣١٣۵٩	١٢
عصبی-فازی	کل دادەھا	•/913775	1/984	•/•780•8	1/78088	۴۸

جدول ۶ نتایج کلی مدلسازی با استفاده از شیوههای مختلف.



بنابرایین از جدول ۶ و شکل ۹ با توجه به پارامترهای خطا مشاهده می شود که شبکه های 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 نزدیک تر هستند، توانایی و کارایی بسیار بیشتری نسبت به شبکههای دیگر از خود نشان داده است.

### مدلسازی پارامتر شار

کل دادههای به دست آمده از تستهای مختلف در آزمایشگاه در جدول ۷ آورده شده است. در این حالت نیز ۸۰٪ دادههای بخش مدل سازی برای آموزش و ۲۰٪ برای تست شبکه به صورت تصادفی انتخاب شده است. با توجه به اینکه ۴ نوع نانولوله کربنی عامل دار مختلف (اسیدی، بازی و امینی) در ساخت غشاها استفاده گردید و نوع نانولوله را نمی توان برای نرمافزار متلب تعریف نمود، لذا نوع نانولولهها در مدل سازی یکسان در نظر گرفته شد.

### MLP

در این مرحله شبیه مراحل مدلسازی برای پیش بینی گرفتگی انجام شد. در این حالت، برای تعداد نرون های ۲ تا ۳۰ عدد در لایه پنهان ساخته شد و در نهایت پس از مقایسه نتایج حاصل از شبکه های ساخته شده، مقدار بهینه برای تعداد نرون های لایه پنهان برابر با ۳ به دست آمد. عملکرد شبکه MLP ساخته شده در شکل های ۱۰ و ۱۱ و همچنین پارامترهای آماری مرتبط در جدول ۸ ارائه شده است.

در این مرحله نیز شبیه مراحل 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 spread کرد. مقدار بهینه برای پارامترهای spread و بیشینه مقدار نرونها بهترتیب برابر با ۱/۰۸ و

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

در این مرحله نیز شبیه مراحل مدلسازی برای پیش بینی پارامتر گرفتگی انجام شد. مقدار بهینه برای دو پارامتر ۲ و  $\sigma$  با استفاده از الگوریتم شبیه سازی تبرید مورد محاسبه قرار گرفتند و بهترتیب برابر با ۱۵۶۶/۲۲ و ۸/۶۲ تعیین شدند. عملکرد شبکه LSSVM ساخته شده در شکلهای ۱۴ و ۱۵ و همچنین پارامترهای آماری مرتبط در جدول ۱۰ ارائه شده است.

### ANFIS

درایین مدلسازی هم شبیه مدلسازی 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 - آن گاه است. پس از ساخته شدن شبکه با استفاده مجموعه دادههای از ساخته شدن شبکه با استفاده مجموعه دادههای اختصاص داده شده برای آموزش، دادههای تست نیز به شبکه ارائه شد. عملکرد شبکه SIFIS ساخته شده درشکلهای 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 GA-RBF 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.

