

A systematic and critical review of the application of machine learning algorithms in modeling nanoparticle transport in porous media

Mahsa Shahi¹, Mohammad Reza Alavi Moghaddam^{2*}, Seiyed Mossa Hosseini³, Elaheh Kowsari⁴

1. Ph.D. of Environmental Engineering, Department of Civil and Environmental Engineering, Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic), Iran.
2. Professor, Department of Civil and Environmental Engineering, Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic), Iran.
3. Associate professor, Physical Geography Department, University of Tehran.
4. Professor, Department of Chemistry, Amirkabir University of Technology (Tehran Polytechnic), Iran.

Abstract

Growing concerns about the potential risk for human exposure to nanoparticle transport and their consequences have drawn researchers' attention to studying the transport behavior in porous media under various conditions. Understanding of this behavior requires the development of reliable predictive models. Therefore, the main objective of this study is to systematically and critically investigate different machine learning-based models from different perspectives to predict the transport efficiency of a wide range of nanoparticles and identify important features. To achieve this goal, first, published articles for selected nanoparticles were collected. Then, machine learning algorithms including linear regression (LR), k-nearest neighbors (KNN), support vector machine (SVM), decision tree (DT), random forest (RF), gradient boosting regression (GBR), and artificial neural networks (ANN) were reviewed. In most of these algorithms, retention rate is considered as the response variable and particle, porous media, and flow characteristics are considered as predictor variables. The results of the reviewed studies showed that the random forest (27%), artificial neural network (23%) and decision tree (14%) algorithms are most useful in predicting the transport of nanoparticles in porous media. The importance analysis of the features indicates that five features including ionic strength, pore volume, zeta potential of particles, input concentration and diameter of nanoparticles exert the greatest influence. The predictive algorithms mentioned in this study can be used to control and manage the release of nanoparticles used in various industries into the environment and reduce their health risks.

Review History

Received: Sep 07, 2025

Revised: Sep 24, 2025

Accepted: Sep 29, 2025

Keywords

Nanoparticles

Porous media

Transport behavior

Machine learning

algorithms

Evaluation criteria

* Corresponding Author Email: alavi@aut.ac.ir



Copyright © 2025, TMU Press. This open-access article is published under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0>) which permits Share (copy and redistribute the material in any medium or format) and Adapt (remix, transform, and build upon the material) under the Attribution-NonCommercial terms.

مرور نظام مند و تحلیلی کاربرد الگوریتم های یادگیری ماشین در مدل سازی انتقال نانوذرات در محیط متخلخل

مهسا شاهی^۱، محمدرضا علوی مقدم^{۲*}، سید موسی حسینی^۳، الهه کوثری^۴

۱. دانش آموخته دکتری تخصصی مهندسی عمران- مهندسی محیط زیست، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران.

۲. عضو هیات علمی (استاد)، دانشکده مهندسی عمران و محیط زیست، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران.

۳. عضو هیات علمی (دانشیار)، دانشکده جغرافیا، دانشگاه تهران، تهران، ایران.

۴. عضو هیات علمی (استاد)، دانشکده شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران.

چکیده

تاریخچه داوری

نگرانی های فزاینده درباره پتانسیل مواجهه انسان با انتشار نانوذرات و پیامدهای آن، توجه محققین را به سمت بررسی رفتار انتقال و نگهداشت این ذرات در محیط های متخلخل، تحت شرایط گوناگون معطوف داشته است. دستیابی به درک دقیق تر از این رفتار، نیازمند توسعه مدل های پیش بینی کننده قابل اعتماد است. در این راستا، هدف اصلی این تحقیق، بررسی نظام مند و تحلیلی مدل های مختلف مبتنی بر یادگیری ماشین از ابعاد مختلف برای پیش بینی راندمان انتقال طیف وسیعی از نانوذرات و شناسایی ویژگی های مهم است. برای دستیابی به این هدف، ابتدا مقالات منتشر شده برای نانوذرات انتخاب شده جمع آوری شد. سپس الگوریتم های یادگیری ماشین شامل رگرسیون خطی، k نزدیک ترین همسایه، رگرسیون بردار پشتیبان، درخت تصمیم گیری، جنگل تصادفی، رگرسیون تقویت کننده گرادیان و شبکه های عصبی مصنوعی بررسی شدند. در اکثر این الگوریتم ها میزان نگهداشت به عنوان متغیر پاسخ و خصوصیات نانوذرات، محیط متخلخل و جریان به عنوان متغیرهای پیشگو در نظر گرفته می شوند. نتیجه مطالعات نشان داد که الگوریتم های جنگل تصادفی، شبکه عصبی مصنوعی و درخت تصمیم به ترتیب با ۲۷٪، ۲۳٪ و ۱۴٪ بیشترین کاربرد را در پیش بینی انتقال نانوذرات در محیط متخلخل دارند. تجزیه و تحلیل اهمیت متغیرها نشان می دهد که پنج متغیر از جمله قدرت یونی، حجم حفرات، پتانسیل زتای ذرات، غلظت ورودی و قطر نانوذرات بیشترین تاثیر را بر این فرآیند دارند. از الگوریتم های پیش بینی کننده ذکر شده در این تحقیق می توان برای کنترل و مدیریت انتشار نانوذرات مورد استفاده در صنایع مختلف در محیط و کاهش خطرپذیری سلامت آن استفاده نمود.

کلمات کلیدی

نانوذرات
محیط متخلخل
رفتار انتقال
الگوریتم های یادگیری ماشین
معیارهای ارزیابی

۱- مقدمه

(He et al., 2019). نانوذرات از طریق کانال های مختلف انتقال

وارد خاک و سایر محیط های متخلخل شده و در نتیجه باعث آلودگی محیط زیست می شوند. علاوه بر این، نانوذرات پتانسیل زیادی در کاربردهای صنعت نفت مانند بهبود حفاری و

نانوذرات مهندسی به عنوان یکی از ابزارهای کاربردی فناوری نانو، به طور گسترده در زیست پزشکی، الکترونیک، انرژی، محیط زیست، پزشکی و سایر زمینه ها مورد استفاده قرار می گیرند

* رایانامه نویسنده مسئول: alavi@aut.ac.ir

و پیش‌بینی است. علاوه بر این، اکثر مدل‌های ریاضی توسعه‌یافته فقط مکانیسم اساسی را تحت شرایط بیش از حد ساده‌شده در نظر می‌گیرند. هنگامی که این مدل به یک محیط پیچیده تعمیم داده می‌شود، باعث انحرافات آشکاری خواهد شد (Babakhani et al., 2017).

فناوری‌های هوش مصنوعی^{۱۰} به دلیل پتانسیل تعمیم قوی و واکنش سریع، در حال گسترش می‌باشند (Evans, 2019). یادگیری ماشین پتانسیل امیدوارکننده‌ای را در تقویت و بهبود روش‌های سنتی مهندسی در طیف وسیعی از چالش‌ها نشان می‌دهد (Anifowose et al., 2017). مدل‌های یادگیری ماشین روابط بین ورودی‌ها و خروجی‌ها را کشف می‌کنند؛ که این مدل‌ها به مسائلی مانند رگرسیون، خوشه‌بندی، فیلتر کردن، طبقه‌بندی و پیش‌بینی می‌پردازند. با این وجود، به دلیل پیچیدگی‌های ذاتی و نیاز به منابع محاسباتی قابل توجه، زمان پردازش طولانی می‌شود. ماهیت پیچیده این مدل‌ها می‌تواند چالش‌های قابل توجهی را از نظر توسعه و اجرای آن‌ها ایجاد کند. بنابراین، نیاز فزاینده‌ای به رویکردهای نوآورانه، از جمله یادگیری ماشین و روش‌های داده‌محور، برای ساده‌سازی و افزایش کارایی وجود دارد که به‌طور بالقوه بار محاسباتی را کاهش می‌دهد و در عین حال دقت و قابلیت اطمینان را حفظ می‌کند. کاربردهای یادگیری ماشین دارای مزایایی از جمله کاهش زمان و هزینه محاسبات، توانایی مدل‌سازی سیستم‌های پیچیده با داده‌های ناقص، قابلیت به روزرسانی مدل با داده‌های جدید و همچنین دارای محدودیت‌ها و مشکلاتی از جمله بیش‌برازش، تصادفی بودن، آموزش بیش از حد و وابستگی به کیفیت داده‌های ورودی است. علاوه بر این، الگوریتم‌های یادگیری ماشین به داده‌های گسترده‌ای نیاز دارند که ممکن است همیشه در دسترس نباشند (Hossain, 2018).

