

سنتز و شناسایی ساختاری نانوذرات SiO_2 و CNT و پیش‌بینی هدایت حرارتی نانوسیالات آنها بر پایه آب

مریم ابارشی

گروه شیمی، دانشکده علوم، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران
ایمیل: abareschi@pnu.ac.ir

چکیده

در این پژوهش، نانوذرات دی‌اکسید سیلیسیم (SiO_2) و نانولوله‌های کربنی (CNT) سنتز و ساختار بلوری آنها به‌وسیله پراش پرتو ایکس (XRD) بررسی شد که نتایج، تشکیل فازهای مورد انتظار و خلوص مناسب را تأیید کرد. سپس نانوسیالات آبی حاوی این نانوذرات در کسرهای حجمی مختلف تهیه و هدایت حرارتی آنها در دماهای مشخص اندازه‌گیری شد. برای پیش‌بینی هدایت حرارتی، از شبکه عصبی مصنوعی پیش‌خور چندلایه (MLP) با ورودی‌های دما و کسر حجمی استفاده گردید. نتایج نشان داد شبکه‌ای با یک لایه پنهان و ۵ نورون بهترین عملکرد آماری را داشته و پیش‌بینی‌ها تطابق بسیار خوبی با داده‌های تجربی، بدون بایاس سیستماتیک، نشان می‌دهند. این مطالعه کارایی بالای ANN را در پیش‌بینی هدایت حرارتی نانوسیالات تأیید می‌کند.

کلیدواژه‌ها: نانوسیال؛ دی‌اکسید سیلیسیم؛ نانولوله‌های کربنی؛ پراش پرتو ایکس (XRD)؛ شبکه عصبی مصنوعی

Synthesis and structural characterization of SiO_2 and CNT nanoparticles and prediction of thermal conductivity of their water-based nanofluids

Maryam Abareschi

Department of Chemistry, Payame Noor University, Tehran, Iran

Abstract

In this study, silicon dioxide (SiO_2) nanoparticles and carbon nanotubes (CNTs) were synthesized, and their crystalline structures were characterized using X-ray diffraction (XRD), confirming the formation of the desired phases and suitable structural purity. Aqueous nanofluids containing these nanoparticles were then prepared at different volume fractions, and their thermal conductivity was measured at specified temperatures. To predict the thermal conductivity of the nanofluids, a multilayer perceptron (MLP) feedforward artificial neural network was employed, with temperature and volume fraction as inputs and thermal conductivity as the output. The results indicated that a network with one hidden layer containing five neurons provided the best performance based on statistical indicators. The ANN predictions showed excellent agreement with experimental data, demonstrating high accuracy and stability without systematic bias. These findings highlight the effectiveness of artificial neural networks as a reliable tool for predicting the thermal conductivity of nanofluids.

Keywords: Nanofluid; Silicon dioxide; Carbon nanotubes; X-ray diffraction (XRD); Artificial neural network

۱- مقدمه

با گسترش کاربردهای انتقال حرارت در سامانه‌های انرژی، خنک‌کاری و فرآیندهای صنعتی، استفاده از نانوسیالات به‌عنوان سیالاتی با خواص حرارتی بهبودیافته مورد توجه گسترده قرار گرفته است (Said & Sajid, 2023). نانوسیالات، حاصل پراکندگی نانوذرات با خواص فیزیکی و ساختاری ویژه در یک سیال پایه هستند و عملکرد حرارتی آن‌ها به‌طور مستقیم تحت تأثیر ویژگی‌های بلوری، اندازه ذرات، مورفولوژی و نحوه توزیع نانوذرات قرار دارد (Said & Sajid, 2023). در این میان، نانوذرات SiO_2 به‌دلیل پایداری شیمیایی مناسب و نانولوله‌های کربنی (CNT) به‌واسطه هدایت حرارتی ذاتی بالا، از گزینه‌های پرکاربرد در تهیه نانوسیالات آبی محسوب می‌شوند (Shahsavari, Khanmohammadi, & Toghraie, 2021).