نوع نانولوله كربني عاملدار	پليمر (٪)	نانولوله کربنی عاملدار (٪)	زاويه تماس (°)	تخلخل (./)	شار
	۱۵	•	λ٧/٢	7/.98	149
	۱۵	• / • ۵	۸ <i>۴</i> /۳۳	۲ <u>/</u> .۷۲	۲۵۳
	۱۵	•/)	76/17	۲.Y۵	۳۳۸
نانولول	۱۵	٠/٢	۷۵/۳۷	·/.A •	٣۴۴
له کري	۱۵	٠/٣	۷۳/۳۷	۲.A.۱	۳۵۶
ئى ا	۱۵	•/۵	٧٣/١٣	۲/.Y۶	۳.۴
ند ديو	١٨	•	٩٣/٧٣	7.49	۱۵۳
واره ام	١٨	• / • ۵	۸۷/۶۳	۶۳/.	744
میلای	١٨	•/1	٩٠/٢٣	%. <b>8</b> r	797
	١٨	•/٢	۸١/٩٢	·/.YY	341
	١٨	٠/٣	۸۲/۶	·/.۶λ	297
	١٨	•/۵	٨٠/٢	·/.99	779
	۱۵	•	٨٧/٢	7/.98	149
	۱۵	• / • ۵	٨۴/٣٧	7/. <del>9</del> V	۲۱۷
	۱۵	•/\	¥٩/٩		۲۸۱
ئانول	۱۵	•/٢	۸۲/۲۳	٣٧./	794
وله كر	۱۵	• /٣	٧۴/۵٧	·/.Y•	۲۵۷
ر بنی .	۱۵	•/۵	Y1/YY	<u>٪</u> ۶۹	۲۳۲
چند ر	١٨	•	٩٣/٧٣	7.49	۱۵۳
بيواره	١٨	• / • ۵	٩٠/٨٣	°/.99	۲۱۲
بازی	١٨	•/)	٨٩/١٣	Έλ	۳۰۳
	١٨	•/٢	٨۵/۴٧	<u>٪</u> ۶۹	۳۴۳
	١٨	• /٣	٨٣/١٧	Έλ	794
	١٨	•/۵	۸۴/۱۳	۲.۶۵	740
	۱۵	•	λ٧/٢	7.88	149
	۱۵	• / • ۵	٨۵		۲۳۹
	۱۵	•/\	٨۴		۳۰۵
نانول	۱۵	•/٢	۷٩/٨٣	'.YY	۳۰۳
وله کر	۱۵	۰/٣	۲٩/۶	۲.Y۴	۲۷۰
بنى	۱۵	•/۵	٨٠	·/.Y٣	۲۲۸
نک د.	١٨	•	٩٣/٧٣	7.49	۱۵۳
بواره ب	١٨	• / • ۵	۸۱/۶۳	7/. <b>%</b> Y	۲۵۰
ازی	١٨	•/\	۸۱/۴	<u>٪</u> ۶۹	747
	١٨	•/٢	۸۱/۴۳	۲ <b>.</b> ۶۹	368
	١٨	• /٣	٨٠/۶	7.84	۳۱۰
	١٨	•/۵	¥٩/۶	7.97	79.
	۱۵		٨٧/٢	۲ <b>.</b> ۶۳	149
	۱۵	•/• ۵	٧٩/٧٣	۳۷٪	۲۷۰
	۱۵	•/1	٧٩/٣٧	7.74	390
	۱۵	•/٢	ΥΑ/ ١	٧٩./	۳۸۴
نانولو	۱۵	• /٣	٧۴/۵٧	·/.A •	362
بلغ كر	۱۵	•/۵	۷۱/۵۳		741
ي بني	١٨		٩٣/٧٣	7.49	۱۵۳
.بی	١٨	•/•۵	٨٧/٣٧	7/.98	۲۷۵
	١٨	•/1	۸۴/۱۳	۲.۶۵	۲۹۳
	١٨	•/٢	٨٣/۶	·/.Y •	85.
	١٨	٠/٣	٨١/٢٧	7/.۶۹	۳۱۲
	١٨	•/۵	V9/V٣	'/. <del>?</del> Y	۲۵۵

**جدول ۷** دادههای مورد استفاده در شبیهسازی برای پارامتر شار



**شکل۱۰** الف) نمودار متقاطع نشاندهنده ضریب همبستگی بین مقادیر پیش بینی 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	ريشه ميانگين مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبى متوسط	ضریب همبستگی	
375	•/•• ١١٨٨	4/10×1·->	•/•••144	١	دادهآموزش
١٢	20/19475	•/• \ 9 4 9 4	۶/۱۰۲۰۷۴	•/9799•7	داده تست
۴۸	۱۲/۵۹۷۳۸	•/•۴۵۱۹۸	1/676879	•/97•۶•٣	کل دادەھا



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 RBF الف) دادههای آموزش و ب) دادههای تست

