

西安交通大学学报
Journal of Xi'an Jiaotong University
ISSN 0253-987X, CN 61-1069/T

《西安交通大学学报》网络首发论文

题目：化工釜残非牛顿流体流变特性的输入凸神经网络建模
作者：张东宽，褚志强，田红，Jeffrey S.CROSS，姬国钊
收稿日期：2025-05-25
网络首发日期：2025-08-12
引用格式：张东宽，褚志强，田红，Jeffrey S.CROSS，姬国钊. 化工釜残非牛顿流体流变特性的输入凸神经网络建模[J/OL]. 西安交通大学学报.
<https://link.cnki.net/urlid/61.1069.t.20250811.1339.007>



网络首发：在编辑部工作流程中，稿件从录用到出版要经历录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿等阶段。录用定稿指内容已经确定，且通过同行评议、主编终审同意刊用的稿件。排版定稿指录用定稿按照期刊特定版式（包括网络呈现版式）排版后的稿件，可暂不确定出版年、卷、期和页码。整期汇编定稿指出版年、卷、期、页码均已确定的印刷或数字出版的整期汇编稿件。录用定稿网络首发稿件内容必须符合《出版管理条例》和《期刊出版管理规定》的有关规定；学术研究成果具有创新性、科学性和先进性，符合编辑部对刊文的录用要求，不存在学术不端行为及其他侵权行为；稿件内容应基本符合国家有关书刊编辑、出版的技术标准，正确使用和统一规范语言文字、符号、数字、外文字母、法定计量单位及地图标注等。为确保录用定稿网络首发的严肃性，录用定稿一经发布，不得修改论文题目、作者、机构名称和学术内容，只可基于编辑规范进行少量文字的修改。

出版确认：纸质期刊编辑部通过与《中国学术期刊（光盘版）》电子杂志社有限公司签约，在《中国学术期刊（网络版）》出版传播平台上创办与纸质期刊内容一致的网络版，以单篇或整期出版形式，在印刷出版之前刊发论文的录用定稿、排版定稿、整期汇编定稿。因为《中国学术期刊（网络版）》是国家新闻出版广电总局批准的网络连续型出版物（ISSN 2096-4188，CN 11-6037/Z），所以签约期刊的网络版上网络首发论文视为正式出版。

化工釜残非牛顿流体流变特性的 输入凸神经网络建模

张东宽^{1,2}, 褚志强³, 田红³, Jeffrey S. CROSS², 姬国钊¹

(1. 大连理工大学环境学院, 116024, 辽宁大连; 2. 东京科学大学环境与社会学院, 152-8550, 东京;

3. 阜新环发废弃物处置有限公司, 123000, 辽宁阜新)

摘要: 针对化工釜残非牛顿流体流变特性建模精度低、异常数据敏感性强等问题, 提出一种输入凸神经网络建模方法, 以提升复杂非牛顿流体的黏度预测稳定性与物理一致性。首先, 构建具有凸性约束的3层神经网络结构, 引入权重非负限制, 以确保模型输出的物理合理性; 其次, 设计指数映射正则项, 增强对高黏度区间及异常点的鲁棒性; 最后, 基于5种典型釜残样本, 在0~2 500 s⁻¹剪切速率范围内采集黏度响应数据, 对输入凸神经网络与幂律模型、Carreau模型、线性回归、支持向量回归、决策树、随机森林和前馈神经网络进行拟合性能评估。研究结果表明: 输入凸神经网络在多模型对比中展现出更优的拟合效果与预测能力, 均方误差低至 2.06×10^{-3} , 拟合优度可达0.987, 整体性能在准确性与稳健性之间取得良好平衡; 输入凸神经网络的预测曲线更为平滑, 能够有效避免传统模型出现的震荡与失真。该方法为化工釜残等复杂非牛顿流体的流变建模提供了有效技术路径, 对输送控制与处理工艺优化具有重要工程参考价值。

关键词: 化工釜残; 非牛顿流体; 输入凸神经网络; 流变建模; 黏度预测

中图分类号: TP3 **文献标志码:** A

Convex Neural Network Modeling and Performance Evaluation of Non-Newtonian Chemical Residue Fluids

ZHANG Dongkuan^{1,2}, CHU Zhiqiang³, TIAN Hong³, Jeffrey S. CROSS², JI Guozhao¹

(1. Key Laboratory of Industrial Ecology and Environmental Engineering, School of Environmental Science & Technology, Dalian University of Technology, Dalian, Liaoning 116024, China. 2. Department of Transdisciplinary Science and Engineering, School of Environment and Society, Institute of Science Tokyo, Tokyo 152-8550, Japan.

3. Fuxin Huanfa Waste Disposal Co., Ltd, Fuxin, Liaoning 123000, China)

Abstract: Based on the analysis that the modeling accuracy is low and it is easy to be affected by the outliers when characterizing rheological models of non-Newtonian chemical residue fluids, an Input Convex Neural Networks (ICNNs) based stabilization and unification scheme of physical quantity prediction results is constructed. First, a three-layer ICNN modeling with convexity constraints is constructed, introducing non-negative weight restrictions into the model to make it physically reasonable. An exponential mapping regularizing item was designed to enhance the stability and anti-anomalous data ability in high viscosity range; the response value data set was collected under different shear rates of 5 representative residue samples between 0-2500s⁻¹, using several classic models (the power law model, Carreau model, linear regression, support vector regression, decision tree, random forest, feedforward neural network) as references for model comparison. The experimental results show that the fitting effect and predictive ability of this model are better than those of existing typical models: the best fit degree can reach up to 0.987, the mean square error is only 2.06×10^{-3} and compared with general models such as polynomial laws or Carreau's model, there is no obvious oscillation and distortion on the fitted curves of ICNN. It can effectively improve the fitting precision and prediction capability of viscosity responses in complex situations, providing new solutions for modeling and optimizing processes of complex non-Newtonian fluids such as chemical residues, having engineering practical application and guiding significance in transport control.

Keywords: chemical reactor residues; non-Newtonian fluid; input convex neural network; rheological modeling; viscosity prediction

在化工生产过程中, 釜残是残留于反应釜内的一种高黏度副产物, 通常含有聚合物类化合物、溶剂、固体颗粒以及复杂的反应生成物。这类物质往往具备毒性、腐蚀性, 甚至易燃, 因而被归类为危险废物^[1]。在实际处理环节中, 釜残常依赖送料系统或雾化喷嘴完成输送操作, 而其流变性能直接影响送料的连续性、搅拌效率、资源回收率乃至最终的安全处置效果^[2]。一旦釜残的流动性不足, 送料管道极易发生堵塞, 雾化效果也可能因流速波动而变得不均, 进而影响焚烧效率, 甚至可能引发设备故障, 造成安全隐患^[3-4]。因此, 建立一个能够准确描述其黏度随剪切速率变化规律的模型, 对于保障进料顺畅、高效处理以及系统安全运行具有重要意义。