مدل پیش‌بینی مبتنی بر یادگیری ماشین^{۱۱}، دارای قابلیت‌هایی از جمله در نظرگیری متغیرهای ورودی به‌عنوان یک سیستم کامل و تأثیر عوامل مختلف محیطی است و می‌تواند به‌خوبی بر نقص‌های مدل ریاضی غلبه کند. در مقایسه با مدل‌های ریاضی، خروجی یادگیری ماشین به انتخاب متغیرهای تجربی وابسته نیست (Fazeli Sangani et al., 2019). در سال‌های اخیر، برخی از محققان از

تصویربرداری حسگر مخزن را نشان می‌دهند (Zhou et al., 2020). بنابراین، پیش‌بینی رفتار انتقال نانوذرات در محیط‌های متخلخل و ارزیابی عوامل محیطی مختلف که بر انتقال آن‌ها تأثیر می‌گذارند، کلید کاربرد و مدیریت نانوذرات است. آزمایش‌های انتقال در مقیاس بزرگ برای مطالعه ویژگی‌های انتقال نانوذرات در سناریوهای کاربردی انجام شده است (Velimirovic et al., 2020). اما هزینه آزمایش‌های میدانی در مقیاس بزرگ بالا است (Fr chet te-Viens et al., 2019). بنابراین، با توجه به پیچیدگی و هزینه، اکثر آزمایش‌های انتقال نانوذرات گزارش شده توسط آزمایش‌های ستونی انجام شده است. لازم به ذکر است که محققان تأثیر عوامل محیطی بر انتقال نانوذرات^۱ را در محیط متخلخل بررسی کرده‌اند (Goldberg et al., 2017; Wang et al., 2016). مهم‌ترین ویژگی‌های مورد نظر در انتقال نانوذرات در محیط متخلخل شامل سه دسته از جمله خصوصیات نانوذرات، محیط متخلخل و جریان است (Wang et al., 2016; Shahi et al., 2025).

کسر نگهداشت^۲ که با نسبت جرم نانوذرات نگهداشت‌شده در ستون به کل جرم نانوذرات تزریق‌شده تعریف می‌شود، نشان‌دهنده مقدار نانوذرات نگهداشت‌شده در محیط متخلخل است. پروفایل نگهداشت^۳، که در عمق ستون به عنوان تابعی از جرم نگهداشت نانوذرات تعریف می‌شود، توزیع نانوذرات نگهداشت‌شده در محیط متخلخل را توصیف می‌کند (Goldberg et al., 2015; Goldberg, 2016). پروفایل نگهداشت دارای اشکال مختلفی از جمله نمایی^۴، کاهش خطی^۵، کاهش ورودی^۶ و افزایش نگهداشت با عمق^۷ می‌باشد. برای مشخصه‌یابی و توصیف رفتار انتقال نانوذرات در محیط متخلخل، محققان مجموعه‌ای از مدل‌های ریاضی مانند مدل‌های انتزاعی^۸، مکانیکی و مقیاس پیوسته^۹ را ایجاد کردند (Naftaly et al., 2016). با این حال، مدل ریاضی سنتی تنها می‌تواند رفتار انتقال را با تکیه بر انتخاب متغیرهای تجربی برای برازش صحیح داده‌های تجربی توصیف کند، اما فاقد قابلیت تعمیم

¹ Nanoparticles

² Retention fraction (RF)

³ Retention profile (RP)

⁴ Exponential

⁵ Linearly decreasing

⁶ Suppressed inlet retention

⁷ Increasing retention with depth

⁸ Abstract models

⁹ Continuum-scale models

¹⁰ Artificial intelligence (AI)

¹¹ Machine learning

هدف از انجام این تحقیق، بررسی نظام‌مند و تحلیلی پیش‌بینی رفتار انتقال نانوذرات با الگوریتم‌های یادگیری ماشین در محیط متخلخل از ابعاد مختلف بر اساس اطلاعات بدست‌آمده از پایگاه داده استنادی اسکوپوس (در بازه زمانی ۲۰۲۵-۲۰۱۵) است. سوالات مطرح‌شده در این تحقیق به شرح زیر است:

۱- مهم‌ترین متغیرها در انتقال نانوذرات در محیط متخلخل کدام است؟

۲- کدام یک از الگوریتم‌های یادگیری ماشین در پیش‌بینی انتقال نانوذرات در محیط متخلخل کاربرد بیشتری دارند؟

با توجه به مطالعات کتابخانه‌ای انجام‌شده بر تحقیقات پیشین در خصوص پیش‌بینی انتقال نانوذرات در محیط متخلخل با روش یادگیری ماشین، نتایج بدست‌آمده به شرح ذیل می‌باشند.

۲- انتقال نانوذرات: مفاهیم و مدل‌سازی عددی

در این بخش به بررسی مفاهیم متغیرهای انتقال نانوذرات در محیط متخلخل از جمله ویژگی نانوذرات، ویژگی محیط متخلخل، ویژگی جریان و پرکاربردترین مدل‌های یادگیری ماشین پرداخته می‌شود.

۲-۱- مهم‌ترین متغیرهای انتقال نانوذرات در محیط متخلخل

نانوذرات رایج در محیط‌زیست و دارای استفاده تجاری به چهار دسته اصلی تقسیم می‌شوند (Sajid et al., 2015): (۱) بر پایه فلز شامل فلزات صفر ظرفیتی، اکسیدهای فلزی، نمک‌های فلزی؛ (۲) بر پایه کربن شامل فولرن^۱، نانولوله‌های کربنی، گرافن و مشتقات آن؛ (۳) نانوکریستال‌های نیمه‌رسانا (نقاط کوانتومی) مانند سولفید روی و کادمیوم؛ (۴) کامپوزیت‌ها و پلیمرهای نانو ساختار مانند پلیمرهای پوشیده‌شده با گرافن اکساید (Ray et al., 2015)، پلیمر نیمه‌رسانا فروالکترونیک (Sung and Boudouris, 2015). لازم به ذکر است که تولید نانوذرات با سرعت فزاینده‌ای در حال افزایش است و احتمال انتشار نانوذرات را افزایش می‌دهد. مهم‌ترین متغیرهای انتقال نانوذرات در محیط متخلخل به سه دسته خصوصیات نانوذرات (شکل، اندازه، غلظت و خصوصیات سطح ذره)، خصوصیات محیط متخلخل (نوع محیط، خصوصیات سطح محیط، اندازه دانه، محتوی رطوبت) و خصوصیات جریان (سرعت، اسیدیته، قدرت یونی، ظرفیت کاتیونی) تقسیم می‌شوند (Wang et al., 2016).

الگوریتم‌های یادگیری ماشین برای حل مسئله توسعه دارو (Mathai and Kirchmair, 2020)، اکتشاف زمین‌شناسی (Sajid et al., 2015)، پیش‌بینی خواص نانوذرات مانند ویسکوزیته (Ramezanizadeh et al., 2019)، رسانایی حرارتی (Khalifeh and Vaferi, 2019) و خواص زیست‌پزشکی (Bahl et al., 2019) استفاده کرده‌اند. یادگیری ماشین شامل انواع خاصی از الگوریتم‌های مدل‌سازی است؛ این الگوریتم‌ها به یک مدل پیش‌بینی اجازه می‌دهند که به‌طور خودکار از داده‌ها یاد بگیرند و ظرفیت پیش‌بینی را بر اساس افزایش تجربه و بدون برنامه‌ریزی صریح بهبود بخشند (Hsieh, 2009). روش‌های داده‌کاوی یادگیری ماشین، مانند رگرسیون خطی^۱، رگرسیون خطی چندگانه^۲، شبکه عصبی مصنوعی^۳، طبقه‌بندی تقویت‌شده^۴، درخت طبقه‌بندی و رگرسیون^۵، k نزدیک‌ترین همسایه^۶، درخت تصمیم‌گیری^۷، جنگل تصادفی^۸، ماشین بردار پشتیبان^۹، رگرسیون تقویت گرادیان^{۱۰}، تقویت گرادیان شدید^{۱۱} و شبکه‌های عصبی مصنوعی^{۱۲} ممکن است به استخراج اطلاعات پنهان، غیرخطی و پیچیده موجود در مجموعه داده‌ها کمک کنند (El-Amin, 2023). بنابراین تحرک نانوذرات مهم زیست‌محیطی را در محیط خاک بر اساس ویژگی‌های مشترک سیستم انتقال بهتر پیش‌بینی می‌کنند (Goldberg et al., 2015). از آنجایی‌که روش‌های یادگیری ماشین هیچ فرضیه قبلی در مورد ماهیت روابط بین متغیرهای پاسخ و پیشگو^{۱۳} ندارند، این الگوریتم‌ها امکان تعاملات و غیرخطی بودن بین متغیرها را فراهم می‌کنند (Bramer, 2007).

اگرچه در سال‌های اخیر استفاده از الگوریتم‌های یادگیری ماشین در کاربردهای مختلف مهندسی و محیط‌زیستی گسترش یافته است؛ اما تعداد محدودی از مطالعات به بررسی کاربرد یادگیری ماشین در مدل‌سازی نانوذرات در محیط متخلخل پرداخته است و تا کنون مقاله مروری جامعی در این زمینه ارائه نشده است.