	0				
تعداد دادەھا	ریشه میانگین مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبى متوسط	ضریب همبستگی	
۳۶	١/٢١٢٨١٨	·/··۴۴۵۷	•/٣•٣١١٧	•/१११۶४١	دادهآموزش
١٢	Y/TAYA I I	•/• ٣٧١٣٨	1/957475	•/٩٩١۵٩٨	داده تست
۴۸	٣/٧٩٢٢۶١	•/• 18898	·/VIAFAV	•/९९४•९	کل دادەھا

جدول ۹ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی RBF



شکل ۱۴ الف) نمودار متقاطع نشاندهنده ضریب همبستگی بین مقادیر واقعی و مقادیر پیش بینی 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

تعداد دادهها	ريشه ميانگين مربعات خطا	انحراف استاندارد	انحراف نسبى متوسط	ضریب همبستگی	
36	۳/۰۲۴۱۰۲	•/• \• ٩•٧	•/887•11	۰/۹۹۸۰۰۶	دادهآموزش
١٢	T1/9T11A	•/•٧•١٨٩	4/4771	•/919787	داده تست
۴۸	11/774	•/•۳۵۳۵۷	١/٦١٨٦١٨	•/9VTVT1	کل دادەھا

جدول ۱۰ پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی LSSVM



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 مربوط به شبکه طراحی شده ANFIS



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

<b>جدول ۱۱</b> پارامترهای آماری مربوط به شبکه عصبی ANFIS									
تعداد دادهها	ضريب همبستگی انحراف نسبی متوسط انحراف استاندارد ريشه ميانگين مربعات خطا تعداد دادهها								
378	۶/۴۸× ۱۰ -۱۴	۲/۵٩× ۱۰ -۱۴	۱/٩× ۱۰ -۱۴	١	داده آموزش				
١٢	1•/98484	•/•٣۶٣٧۶	۲/۷۰۵۳۸۴	۰/۹۸۱۰۰۲	داده تست				
۴۸	۵/۴۹۲۲۷۲	•/• ١٨۶٨٣	•/\$V\$٣۴\$	•/998889	کل دادەھا				

		_ , ,		0 0. 0,		
		ضریب همبستگی	انحراف نسبی متوسط	انحراف استاندارد	ریشهمیانگین مربعات خطا	تعداد دادهها
شبکه چند لایه	داده آموزش	١	•/•••144	۴/۱۵× ۱۰ -۶	•/••١١٨٨	۳۶
	داده تست	•/9799•7	8/10708	•/• \9494	20/19478	١٢
	کل دادەھا	۰/۹۷۰۶۰۳	1/222529	•/• 40191	۱۲/۵۹۷۳۸	۴۸
شبکه مدار	داده آموزش	•/९९९۶४١	•/٣•٣١١٧	•/••۴۴۵۷	1/515218	۳۶
شعاعی	داده تست	•/991098	1/925420	•/• ٣٧١٣٨	٧/٢٨٧٨١١	١٢
	کل دادەھا	•/९९४•९	•/٧١۵۴۵٧	•/• ١٣۶٩٣	٣/٧٩٢٢۶١	۴۸
شبكه كمترين	داده آموزش	۰/۹۹۸۰۰۶	•/887•11	•/• \ • ٩ • V	٣/•٢٤١٠٢	۳۶
مربعات پشتيبان	داده تست	•/919787	4/47741	•/• ٧• ١٨٩	51/93118	١٢
	کل دادەھا	•/٩٧٣٧٣١	1/818818	•/• ۳۵۳۵۷	11/774	۴۸
شبکه هیبرید	داده آموزش	١	1/9× 1 • -14	۲/۵٩× ۱۰ -۱۶	۶/۴۸× ۱۰ -۱۴	۳۶
عصبی- فازی	داده تست	•/981••2	۲/۷۰۵۳۸۴	•/• ٣۶٣٧۶	1./91494	١٢
	کل دادەھا	•/993889	•/\$V\$**\$	•/• ١٨۶٨٣	۵/۴۹۲۲۷۲	۴۸

جدول ۱۲ نتایج کلی مدل سازی با استفاده از شیوههای مختلف



مشهود است.