خواص بلوری و ساختاری نانوذرات نقش کلیدی در رفتار حرارتی نانوسیالات ایفا می‌کند؛ به‌گونه‌ای که فاز بلوری، اندازه بلورک و کیفیت ساختار نانوذره می‌تواند بر بهره‌کنش ذره-سیال و در نتیجه هدایت حرارتی مؤثر سیستم تأثیرگذار باشد. از این‌رو، شناسایی بلوری نانوذرات با استفاده از روش‌هایی نظیر پراش پرتو ایکس (XRD) به‌عنوان یکی از ابزارهای اصلی در تحلیل ارتباط ساختار-خواص نانوسیالات مطرح است (Said & Sajid, 2023). مطالعات پیشین نشان داده‌اند که ترکیب نانوذرات مختلف و کنترل کسر حجمی آن‌ها می‌تواند منجر به بهبود قابل‌توجه هدایت حرارتی نسبت به سیال پایه شود (Said & Sajid, 2023; Shahsavari, Khanmohammadi, & Toghraie, 2021).

در کنار بررسی‌های تجربی، استفاده از روش‌های هوشمند داده‌محور برای مدل‌سازی و پیش‌بینی خواص ترموفیزیکی نانوسیالات در سال‌های اخیر رشد چشمگیری داشته است. شبکه‌های عصبی مصنوعی (ANN) به‌دلیل توانایی بالا در مدل‌سازی روابط غیرخطی بین پارامترهایی مانند دما، کسر حجمی و نوع نانوذره، به‌عنوان ابزاری کارآمد برای پیش‌بینی هدایت حرارتی نانوسیالات معرفی شده‌اند و در بسیاری از مطالعات نتایج دقیقی ارائه داده‌اند (Hemmat Esfe, Afrand, & Yan, 2020). در این پژوهش، ابتدا نانوذرات SiO_2 و CNT مطابق روش‌های گزارش‌شده در منابع معتبر سنتز شده و ساختار بلوری آن‌ها به‌وسیله آزمون XRD مورد بررسی قرار گرفته است. سپس نانوسیالات آبی حاوی این نانوذرات در کسرهای حجمی مختلف تهیه و هدایت حرارتی آن‌ها در بازه‌های مشخص اندازه‌گیری شده است. در ادامه، با بهره‌گیری از شبکه عصبی مصنوعی، پیش‌بینی هدایت حرارتی نانوسیالات انجام شده و دقت مدل در بازتولید داده‌های تجربی مورد ارزیابی قرار گرفته است. هدف این مطالعه، تبیین نقش ویژگی‌های بلوری نانوذرات در رفتار حرارتی نانوسیالات و ارائه یک مدل پیش‌بینی دقیق برای هدایت حرارتی آن‌ها است.

۲- مواد و روش‌ها

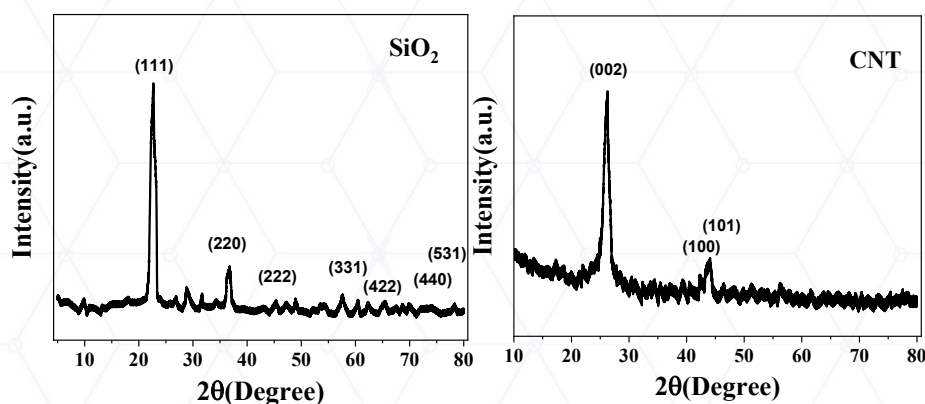
در این پژوهش، نانوذرات SiO_2 و CNT مطابق روش‌های گزارش‌شده در منابع معتبر سنتز شدند. به‌منظور بررسی ساختار بلوری و شناسایی فازهای تشکیل‌شده، آزمون پراش پرتو ایکس (XRD) برای هر دو نوع نانوذره انجام شد. الگوهای XRD توسط دستگاه پراش‌سنج EQUINOX 3000 (INEL, France) با هدف مس و طول موج $1/5406 \text{ nm}$ در زوایای بین ۵ تا ۸۰ درجه در دمای اتاق تعیین شد.