化工釜残通常呈现非牛顿流体特性, 表现出显著的

剪切变稀效应^[5-7]。传统上主要采用幂律模型和Carreau模型对其流变行为进行建模^[7]。其中, 幂律模型仅依赖流动指数与一致性系数, 可较好描述剪切变稀或剪切增稠情况下黏度和剪切速率的关系^[8]; 而Carreau模型则通过引入零剪切黏度、无限剪切黏度和时间常数, 使得拟合精度具有更优表现^[9-10]。然而, 此类物理模型结构固定, 需依赖人工选择与对比, 不具备足够的自适应能力。同时, 模型参数的拟合过程高度依赖高质量实验数据, 难以适应釜残体系中普遍存在的成分复杂性与数据噪声, 特别是在高黏度或低剪切速率区间, 预测误差尤为显著。因此, 亟需一种既能反映物理演化规律, 又具备较强抗干扰能力的流变建模新方法。

近年来, 随着机器学习和神经网络技术的迅速发展,

化工釜残流变特性的建模方法和思路也得到了更新。传统的机器学习方法，如线性回归、决策树、随机森林和支持向量回归，由于实现简单且计算效率高，已经在一定程度上应用于流变行为建模任务中^[11-12]。与此同时，输入凸神经网络（ICNN）凭借其独特的结构优势，逐渐引起了研究者的关注^[13]。该网络通过引入非负权重和凸激活函数，从结构上限制模型输出的单调性和平滑性，保证了在输入变量变化过程中，输出保持凸性特征^[14]。这一结构特性使得预测结果更加符合物理规律，尤其是在黏度与剪切速率的关系上，确保黏度随剪切速率增加而单调下降，符合剪切变稀流体的流变特性，从而避免了局部回升或突变等不合物理常理的行为^[15]，尤其在面对包含异常值或实验误差的数据时，ICNN显示出了更强的鲁棒性与稳定性，这使得它与化工釜残流变建模中对物理合理性和模型可靠性的需求相契合^[16]。本文基于5组真实的釜残数据，全面评估了ICNN在流变建模任务中的适用性，并将其与传统神经网络、物理模型以及其他主流机器学习方法进行了多维度的比较。实验结果表明，ICNN在黏度预测的精度、鲁棒性和稳定性方面均具有显著优势，为化工釜残非牛顿流体的建模研究提供了全新的视角和理论支持。

1 方法与建模流程

1.1 釜残采集与流变实验设计

本研究所采集的5种釜残样品，取自辽宁阜新环废弃废物处置有限公司，编号依次为样品1~样品5，其外观如图1所示。对5种典型釜残样品开展了理化性质测试，结果如表1所示。各样品均处于pH=6.5~8.3的中性至弱碱性范围，未表现出强腐蚀性。密度测试结果显示，样品密度处于1 165~1 250 kg·m⁻³之间。在105℃恒温下烘干后，剩余物质质量分数均高于66%，其中样品5高达93.83%，显示出较高的固体含量。结合该批次釜残的转运与处置信息分析可知，样品中含有对氯苯甲醛、吡啶、二氯甲烷等具有一定毒性和挥发性的有机物，以及对氯苯甲酸钠等相对稳定的无机残留组分。这些理化数据反映出化工釜残在组分上的复杂性及其潜在流变特性的多样性。

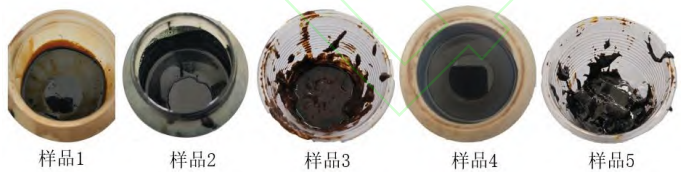


图1 5种化工釜残样品的外观照片
Fig.1 Appearance photos of five chemical reactor residue samples
表1 5种化工釜残样品的理化参数
Table 1 Physicochemical parameters of the five residual samples

编号	pH	密度/(kg·m ⁻³)	烘干后质量分数/%
1	7.2	1 189	71.4
2	6.9	1 170	74.6
3	8.3	1 165	81.1
4	6.5	1 178	66.9
5	7.5	1 250	93.8

使用奥地利Anton Paar公司生产的MCR302型流变仪对釜残样品的剪切性能进行测试。实验在25℃的常温条件下进行，剪切速率范围为0~2.5×10³ s⁻¹，涵盖了从低剪切到高剪切的完整流变行为。本文研究重点放在常温下的工业工况，旨在排除温度变化对黏度测试结果可

能带来的影响。

1.2 ICNN 结构设计

本文所采用的ICNN为3层全连接结构，网络架构为1-720-336-1，如图2所示。其中，输入层和输出层各有1个节点，中间包含两个隐藏层，节点数分别为720和336。该结构能在凸性约束下兼顾模型对复杂流变非线性关系的拟合能力和表达能力。考虑到非负权重等结构性约束可能会限制网络自由度，因此适当增大隐藏层宽度，以提升模型的表达能力和优化收敛性。通过多组结构预实验发现，该配置在5种釜残样品上的预测精度与鲁棒性表现最佳，最终被确定为本文的主网络架构。激活函数统一采用指数线性单元(ELU)^[17]，该函数在输入为负时呈指数函数形式，具备良好的平滑性，有助于增强模型的非线性表达能力，同时有利于凸性的保持^[18]。基于Python环境下的深度学习框架PyTorch构建神经网络模型，并通过顺序式模块依次组合各层结构。

为提升模型的稳定性和泛化能力，在训练过程中，首先对输入特征和目标值进行了归一化处理。优化器选择加权衰减修正的自适应矩估计算法，并结合平台下降自适应学习率调整策略，在训练过程中根据验证误差的变化动态调整学习率。初始学习率设置为5.0×10⁻³，总训练轮数为1.5×10⁵^[19-20]。超参数的设置遵循了经验预设和预实验筛选相结合的原则，并采用网格搜索法在验证集上进行调优。所有实验均在统一的计算环境下完成。为了确保模型输出符合凸性与单调性的理论要求，在训练阶段引入了两类结构性约束：一是对除输入层外的所有权重参数施加非负约束，通过指数映射方式修正可能出现的负值；二是对输入层权重施加非正约束，确保模型输出随输入变量单调递减。此外，为增强网络对凸性约束的表达能力，设计了一种结构性正则化机制：当隐藏层中的部分权重不满足凸性要求(即出现负值)时，系统通过指数映射函数将其逐步修正为非负值。该机制由惩罚系数控制修正强度，从而强化了模型对输入变量凸性响应的能力，使预测的结果更加符合流变特性规律^[21]。

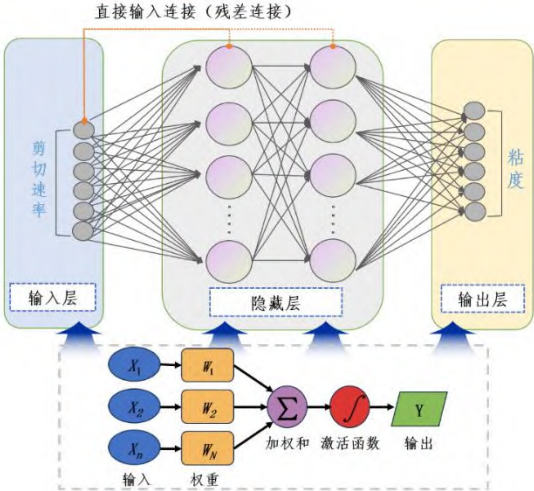


图2 ICNN结构示意图
Fig.2 Schematic diagram of the ICNN structure

1.3 对比模型设定与参数配置

为获得最佳拟合效果，采用非线性最小二乘法对幂律模型和Carreau模型在对数空间内进行参数估计，并利用curve fit函数搜索最优解^[22]。本文引入线性回归、决策树、随机森林和支持向量回归4种典型的机器学习回