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

با استفاده از نتایج شبیهسازی برای هر نوع درصد یلیمر ( ۱۵٪ و ۱۸٪) غشاهای نانوکامیوزیت با استفاده از نانولولههای کربنے (چند دیںوارہ اسیدی، چند دیواره بازی و تک دیواره بازی) مجدداً در آزمایشگاه ساخته شده و سیس 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 نمی توان در نرمافزار متلب تعريف نمود، لذا نتايج خروجي از مدل براي همه نانولولـه کربنـی مختلـف در هـر درصـد پلیمـر یکسـان در نظر گرفته شد و سیس نتایج آن با نتایج مدل مقایسه و خطاها به شرح جدول ۱۴ محاسبه گردید. با توجه به درنظر گرفتن مینیمم خطا، ۰/۰۷٪ وزنے نانولولے کربنے تک دیوارہ بازی برای غشای نانوكامپوزيت پليمري ۱۵٪ PVDF و ۱۹/۰٪ وزنري نانولوك كربني تك ديواره بازي براي غشاي يليمري PVDF //۱۸ بهترین عملکرد را داشته است.

یافتن شرایط بهینه پارامترهای آزمایشگاهی

در این بخش هدف بهدست آوردن مقادیر بهینه برای شرایطی است کے طبی آن گرفتگے بے کمینے خود برسد و همزمان مقادیر شار نیز بالا باشد. برای این کار از بهترین مدل های 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 مجـذور کمینـه مربعـات خطـای مربـوط بـه هـر سـه پارامتـر بهعنـوان تابع هـدف اسـتفاده شـده است. نزدیک شدن پارامتر گرفتگی به کمترین مقدار نسبت به ماکزیمه 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 یافتین مقادیر بهینه در دو حالت پلیمر ۱۵ PVDF ٪ و ۱۸ PVDF٪ انجـام گرفتـه اسـت. در ابتـدا جمعیتـی تصادفی از پاسیخها محتمل به تعداد ۳۰۰ میورد ایجاد شد. سیس بعد از ۵۰ نسل به شرایط بهینه همگـرا میشـود. تابـع هـدف مقـدار مجـذور کمینـه مربعات پارامتر گرفتگی و شار در نظر گرفته شده است. شرايط بهينه هر دو يليمر جهت به حداقل رسیدن گرفتگی و حداکثر رسیدن شار در جدول ۱۳

درصد پليمر	درصد نانوذره	زاویه تماس (درجه)	درصد تخلخل	درصد میزان پسدهی پروتئین	درصد نرخ بازیابی شار	میزان شار (کیلوگرم/ساعت/مترمربع)			
۱۵	•/•٧٢۴٣۵۶۴	۸۸/۱۳۶۷۱۰۹۷	•/\740776	99/8575487	۷۸/۰۶	<b>TFV/T</b>			
۱۸	•/19187808	V9/9·V9· <i>55</i> F	•/٧٨۴٧٣۴	99/74584677	۶۸/۳۱	4 • 1/1			