پس از شناسایی نانوذرات، نانوسیالات آبی حاوی نانوذرات SiO_2 و CNT در کسرهای حجمی مختلف به روش دو مرحله‌ای تهیه شدند. به‌منظور دستیابی به پراکندگی یکنواخت و پایداری مناسب، فرآیند همگن‌سازی مناسب اعمال گردید. هدایت حرارتی نانوسیالات تهیه‌شده در شرایط دمایی مشخص اندازه‌گیری و داده‌های تجربی استخراج شدند. در ادامه، به‌منظور پیش‌بینی هدایت حرارتی نانوسیالات، از شبکه عصبی مصنوعی (ANN) استفاده شد. دما و کسر حجمی و نسبت جرمی به‌عنوان ورودی‌های مدل و هدایت حرارتی به‌عنوان خروجی در نظر گرفته شد. به منظور افزایش تعداد داده‌ها به میزان قابل قبول، از داده‌های تجربی گزارش‌شده در مقاله Dalkılıç (Dalkılıç, A. et al. 2018) و همکاران استفاده شد. داده‌های تجربی به مجموعه‌های آموزش، اعتبارسنجی و آزمون تقسیم شده و دقت مدل با استفاده از شاخص‌های آماری مناسب ارزیابی گردید.

۳- بحث

الگوهای پراش پرتو ایکس (XRD) نانوذرات SiO_2 و CNT به منظور شناسایی فازهای بلوری و بررسی ویژگی‌های ساختاری آن‌ها در شکل (۱) ارائه شده است. همان‌طور که در الگوی XRD نانوذرات SiO_2 مشاهده می‌شود، پیک اصلی با شدت بالا در زاویه حدود $22^\circ \approx 2\theta$ ظاهر شده که به صفحه (۱۱۱) نسبت داده می‌شود. همچنین پیک‌های ضعیف‌تر در زوایای بالاتر مربوط به صفحات (۲۲۰)، (۲۲۲)، (۳۳۱)، (۴۲۲)، (۴۴۰) و (۵۳۱) قابل مشاهده هستند. حضور این پیک‌ها بیانگر تشکیل ساختار بلوری SiO_2 و تطابق مناسب آن با الگوهای گزارش شده در منابع معتبر می‌باشد. عدم مشاهده پیک‌های اضافی نشان‌دهنده خلوص فازی مناسب و نبود ناخالصی بلوری قابل تشخیص در نمونه سنتز شده است.

الگوی XRD مربوط به نانوذرات CNT نشان‌دهنده یک پیک غالب و تیز در زاویه حدود $26^\circ \approx 2\theta$ است که به صفحه (۰۰۲) ساختار گرافیتی نسبت داده می‌شود. این پیک مشخصه آرایش منظم لایه‌های کربنی در نانولوله‌های کربنی بوده و نشان‌دهنده کیفیت مناسب ساختار بلوری CNT ها می‌باشد. علاوه بر این، پیک‌های ضعیف‌تر مشاهده شده در زوایای بالاتر، که به صفحات (۱۰۰) و (۱۰۱) نسبت داده می‌شوند، مؤید حضور ساختار گرافیتی و نظم نسبی در نمونه CNT سنتز شده هستند. بررسی هم‌زمان نتایج XRD برای هر دو نانوذره نشان می‌دهد که نانوذرات SiO_2 و CNT از ساختار بلوری مناسب برای کاربرد در نانوسیالات برخوردار هستند. ویژگی‌های بلوری مشاهده شده، به ویژه کیفیت ساختاری CNT و فاز مشخص SiO_2 ، می‌توانند نقش مؤثری در برهم‌کنش ذره-سیال و در نهایت در بهبود هدایت حرارتی نانوسیالات ایفا کنند. از این‌رو، نتایج شناسایی بلوری به عنوان پایه‌ای برای تحلیل رفتار حرارتی و مدل‌سازی پیش‌بینی هدایت حرارتی در بخش‌های بعدی مورد استفاده قرار گرفته است.

