

Нейро-нечеткая модель динамической вязкости водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния

Ю.В. БРУТТАН¹, В.Е. ГАЙШУН², Я.А. КОСЕНОК², Л.Н. МАРЧЕНКО^{1,2}

Статья посвящена построению нейро-нечеткой модели ANFIS для прогнозирования динамической вязкости от независимых входных параметров: концентрации диоксида кремния, кислотности, а также скорости сдвига. Фаззификация входных параметров осуществлялась с помощью гауссовских функций принадлежности. На основе подхода Сугено рассматривалось 36 правил if-then с линейной функцией вывода. Для обучения сети использовался гибридный метод обучения, включающий комбинацию методов градиентного спуска и наименьших квадратов. Эффективность построенной модели оценивалась на основе средней квадратической ошибки RMSE. Предложенная нейро-нечеткая модель ANFIS показала лучшую точность в сравнении с предложенными в литературе моделями искусственного интеллекта.

Ключевые слова: наножидкость, концентрация SiO₂, кислотность pH, динамическая вязкость, регрессия, нейро-нечеткая модель.

The article is devoted to the construction of a neuro-fuzzy model ANFIS for predicting dynamic viscosity from independent input parameters: silicon dioxide concentration, acidity, and shear rate. Fuzzification of the input parameters was carried out using Gaussian membership functions. Based on Sugeno inference, 36 if-then rules with a linear output function were considered. A hybrid learning method was used to train the network, including a combination of gradient descent and least squares methods. The efficiency of the constructed model was estimated based on the root mean square error RMSE. The proposed neuro-fuzzy model ANFIS showed better accuracy in comparison with the artificial neural network models proposed in the literature.

Keywords: nanofluid, SiO₂ concentration, pH acidity, dynamic viscosity, regression, neuro-fuzzy model.

Введение. Наножидкости – это относительно новые материалы, которые находят широкое применение для улучшения термодинамических характеристик систем солнечной энергии, машин, работающих на электричестве, и в других производственных процессах [1]. Поведение наножидкости всегда связано с фильтрацией, поэтому важнейшим параметром высококонцентрированных суспензий с наночастицами является вязкость, которая представляет собой способность сопротивляться потоку и определяет реологические свойства наножидкости [2]. За последние годы проведены исследования вязкости наножидкостей [3], [4], рассмотрены эффекты независимых переменных, таких как температура, форма, диаметр и объемная доля частиц, кислотность и другие [5]. Для оценки зависимости вязкости наножидкости от различных показателей используются теоретические и эмпирические модели, которые базируются на упрощенных предположениях [3]–[5]. В последнее время для моделирования поведения вязкости жидкостей, в том числе и наножидкостей, получили широкое распространение модели искусственного интеллекта, которые позволяют моделировать вязкость даже с зашумленными и неполными данными. Обзор и анализ моделей и методов для прогнозирования реологического поведения жидкости, в том числе и наножидкостей, проводится в [6], [7]. Отмечено, что большинство этих исследований используют искусственные нейронные сети, алгоритмы машинного обучения, сравнивают полученные результаты с результатами теоретических моделей и эмпирических корреляций, при этом интеллектуальные модели имеют более высокую точность. Также для прогнозирования вязкости и других реологических свойств используются гибридные модели, основанные на использовании алгоритмов нечеткой логики и искусственных нейронных сетей [8], [9], [10], [11], [12]. Использование таких гибридных моделей учитывает нелинейные зависимости (вязкость может резко меняться при малых изменениях температуры) и может обучаться на экспериментальных данных без строгой физической модели.

Представленные модели могут быть адаптированы к аналогичному поведению различных наножидкостей [13], однако общая модель поведения вязкости с учетом особенностей протекания фильтрации конкретной наножидкости окончательно не определена.

Предметом настоящего исследования является построение нейро-нечеткой модели ANFIS для прогнозирования высококонцентрированных суспензий диоксида кремния. Данные суспен-

зии являются кинетически неустойчивыми системами, что приводит к снижению производительности и ухудшению качества наноматериалов. Для повышения стабильности высококонцентрированных суспензий в композицию вводили специальные стабилизирующие добавки и поверхностно-активные вещества, концентрацией которых можно изменять лиотропные свойства суспензии и тем самым препятствовать образованию структур. Поэтому весьма важно изучение поведения динамической вязкости таких наножидкостей и выявление более точных зависимостей динамической вязкости от входных параметров на основе нечеткого подхода.