¹ Linear regression (LR)

² Multiple linear regression (MLR)

³ Artificial neural network (ANN)

⁴ Categorical boosting (CatBoost)

⁵ Classification and regression tree (CART)

⁶ K-nearest neighbour (KNN)

⁷ Decision tree (DT)

⁸ Random forest (RF)

⁹ Support vector machine (SVM)

¹⁰ Gradient boosting regression (GBR)

¹¹ Extreme gradient boosting (XGBoost)

¹² Artificial neural networks (ANN)

¹³ Predictor variables



شکل ۱- مراحل ایجاد مدل یادگیری ماشین

۲-۲- معیارهای ارزیابی عملکرد مدل‌های یادگیری ماشین در

انتقال نانوذرات

مدل‌های ریاضی معمولاً پیچیده و زمان‌بر است. محاسبات موازی می‌تواند به مقابله با این چالش‌ها کمک کنند. از سوی دیگر، روش‌های یادگیری ماشین در بسیاری از رشته‌ها به روش‌های پیش‌بینی امیدوارکننده‌ای تبدیل شده است. بنابراین، مشکلات استفاده از شبیه‌سازهای عددی سنتی ممکن است به‌طور بالقوه با استفاده از روش‌های یادگیری ماشین حل شوند. این مدل با استفاده از داده‌های قبلی و داده‌های تولیدشده از شبیه‌سازهای متداول قوی آموزش داده خواهد شد (El-Amin, 2023). هوش مصنوعی شاخه‌ای از علوم کامپیوتر است که با شبیه‌سازی قدرت مغز انسان و اجازه دادن به کامپیوترها برای انجام محاسبات، از الگوریتم‌های پیچیده و فناوری‌های شبکه برای حل مسائل چندبعدی استفاده می‌کند. الگوریتم‌های یادگیری ماشین به دنبال ارتباط بین ورودی‌ها و نتایج است که رگرسیون، تشخیص الگو، طبقه‌بندی، فیلتر کردن، داده‌کاوی و پیش‌بینی، جنبه‌هایی از یادگیری ماشین است. الگوریتم‌های یادگیری ماشین می‌توانند مدل‌های پیچیده و ارتباطات غیرخطی بین متغیرهای ورودی و خروجی را بدون ایجاد فرضیات تشکیل دهند (Goldberg et al., 2015). مراحل ایجاد الگوریتم‌های یادگیری ماشین مطابق شکل ۱ است.

یادگیری ماشین می‌تواند همبستگی‌ها و الگوهای ضروری را از مجموعه داده‌های بزرگ ارائه دهد و داده‌های ناقص را مدیریت کند. همبستگی‌های غیرخطی بین متغیرهای وابسته و مستقل را می‌توان با استفاده از الگوریتم‌های یادگیری ماشین شناسایی کرد. مدل‌های یادگیری ماشین به نحوی آموزش داده می‌شوند که عملیات تکراری را به‌طور کارآمد و با حداقل خطا نسبت به انسان انجام دهند (El-Amin, 2023). لازم به ذکر است که الگوریتم‌های یادگیری ماشین مانند رگرسیون خطی، k نزدیک‌ترین همسایه، درخت تصمیم‌گیری، جنگل تصادفی، ماشین بردار پشتیبان، رگرسیون تقویت گرادیان و شبکه‌های عصبی مصنوعی برای

روش‌های رگرسیون و طبقه‌بندی کاربرد دارند. معیارهای ارزیابی مورد استفاده برای بررسی مدل‌های یادگیری ماشین شامل میانگین خطای مطلق^۱ (MAE)، خطای میانگین مربعات^۲ (MSE)، خطای جذر میانگین مربعات^۳ (RMSE)، میانگین درصد مطلق خطا^۴ (MAPE) و ضریب تعیین^۵ (R^2) است (El-Amin, 2023; Amin et al., 2023). اندازه‌گیری‌ها با تعیین پیش‌بینی‌های عددی برای تعداد نمونه‌های مورد آزمون بر اساس مقادیر واقعی (مشاهده‌شده)^۶ و مورد انتظار (تخمین‌زده‌شده)^۷ توصیف می‌شوند.

۲-۳- بررسی اهمیت نسبی متغیرها

بررسی اهمیت نسبی متغیرها در مدل‌های یادگیری ماشین برای شناسایی مهم‌ترین ویژگی‌های فیزیکی و شیمیایی به‌منظور پیش‌بینی متغیر پاسخ و جلوگیری از بیش‌برازش است. لازم به ذکر است که روش RFECV^۸ برای شناسایی و حذف متغیرهای کم‌اهمیت استفاده می‌شود. این روش از نظر محاسباتی پرهزینه است، اما برای سنجش عملکرد مدلی که تعداد نمونه‌ها در مقایسه با تعداد متغیرها کم است (نمونه‌ها $\geq 10 \times$ متغیرها) بسیار مهم است. برای اجرای الگوریتم یادگیری ماشین، نمونه‌ها به دسته‌های آموزشی و آزمایشی تقسیم می‌شوند. در روش RFECV برای هر مرحله، متغیرها با کمترین اهمیت حذف می‌شوند و الگوریتم یادگیری ماشین مجدد آموزش و آزمایش می‌شود تا زمانی که مهم‌ترین متغیرها باقی بمانند (Goldberg et al., 2015).

۳- روش‌شناسی تحقیق

مراحل انجام تحقیق از جمله مرور نظام‌مند و تحلیلی به ترتیب شامل بررسی (۱) کلمات کلیدی، رتبه‌بندی مجلات منتشرکننده و تعداد متغیرهای پیشگو، (۲) متغیرهای اثرگذار بر انتقال نانوذرات

¹ Mean absolute error (MAE)

² Mean squared error (MSE)

³ Root-mean-square error (RMSE)

⁴ Mean absolute percentage error (MAPE)

⁵ R-squared correlation

⁶ Observed

⁷ Estimated

⁸ Recursive feature elimination with cross validation (RFECV)

کلمات کلیدی و تحلیل کتاب‌سنجی، از نرم‌افزار VOSviewer (نسخه ۱,۶,۲۰) استفاده شد. در این نرم‌افزار، شبکه هم‌رخدادی کلمات کلیدی از مقالات انتخاب‌شده نشان داده می‌شود. این شبکه شامل گره‌هایی با اندازه‌های مختلف است که مطابق با فراوانی وقوع کلمات کلیدی و همراه با خوشه‌های رنگی رسم‌شده توسط نرم‌افزار تعیین می‌شوند.



شکل ۲- مراحل انجام تحقیق حاضر

در محیط متخلخل و (۳) مهم‌ترین مدل‌های یادگیری ماشین استفاده‌شده برای پیش‌بینی انتقال نانوذرات است؛ که به‌طور مختصر در شکل ۲ نشان داده شده است. داده‌های استفاده‌شده در این تحقیق در تاریخ مردادماه ۱۴۰۴، به‌منظور انجام مرور نظام‌مند و تحلیلی با استفاده از پایگاه داده استنادی اسکوپوس^۱ استخراج شد. به‌منظور انجام جستجوی دقیق‌تر در این پایگاه داده استنادی، عبارات موردنظر و کاربردی در عنوان، چکیده و کلمات کلیدی مقالات در محیط متخلخل انتخاب شد. در ابتدا تعداد ۲۰۹ مقاله در زمینه پیش‌بینی انتقال نانوذرات با الگوریتم‌های یادگیری ماشین انتخاب شد و پس از غربال‌گری اولیه، این تعداد به ۸ مقاله رسید. اطلاعات آماری به‌دست‌آمده از پایگاه داده استنادی اسکوپوس، با استفاده از نرم‌افزار Microsoft Excel تحلیل می‌شوند.

۳-۱- مرور نظام‌مند

روش‌شناسی مورد استفاده در مقاله مروری حاضر بر اساس استراتژی جستجو است. متعاقباً، یک مرور نظام‌مند بر اساس مقالات منتخب از متون انجام شد. تمام مراحل جستجو در شکل ۲ ارائه شده است. بر این اساس، پایگاه‌های داده اسکوپوس، ساینس دایرکت^۲ و گوگل اسکالر^۳ برای بررسی کامل و جمع‌آوری مقالات علمی از سال ۲۰۱۵ تا ۲۰۲۵ انتخاب شدند. تعداد ۷ مقاله بر اساس جستجو در پایگاه استنادی اسکوپوس انتخاب شد. علاوه بر این، یک مقاله با انجام جستجو دستی با کلمات کلیدی فوق در پایگاه‌های داده ساینس دایرکت و گوگل اسکالر انتخاب شد. به‌طورکلی، ۸ مقاله مجزا برای بررسی در مقاله حاضر انتخاب شدند. بنابراین، این مقاله مروری در یک چارچوب تعریف‌شده انجام شد و بر بررسی عوامل مهم مرتبط با انتقال نانوذرات و مدل‌سازی آن‌ها در محیط متخلخل تمرکز دارد. علاوه بر این، مقالات انتخاب‌شده از جنبه‌های نظام‌مند و تحلیلی به شرح زیر مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته‌اند.

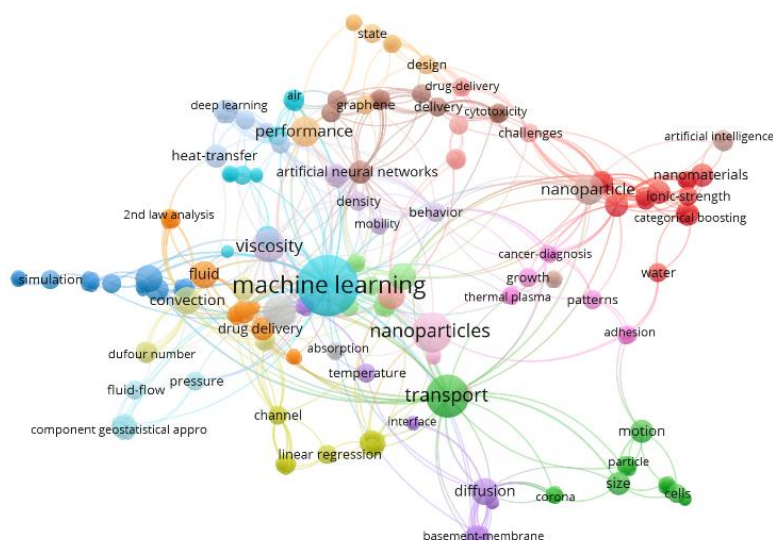
کلمات کلیدی مورد استفاده در مقالات: کلمات کلیدی،

محتوای اساسی یک مقاله پژوهشی را نشان می‌دهند؛ ترسیم شبکه‌های هم‌رخدادی این کلمات کلیدی می‌تواند درک ارتباطات متقابل آن‌ها را به میزان قابل‌توجهی افزایش دهد. برای تجسم

^۱ Scopus citation database

^۲ Science Direct

^۳ Google Scholar



ظرفیت کاتیونی). همچنین به منظور مدل‌سازی انتقال نانوذرات در محیط متخلخل به بررسی مهم‌ترین الگوریتم‌های یادگیری ماشین شامل رگرسیون خطی، k نزدیک‌ترین همسایه، درخت تصمیم‌گیری، جنگل تصادفی، ماشین بردار پشتیبان، رگرسیون تقویت گرادینان و شبکه‌های عصبی مصنوعی پرداخته می‌شود.