归模型作为对比方法,进一步评估数据驱动方法在非牛顿流体黏度预测中的适用性与效果。其中,线性回归假设剪切速率与黏度之间存在线性关系,模型形式简单,可作为基础的回归基准;决策树模型通过逐层划分剪切速率区间构建规则结构,具有较好的局部拟合能力,适用于处理局部变化显著的数据^[23];随机森林模型基于集成学习思想,将多个决策树加权融合,从而提升模型的泛化能力和鲁棒性^[24];支持向量回归模型采用径向基函数将输入映射至高维特征空间,拟合复杂的非线性关系^[25]。上述模型主要用于构建对比基线,评估未引入结构性约束时的建模能力。由于本文重点在于探究ICNN架构所引入的凸性约束与非负权重对流变预测性能的影响,故在统一实验框架下,传统回归模型均采用Scikit-learn默认参数配置,以保证对比实验的简洁性、可复现性与一致性。网格搜索调参验证表明,尽管模型性能可进一步提升,但不影响主要结论。

为进一步分析深度学习模型结构设计对黏度预测性能的影响,本文引入与ICNN网络结构完全一致、但不含凸性约束的前馈神经网络作为对照模型^[26]。该模型采用3层全连接结构,两个隐含层神经元数分别为720和336,激活函数选用指数线性单元(ELU),训练轮数为 1.5×10^5 ,优化器采用加权衰减修正的自适应矩估计算法,学习率设定为 5.0×10^{-3} 。与ICNN不同,前馈神经网络在训练过程中未引入权重符号限制与凸性正则项,其目标为通过自由优化参数,更好地拟合训练集中的黏度-剪切速率关系。

1.4 模型评估指标

为了评估不同模型在釜残黏度预测中的表现,通过绝对误差(即预测值与真实值之间误差的绝对值)分析,来呈现各个模型在不同剪切速率时的误差。同时采用了5种样品拟合优度与均方误差的均值作为评价指标来衡量模型在5种釜残样品数据上的综合表现^[27]。拟合优度衡量模型对数据的拟合程度,反映其捕捉整体变化趋势的能力;均方误差衡量模型预测值与真实值之间的平均偏差,体现了预测精度。需要注意的是,幂律模型因其数学形式具有幂函数特性,可以在对数坐标系下转化为线性关系,从而便于参数求解和收敛性控制。而Carreau模型结构更加复杂,但在参数估计过程中也常通过对数变换增强数值稳定性,以应对高低黏度跨度带来的不稳定性问题。为了更准确地描述剪切变稀的非线性流变行为,幂律模型和Carreau模型在拟合过程中均对黏度数据进行对数变换预处理。通过对数空间中的建模,复杂的非线性关系得以转化为线性或准线性形式,从而减少数据分布不均所带来的偏差,提高模型的拟合精度。在完成参数拟合后,为确保评价指标的可比性和统一的物理意义,拟合优度与均方误差的计算均在原始线性空间中进行。所有模型均在相同的数据集上进行训练与测试,具体实验结果将在第2节中展开分析。

2 结果分析

2.1 实验结果

图3展示了5种釜残样品的剪切速率-黏度测试结果。可以观察到,所有样品的黏度随着剪切速率的增加而降低,呈现出典型的剪切变稀行为,符合非牛顿流体特性。然而,不同样品在初始黏度、剪切变稀程度和最终黏度

方面存在显著差异。在低剪切速率区间,样品1、样品3和样品5均表现出较高的初始黏度。随着剪切速率升高,样品1和样品3的黏度下降趋势较为平缓,说明其内部结构比较稳定。相比之下,样品5的黏度在高剪切速率下表现出明显的下降趋势。样品4在低剪切速率下黏度急剧下降,随后迅速趋于稳定,表明其内部结构易于破坏,具有较好的流动性。样品2的黏度变化比较平稳,表明其流动阻力较小,并且对剪切变化具有较强的适应性。需要注意的是,当剪切速率接近0时,样品2的数据出现异常,曲线呈现先上升后下降的趋势。该异常现象可能是由于流变仪在启动过程中产生的误差所致。

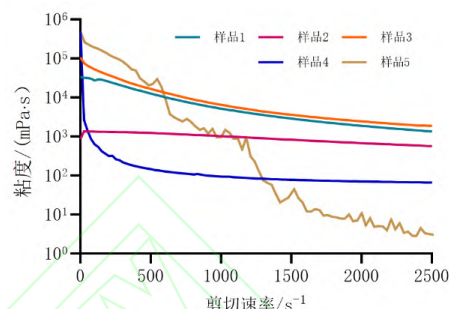


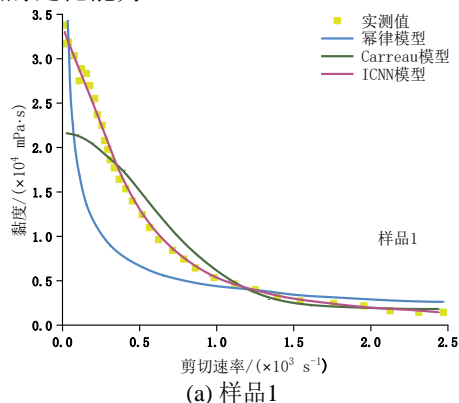
图3 5种样品的剪切速率-黏度测试结果

Fig.3 Shear rate-viscosity test results for the samples

2.2 不同流变模型的性能评估

2.2.1 ICNN模型与经典物理模型对比

为了比较数据驱动的ICNN模型与经典流变模型在不同剪切速率范围内的拟合性能,选取幂律模型、Carreau模型和ICNN模型对各釜残样品的黏度数据进行分析,结果如图4所示。由图可见,幂律模型难以准确反映样品的初始黏度,且在整个剪切速率范围内预测偏差较大;Carreau模型整体拟合表现较为优异,在不同釜残样品中均表现出较好的稳定性,这主要得益于其数学形式中引入了零剪切和无限剪切黏度,使其在反映黏度随剪切速率变化的过渡行为时具有更强的适应能力。进一步分析可知,ICNN模型在所有样品上的拟合精度均最高。对于样品1、样品2和样品3,该模型均能较准确捕捉低剪切速率下的黏度变化趋势,尤其是在黏度较高的初始阶段,拟合效果显著优于幂律模型和Carreau模型。对于样品4和样品5,ICNN模型同样展现出良好的适应性与精度,表明其在化工釜残非线性流变行为建模方面具有较强的泛化能力。