Основная часть. Для изготовления водных суспензий на основе диоксида кремния применялись следующие химические вещества: наноразмерный порошок диоксида кремния SiO_2 с удельной поверхностью $50 \text{ м}^2/\text{г}$, ОХ-50 (Evonik); этилендиамин (ЭДА); гидроксид натрия (NaOH); ортофосфорная кислота (H_3PO_4); поверхностно-активные вещества (ПАВ); этиленгликоль; вода дистиллированная. Получение концентрированных суспензий предусматривало гомогенное распределение порошка диоксида кремния SiO_2 в жидкости. Для контроля величины pH водных композиций использовался лабораторный микропроцессорный ионметр типа И-160. Динамическую вязкость изучали с помощью ротационного вискозиметра «REOTEST 2.1» с использованием термостатированной цилиндрической измерительной системы (зазор 0,4 мм, объем 10 мл) в диапазоне скоростей сдвига от 3 до $1312,2 \text{ с}^{-1}$. Измерения проводили при температуре 20°C , точность поддержания температуры не менее $0,1^\circ\text{C}$. Погрешность измерений реологических характеристик составляет менее 3 %.

В результате изучения реологического поведения водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния [14], [15], [16], [17] показано, что динамическая вязкость η ($\text{мПа} \cdot \text{с}$) данной суспензии изменяется при варьировании концентрации диоксида кремния SiO_2 (%), кислотности pH и изменении рабочих условий, то есть скорости сдвига γ (с^{-1}), которые и рассматривались в качестве входных параметров. Концентрация диоксида кремния SiO_2 регулирует стабильность суспензии, интервал вариации ее экспериментальных значений составил 16 %–47 %. Кислотность pH способствует растворению диоксида кремния SiO_2 , тем самым воздействует на реологические свойства суспензий. Измерения проводились на 12 скоростях сдвига γ : 3; 5,4; 9; 16,2; 27; 48,6; 81; 145,8; 243; 437,4; 729; 1312 с^{-1} . На основе варьирования входных параметров концентраций суспензии при различных скоростях сдвига γ была сформирована база собственных экспериментальных данных из 177 наблюдений.

Нейро-нечеткая система ANFIS (Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System) – это гибридная система, сочетающая нейронные сети и нечеткую логику, которая широко применяется для моделирования сложных систем и прогнозирования. ANFIS используется для обнаружения сложных и нелинейных отношений [18] между входными и выходными параметрами [19]. Оптимизация и обучение функций принадлежности выполняется согласно алгоритмам построения искусственных нейронных сетей. На рисунке 1 представлена структура нейро-нечеткой системы вывода ANFIS, которая состоит из пяти слоев [20].

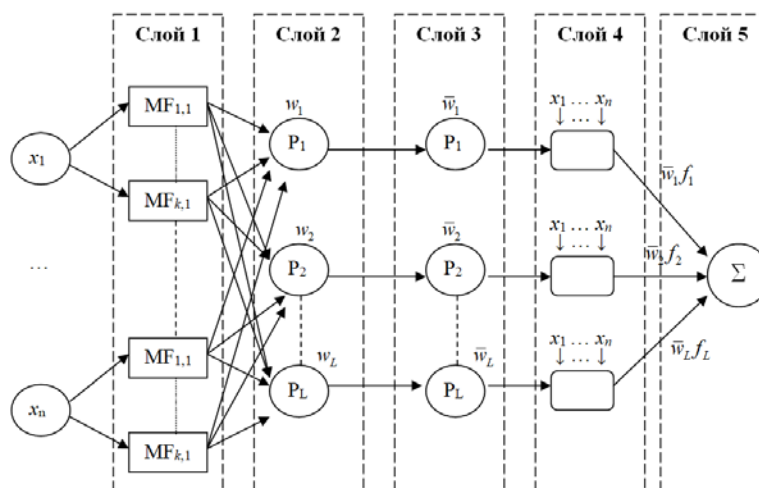


Рисунок 1 – Структура нейро-нечеткой системы вывода

Слой 1 (адаптивный) – фаззификация, то есть определение нечетких лингвистических переменных для четких входных параметров $x_1, \dots, x_n$. Выходами слоя являются значения функций принадлежности μ_{ij} , $i = 1, \dots, k$, $j = 1, \dots, n$. Различные функции принадлежности (MF) в этом слое производят оценки принадлежности из входных переменных.