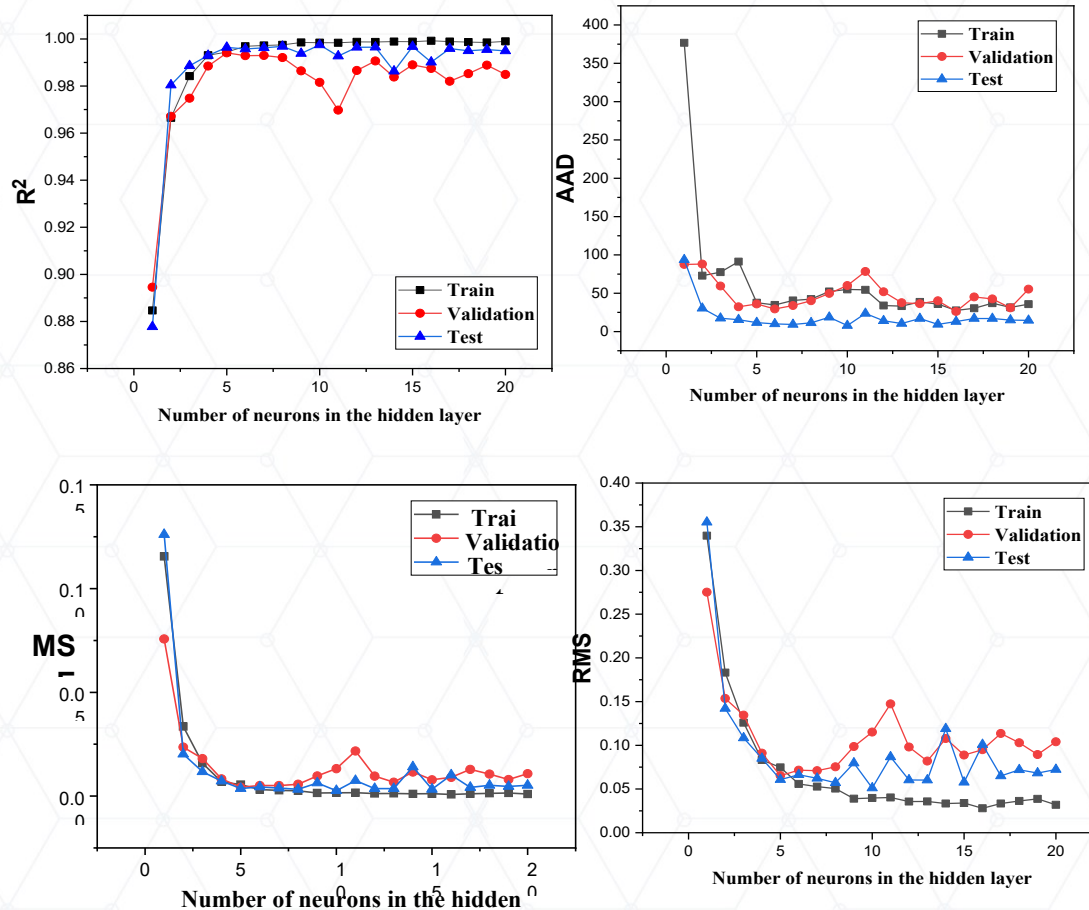


شکل (۱): الگوهای پراش پرتو ایکس (XRD) نانوذرات (الف) SiO_2 و (ب) CNT سنتز شده.