یافته‌های حاصل از مرور نظام‌مند و تحلیلی به‌عنوان روش‌هایی برای ارزیابی نتایج پژوهشی، امکان دستیابی به نتایج معتبر و قابل تعمیم را فراهم می‌کنند. مهم‌ترین نتایج و تحلیل حاصل از مرور تحقیقات انجام‌شده در زمینه پیش‌بینی انتقال نانوذرات در محیط متخلخل با یادگیری ماشین در جدول ۱ ارائه شده است.

در تحقیق حاضر مقالات انتخاب شده (جدول ۱) در بازه زمانی ۲۰۲۵-۲۰۱۵، از نظر نظام‌مندی شامل کلمات کلیدی، مجلات منتشرکننده و تعداد متغیرهای پیشگو و همچنین از نظر تحلیلی شامل موثرترین متغیرهای انتقال نانوذرات، الگوریتم‌های یادگیری ماشین، معیارهای ارزیابی عملکرد الگوریتم‌ها و سنجش اهمیت نسبی متغیرها مورد بررسی و بحث قرار گرفته است. بر اساس شکل ۳ بدست‌آمده از خروجی نرم‌افزار VOSviewer، هر گره نشان‌دهنده یک کلمه کلیدی است و اندازه گره بیانگر اهمیت آن می‌باشد. همچنین کلمات کلیدی با ارتباط نزدیک در یک خوشه و با رنگ یکسان نشان داده می‌شوند. بر این اساس، عبارت‌های

تعداد متغیرهای پیشگو مورد استفاده در مدل سازی: در مدل سازی مبتنی بر یادگیری ماشین، تعداد متغیرهای پیشگو یکی از عوامل تاثیرگذار بر عملکرد مدل است. انتخاب بهینه متغیرهای پیشگو نه تنها دقت مدل را افزایش می دهد، بلکه باعث کاهش پیچیدگی محاسبات و جلوگیری از بیش برآزش^۱ نیز می شود. همچنین لازم به ذکر است که ازدیاد تعداد متغیرهای مورد استفاده در مدل یادگیری ماشین باعث ایجاد پدیده هم خطی می شود (Chan et al., 2022).

این بخش بر بررسی دقیق ۸ مقاله انتخاب شده برای تجزیه و تحلیل بیشتر در زمینه عوامل مؤثر بر انتقال و مدل سازی تمرکز دارد. عوامل انتقال در اکثر تحقیقات مورد نظر عبارتند از: خصوصیات نانو ذرات (شکل، اندازه، غلظت و خصوصیات سطح ذره)، محیط متخلخل (نوع محیط، خصوصیات سطح محیط، اندازه دانه، محتوای رطوبت) و جریان (سرعت، اسیدیت، قدرت یونی،

¹ Overfitting

جدول ۱- تحقیقات انجام شده در زمینه پیش‌بینی انتقال نانوذرات در محیط متخلخل با یادگیری ماشین

ردیف	نانوذرات	متغیرهای پاسخ	الگوریتم‌های یادگیری ماشین	اهمیت متغیرها	نتایج تحقیق	مرجع
۱	نقره، تیتانیوم دی‌اکساید، اکسید مس، بایوجار، هیدروکسی آپاتیت، اکسید روی، فولرن، هیدروکسید آهن، نانولوله‌های کربنی چندجداره، اکسید سیلیسیم	مقدار نگهداشت، شکل منحنی نگهداشت	جنگل تصادفی	حجم حفرات، غلظت فعال‌کننده سطحی، پتانسیل زتای نانوذرات و جاذب، چگالی ذرات، قدرت یونی، سرعت دارسی، غلظت اولیه، اسیدیته، قطر ذرات	در این تحقیق ۲۰۴ نمونه بررسی شد که تعداد متغیرهای پیشگو برابر ۲۰ عدد است. نتایج رگرسیون نشان می‌دهد که مقدار جرم نانوذرات باقی‌مانده در طول ستون را می‌توان با میانگین مربعات خطای مورد انتظار بین ۰/۰۲۵ تا ۰/۰۳۳ پیش‌بینی کرد. همچنین، شکل منحنی نگهداشت، مانند فوق‌نمایی یا خطی را می‌توان در حدود ۶۰ تا ۷۰ درصد پیش‌بینی کرد.	(Goldberg et al., 2015)
۲	نقره، آهن صفر ظرفیتی، اکسید آهن، هیدروکسی آپاتیت، گرافن، اکسید گرافن، اکسید سریم، تیتانیوم دی‌اکساید، اکسید روی، نقاط کوانتومی، لاتکس، سیلیکا، آلومینیوم اکساید، بوهمیت	ضریب جذب نانوذرات به محیط، مقدار نانوذرات جذب‌شده به محیط، غلظت نسبی	شبکه عصبی مصنوعی	قدرت یونی، غلظت اولیه	در این تحقیق ۴۹۳ نمونه بررسی شد که تعداد متغیرهای پیشگو برابر ۲۰ عدد است. نتایج نشان داد که ارتباط میزان نانوذرات جذب‌شده با سرعت آب منفذی مثبت است. همچنین، ناهمگنی محیط متخلخل برای اولین بار به عنوان یک متغیر در نظر گرفته شد و حساسیت بالاتری نسبت به پراکندگی نشان داد.	(Babakhani et al., 2017)
۳	تیتانیوم دی‌اکساید	شاخص انتقال ذرات، توزیع مکانی نانوذرات باقیمانده در ستون	رگرسیون خطی چندگانه، درختان طبقه‌بندی و رگرسیون، جنگل تصادفی، شبکه عصبی مصنوعی	قدرت یونی، متوسط هندسی قطر ذرات خاک، متوسط قطر هیدرودینامیک	در این تحقیق ۲۷۰ نمونه بررسی شد که تعداد متغیرهای پیشگو برابر ۳۱ عدد است. درحالی‌که عملکرد الگوریتم‌های شبکه عصبی مصنوعی و جنگل تصادفی برای پیش‌بینی انتقال تیتانیوم دی‌اکساید در محیط‌های خاکی خوب است. پیش‌بینی‌های شبکه عصبی مصنوعی با خطاهای تعمیم کمتر، نسبت به مدل جنگل تصادفی برتر بود. اما جنگل تصادفی به ورودی‌های کمتری نیاز دارد.	(Fazeli Sangani et al., 2019)
۴	نانوذره خاص برای بازیابی روغن ^۱ ، اکسید آهن	غلظت نانوذرات	جنگل تصادفی، درخت تصمیم، شبکه عصبی مصنوعی، رگرسیون تقویت گرادیان	حجم حفرات، مکان، زمان، ضریب انتشارپذیری، غلظت نانوذرات جذب‌شده، برگشت‌پذیر/ برگشت‌ناپذیر بر سطح جاذب، نرخ واجذب، ظرفیت جذب برگشت‌ناپذیر	در این تحقیق ۶ نمونه بررسی شد که تعداد متغیرهای پیشگو برابر ۱۶ عدد است. الگوریتم درخت تصمیم بهترین عملکرد و بالاترین دقت را دارد. از طرفی، مدل جنگل تصادفی در بقیه مجموعه داده‌ها، از جمله مجموعه داده‌های ترکیبی، کمترین مقدار جذر میانگین مربعات خطا و بالاترین مقدار R-squared را دارد.	(Alwated and El-Amin, 2021)

¹ Nano-enhanced oil recovery (nano-EOR)