Слой 2 (неадаптивный) – импликация, то есть определение нечетких правил if-then. Каждый фиксированный узел в слое устанавливает правила и номер системы нечеткого вывода. Выходами нейронов этого слоя являются веса w_q , $q = 1, \dots, L$, истинности посылок каждого правила базы знаний системы.

Слой 3 (неадаптивный) – нормализация, то есть происходит нормализация весов активации правил. Неадаптивные узлы этого слоя определяются как $\bar{w}_q = \frac{w_q}{\sum_{q=1}^n w_q}$, $q = 1, \dots, L$.

Слой 4 (адаптивный) – дефаззификация. В этом слое реализуется модель нечеткого логического вывода, вычисляются значения $\bar{w}_q f_q$ заключений по каждому правилу, где f_q – функции от входных параметров.

Слой 5 (неадаптивный) – выход, на котором вычисляется окончательное значение путем суммирования результатов предыдущего слоя $Y = \sum_{q=1}^L \bar{w}_q f_q + \bar{w}_0$.

В процессе обучения происходит настройка параметров предпосылок и параметров правил вывода.

Для прогнозирования динамической вязкости η (выход Y) в зависимости от концентрации диоксида кремния SiO_2 (входной параметр $X1$), кислотности pH (входной параметр $X2$), скорости сдвига γ (входной параметр $X3$) разработана нейро-нечеткая система вывода. Лингвистические переменные входных параметров определялись следующим образом:

– концентрация диоксида кремния SiO_2 :

$X1 = \{ L - \text{низкая}, M - \text{средняя}, H - \text{высокая} \};$

– кислотность pH:

$X2 = \{ L - \text{кислая}, M - \text{нейтральная}, H - \text{щелочная} \};$

– скорость сдвига γ :

$X3 = \{ L - \text{низкая}, M - \text{средняя}, H - \text{высокая}; VH - \text{очень высокая} \};$

– динамическая вязкости η :

$Y = \{ L - \text{низкая}, M - \text{средняя}, H - \text{высокая} \}.$

На слое фаззификации четкие входные параметры преобразовывались в нечеткие с ис-

пользованием соответствующих гауссовских функций принадлежности типа $f(x) = e^{-\left(\frac{x-c}{o}\right)^2}$, где x – значение, переданное входным слоем, c – центр параметра, подаваемого в функцию, а σ – параметр дисперсии. Гауссовские функции выбраны из-за их гладкости и способности аппроксимировать нелинейные зависимости.

При моделировании рассматривалось 36 правил Сугено if-then с линейными функциями вывода

If $X1$ is A and $X2$ is B and $X3$ is C then Y is out $a_0 + a_1X1 + a_2X2 + a_3X3$,

где a_0, a_1, a_2, a_3 – определяемые коэффициенты.

Для обучения сети использовался гибридный метод обучения – комбинация метода градиентного спуска и метода наименьших квадратов [21]. На первом этапе параметры предпосылок фиксированы и настраиваются параметры заключений методом наименьших квадратов. На втором этапе фиксируются параметры заключений и уточняются параметры предпосылок методом градиентного спуска. Параметры алгоритма: количество итераций – 50, допустимая ошибка обучения – 0. Сходимость наблюдалась уже после 35 итераций.

Для обучения модели данные были разделены на обучающую (142 наблюдения) и тестовую (35 наблюдений) выборки методом случайной выборки с сохранением распределения по pH. Для исключения переобучения использовано 5-кратное перекрестное проверочное тестирование. Архитектура ANFIS подбиралась путем минимизации $RMSE$ на валидационном подмножестве (20 % от обучающих данных). Количество правил обеспечило баланс между точностью и сложностью модели.