جدول ۱۳ مقادیر بهینه پیشبینی شده

PVDF / ١٨			PVDF ٪۱۵			نوع غشا
۰/۱۹٪ نانولوله تک دیواره بازی	۰/۱۹٪ نانولوله چند دیواره اسیدی	۰/۱۹٪ نانولوله چند دیواره بازی	۰/۰۷٪ نانولوله تک دیواره بازی	۰/۰۷٪ نانولوله چند دیواره اسیدی	۰/۰۷٪ نانولوله چند دیواره بازی	
4.1/1	۴۰۱/۱	۴۰۱/۱	787/8	787/3	787/3	شار مدل
362	341	۳۵۰	781	74.	۲۵۹	شار اندازهگیری شده
۱.	۱۵	١٣	٢	١٠	٣	درصد خطا
۶۸/۳	۶۸/۳	۶۸/۳	۷۸	٧٨	۷۸	گرفتگی مدل
٧٠	57	٧۴	٧٣	۵١	٧٠	گرفتگی اندازه گیری شده
٢	٩	٨	۶	٣۴	۱.	درصد خطا
<b>۲</b> ٩/٩	٧٩/٩	<b>۲</b> ٩/٩	٨٨/١	٨٨/١	٨٨/١	زاويه تماس مدل
٨٠	٨٢	٨۴	٨٢	۷۵	٨١	زاویه تماس اندازهگیری شده
*	٣	۵	٧	۱۵	٨	درصد خطا
۷۸/۴	۲۸/۴	۲۸/۴	۶۲/۴	٨٢/۴	۸۲/۴	تخلخل مدل
۷۲	۶۸	۶٩	۷۵	٧٠	۲۲	تخلخل اندازه گیری شده
٨	١٣	١٢	٩	۱۵	١٣	درصد خطا

**جدول ۱۴** نتایج تستهای مدل و اعداد تجربی

نتيجه گيرى

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 نانولوله ها در مدلسازی یکسان در نظر گرفته شد. همان طور که شکلها و جداول نشان میدهند هر یک از مدلها با نسبتی مشخص توانایی لازم برای پیشبینی مقادیر شار و گرفتگی برای غشاهای نانوکامپوزیت را دارا هستند لذا برخی از آنها برای پیشبینی پارامترهای فوق برای غشاها پیشنهاد می در با توجه به ضریب همبستگی بهدست آمده برای هر سیستم و اینکه

در تحقیق حاضر، غشاهای اولترافیلتراسیون PVDF با دو غلظت ۱۵ و ۱۸٪ به روش وارونگی فاز و با استفاده از حلال NMP درآزمایشگاه ساخته شد. در ادامه برای بهبود خواص آبدوستی و کاهش گرفتگی این غشاها از نانولولههای کربنی (چند دیواره اسیدی، چند دیواره و تک دیواره بازی و آمینی) با غلظتهای مختلف ۱۰/۰، ۱/۰، ۲/۰، و ۱/۵٪ وزنی نسبت به وزن پلیمر استفاده شد. نتایج مدلسازی با استفاده از ۴ سیستم هوشمند شبکه عصبی چند لایه، شبکه عصبی پایه شعای، کمینه مربعات بردار پشتیبان و شبکه هیبرید عصبی- فازی انجام گرفت. با توجه

**پروش نفت** شماره ۱۰۳، بهمن و اسفند ۱۳۹۷

برای هر نوع درصد پلیمر، غشاهای نانوکامیوزیت (با نانولولەھای کربنے عاملدار چند دیوارہ اسیدی، چند دیـواره بـازی و تـک دیـواره بـازی) در آزمایشـگاه مجدداً ساخته شده و سیس تستهای شار، گرفتگی، زاویـه تمـاس و تخلخـل انجـام شـده و نتایـج تجربـی با نتایج مدل مقایسه و خطاها محاسبه گردید لذا به دلایل قبلی نتایج خروجی از مدل برای همه نانولولههای کربنے فوق درهر درصد پلیمر یکسان در نظر گرفته شد و سپس نتایج آن با نتایج مدل مقایسه و خطاها محاسبه گردید. با توجه به درنظر گرفتن مینیمه خطا، غشای نانوکامپوزیت ۰/۰۷٪ وزنے نانولولیہ کربنے تیک دیے ارہ عامل دار شدہ با گـروه هیدروکسـیل و غشـای نانوکامیوزیـت ۰/۱۹٪ وزنے نانولولے کربنے تےک دیےارہ عامےلدار شےدہ بےا گروه هیدروکسیل به ترتیب بهترین عملکرد را با یلیمرهای ۱۵٪ وزنے و ۱۸٪ وزنے PVDF داشته است.