(a) 样品1

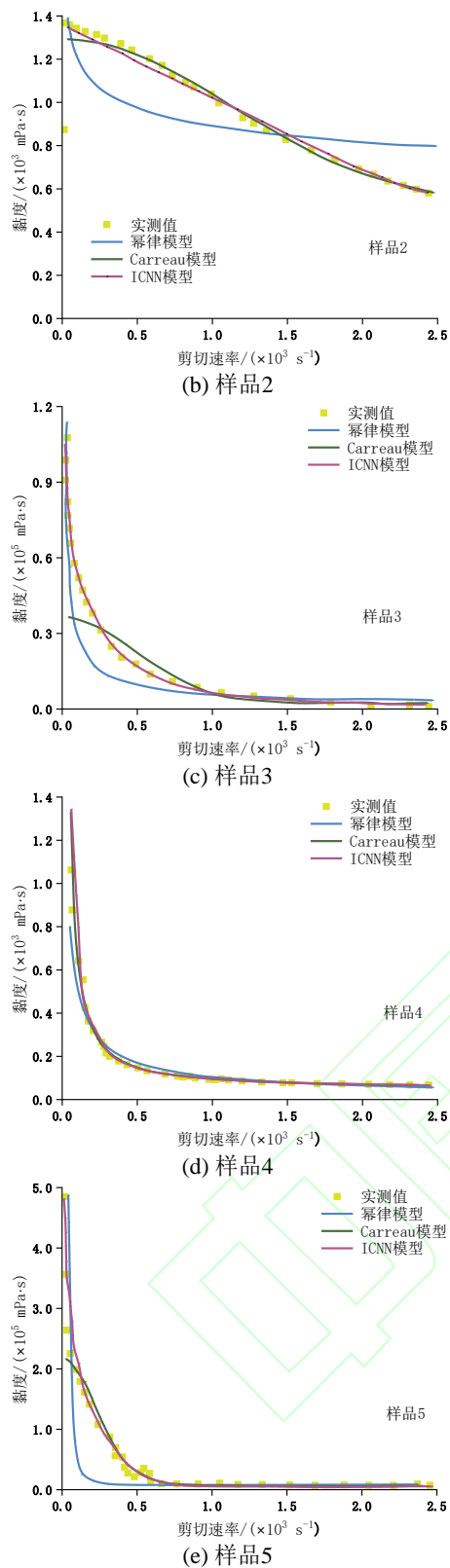
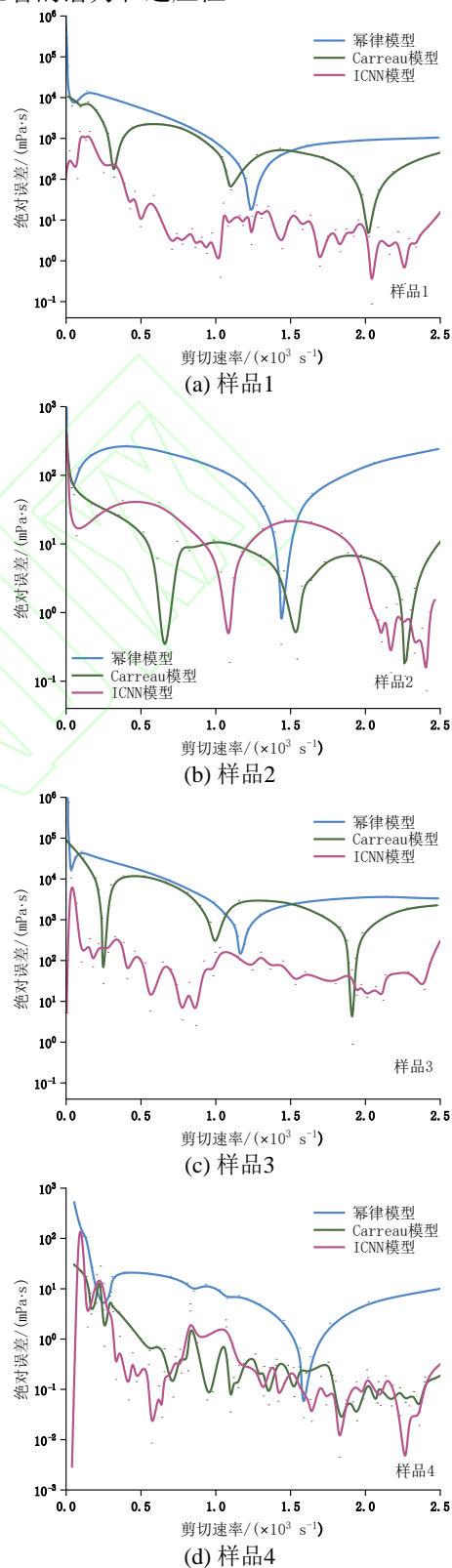


图4 ICNN模型与经典流变模型对不同样品黏度的拟合效果对比
Fig.4 Comparison of the fitting effect of ICNN model and classic rheological model on viscosity of different samples

图5展示了幂律模型、Carreau模型和ICNN模型在不同釜残样品和剪切速率区间下的绝对误差。从图中可以看出，在所有样品中，幂律模型在低剪切速率区间的误差最大，尤其是样品3和样品5，由于这两种样品本身黏度较大，预测误差达到多个数量级，表明该模型在预测釜残的初始黏度以及复杂的非牛顿流动行为时存在困难。相比之下，Carreau模型在多数剪切速率区间的表现优于幂律模型，能够更全面地描述化工釜残的流变特性。而ICNN模型的表现最为突出，它在各剪切速率区间的

误差最小，且在所有釜残样品上均展现了极高的拟合精度。特别是在极端工况下，ICNN模型仍能保持优异的预测能力，其误差显著低于幂律模型和Carreau模型。这一结果进一步验证了ICNN模型在捕捉实验数据中的非线性规律方面的优势，表明其在处理复杂流变行为建模时具有显著的潜力和适应性。



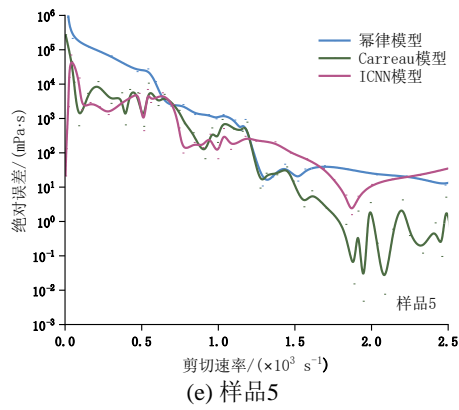


图5 ICNN模型与经典流变模型对不同样品黏度的拟合误差对比
Fig.5 Comparison of fitting errors between ICNN model and classical rheological model on viscosity of different samples

为了更直观地评估3种模型在原始数据空间中的拟合性能,本文计算了各模型的拟合优度和均方误差,结果如表2所示。幂律模型的平均误差约为Carreau、ICNN模型的24倍、33倍,表明在原始尺度下,幂律模型对黏度的预测偏差较大。从物理意义上分析,较大的均方误差通常意味着模型在某些数据区间存在较大的拟合偏差。幂律模型仅包含流动指数和一致性系数两个参数,难以同时考虑低剪切(高黏度)与高剪切(低黏度)区间的复杂流变特性。特别是在低黏度区间,一些预测偏差较大的数据点在平方后对整体均方误差造成了显著影响,使得幂律模型的误差水平较高,这与其简化模型结构的局限性相符。相比之下,Carreau模型通过引入零剪切黏度、无限剪切黏度和过渡指数等参数,可以在低、中、高剪切速率区间之间实现较为平滑的过渡,从而在不同剪切条件下保持较好的拟合一致性。更进一步,ICNN模型借助深度神经网络的高度非线性结构,能够自适应捕捉不同剪切速率段的流变行为,显著降低拟合误差。与传统解析模型相比,ICNN更适合复杂流体系统的建模任务,尤其在处理高度非线性关系时,展现了更强的适应性与泛化能力。