ردیف	نانوذرات	متغیرهای پاسخ	الگوریتم‌های یادگیری ماشین	اهمیت متغیرها	نتایج تحقیق	مرجع
۵	نقره، اکسید سریم، مس، آهن، اکسید آهن، اکسید گرافن، نانولوله کربنی چند جداره، بایوچار، فولرن، هیدروکسی آپاتیت، تیتانیوم دی‌اکساید، سیلیکون اکسید، اکسید روی	مقدار نگهداشت، شکل منحنی نگهداشت	طبقه‌بندی تقویت‌شده	نقطه ایزوالکتریک ذرات، پتانسیل زتای ذرات و جاذب، غلظت اولیه، حجم حفرات، سرعت منفذی، قطر نانوذرات	در این تحقیق ۴۱۱ نمونه بررسی شد که تعداد متغیرهای پیشگو برابر ۱۹ عدد است. اثر پیش‌بینی برای مقدار نگهداشت و شکل منحنی نگهداشت در مقایسه با روش‌های پیشرفته بهبود یافته است. برای مقدار نگهداشت نانوذرات، عملکرد الگوریتم به $R^2 > 0.94$ رسیده است. برای پیش‌بینی شکل منحنی نگهداشت، عملکرد الگوریتم با دقت $> 89\%$ حاصل شده است.	(Zhou et al., 2021)
۶	نقره، تیتانیوم دی‌اکساید، اکسید روی، اکسید گرافن	مقدار نگهداشت	جنگل تصادفی، تقویت گرادیان نامحدود، طبقه‌بندی تقویت‌شده	قطر نانوذرات، پتانسیل زتای نانوذرات، اسیدیته، قطر ذرات محیط، قدرت یونی	در این تحقیق ۵۸۷ نمونه بررسی شد که تعداد متغیرهای پیشگو برابر ۸ عدد است. نتیجه مطالعه نشان می‌دهد که الگوریتم طبقه‌بندی تقویت‌شده بهترین عملکرد را در پیش‌بینی مقدار نگهداشت برای کل نانوذرات دارد.	(Banerjee et al., 2023)
۷	تعیین نشده	غلظت نانوذرات، درجه اشباعیت آب، نفوذپذیری نسبی روغن، نفوذپذیری نسبی آب	شبکه عصبی مصنوعی، رگرسیون تقویت گرادیان، جنگل تصادفی، درخت تصمیم	نفوذپذیری روغن، نفوذپذیری آب، انتقال کل، فشار موئینگی، نسبت انتقال روغن، نفوذپذیری نسبی روغن و آب زمانی که محیط متخلخل توسط نانوذرات اشغال شده است، نسبت انتقال آب	در این تحقیق ۲۸۸۰۰۰ نمونه بررسی شد که تعداد متغیرهای پیشگو برابر ۳۸ عدد است. طبق نتایج، مدل شبکه عصبی مصنوعی بهترین عملکرد را در پیش‌بینی انتقال نانوذرات در محیط متخلخل دارد.	(El-Amin et al., 2023)
۸	نانوزره خاص برای بازیابی روغن	غلظت اولیه، حجم حفرات	شبکه عصبی مصنوعی، درخت تصمیم، جنگل تصادفی	تعیین نشده	در این تحقیق ۲۳۰ نمونه بررسی شد که تعداد متغیرهای پیشگو برابر ۸ عدد است. یادگیری ماشین به‌عنوان یک راه‌حل پیشرفته‌تر امکان تولید پیش‌بینی سریع را فراهم می‌کند. در این تحقیق، مدل شبکه عصبی مصنوعی عملکرد بسیار خوبی داشت.	(Patel et al., 2024)

بررسی‌شده در جدول ۱، تعداد متغیرهای پیشگو مورد استفاده در تحقیقات مختلف شامل کمتر از ۱۵ عدد (۲ مقاله)، بین ۱۵ تا ۳۰ عدد (۴ مقاله) و بیشتر از ۳۰ عدد (۲ مقاله) است. بنابراین تعداد متغیرهای کمتر از ۳۰ عدد مورد توجه بیشتری قرار گرفته است.

۴-۲- مرور تحلیلی

در این بخش به بررسی یافته‌های حاصل از مرور تحلیلی

کلیدی یادگیری ماشین، نانوذرات، انتقال و عملکرد دارای بیشترین فراوانی می‌باشند. همچنین مقالات مورد بررسی در مجلات معتبر با چارک‌های متفاوت به چاپ رسیده است و ۸۸٪ از مقالات دارای رتبه چارک Q1 (دارای بیشترین تاثیرگذاری) است. از آنجایی که تعداد متغیرهای پیشگو در الگوریتم‌های یادگیری ماشین تاثیر مستقیمی بر عملکرد مدل دارند؛ در این تحقیق بر اساس مقالات

تحقیقات انجام‌شده (جدول ۱) بر تاثیر خصوصیات نانوذرات، محیط متخلخل و جریان به‌همراه مهم‌ترین الگوریتم‌های یادگیری ماشین مورد استفاده پرداخته می‌شود.

۴-۲-۱- متغیرهای اثرگذار بر انتقال نانوذرات در محیط متخلخل

تاثیر ویژگی‌های نانوذرات: شکل نانوذرات به‌عنوان یک ویژگی مهم و موثر بر کاربرد و عملکرد ذرات است. نانوذرات بر پایه کربن دارای شکل‌های مختلف از جمله لایه، میله، کره، سیم و فیبر است (Wang et al., 2016). همچنین براساس تئوری‌های DLVO^۱ و CFT^۲ اندازه ذرات تاثیر قابل توجهی بر انتقال نانوذرات دارند (Wang et al., 2012; Goldberg et al., 2015). ذرات بزرگ باعث کاهش انتقال در شرایط مطلوب می‌شوند (May and Li, 2013). علاوه بر این، غلظت بالای نانوذرات به همراه خطرات بالقوه آن‌ها یکی از موضوعات مهم است (Baalousha et al., 2017; Babakhani et al., 2016). اکثر مطالعات موجود نشان دادند که افزایش انتقال مرتبط با غلظت بالای نانوذرات و پرشدن مکان‌های جذب در غلظت‌های بالا است (Sun et al., 2015). لازم به ذکر است که ویژگی‌های سطح نانوذرات شامل بارسطحی و آب‌گریزی نقش مهمی در تعیین واکنش با محیط اطراف دارند (Zhou et al., 2021). علاوه بر این، سورفکتانت‌ها به‌عنوان مواد پایدارکننده در محیط‌های آبی یافت می‌شوند (Aiken et al., 2011) و اثر قابل توجهی بر افزایش انتقال نانوذرات در محیط آب زیرزمینی نشان دادند (Loosli et al., 2013). همچنین، مواد ارگانیک طبیعی^۳ و اکسیداسیون نقش مهمی در پایداری نانوذرات و افزایش انتقال آن‌ها در محیط متخلخل دارند (Hu et al., 2010).

تاثیر ویژگی‌های محیط متخلخل: انواع مختلف محیط متخلخل شامل ذرات شیشه، ماسه و خاک نقش مهمی بر انتقال نانوذرات دارند (Kanel et al., 2007). علاوه بر این، اندازه دانه محیط متخلخل بر انتقال نانوذرات تاثیر دارد (Garner and Keller, 2014; Goldberg et al., 2015; Banerjee et al., 2023). مطالعات متعددی نشان دادند که افزایش اندازه دانه باعث افزایش انتقال نانوذرات در محیط متخلخل می‌شوند و این پدیده باعث کاهش

مساحت سطح و تعداد مکان‌های جذب در دسترس برای نانوذرات می‌شود (Sharma et al., 2014). درحالی‌که، ذرات کوچک منجر به شکل‌گیری حفرات کوچک در محیط متخلخل می‌شوند و در نتیجه احتمال شکل‌گیری مکانیزم پالایش فیزیکی^۴ افزایش می‌یابد (Liang et al., 2013). همچنین انتقال نانوذرات تحت تاثیر ویژگی‌های سطح محیط متخلخل است. ماسه‌های فاقد مواد ارگانیک انتقال کمتری را در مقایسه با ماسه‌های دارای مواد ارگانیک فلزی نشان می‌دهند (Tian et al., 2010). مواد NOM و سورفکتانت‌ها با قابلیت تغییر ویژگی سطح محیط به‌طور گسترده در محیط آب زیرزمینی حضور دارند (Liu et al., 2015). همچنین افزایش زبری سطح دانه‌ها باعث کاهش نیروی دافعه میان دانه‌های محیط و ذرات و در نتیجه کاهش انتقال می‌شود (Shen et al., 2011). اصطلاح محیط اشباع به شرایطی اشاره دارد که تمام حفرات خاک با آب پر شده است. که در این شرایط محیط دوفازی آب-خاک ایجاد می‌شود و مکانیزم پالایش حفرات^۵ بر انتقال نانوذرات غالب است (Bradford et al., 2003). اما اصطلاح غیراشباع به حضور هوا در حفرات خاک اشاره دارد و باعث شکل‌گیری سه فاز آب-خاک-هوا و مکانیزم پالایش لایه نازک آب می‌شود (Chen et al., 2010; Zhao et al., 2019; El-Amin et al., 2023).