بــرای شــبکههای هوشــمند اســت (بــرای پارامتــر گرفتگے مقدار R<sup>2</sup> بەترتیب برای مدل های GA-RBF و ANFIS برابـر ۹۸۲ و ۰/۹۸۳) و همچنین با توجیه به اینکه پارامتیر میانگیین مربعیات خطیا نزدییک بـه عـدد صفـر مناسـب بـرای شـبکه اسـت، لــذا بـرای پارامترهای شار و گرفتگی میتوان نتیجه گرفت که بهتریــن مــدل، مــدل GA-RBF و ANFIS هســتند. در بخــش بعــدی مدلســازی بــرای بهدســت آوردن مقادیــر بهینه (بیشترین گرفتگی و ماکزیمم شار) از بهترین مدل های ساخته شده برای هر دو خروجی استفاده شـد و سـپس از الگوریتـم ترکیبـی از الگوریتـم ژنتیـک و ازدحام ذرات مقاديـر بهينـه بهدسـت آمـد. بـراي يليمـر ۱۵ PVDF٪ مقـدار بهینـه نانـوذره ۰/۰۷٪ بـا مقـدار شـار ۲۶۷/۳ L/m²h، گرفتگـی ۷۸٪، زاویـه تمـاس ۸۸° و تخلخل ۸۲ ٪ و برای پلیمر ۱۸ PVDF ۸۱٪ مقدار بهینه نانوذرہ ۰/۱۹٪ با مقدار شار ۴۰۱/۱ L/m<sup>2</sup>h، گرفتگے ۶۸/۳٪، زاویـه تمـاس ۷۹/۹۰ و تخلخـل ۷۸٪ بهدسـت آم.د. سیس 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 transmembane 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

loids: 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 nano-tubes (MWCNTs) mixed polyacrylonitrile (PAN) ultrafiltration membranes," J. of Membr. Sci., Vol. 403–404, p. 101, 2012.

Petroleum Research Petroleum Research 2018 (August-September), Vol. 28, No. 102. 10-14 DOI: 10.22078/pr.2018.2937.2374

## Modeling the Prediction of Flux and Fouling Parameters of PVDF Nanocomposite Ultrafiltration Membranes with Carbon Nanotubes using Artificial Intelligence Networks

Mehran Mofakhami, Alireza Aghaei\*, and Maziar Sahba Yaghmaee

Material and energy research center- Karaj-Iran

a-aghaei@merc.ac.ir

DOI: 1./11.VA/pr.1.1A/71VF/1609

Received: February/12/2018 Accepted: July/22/2018

### INTRODUCTION

Membrane processes have been proposed in recent years as efficient methods for separation and purification. Since the hydrophilicity membranes with functional carbon nanotube have higher resistance to fouling than hydrophobic materials, the increase in hydrophilicity of polymer membranes is one of the basic solutions for membrane modification. In addition, carbon nanotubes have been considered by many researchers because of their desirable properties such as low mass density, high flexibility and effective interaction between carbon nanotube bonds and functional groups which have the proper properties to improve the performance of polymer membranes. Moreover, four intelligent systems (MLP, RBF, LSSVM, and ANFIS) and three optimization algorithms (GA, PSO, and SA) for modeling flux and fouling parameters have been used by us. Artificial neural networks have been successfully used to prevent membrane fouling during microfiltration and ultrafiltration of colloidal compounds, proteins as well as urban and industrial water treatment [1-5].