表2 经典流变模型与ICNN的性能指标比较

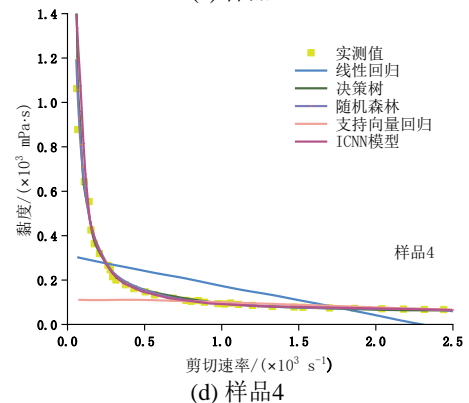
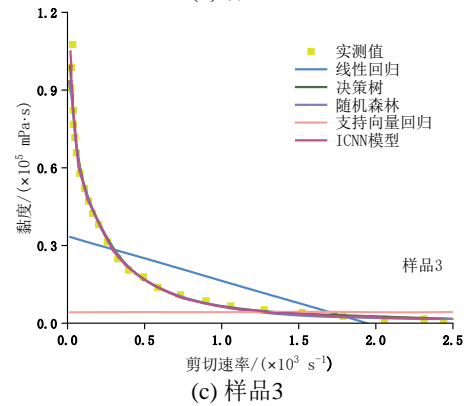
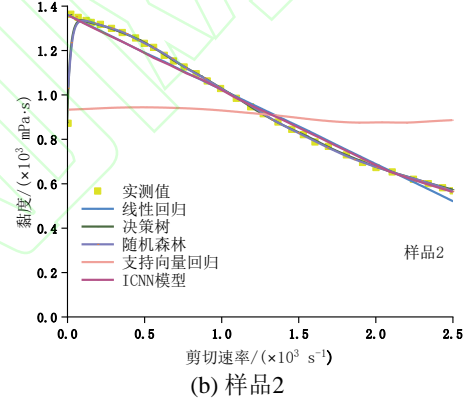
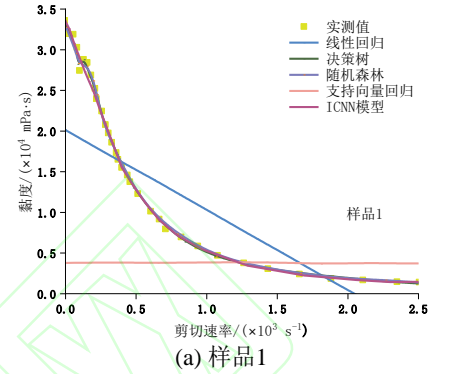
Table 2 Comparison of performance metrics between classical rheological models and ICNN

模型	均方误差	拟合优度
幂律	6.77×10^4	-8.02×10^{-2}
Carreau	2.80×10^3	9.55×10^{-1}
ICNN	2.06×10^3	9.67×10^{-1}

2.2.2 ICNN模型与典型机器学习模型对比

为进一步验证ICNN模型在非牛顿流体釜残黏度预测中的建模能力,本文选取线性回归、决策树、随机森林和支持向量回归4种典型机器学习方法作为对比,相关结果如图6所示。从图中可以看出,ICNN模型在所有釜残样品上均表现出较高的拟合精度,能够较好地捕捉剪切速率与黏度之间的非线性关系。特别是在低剪切速率区间,模型预测值与实际值高度一致,显示出良好的稳定性与抗干扰能力。相比之下,线性回归模型由于受限于线性假设,难以准确刻画黏度的非线性变化,不仅整体偏离较大,在部分区间甚至出现预测值为负的情况,说明不适用于该类复杂流变系统。支持向量回归模型整体表现不佳,除样品2外,其在高剪切速率区间的拟合效果略优,但在低剪切速率下,普遍出现预测偏

低的问题,误差较为明显。决策树和随机森林在捕捉非线性趋势方面优于线性回归和支持向量回归,能较好地反应黏度随剪切速率变化的基本特征。然而,在样品2的低剪切速率区间,两者均出现较明显的过拟合,推测可能与原始数据中误差或局部波动有关,反映出其在泛化能力上的不足。总体来看,ICNN模型不仅在拟合精度方面显著优于传统机器学习方法,而且通过网络结构中引入的凸性约束,有效抑制了异常点对模型训练的影响,降低了过拟合风险,同时增强了预测结果的物理合理性与可解释性,展现出在复杂流变行为建模中的显著潜力。



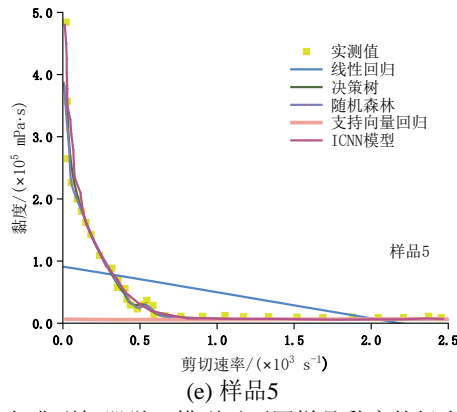


图6 ICNN与典型机器学习模型对不同样品黏度的拟合效果对比
Fig.6 Comparison of the fitting effects of ICNN and typical machine learning model on viscosity of different samples

图7展示了ICNN与四种典型机器学习模型在不同釜残样品上，黏度预测绝对误差随剪切速率变化的情况。从图中可以看出，ICNN模型在全部5类釜残样品中均表现出优异的拟合能力，能够较为准确地捕捉黏度随剪切速率变化的非线性趋势。尤其在低剪切速率区间，ICNN模型仍能保持预测结果与实验数据的高度一致，体现出良好的模型稳定性和鲁棒性。线性回归模型由于建立在线性关系假设基础之上，难以刻画复杂的流变行为，导致其预测结果整体偏离实际值，部分区间甚至出现明显误差，说明其在本研究场景下不具备适用性。支持向量回归模型在样品2以外的中高剪切速率区间表现尚可，但在低剪切速率下预测误差明显偏高，拟合效果较弱。相较而言，决策树和随机森林模型在刻画非线性特征方面具备一定优势，对黏度变化趋势的拟合更为准确。然而，在样品2的低剪切速率区间，由于存在测量误差和数据波动，决策树模型表现出较为明显的过拟合现象，反映出其泛化能力的不足。整体来看，ICNN模型在各剪切速率区间均保持稳定的预测性能。其结构中引入的凸性约束在一定程度上抑制了极端值和异常点对模型训练的干扰，降低了过拟合风险，进一步增强了预测结果的物理一致性与稳健性。