هدایت حرارتی نانوسیالات آبی حاوی نانوذرات SiO_2 و CNT در کسرهای حجمی مختلف و دماهای مشخص اندازه‌گیری شد. نتایج نشان داد که هدایت حرارتی نانوسیالات با افزایش دما و کسر حجمی نانوذرات افزایش می‌یابد که این رفتار با روندهای گزارش شده در مطالعات پیشین همخوانی دارد. داده‌های تجربی حاصل به عنوان مبنای توسعه مدل پیش‌بینی مورد استفاده قرار گرفتند.

به منظور پیش‌بینی هدایت حرارتی نانوسیالات آبی حاوی نانوذرات SiO_2 و CNT، از شبکه عصبی مصنوعی پیش‌خور از نوع چندلایه (MLP) استفاده شد. ساختار شبکه شامل یک لایه ورودی، یک لایه پنهان و یک لایه خروجی با یک نورون متناظر با هدایت حرارتی بود. تابع انتقال لایه پنهان از نوع تانژانت هایپربولیک (\tanh) و تابع انتقال لایه خروجی به صورت خطی در نظر گرفته شد. آموزش شبکه با استفاده از الگوریتم LBFGS و حداکثر ۵۰۰۰ تکرار انجام گرفت.

به منظور تعیین تعداد بهینه نورون‌های لایه پنهان، عملکرد شبکه برای مقادیر مختلف N مورد بررسی قرار گرفت. تغییرات ضریب تعیین (R^2) بر حسب تعداد نورون‌ها در شکل (۲-الف) نشان می‌دهد که مقدار R^2 با افزایش N تا مقدار ۵ به طور معنی‌داری افزایش یافته و پس از آن وارد ناحیه اشباع (plateau) می‌شود. برای مقادیر بزرگ‌تر از ۵ نورون، نوساناتی در رفتار مجموعه‌های اعتبارسنجی و آزمون مشاهده می‌شود که می‌تواند بیانگر بروز بیش‌برازش باشد. بر این اساس، مقدار $N = 5$ به عنوان اولین نقطه با دقت بالا و رفتار پایدار انتخاب شد.