PREPARATION OF NANOCOMPOSITE MEMBRANE For manufacturing ultrafiltration membranes by phase inversion, a certain amount of nanotubes based on previous experiences and studies (0.05, 0.1, 0.2, 0.3, 0.5 wt.% compared to polymer)[6-7] has been distributed for half an hour in normal methylpyrrolidone solvent using ultrasonic bath and then Polyvinylidene fluoride polymer with a 15 wt.% (compared to the weight of the polymer) is solved in solution. Then cavity-causing polymer of polyvinylpyrrolidone in the amount of 1 wt.% (compared to the weight of the polymer) for pitting is added to the solution. After stirring the solution for 24 hours, it is placed in an oven of 55 °C for de-bubbling for 6 hours. After passing of the solution through a smooth glass substrate to reach ambient temperature, membrane layer thickness by a video cache with a thickness of 150 micrometers and at a constant speed was spread on the bed and immediately, immersed in the coagulation bath water. After about 10 minutes, the membrane is removed from the water bath and stored in a container which contains distilled water.

### MODELING

In this paper, modeling using artificial intelligence networks has been used to create a predictive model of fouling and flux parameters that uses 4 smart networks and three optimization algorithms.

### FOULING PARAMETER MODELING:

In this research, 80% of the modeling data for training and 20% for network testing were selected randomly.

### **MLP MODELING:**

At this stage, a 3-layer neural network was used to simulate . This three-layer neural network contains 5 neurons in the input layer and 1 neuron in the output layer. For both hidden and output layers, the tansig activation function was used. The objective function was also considered as the least mean squared error (LMSE). To find the optimal number of hidden neurons, several neural networks have been constructed and their function has been investigated. To do this, a neuron number of 2 to 30 has been hidden in the layer, and finally, after comparing the results of the constructed networks, the optimal value for the number of hidden layer neurons has been 15. After the network has been built using the data set devoted to training, test data has been also provided to the network. The function of the MLP network has been constructed, and the function is shown in Figures 1 and 2.In addition, the related statistical parameters have been presented in Table 1.



**Figure 1:** (a) The cross-sectional graph shows the correlation coefficient between predicted values and actual data by the MLP network for training and testing data. (b) The graph shows the relative error for the training and testing data for the MLP designed network.



Petroleum Research, 2018(August-September), Vol. 28, No. 100

**Figure 2:** Comparison between the values predicted by the MLP network with actual data (a) training data, (b) test data.

N	RMSE	STD	AARD	R <sup>2</sup>	
36	2.587527	0.04496	2.807025	0.960509	Training data
12	5.815536	0.101796	7.149236	0.775561	Test data
48	3.671047	0.063741	3.892577	0.917662	Total data

 Table 1: Statistical Parameters for the MLP Neural Network.

The modeling which has been achieved for other networks RBF, LSSVM, and ANFIS is similar to the above table and figures.

Comparison of Models for fouling Parameters are

following in Table 2. Modeling which has been simulated are similar to fouling parameter. Comparison of the models with each other for finding the flux parameter are shown in Table 3.

		R <sup>2</sup>	AARD	STD	RMSE	Ν
	Train data	0.960509	2.807025	0.04496	2.587527	36
MLP	Test data	0.775561	7.149236	0.101796	5.815536	12
	All data	0.917662	3.892577	0.063741	3.671047	48
	Train data	1	8.23E-14	1.61E-15	7.87E-14	36
GA-RBF	Test data	0.932464	4.171744	0.053156	3.403937	12
	All data	0.982956	1.042936	0.028026	1.701968	48
	Train data	0.81951	7.365815	0.116697	5.686178	36
LSSVM	Test data	0.92654	5.513205	0.06567	3.229177	12
	All data	0.838147	6.902663	0.1056	5.182313	48
	Train data	1	2.04E-15	6.26E-17	3.13E-15	36
Conjugate-ANFIS	Test data	0.963835	4.038988	0.048845	3.531359	12
	All data	0.983726	1.009747	0.028506	1.76568	48