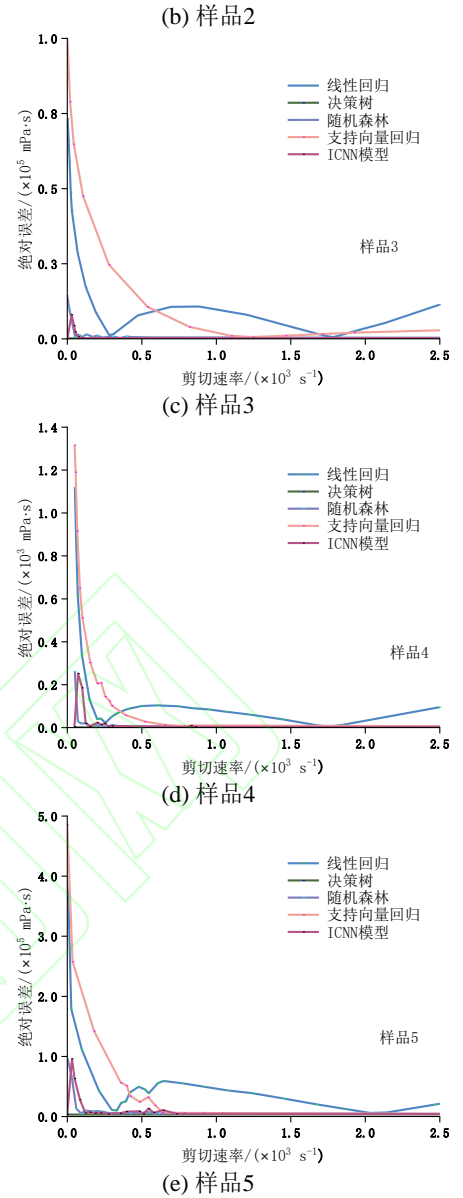
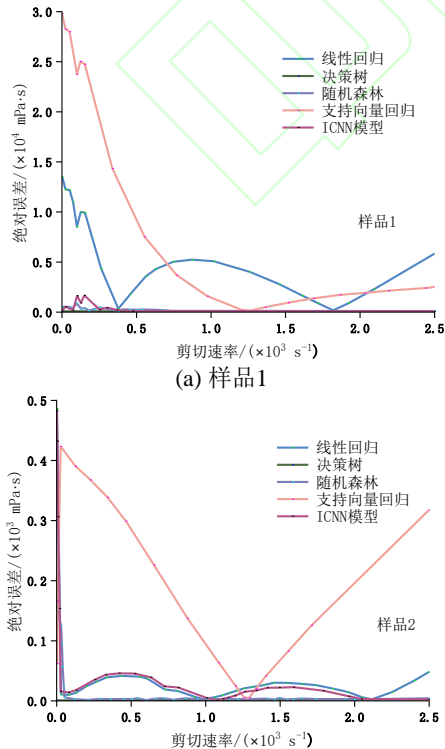


图7 ICNN与传统机器学习模型对不同样品黏度的预测误差对比
Fig.7 Comparison of the prediction error of ICNN and traditional machine learning model on viscosity of different samples

机器学习模型与ICNN的性能比较如表3所示，各模型在均方误差与拟合优度两项评价指标上的表现存在显著差异。线性回归模型均方误差高达 1.49×10^4 ，拟合优度值仅为 5.52×10^{-1} ，表明其在捕捉黏度数据的非线性规律方面能力有限，难以对复杂流变体系建模。支持向量回归模型表现同样不理想，均方误差达 2.03×10^4 ，且拟合优度值为负，说明该模型未能有效拟合实际数据，预测性能较弱，尤其在高黏度样品的处理上，误差尤为明显。决策树模型的均方误差为0，拟合优度达到1，反映出严决策树模型虽然在表面上取得了0的均方误差和1的拟合优度，但这类结果实质上反映出模型对训练集的高度拟合，存在严重的过拟合问题，其泛化能力较差，在应对新数据时预测性能难以保障。相比之下，随机森林模型在两个指标上均表现良好，较好地捕捉了数据中的非线性结构，整体性能优于上述传统模型。然而，结合图6中的结果来看，其在存在异常波动或误差样本的情况下仍可能出现一定程度的过拟合，需进一步关注模型稳定性。综合来看，ICNN模型在均方误差(2.39×10^3)和拟合优度(9.79×10^{-1})之间实现了良好的平衡，既具备较高的预测精度，又表现出较强的稳健性与泛化能力。

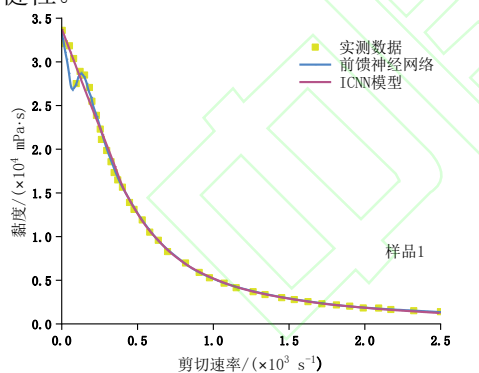
表3 机器学习模型与ICNN的性能比较

Table 3 Performance comparison of machine learning models and ICNN

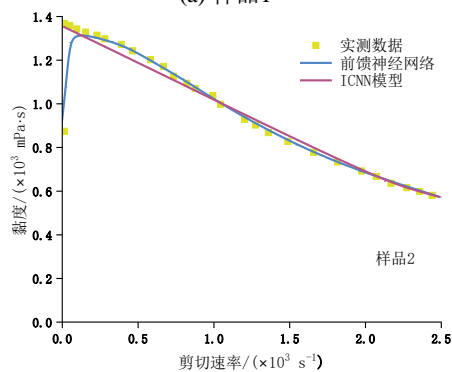
模型	均方误差	拟合优度
线性回归	1.49×10^4	5.52×10^{-1}
决策树	0	1
随机森林	1.90×10^3	9.90×10^{-1}
支持向量回归	2.03×10^4	-6.56×10^{-2}
ICNN	2.39×10^3	9.79×10^{-1}

2.2.3 ICNN 模型与前馈神经网络对比

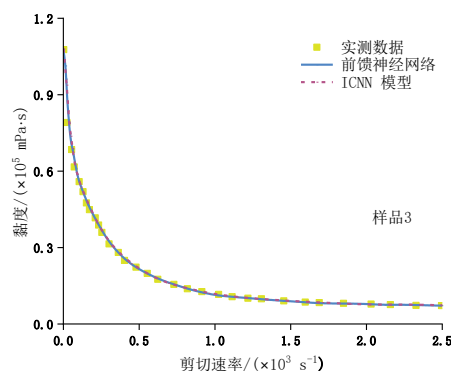
图8展示了ICNN与前馈神经网络在流变建模中的预测差异。总体来看,两种模型均能较好地拟合实验数据,但在局部细节处理能力以及异常数据的应对方面,ICNN模型表现出更强的鲁棒性和物理一致性。在样品1中,二者在高剪切速率区间的预测结果较为一致,均能够准确反映黏度随剪切速率变化的趋势。然而,在低剪切速率区间,前馈神经网络的拟合曲线出现轻微波动,而ICNN模型的预测结果则更加平滑,与黏度随剪切速率增加而降低的物理规律更为一致。样品2中包含明显异常点,前馈神经网络在低剪切速率区间的预测结果出现剧烈波动,表明该模型对异常数据较为敏感,容易发生拟合。相比之下,ICNN模型的拟合曲线更为稳定,能够有效抑制局部异常对整体预测结果的影响,展现出较强的容错能力。对于样品3和样品4,两种模型的预测结果几乎重合,均展现出较好的拟合精度。然而,在样品5的预测中,两者的性能差异再次显现:尽管整体趋势一致,前馈神经网络在局部区域仍存在不稳定的波动,而ICNN模型始终保持光滑、连续的预测输出,进一步验证了其在应对高黏度、高非线性化工釜残样品时的可靠性与稳健性。