Входные (концентрация диоксида кремния SiO_2 , кислотность pH, скорость сдвига γ) и выходные параметры (динамическая вязкость η) предварительно были нормализованы. Для скорости сдвига γ и динамической вязкости η использовалась логарифмическая нормализация [22] по формуле:

$$y_i = \frac{\ln(x_i) - \ln(x_{\min})}{\ln(x_{\max}) - \ln(x_{\min})},$$

для остальных входных параметров – линейная нормализация:

$$y_i = \frac{x_i - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}},$$

где y_i , x_i , $x_{\min}$, $x_{\max}$, – нормализованные и экспериментальные значения, минимальное и максимальное значения соответственно.

Проверка адекватности модели ANFIS проводилась с использованием как статистической метрики *RMSE*:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\eta_i - \hat{\eta}_i)^2}$$

где η_i – эмпирические значения динамической вязкости, $\hat{\eta}_i$ – оценочные (предсказанные) значения динамической вязкости, n – число наблюдений.

В работе [23] для прогнозирования динамической вязкости от независимых входных параметров (концентрации диоксида кремния, кислотности, а также скорости сдвига) построены модели линейной регрессии, многослойного персептрона (MLP) радиальной базисной функции (RBF), случайного леса (RF), метода машин опорных векторов (SVM). Значения статистической метрики *RMSE* (обучающая выборка) для построенных моделей в [23] и модели ANFIS представлены в таблице 1.

Таблица 1 – Сравнение моделей искусственного интеллекта предсказания динамической вязкости

Модель	Статистическая метрика <i>RMSE</i>
Модель линейной регрессии	0,663
MLP 3-10-1	0,130
MLP 3-7-1	0,148
RBF 3-11-1	0,114
RF	0,084
SVM	0,253
ANFIS	0,011

В литературе приводятся различные исследования для создания прогнозной модели вязкости наножидкости с использованием моделей и методов искусственного интеллекта. В работе [24] использовалась модель *MLP* для моделирования вязкости различных наножидкостей, в том числе и диоксида кремния SiO_2 , точность моделирования составила $RMSE = 0,1$. Модель *LS-SVM* использовалась для прогнозирования вязкости наножидкостей с наночастицами четырех типов, включая SiO_2 , точность $RMSE = 37,084$ [25]. В данном исследовании точность $RMSE$ моделирования на основе ANFIS имеет меньшую ошибку, чем результаты анализа ошибок $RMSE$ в других исследованиях прогнозирования динамической вязкости водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния SiO_2 .

Нейро-нечеткая модель ANFIS динамической вязкости (Y) высококонцентрированных суспензий от концентрации диоксида кремния (X_1), кислотности (X_2) и скорости сдвига (X_3) по нормированным данным создает гладкую поверхность, которая показывает высокую точность моделирования (рисунок 2).

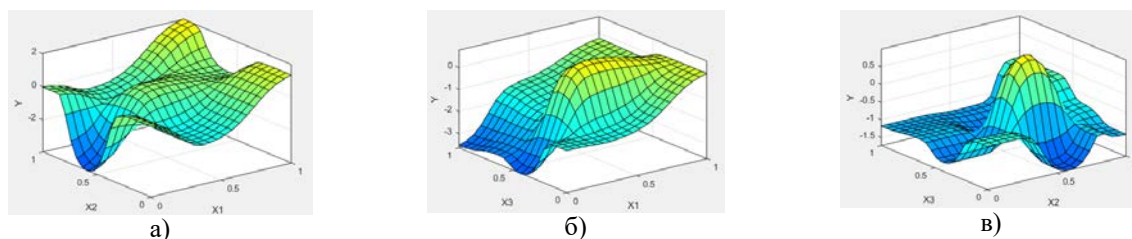


Рисунок 2 – Трехмерный сетчатый график разработанной нейро-нечеткой модели ANFIS зависимости динамической вязкости (Y) от: а) концентрации диоксида кремния (X_1) и кислотности (X_2); б) концентрации диоксида кремния (X_1) и скорости сдвига (X_3), в) кислотности (X_2) и скорости сдвига (X_3)

Максимальная вязкость наблюдается при высоких концентрациях SiO_2 (40–47 %) и низких скоростях сдвига ($<10 \text{ c}^{-1}$), что согласуется с литературой [15], [17].