**Table 2:** General results of modeling using different methods.

7

		R <sup>2</sup>	AARD	STD	RMSE	N
MLP GA-RBF LSSVM Conju-	Train data	1	0.000147	4.15E-06	0.001188	36
	Test data	0.929902	6.102074	0.089494	25.19476	12
	All data	0.970603	1.525629	0.045198	12.59738	48
	Train data	0.999671	0.303117	0.004457	1.212818	36
GA-RBF	Test data	0.991598	1.952475	0.027128	7.287811	12
	All data	0.99709	0.715457	0.013693	3.792261	48
LSSVM	Train data	0.998006	0.662018	0.010907	3.024102	36
	Test data	0.919262	4.488421	0.070189	21.93118	12
	All data	0.973731	1.618618	0.035357	11.274	48
Conju- gate-	Train data	1	1.9E-14	2.59E-16	6.48E-14	36
	Test data	0.981002	2.705384	0.036376	10.98454	12
ANFIS	All data	0.993869	0.676346	0.018683	5.492272	48

Table 3: General outcomes of modeling using different methods.

### FIND OPTIMAL LABORATORY PARAMETERS

In this section, the goal is to obtain optimal values for the conditions at which the fouling reaches its minimum, while the flux values are high. For this, the best models made last season for both outputs will be used. Moreover, a combination of genetic and particle swarm algorithms is working to find optimal values. At first, a random population of 300 responses was possible. Then, after 50 generations, it converges to optimal conditions. The target function is the least squared FRR and flux. Finally, convergence to the optimal values for the 15% PVDF membrane and 18% PVDF membrane are shown in Table 4.

Table 4: Estimated optimal values.

polymer	nanoparticle %	contact angle	porosity	BSA Rejection	FRR%	(Flux(L/m².hr
15	0.069212835	88.13671097	0.72680354	81.7703366	100.00	252.7
18	0.171222113	79.90790664	0.75124799	98.86853228	63.47	454.2

### CONCLUSIONS

In the present study, PVDF ultrafiltration membranes with two concentrations of 15 and 18% have been prepared by phase inversion using NMP solvent. In order to improve the hydrophilic properties and to reduce the fouling of these membranes, various acidic, basic, and amine carbon nanotubes with different concentrations have been used. The modeling results have been performed using four artificial intelligence networks. Finally, using optimization algorithms, the optimal parameters have been obtained according to the goals of the most flux and the minimum fouling for both PVDF (15 wt.% and 18 wt.%) polymers. The overall outcomes of this research can be summarized as follows: For modeling flux and fouling parameters, four intelligent multi-layer neural network (MLP), radial basic function (RBF), least squared support vector mechine (LSSVM) and adaptive neuro fuzzy interference systems (ANFIS) have been used. Errors have been calculated and compared with each other for each neural network system. According to the correlation coefficient obtained for each system and the correlation coefficient (> 0.85) is a good accuracy for neural networks, it can be concluded that for flux and fouling parameters, the best model are GA-RBF and Conjugate-ANFIS. In the next section, modeling has been used to obtain the optimal values of the best models which have been made for both outputs. Afterward, by using the combination of genetic algorithm with particle swarm optimization algorithim, optimal values have been obtained.

Finally, for 15% PVDF polymer, optimum nanoparticle content is 0.6% with flux 252.7% L/m2h, 100% fouling, 88° contact angle and 73% porosity; moreover, for 18% PVDF polymer, optimum nanoparticle content is 0.17% with flux volume 454.2 L/m2h, fouling 63.5%, contact angle 80° and porosity 75%.

### REFERENCES

[1]. Delgrange N., Cabassud C., Cabassud M., Durand-Bourlier L. and Lain J. M., *"Neural network for prediction of ultrafiltration transmembane pressure—application to drink water,"* Journal of Membr. Sci., Vol. 150, pp. 111, 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, pp. 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, pp. 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, pp. 69, 2004.

 [5]. Teodosiu C., Pastravanu D. and Macoveanu
 M., "Neural network model for ultrafiltration and backwashing," Water Research, Vol. 34, pp. 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, pp. 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, pp. 37, 2006.

[8]. Bowen W. R., Jones M. G. and Yousef H. N. S., *"Prediction of the rate of crossflow membrane ultrafiltration of col loids: a neural network approach,"* J. of Chem. Eng. Sci., Vol. 53, pp. 3793, 1998.

9