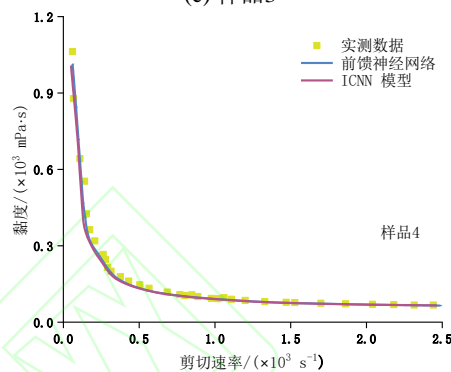
(a) 样品1



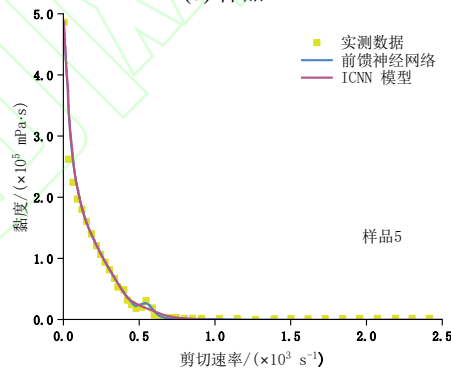
(b) 样品2



(c) 样品3



(d) 样品4



(e) 样品5

图8 ICNN与前馈神经网络对不同样品黏度的预测性能对比
Fig.8 Comparison of viscosity predictions between ICNN and FNN on viscosity of different samples

图9展示了不同釜残样品中, ICNN与前馈神经网络的预测误差随剪切速率变化的对比结果。对于样品1, 前馈神经网络在低剪切速率区间的预测稳定性较差, 拟合曲线波动显著, 误差图中表现为剧烈震荡, 反映出模型在该区间存在局部拟合不一致的情况。样品2的实验数据在低剪切速率处存在异常跳变现象。尽管前馈神经网络在该区域的误差幅度略低于ICNN, 但结合图8的拟合曲线可见, 该模型对异常点响应过度, 显示出过拟合倾向。相较之下ICNN的预测结果更为平滑, 虽局部误差稍高, 但整体曲线走势更符合黏度与剪切速率的物理关系, 因此具有更高的可信度与解释性。在样品3、样品4和样品5, 两种模型的误差曲线几乎重合, 拟合精度较高, 结果稳定一致。本研究将ICNN与前馈神经网络模型对5组釜残数据预测结果的平均性能进行对比得到, ICNN在多数样品中表现出更优的预测稳定性和物理合理性。尤其在面对剪切速率变化剧烈、数据波动较大的复杂样品时, 其在鲁棒性和泛化能力方面更具优势, 适用于非线性特征显著的化工釜残流变行为建模任务。

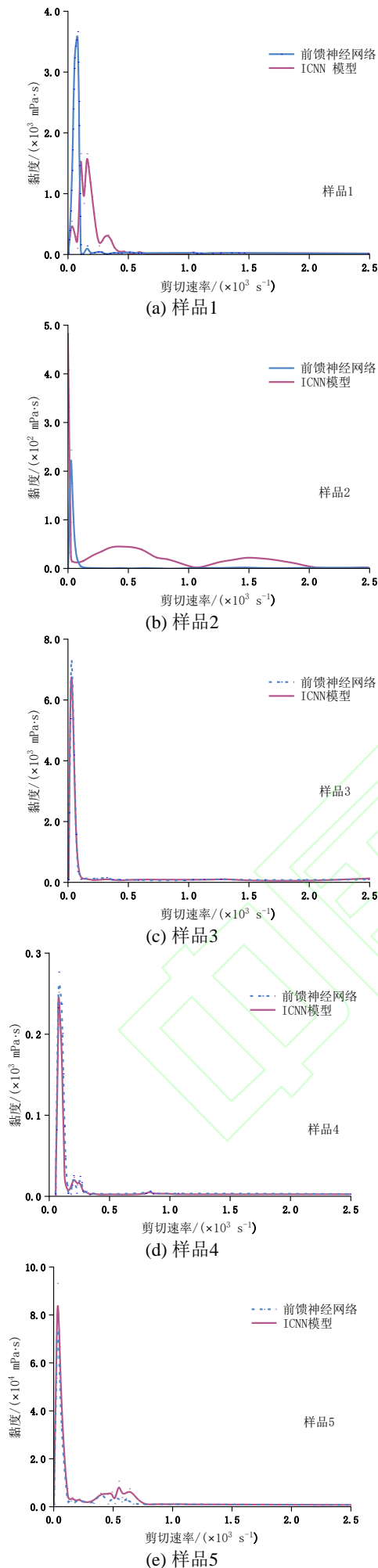


图9 ICNN模型与前馈神经网络对不同样品黏度的预测误差对比
Fig.9 Comparison of the prediction errors of ICNN and FNN on viscosity of different samples

2.2.4 抗干扰性能评估与工业应用前景

为了进一步验证ICNN模型在含有测量误差或局部异常值数据下的稳定性与预测能力，在样本1实验数据基础上构建10%的噪声扰动集，如图10所示。具体方法为：在原始剪切速率-黏度数据中，随机选取10%的数据点，并对其黏度施加 $\pm 30\%$ 的随机扰动，以模拟传感器误差或实验误差场景。接着，将该异常数据集输入已训练的ICNN模型，观察其预测曲线与异常数据点的拟合关系。尽管部分数据点存在显著偏移，ICNN模型的拟合曲线仍能准确保持整体趋势，未因个别异常值而发生剧烈波动。这表明，得益于模型中的凸性结构和单调性约束，ICNN能够有效抑制局部扰动对整体预测结果的影响，保持曲线的平滑性与物理合理性，并展现出较强的异常数据处理能力。

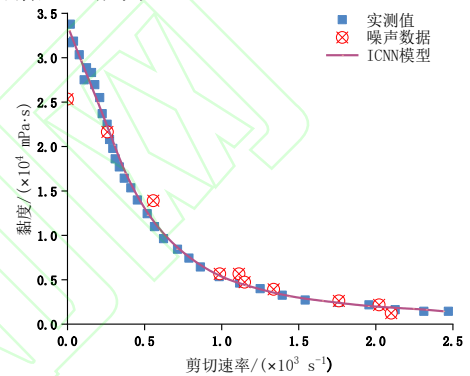


图10 含 $\pm 30\%$ 噪声扰动时ICNN模型对黏度的拟合结果
Fig. 10 Fitting results of ICNN model on viscosity with $\pm 30\%$ noise disturbance

除了模型的拟合精度和误差外，计算效率也是评估模型实际应用能力的重要因素。本文对ICNN、前馈神经网络和物理建模方法的训练时间进行了对比分析。在AMD Ryzen 74800H CPU上，ICNN模型的训练时间约为20 min，前馈神经网络的训练时间约为10 min，而基于手动的物理建模方法则需要约50 min。ICNN在处理复杂非线性流变行为时，其计算效率相较于传统物理建模方法具有显著提升。尽管ICNN的训练时间比前馈神经网络长，但其在高黏度、低剪切速率及复杂数据的预测精度和稳定性方面，其表现明显优于其他模型。

基于本文所建立的非牛顿流体建模方法，结合流体力学计算，开发了一套喷嘴堵塞风险预测软件，该软件已初步验证了模型在实际喷枪喷嘴中预测釜残发生堵塞的可行性，展现出良好的工业应用前景。然而，本文也存在局限性，值得进一步探讨。首先，研究中的样本数量较为有限，可能会影响模型的泛化能力及其在不同工况下的表现。其次，当前模型主要针对化工釜残非牛顿流体，对于其他类型流体的适用性尚需进一步验证。