تاثیر ویژگی‌های جریان: لازم به ذکر است که قدرت یونی و ظرفیت کاتیونی تاثیر قابل توجهی بر انتقال نانوذرات در محیط متخلخل دارند (Goldberg et al., 2015; Fazeli Sangani et al., 2019). مطالعات متعددی نشان دادند که افزایش قدرت یونی باعث کاهش انتقال می‌شود (Tosco et al., 2012). علاوه بر این، قدرت یونی بر غلظت انعقاد بحرانی^۶ نانوذرات و پایداری آن‌ها در محیط متخلخل تاثیر دارد (Chowdhury et al., 2015). افزایش قدرت یونی باعث کاهش ضخامت لایه دوگانه الکترواستاتیکی اطراف نانوذره و در نتیجه کاهش نیروهای دافعه و ایجاد تراکم ذرات می‌شود (Chowdhury et al., 2013). علاوه بر این، کاتیون‌های چندظرفیتی در مقایسه با تک ظرفیتی دارای بازدهی بیشتری در انتقال نانوذرات است (Sasidharan et al., 2014). این رفتار به دلیل ایجاد پل کاتیونی مرتبط با گروه‌های عاملی در سطح ذرات

^۴ Physical straining

^۵ Straining of pores

^۶ Critical coagulation concentrations (CCC)

^۱ Derjaguin-Landau-Verwey-Overbeek (DLVO)

^۲ Colloid filtration theory

^۳ Natural organic matters (NOMs)

باعث افزایش تحرک نانوذرات به دلیل افزایش نیروهای هیدرودینامیک موثر بر مکانیسم تراکم پذیری می شوند؛ که در نتیجه نگهداشت کاهش می یابد (Chowdhury et al., 2011; Kim et al., 2015). در سطوح اسیدیته نزدیک به نقطه ایزوالکتریک، نانوذرات تمایل به متراکم شدن دارند و توسط مکانیسم های پالایش فیزیکی و جذب نگهداشته می شوند (Chowdhury et al., 2011; Yumu et al., 2022). قدرت یونی با اصلاح واکنش های الکترواستاتیک و رفتارهای تراکم پذیری بر انتقال نانوذرات تاثیر می گذارند. قدرت یونی بالاتر با کاهش انرژی رسوب گذاری و در نتیجه افزایش نگهداشت، از انتقال ذرات جلوگیری می کند (Yumu et al., 2022).

۴-۲-۲- مهمترین الگوریتم های یادگیری ماشین در پیش بینی انتقال نانوذرات

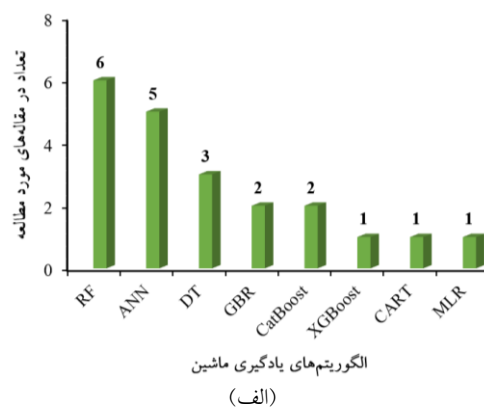
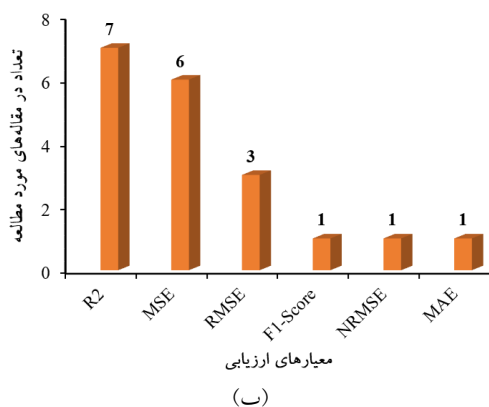
بر اساس مقالات بررسی شده (جدول ۱)، در تحقیقات انجام شده توسط گلدبرگ و همکاران (Goldberg et al., 2015) ویژگی های نانوذرات از جمله نوع، اندازه، غلظت ورودی و ویژگی های سطح نانوذره بررسی شده است و از الگوریتم جنگل تصادفی استفاده شده است. همچنین، ژو و همکاران (Zhou et al., 2021) به بررسی ویژگی های محیط متخلخل پرداختند و مدل سازی با الگوریتم طبقه بندی تقویت شده انجام شد. لازم به ذکر است که بانرجی و همکاران (Banerjee et al., 2023) به بررسی ویژگی های جریان در محیط متخلخل پرداختند و در این مطالعه از جنگل تصادفی، تقویت گرادیان نامحدود و طبقه بندی تقویت شده استفاده شده است.

مهم ترین الگوریتم های استفاده شده برای پیش بینی انتقال نانوذرات در محیط متخلخل (شکل ۴ الف) شامل جنگل تصادفی، شبکه عصبی مصنوعی و درخت تصمیم است. بر اساس این شکل، الگوریتم های جنگل تصادفی (۶ مقاله)، شبکه عصبی مصنوعی (۵ مقاله) و درخت تصمیم (۳ مقاله) دارای بیشترین کاربرد می باشند. الگوریتم جنگل تصادفی با ترکیب چندین درخت تصمیم از بیش برآزش^۲ جلوگیری کرده و دقت پیش بینی را افزایش می دهد (Zhou et al., 2021). همچنین، به دلیل توانایی در مدل سازی روابط غیرخطی و تعاملات پیچیده بین ویژگی نانوذرات و محیط متخلخل

است (Chowdhury et al., 2015). همچنین سرعت جریان بر انتقال نانوذرات موثر است (Braun et al., 2015; Alwated and El-Amin, 2021; Patel et al., 2024). افزایش سرعت جریان باعث تسهیل واجذب نانوذرات نگهداشت شده از محیط متخلخل می شود، این پدیده در معرض نیروهای هیدرودینامیک قابل توجه است (Wang et al., 2016). لازم به ذکر است که میزان pH محلول می تواند بر پتانسیل زتای نانوذرات و در نتیجه انتقال آن ها تاثیر بگذارد (Banerjee et al., 2023). در نقطه بار صفر^۱، نانوذرات یک شرایط بسیار ناپایدار را نشان می دهند. زمانی که pH محلول به کمتر از نقطه PZC می رسد، سطح نانوذره دارای بار مثبت می شود. به طور عکس، وقتی pH محلول بیشتر از PZC است، سطح دارای بار منفی و منجر به تولید نیروهای لایه الکترواستاتیک دوگانه و از نوع دافعه می شوند. این پدیده باعث افزایش انتقال نانوذرات در محیط متخلخل می شود (Wang et al., 2016).

بنابراین، بررسی مهم ترین متغیرها در انتقال نانوذره در محیط متخلخل و الگوریتم های موثر، معیارهای ارزیابی و اهمیت نسبی متغیرهای پیشگو در مدل های یادگیری ماشین از اهمیت ویژه ای برخوردار است. با بررسی مقالات در جدول ۱، بیشترین نانوذرات استفاده شده شامل تیتانیوم دی اکساید (۵ مقاله)، نقره (۴ مقاله) و اکسید روی (۴ مقاله) است؛ زیرا این نانوذرات دارای قابلیت انتقال در مسافت طولانی در محیط متخلخل می باشند (Dibyanshu et al., 2023). این نانوذرات درجات مختلفی از تراکم پذیری و رسوب در محیط متخلخل را نشان می دهند، که تحت تاثیر متغیرهایی از جمله قدرت یونی و اسیدیته است (Dibyanshu and Raychoudhury, 2020). همچنین بر اساس بررسی های انجام شده بر جدول ۱، مهم ترین متغیرهای پیشگو مربوط به پدیده انتقال به ترتیب شامل غلظت اولیه (۶ مقاله)، سرعت دارسی (۷ مقاله)، اسیدیته (۵ مقاله) و قدرت یونی (۵ مقاله) است. اهمیت این متغیرها به دلیل تاثیر بر واکنش های فیزیکی- شیمیایی و رفتارهای هیدرودینامیک مربوط به حرکت و تراکم نانوذرات است. غلظت های اولیه بالاتر نانوذرات منجر به افزایش واکنش های ذره- ذره و در نتیجه مکانیسم های انسداد می شوند (Chowdhury et al., 2011; Yumu et al., 2022). همچنین، نرخ های بالاتر جریان

² Overfitting¹ Point of zero charge (PZC)



شکل ۴- مهم‌ترین (الف) الگوریتم‌های یادگیری ماشین و

(ب) معیارهای ارزیابی مورد استفاده در پیش‌بینی انتقال نانوذرات در محیط متخلخل بر اساس مقاله‌های مورد مطالعه

نتایج حاصل از بررسی مقالات منتخب، به تاثیر متغیرهای غلظت اولیه نانوذره، سرعت دارسی، اسیدیته و قدرت یونی اشاره دارند. همچنین، الگوریتم‌های پیش‌بینی‌کننده رفتار انتقال نانوذرات در مقالات پیشین نشان داد که جنگل تصادفی، شبکه عصبی مصنوعی و درخت تصمیم از مهم‌ترین الگوریتم‌های یادگیری ماشین است. همچنین، به منظور بررسی انتقال نانوذرات در محیط متخلخل از معیارهای ارزیابی R^2 ، MSE و RMSE (۳ مقاله) است. بر اساس جدول ۱، متغیرهای با بالاترین درجه اهمیت نسبی شامل قدرت یونی، حجم حفرات، پتانسیل زتای ذرات، غلظت ورودی و قطر نانوذرات است. حوزه ایفا کند. جهت‌گیری‌های آینده باید بر توسعه مدل‌های هوشمند، تفسیرپذیر و قابل اعتماد متمرکز شوند. همچنین همکاری میان متخصصان یادگیری ماشین و محققان در زمینه نانو برای دستیابی به نتایج عملی ضروری است. با تحقق این راهکارها، می‌توان به مدل‌های دقیق‌تر و سیستم‌های بهینه‌شده برای مدیریت انتقال نانوذرات در کاربردهای صنعتی و محیط‌زیستی دست یافت. به منظور انجام تحقیقات آتی پیشنهاد می‌گردد بر (۱) مقایسه عملکرد مدل‌های مختلف یادگیری ماشین در شرایط آزمایشگاهی و واقعی (۲) بررسی تاثیر نانوذرات مهندسی‌شده بر رفتار انتقال در محیط متخلخل با استفاده از یادگیری عمیق و (۳) ایجاد پایگاه‌های داده جامع و استاندارد برای آموزش مدل‌های یادگیری ماشین تمرکز بیشتری انجام شود.