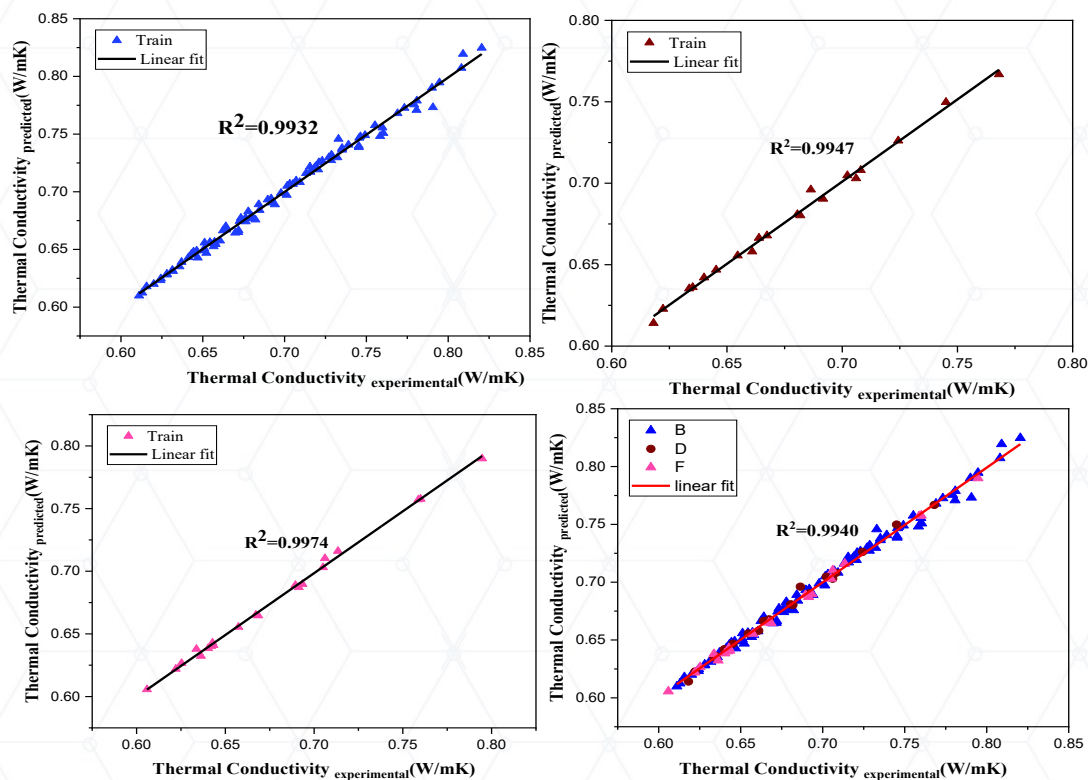


شکل (۲): الگوهای تغییرات شاخص‌های آماری عملکرد شبکه عصبی بر حسب تعداد نورون‌های لایه پنهان: (الف) ضریب تعیین (R^2)، (ب) میانگین مربعات خطا (MSE)، (ج) ریشه میانگین مربعات خطا (RMS)، (د) میانگین انحراف مطلق (AAD). بهترین عملکرد شبکه در $N = 5$ مشاهده می‌شود.

همچنین تغییرات میانگین مربعات خطا (MSE) بر حسب تعداد نورون‌ها که در شکل (۲-ب) ارائه شده است، نشان می‌دهد که مقدار MSE تا $N = 5$ به صورت یکنواخت کاهش یافته و پس از آن کاهش قابل توجهی مشاهده نمی‌شود. رفتار مشابهی برای شاخص‌های RMS و AAD مطابق شکل‌های (۲-ج) و (۲-د) به دست آمده است، به طوری که کمینه مؤثر این خطاها در حوالی $N = 5$ قرار دارد. این نتایج با اصل سادگی مدل (Occam's razor) همخوانی داشته و انتخاب ساده‌ترین ساختار با خطای کمتر را توجیه می‌کند.

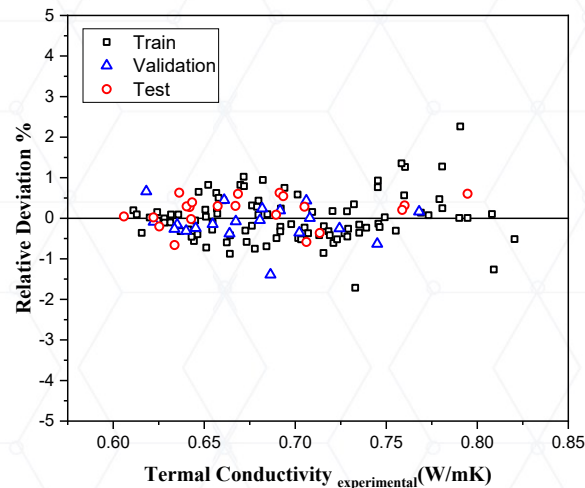
پیش‌پردازش داده‌ها نقش مهمی در بهبود عملکرد مدل ایفا کرد؛ به گونه‌ای که ورودی‌ها با استفاده از روش StandardScaler نرمال‌سازی شده و خروجی‌ها با تبدیل توان Yeo-Johnson به مقیاس مناسب منتقل شدند. داده‌ها به نسبت ۷۰٪ برای آموزش، ۱۵٪ برای اعتبارسنجی و ۱۵٪ برای آزمون تقسیم شدند که منجر به همگرایی پایدار شبکه در هر سه مجموعه گردید.