Нечетко-нейронная модель ANFIS обладает высокой точностью при прогнозировании динамической вязкости водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния в зависимости от входных параметров и не противоречит аналогичным исследованиям. Полученные результаты могут быть использованы для разработки новых водных суспензий диоксида кремния, которые находят практическое применение при изготовлении новых наноматериалов.

Закключение. Данное исследование предлагает новый подход к прогнозированию динамической вязкости высококонцентрированной водной суспензии на основе наноразмерных частиц диоксида кремния при различных составах и рабочих условиях. Использование гибридной модели ANFIS, которая сочетает преимущества нечеткой логики и искусственных нейронных сетей, для прогнозирования динамической вязкости позволяет эффективно работать с нелинейными зависимостями и обучаться на экспериментальных данных без необходимости строгой физической модели. Для преобразования четких входных данных в нечеткие использовались гауссовские функции принадлежности, которые обеспечивает гибкость модели. Было рассмотрено 36 правил if-then с линейной функцией вывода, что позволило охватить широкий спектр возможных комбинаций входных параметров. Для обучения сети применен гибридный метод, сочетающий градиентный спуск и метод наименьших квадратов, обеспечивающий высокую точность настройки параметров модели. Полученные результаты сравнимы с данными из литературы, где точность моделей для наножидкостей на основе SiO_2 также оценивалась с использованием различных методов машинного обучения, и предложенная модель ANFIS демонстрирует лучшие показатели точности. Результаты работы могут быть применены для разработки новых композиционных материалов на основе наночастиц SiO_2 , что важно для современной промышленности.

Статья подготовлена в рамках реализации проекта «Научно-образовательный математический центр “Северо-Западный центр математических исследований имени Софьи Ковалевской”» (соглашение № 075-02-2025-1607 от 27 февраля 2025 г).

Литература

1. Bahiraei, M. Artificial intelligence in the field of nanofluids : a review on applications and potential future directions / M. Bahiraei, S. Heshmatian, H. Moayedi // Powder Technol. – 2019. – Vol. 353. – P. 276–301.
2. Chen, H. Rheological behaviour of ethylene glycol based titania nanofluids / H. Chen, Y. Ding, Y. He, C. Tan // Chemical Physics Letters. – 2007. – Vol. 444, № 4-6. – P. 333–337.
3. Ahmadi, M. H. Precise smart model for estimating dynamic viscosity of SiO_2 /ethylene glycol-water nanofluid / M. H. Ahmadi, M. Sadeghzadeh, H. Maddah [et al.] // Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics. – 2019. – Vol. 13., № 1. – P. 1095–1105.
4. Rudyak, V. Y. On the dependence of the viscosity coefficient of nanofluids on particle size and temperature / V. Y. Rudyak, S. Dimov, V. Kuznetsov // Tech. Phys. Lett. – 2013. – Vol. 39. – P. 779–782.
5. Baghban, A. Developing an ANFISbased swarm concept model for estimating the relative viscosity of nanofluids / A. Baghban, A. Jalali, M. Shafiee [et al.] // Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics. – 2019. – Vol. 13. – P. 26–39.
6. Hemmati-Sarapardeh, A. On the evaluation of the viscosity of nanofluid systems: Modeling and data assessment / A. Hemmati-Sarapardeh, A. Varamesh, M. M. Husein, K. Karan // Renewable and Sustainable Energy Re-viws. – 2018. – Vol. 81. – P. 313–329.