۵- نتیجه‌گیری و پیشنهادات

نتایج حاصل از بررسی مقالات منتخب، به تاثیر متغیرهای غلظت اولیه نانوذره، سرعت دارسی، اسیدیته و قدرت یونی اشاره دارند. همچنین، الگوریتم‌های پیش‌بینی‌کننده رفتار انتقال نانوذرات در مقالات پیشین نشان داد که جنگل تصادفی، شبکه عصبی مصنوعی و درخت تصمیم از مهم‌ترین الگوریتم‌های یادگیری ماشین است. همچنین، به منظور بررسی انتقال نانوذرات در محیط متخلخل از معیارهای ارزیابی R^2 ، MSE و RMSE استفاده می‌شود. مرور مقالات پیشین نشان داد که متغیرهای قدرت یونی، حجم حفرات، پتانسیل زتای ذرات، غلظت ورودی و قطر نانوذرات دارای بیشترین اهمیت نسبی می‌باشند. با توجه به رشد سریع فناوری نانو و نیاز روزافزون به درک رفتار نانوذرات در محیط‌های پیچیده، یادگیری ماشین می‌تواند نقش کلیدی را برای پیشرفت این و مدیریت داده‌های با تعداد زیاد یکی از پرکاربردترین روش‌های یادگیری ماشین است. این الگوریتم در بخش‌های رگرسیون و طبقه‌بندی به خوبی عمل می‌کند (Alwated et al., 2015; Goldberg et al., 2015; Alwated and El-Amin, 2021; El-Amin et al., 2023). شبکه‌های عصبی مصنوعی در ثبت روابط غیرخطی درون داده‌ها و پردازش داده‌های چند مقیاسی قدرتمند است و در مواجهه با سیستم‌های پیچیده و داده‌های با تعداد زیاد موثر است (El-Amin et al., 2023; Patel et al., 2023).

References

- Aiken, G.R., Hsu-Kim, H., Ryan, J.N. (2011) 'Influence of dissolved organic matter on the environmental fate of metals, nanoparticles, and colloids', *Environmental Science and Technology*, 45(8), 3196–3201. DOI: 10.1021/es103992s.
- Alwated, B., El-Amin, M.F. (2021) 'Enhanced oil recovery

by nanoparticles flooding: from numerical modeling improvement to machine learning prediction', *Advances in Geo-Energy Research*, 5(3), 297–317. DOI: 10.46690/ager.2021.03.06.

- Anifowose, F. A., Labadin, J., Abdulraheem, A. (2017) 'Ensemble machine learning: An untapped modeling paradigm for petroleum reservoir characterization.',

- Journal of Petroleum Science and Engineering, 151, 480–487. DOI: 10.1016/j.petrol.2017.01.024.
- Baalousha, M., Sikder, M., Prasad, A., Lead, J., Merrifield, R., Chandler, G. T. (2016) 'The concentration-dependent behaviour of nanoparticles', *Environmental Chemistry*, 13(1), 1–3. DOI: 10.1071/EN15142.
- Babakhani, P., Bridge, J., Doong, R. A., Phenrat, T. (2017) 'Parameterization and prediction of nanoparticle transport in porous media: a reanalysis using artificial neural network', *JAWRA Journal of the American Water Resources Association*, 53(6), 4564–4585. DOI: 10.1002/2016WR020358.
- Babakhani, P., Bridge, J., Doong, R. A., Phenrat, T. (2017) 'Continuum-based models and concepts for the transport of nanoparticles in saturated porous media: A state-of-the-science review', *Advances in Colloid and Interface Science*, 246(June), 75–104. DOI: 10.1016/j.cis.2017.06.002.
- Bahl, A., Hellack, B., Balas, M., Dinischiotu, A., Wiemann, M., Brinkmann, J., Luch, A., Renard, B.Y., Haase, A. (2019) 'Recursive feature elimination in random forest classification supports nanomaterial grouping', *NanoImpact*, 15. DOI: 10.1016/j.impact.2019.100179.
- Banerjee, S., Bhavna, K., Raychoudhury, T. (2023) 'Prediction of transport behavior of nanoparticles using machine learning algorithm: physical significance of important features', *Journal of Contaminant Hydrology*, 258. DOI: 10.1016/j.jconhyd.2023.104237.
- Bradford, S.A., Simunek, J., Bettahar, M., Van Genuchten, M. T., Yates, S. R. (2003) 'Modeling colloid attachment, straining, and exclusion in saturated porous media', *Environmental Science and Technology*, 37(10), 2242–2250. DOI: 10.1021/es025899u.
- Bramer, M. (2007) *Principles of data mining*. Springer.
- Braun, A., Klumpp, E., Azzam, R., & Neukum, C. (2015) 'Transport and deposition of stabilized engineered silver nanoparticles in water saturated loamy sand and silty loam', *Science of the Total Environment*, 535, 102–112. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2014.12.023.
- Chan, J.Y., Leow, S. M. H., Bea, K. T., Cheng, W. K., Phoong, S. W., Hong, Z. W., Chen, Y. L. (2022) 'Mitigating the multicollinearity problem and its machine learning approach: A review'. *Mathematics*, 10(8), 1283. DOI: 10.3390/math10081283.
- Chen, L., Sabatini, D. A., Kibbey, T. C. (2010) 'Retention and release of TiO₂ nanoparticles in unsaturated porous media during dynamic saturation change', *Journal of contaminant hydrology*, 118(3), 199–207. DOI: 10.1016/j.jconhyd.2010.07.010.
- Chowdhury, A.I.A., Krol, M. M., Kocur, C. M., Boparai, H. K., Weber, K. P., Sleep, B. E., O'Carroll, D. M. (2015) 'NZVI injection into variably saturated soils: Field and modeling study', *Journal of Contaminant Hydrology*, 183, 16–28. DOI: 10.1016/j.jconhyd.2015.10.003.
- Chowdhury, I., Hong, Y., Honda, R. J., Walker, S. L. (2011) 'Mechanisms of TiO₂ nanoparticle transport in porous media: Role of solution chemistry, nanoparticle concentration, and flowrate', *Journal of Colloid and Interface Science*, 360(2), 548–555. DOI: 10.1016/j.jcis.2011.04.111.
- Chowdhury, I., Duch, M. C., Mansukhani, N. D., Hersam, M. C., Bouchard, D. (2013) 'Colloidal properties and stability of graphene oxide nanomaterials in the aquatic environment', *Environmental Science and Technology*, 47(12), 6288–6296. DOI: 10.1021/es400483k.
- Dibyanshu, K., Chhaya, T., Raychoudhury, T. (2023) 'A review on the fate and transport behavior of engineered nanoparticles: possibility of becoming an emerging contaminant in the groundwater', *International Journal of Environmental Science and Technology*, 20(4), 4649–4672. DOI: 10.1007/s13762-021-03835-9.
- Dibyanshu, Raychoudhury, T. (2020) 'Transport behaviour of different metal-based nanoparticles through natural sediment in the presence of humic acid and under the groundwater condition', *Journal of Earth System Science*, 129(1), 1–12. DOI: 10.1007/s12040-020-01411-2.
- El-Amin, M.F. (2023) *Numerical modeling of nanoparticle transport in porous media: MATLAB/PYTHON approach*, Elsevier. DOI: 10.1016/C2020-0-03512-7.
- El-Amin, M.F., Alwated, B., Hoteit, H.A. (2023) 'Machine learning prediction of nanoparticle transport with two-phase flow in porous media', *Energies*, 16(2), 1–27. DOI: 10.3390/en16020678.
- Evans, S.J.H. (2019) 'How digital engineering and cross-industry knowledge transfer is reducing project execution risks in oil and gas', In *Offshore Technology Conference* [Preprint].
- Fazeli Sangani, M., Owens, G., Nazari, B., Astaraei, A., Fotovat, A., Emami, H. (2019) 'Different modelling approaches for predicting titanium dioxide nanoparticles mobility in intact soil media', *Science of the Total Environment*, 665, 1168–1181. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2019.01.345.
- Fréchette-Viens, L., Hadioui, M., Wilkinson, K.J. (2019) 'Quantification of ZnO nanoparticles and other Zn containing colloids in natural waters using a high sensitivity single particle ICP-MS.', *Talanta*, 200, 156–162. DOI: https://doi.org/10.1016/j.talanta.2019.03.041.
- Garner, K.L., Keller, A.A. (2014) 'Emerging patterns for engineered nanomaterials in the environment: a review of fate and toxicity studies', *Journal of Nanoparticle Research*, 16(8), 1–28. DOI: 10.1007/s11051-014-2503-2.