مقایسه مقادیر پیش‌بینی‌شده هدایت حرارتی با داده‌های تجربی که در شکل (۳) نشان داده شده است، بیانگر تطابق بسیار خوب مدل ANN با نتایج آزمایشگاهی می‌باشد. تمرکز نقاط داده پیرامون خط $y = x$ نشان‌دهنده دقت بالای پیش‌بینی و توانایی شبکه عصبی در مدل‌سازی روابط غیرخطی بین پارامترهای ورودی و هدایت حرارتی نانوسیالات است. مقادیر بالای ضریب تعیین برای مجموعه‌های آموزش، اعتبارسنجی و آزمون ($R^2 \approx 0.99$) مؤید عملکرد مناسب و پایداری مدل پیشنهادی می‌باشد.



شکل (۳): مقایسه مقادیر تجربی و پیش‌بینی‌شده هدایت حرارتی نانوسیالات آبی حاوی نانوذرات SiO_2 و CNT با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی (ANN).

علاوه بر این، توزیع انحراف نسبی (Relative Deviation) بین مقادیر تجربی و پیش‌بینی‌شده هدایت حرارتی که در شکل (۴) ارائه شده است، نشان می‌دهد که خطای پیش‌بینی مدل ANN در بازه محدودی متمرکز شده است. تمرکز مقادیر انحراف نسبی در اطراف صفر بیانگر نبود بایاس سیستماتیک در پیش‌بینی‌ها و عملکرد متعادل مدل برای کل داده‌ها می‌باشد. همچنین عدم مشاهده پراکندگی نامتقارن یا روند وابسته به مقدار هدایت حرارتی، نشان‌دهنده پایداری مدل و توانایی آن در پیش‌بینی دقیق هدایت حرارتی نانوسیالات در شرایط مختلف دما و کسر حجمی است.



شکل (۴). توزیع انحراف نسبی (Relative Deviation) بین مقادیر تجربی و پیش‌بینی شده هدایت حرارتی نانوسیالات با استفاده از شبکه عصبی مصنوعی (ANN).

۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، نانوذرات SiO_2 و CNT سنتز شده و ساختار بلوری آن‌ها با استفاده از آزمون XRD مورد بررسی قرار گرفت که نتایج بیانگر تشکیل فازهای مورد انتظار و خلوص ساختاری مناسب نانوذرات بود. نانوسیالات آبی حاوی این نانوذرات در کسرهای حجمی مختلف تهیه و هدایت حرارتی آن‌ها اندازه‌گیری شد. به منظور مدل‌سازی و پیش‌بینی هدایت حرارتی، از شبکه عصبی مصنوعی پیش‌خور استفاده گردید. نتایج نشان داد که شبکه‌ای با یک لایه پنهان و ۵ نورون، بهترین عملکرد را از نظر شاخص‌های آماری مختلف ارائه می‌دهد. تطابق بسیار خوب مقادیر پیش‌بینی شده با داده‌های تجربی نشان‌دهنده توانایی بالای روش ANN در مدل‌سازی روابط غیرخطی و پیش‌بینی دقیق هدایت حرارتی نانوسیالات است. نتایج این مطالعه بیانگر پتانسیل بالای روش‌های هوشمند داده‌محور در تحلیل و پیش‌بینی خواص ترموفیزیکی نانوسیالات می‌باشد.

۵- مراجع

- Dalkılıç, A., Yalçın, G., Küçükıyıldırım, B. O., Öztuna, S., Eker, A. A., Jumpholkul, C., Nakkaew, S., & Wongwises, S. 2018. Experimental study on the thermal conductivity of water-based CNT-SiO₂ hybrid nanofluids. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 99, 18–25.
- Hemmat Esfe, M., Afrand, M., & Yan, W. M. 2020. Prediction of thermal conductivity of nanofluids using artificial neural networks: A comparative study. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 116, 104825.
- Said, Z., & Sajid, M. H. (2023). Thermal conductivity and viscosity behavior of nanofluids: A comprehensive review. *Journal of Molecular Liquids*, 371, 122213.
- Shahsavari, A., Khanmohammadi, S., & Toghray, D. 2021. Recent advances in carbon-based nanofluids for heat transfer applications. *Nanomaterials*, 11(6), 1628.