7. Гаджимагомедова, З. М. Технологии искусственного интеллекта для наноструктурных материалов / З. М. Гаджимагомедова // Российские нанотехнологии [и др.]. – 2022. – Т. 17, № 1. – С. 3–13.
8. Beigzadeh, R. An intelligent approach to predict the viscosity of water/glycerin containing Cu Nanoparticles : Neuro fuzzy inference system (ANFIS) / R. Beigzadeh // Model Journal of Chemical and Petroleum Engineering. – 2021. – № 55 (1). – P. 163–175.
9. Gong, Han. Proposing an adaptive neuro-fuzzy system-based swarm concept method for predicting the physical properties of nanofluids / Han Gong, Amir Seraj // International Journal of Chemical Engineering. – 2022. – № 3. – 11 p.
10. Ibrahim, M. Alarifi. Feasibility of ANFIS-PSO and ANFIS-GA Models in Predicting Thermophysical Properties of Al₂O₃-MWCNT/Oil Hybrid / Ibrahim M. Alarifi [et al.] // Materials (Basel) – 2019. – № 12 (21). – P. 28.
11. Bandar, M. Fadhla. Dynamic viscosity modeling of nanofluids with MgO nanoparticles by utilizing intelligent methods / Bandar M. Fadhla [et al.] // Energy Reports. – 2023. – Vol. 9. – P. 5397–5403.
12. Yazeed, AbuShanab. Accurate prediction of dynamic viscosity of polyalpha-olefin boron nitride nanofluids using machine learning / Yazeed AbuShanab [et al.] // Heliyon Research Article. – 2023. – Vol. 9, is. 6. – e 16716.
13. Bahiuddin I. Review of modeling schemes and machine learning algorithms for fluid rheological behavior analysis / I. Bahiuddin, S. A. Mazlan [et al.] // Journal of the Mechanical Behavior of Materials. – 2024 – Vol. 33, № 1. – 21 p.
14. Косенок, Я. А. Реологические свойства композиционных суспензий на основе силикатного золя и наноразмерных частиц диоксида кремния для применения в электронике / Я. А. Косенок [и др.] // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. – 2014. – Т. 12, № 2. – С. 269–277.
15. Рудяк, В. Я. Современное состояние исследований вязкости наножидкостей / В. Я. Рудяк // Журнал Вестник НГУ. – 2015. – Т. 10, № 1. – С. 5–22.
16. Косенок, Я. А. Концентрированные композиции на основе наноразмерных частиц диоксида кремния, полученные по ионообменной технологии / Я. А. Косенок [и др.] // Вестник Гомельского гос. технич. ун-та им. П.О. Сухого. – 2022. – № 3 (90). – С. 55–61.
17. Prasad T. R. Вязкость и теплопроводность наножидкостей кобальта и диоксида кремния в оптимальной смеси глицерина и воды / T. R. Prasad [et al.] // Коллоидный журнал. – 2022. – Т. 84, № 2. – С. 213–227.
18. D. Karaboga. Adaptive network based fuzzy inference system (ANFIS) training approaches : a comprehensive survey / D. Karaboga, E. Kaya // Artif. Intell. Rev. – 2019. – № 52. – P. 2263–2293.
19. Samui, P. Spatial variability of rock depth using adaptive neuro-fuzzy inference system (ANFIS) and multivariate adaptive regression spline (MARS) / P. Samui, D. Kim // Env. Earth Sc. – 2014. – № 73 – P. 4265–4272.
20. Леоненков, А. В. Нечеткое моделирование в среде MATLAB и fuzzyTECH / А. В. Леоненков. – СПб. : БХВ-Петербург, 2005. – 736 с.
21. Jang, J.-S.R. ANFIS : Adaptive-network-based fuzzy inference system / J.-S. R. Jang // IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics. – 1993. – № 23 (3). – P. 665–685.
22. Bahiuddin, I. Comparing the linear and logarithm normalized extreme learning machine in flow curve modeling of magnetorheological fluid / I. Bahiuddin [et al.] // Indonesian Journal of Electrical Engineering and Computer Science. – 2019. – № 13. – P. 1065–1072.
23. Марченко, Л. Н. Моделирование реологических характеристик водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния / Л. Н. Марченко, Я. А. Косенок, В. Е. Гайшун, Ю. В. Бруттан // Компьютерные исследования и моделирование. – 2024. – Т. 16, № 5. – С. 1217–1253.
24. Hemmati-Sarapardeh, A. On the evaluation of the viscosity of nanofluid systems : Modeling and data assessment / A. Hemmati-Sarapardeh [et al.] // Renewable and Sustainable Energy Reviews. – 2018. – Vol. 81. – P. 313–329.
25. Mehrabi, M. Viscosity of nanofluids based on an artificial intelligence model / M. Mehrabi, M. Sharifpur, J. P. Meyer // International Communications in Heat and Mass Transfer. – 2013. – Vol. 43. – P. 16–21.

¹Псковский государственный университет

²Гомельский государственный
университет имени Франциска Скорины