- Goldberg, E., Scheringer, M., Bucheli, T. D., Hungerbühler, K. (2015) 'Prediction of nanoparticle transport behavior from physicochemical properties: Machine learning provides insights to guide the next generation of transport models', *Environmental Science: Nano*, 2(4), 352–360. DOI: 10.1039/c5en00050e.
- Goldberg, E. (2016) Understanding engineered nanomaterial transport in soil: reconciling weaknesses in advection dispersion modeling with machine learning. ETH Zurich.
- Goldberg, E., McNew, C., Scheringer, M., Bucheli, T. D., Nelson, P., Hungerbühler, K. (2017) 'What factors determine the retention behavior of engineered nanomaterials in saturated porous media?', *Environmental Science and Technology*, 51(5), 2729–2737. DOI: 10.1021/acs.est.6b05217.
- He, J., Wang, D., Zhou, D. (2019) 'Transport and retention of silver nanoparticles in soil: Effects of input concentration, particle size and surface coating', *Science of the Total Environment*, 648, 102–108. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2018.08.136.
- Hossain, M. (2018) 'Frugal innovation: A review and research agenda', *Journal of Cleaner Production*, 182, 926–936.
- Hsieh, W.W. (2009) Machine learning methods in the environmental sciences: Neural networks and kernels. Cambridge university press.
- Hu, J.D., Zevi, Y., Kou, X. M., Xiao, J., Wang, X. J., Jin, Y. (2010) 'Effect of dissolved organic matter on the stability of magnetite nanoparticles under different pH and ionic strength conditions', *Science of the Total Environment*, 408(16), 3477–3489. DOI: 10.1016/j.scitotenv.2010.03.033.
- Kanel, S.R., Nepal, D., Manning, B., Choi, H. (2007) 'Transport of surface-modified iron nanoparticle in porous media and application to arsenic(III) remediation', *Journal of Nanoparticle Research*, 9(5), 725–735. DOI: 10.1007/s11051-007-9225-7.
- Khalifeh, A., Vaferi, B. (2019) 'Intelligent assessment of effect of aggregation on thermal conductivity of nanofluids—comparison by experimental data and empirical correlations', *Thermochimica Acta*, 681. DOI: 10.1016/j.tca.2019.178377.
- Liang, Y., Bradford, S. A., Simunek, J., Vereecken, H., Klumpp, E. (2013) 'Sensitivity of the transport and retention of stabilized silver nanoparticles to physicochemical factors', *Water Research*, 47(7), 2572–2582. DOI: 10.1016/j.watres.2013.02.025.
- Liu, L., Gao, B., Wu, L., Sun, Y., Zhou, Z. (2015) 'Effects of surfactant type and concentration on graphene retention and transport in saturated porous media', *Chemical Engineering Journal*, 262, 1187–1191. DOI: 10.1016/j.cej.2014.10.032.
- Loosli, F., Le Coustumer, P. and Stoll, S. (2013) 'TiO₂ nanoparticles aggregation and disaggregation in presence of alginate and Suwannee River humic acids. pH and concentration effects on nanoparticle stability', *Water Research*, 47(16), 6052–6063. DOI: 10.1016/j.watres.2013.07.021.
- Mathai, N., Kirchmair, J. (2020) 'Similarity-based methods and machine learning approaches for target prediction in early drug discovery: performance and scope.', *International Journal of Molecular Sciences*, 21(10). DOI: 10.3390/ijms21103585.
- May, R., Li, Y. (2013) 'The effects of particle size on the deposition of fluorescent nanoparticles in porous media: direct observation using laser scanning cytometry', *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 418, 84–91. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2012.11.028.
- Naftaly, A., Dror, I., Berkowitz, B. (2016) 'Measurement and modeling of engineered nanoparticle transport and aging dynamics in a reactive porous medium', *Water Resources Research*, 52(7), 5473–5491. DOI: 10.1002/2016WR018780.
- Patel, P., Yadav, S. R., El-Amin, M. F., Yıldız, M. (2024) 'Prediction by machine learning in nanoparticles-based enhanced oil recovery', *Mathematical Modelling and Numerical Simulation with Applications*, 4(4), 544–561. DOI: 10.53391/mmnsa.1498986.
- Ramezanizadeh, M., Ahmadi, M. H., Nazari, M. A., Sadeghzadeh, M., Chen, L. (2019) 'A review on the utilized machine learning approaches for modeling the dynamic viscosity of nanofluids.', *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 114. DOI: 10.1016/j.rser.2019.109345.
- Ray, S. C., Bhunia, S. K., Saha, A., Jana, N.R. (2015) 'Graphene oxide (GO)/reduced-GO and their composite with conducting polymer nanostructure thin films for non-volatile memory device', *Microelectronic Engineering*, 146, 48–52. DOI: 10.1016/j.mee.2015.04.001.
- Romano, R., Barbul, A., Korenstein, R. (2023). From modeling dose-response relationships to improved performance of decision-tree classifiers for predictive toxicology of nanomaterials. *Computational Toxicology*, 27, 100277. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.comtox.2023.100277>.
- Sajid, M., Ilyas, M., Basheer, C., Tariq, M., Daud, M., Baig, N., Shehzad, F. (2015) 'Impact of nanoparticles on human and environment: review of toxicity factors, exposures, control strategies, and future prospects.', *Environmental Science and Pollution Research*, 22, 4122–4143. DOI: 10.1007/s11356-014-3994-1.
- Sasidharan, S., Torkzaban, S., Bradford, S. A., Dillon, P. J., Cook, P.G. (2014) 'Coupled effects of hydrodynamic and solution chemistry on long-term nanoparticle transport and deposition in saturated porous media', *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and*

- Engineering Aspects, 457, 169–179. DOI: 10.1016/j.colsurfa.2014.05.075.
- Sharma, P., Bao, D., Fagerlund, F. (2014) 'Deposition and mobilization of functionalized multiwall carbon nanotubes in saturated porous media: effect of grain size, flow velocity and solution chemistry', *Environmental Earth Sciences*, 72(8), 3025–3035. DOI: 10.1007/s12665-014-3208-7.
- Shahi, M., Alavi Moghaddam, M. R., Hosseini, S. M., Kowsari, E. (2025). Key factors affecting transport/retention of graphene oxide nanoparticles in porous media: A systematic and critical review. *Chemosphere*, 377, 144373. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2025.144373.
- Shen, X., Zhao, L., Ding, Y., Liu, B., Zeng, H., Zhong, L., Li, X. (2011) 'Foam, a promising vehicle to deliver nanoparticles for vadose zone remediation', *Journal of Hazardous Materials*, 186(2–3), 1773–1780. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2010.12.071.
- Sun, Y., Gao, B., Bradford, S. A., Wu, L., Chen, H., Shi, X., Wu, J. (2015) 'Transport, retention, and size perturbation of graphene oxide in saturated porous media: effects of input concentration and grain size', *Water Research*, 68, 24–33. DOI: 10.1016/j.watres.2014.09.025.
- Sung, S. H., Boudouris, B.W. (2015) 'Systematic control of the nanostructure of semiconducting-ferroelectric polymer composites in thin film memory devices.', *ACS Macro Letters*, 4(3), 293–297. DOI: 10.1021/mz5007766.
- Tian, Y., Gao, B., Silvera-Batista, C., Ziegler, K.J. (2010) 'Transport of engineered nanoparticles in saturated porous media', *Journal of Nanoparticle Research*, 12(7), 2371–2380. DOI: 10.1007/s11051-010-9912-7.
- Tosco, T., Bosch, J., Meckenstock, R. U., Sethi, R. (2012) 'Transport of ferrihydrite nanoparticles in saturated porous media: role of ionic strength and flow rate', *Environmental Science and Technology*, 46(7), 4008–4015. DOI: 10.1021/es202643c.
- Velimirovic, M., Bianco, C., Ferrantello, N., Tosco, T., Casasso, A., Sethi, R., Schmid, D., Wagner, S., Miyajima, K., Klaas, N., Meckenstock, R. U., von der Kammer, F., Hofmann, T. (2020) 'A large-scale 3D study on transport of humic acid-coated goethite nanoparticles for aquifer remediation.', *Water*, 12(4). DOI: 10.3390/w12041207.
- Wang, C., Bobba, A. D., Attinti, R., Shen, C., Lazouskaya, V., Wang, L. P., Jin, Y. (2012) 'Retention and transport of silica nanoparticles in saturated porous media: effect of concentration and particle size', *Environmental Science and Technology*, 46(13), 7151–7158. DOI: 10.1021/es300314n.
- Wang, M., Gao, B., Tang, D. (2016) 'Review of key factors controlling engineered nanoparticle transport in porous media', *Journal of Hazardous Materials*, 318, 233–246. DOI: 10.1016/j.jhazmat.2016.06.065.
- Yumu, H. U., Tiangui, W. A. N. G., Junhang, C. H. E. N., Hongjuan, B.A.I. (2022) 'TiO₂ nanoparticles transport in aggregated porous media with intra-and interaggregate porosities: Effects of pH, ionic strength and sodium dodecylbenzene sulfonate', *Environmental Chemistry*, 41(8), 2771–2783.
- Zhao, W., Zhao, P., Tian, Y., Shen, C., Li, Z., Jin, C. (2019) 'Transport and retention of microcystis aeruginosa in porous media: impacts of ionic strength, flow rate, media size and pre-oxidization', *Water Research*, 162, 277–287. DOI: 10.1016/j.watres.2019.07.001.
- Zhou, K., Zhou, X., Liu, J., Huang, Z. (2020) 'Application of magnetic nanoparticles in petroleum industry: A review.', *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 188, 1–17. DOI: 10.1016/j.petrol.2020.106943.
- Zhou, K., Li, S., Zhou, X., Hu, Y., Zhang, C., Liu, J. (2021) 'Data-driven prediction and analysis method for nanoparticle transport behavior in porous media', *Measurement*, 172, 1–15. Available at: DOI: 10.1016/j.measurement.2020.108869.