3 结论

本文针对化工釜残非牛顿流体流变特性建模中存在的拟合精度低、异常数据干扰大等问题，提出了一种基于ICNN模型的流变建模方法，得到如下主要结论。

(1) 构建了一种具有凸性约束的ICNN流变模型，通过引入非负权重与指数映射正则项，增强了模型的

理合理性与鲁棒性，有效解决了传统模型在低剪切速率区间易震荡、误差大等问题。

(2) 在5种典型釜残样本实验数据上进行验证，ICNN模型在拟合精度与预测稳定性方面均优于幂律模型、Carreau模型、支持向量回归、随机森林、决策树、前馈神经网络等多种对比模型，平均拟合优度可达0.987，表现出更优的综合性能。

(3) 噪声扰动实验表明，在10%数据被施加 $\pm 30\%$ 扰动的条件下，ICNN模型仍能保持预测曲线平滑，未出现大幅偏离，验证了其抗干扰能力。

(4) 基于所构建的ICNN模型，开发了喷嘴堵塞风险预测软件，并在化工实际工况下完成初步验证，显示出良好的工程适应性和应用潜力。

研究结果表明，ICNN模型在非牛顿流体流变建模中具有显著优势，为高黏度废液输送与处理工艺的优化设计提供了理论基础与技术支撑，具有良好的工程推广价值。

参考文献:

- [1] 蔡思超, 周静, 杜金泽, 等. 煤化工酚基精馏釜残资源化利用过程初步分析 [J]. 化工进展, 2022, 41(06): 3360-3371.
Cai Sichao, Zhou Jing, Du Jinze, et al. Process analysis of resource utilization of phenol-based distillation residue from coal chemical industry [J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2022, 41(06): 3360-3371.
- [2] 王娇, 刘吉宝, 宋云鹏, 等. 高含固餐厨垃圾有机组成对其流变特征的影响 [J]. 环境科学学报, 2021, 41(10): 4107-4115.
Wang Jiao, Liu Jibao, Song Yunpeng, et al. Effect of organic composition of high solid food waste on its rheological behaviors [J]. Acta Scientiae Circumstantiae, 2021, 41(10): 4107-4115.
- [3] 马媛, 杜金泽, 周静, 等. 酚基釜残深拔残渣分析及其热转化制备CO₂吸附材料 [J]. 化学工业与工程, 2021, 38(01): 43-52.
Ma Yuan, Du Jinze, Zhou Jing, et al. Chemical analysis of the phenolic tar residue and its potential conversion to CO₂ adsorbents by thermal treatment [J]. Chemical Industry and Engineering, 2021, 38(01): 43-52.
- [4] 徐硕涵, 赵凯, 白天阳, 等. 喷嘴内流影响下的喷油器性能参数敏感性分析 [J]. 西安交通大学学报, 2025, 59(05): 189-197.
Xu Shuohan, Zhao Kai, Bai Tianyang, et al. Parameters sensitivity analysis of injector performance with the effect of nozzle internal flows [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2025, 59(05): 189-197.
- [5] 陈芝, 刘建忠, 陈建, 等. DMF精馏残渣与煤共成浆特性 [J]. 动力工程学报, 2021, 41(1): 71-78.
Chen Zhi, Liu Jianzhong, Chen Jian, et al. Co-slurryability of DMF distillation residue with coal [J]. Journal of Chinese Society of Power Engineering, 2021, 41(1): 71-78.
- [6] 周储朋, 钱善华, 任海栋, 等. 基于流体仿真的搅拌器结构参数对搅拌特性影响研究 [J]. 化学工业与工程, 2024, 41(03): 124-134.
Zhou Chupeng, Qian Shanhua, Ren Haidong, et al. Research on the influence of agitator structural parameters on stirring characteristics based on fluid simulation [J]. Chemical Industry and Engineering, 2024, 41(03): 124-134.
- [7] JIA-TONG X, ZI-YU Z, QING-YU L, et al. Determination of yield stress in complex fluids: theory, methods and applications [J]. POLYMER BULLETIN, 2025, 38(5): 689-717.
- [8] 刘泓志, 徐善坤, 郭易东, 等. 泥浆流变模型对泥水盾构排浆管道压力损失特性的影响分析 [J]. 现代隧道技术, 2024, 61(01): 182-189.
Liu Hongzhi, Xu Shankun, Guo Yidong, et al. Analysis of the effect of slurry rheological model on the pressure loss characteristics of slurry discharge pipe of slurry shield [J]. Modern Tunneling Technology, 2024, 61(01): 182-189.
- [9] 何文卓, 刘晓玲, 朱鹏娟, 等. 基于Carreau流变模型的圆柱滚子轴承热混合润滑分析 [J]. 润滑与密封, 2023, 48(05): 52-59.
He Wenzhuo, Liu Xiaoling, Zhu Pengjuan, et al. Analysis of thermal mixed lubrication of cylindrical roller bearings based on carreau rheological model [J]. Lubrication Engineering, 2023, 48(05): 52-59.
- [10] DWIER S, GARROUCH A, LABABIDI H. Delineation of the effective viscosity controls of diluted polymer solutions at various flow regimes [J]. Fluid Phase Equilibria, 2024, 584: 114143.
- [11] ISMAIL A, RASHID H M A, GHOLAMI R, et al. Characterization based machine learning modeling for the prediction of the rheological properties of water-based drilling mud: an experimental study on grass as an environmental friendly additive [J]. Journal of Petroleum Exploration and Production Technology, 2022, 12(6): 1677-1695.
- [12] BEMANI A, MADANI M, KAZEMI A. Machine learning-based estimation of nano-lubricants viscosity in different operating conditions [J]. Fuel, 2023, 352: 129102.
- [13] PAROLINI N, POIATTI A, VENÉ J, et al. Structure-preserving neural networks in data-driven rheological models [J]. SIAM Journal on Scientific Computing, 2025, 47(1): C182-C206.
- [14] TAÇ V, LINKA K, SAHLI-COSTABAL F, et al. Benchmarking physics-informed frameworks for data-driven hyperelasticity [J]. Computational Mechanics, 2024, 73(1): 49-65.
- [15] YAN T, WANG D, XIA T, et al. New shapeness property and its convex optimization model for interpretable machine degradation modeling [J]. IEEE Transactions on Reliability, 2023, 72(2): 703-715.
- [16] 张争奇, 雷志坤, 张天天, 等. 高黏改性沥青制备及高温流变性能 [J]. 材料科学与工程学报, 2025, 43(01): 47-54.
Zhang Zhengqi, Lei Zhikun, Zhang Tiantian, et al. Reparation and high temperature rheological properties of high viscosity asphalt [J]. Journal of Materials Science and Engineering, 2025, 43(01): 47-54.

- [17] 程曦, 张志勇. 基于人工神经网络的复杂介质中波的传播不确定性分析方法 [J]. 电子与信息学报, 2021, 43(12): 3662-3670.
- Cheng Xi, Zhang Zhiyong. An uncertainty analysis method of wave propagation in complex media based on artificial neural network [J]. Journal of Electronics & Information Technology, 2021, 43(12): 3662-3670.
- [18] TAHERI M, KLIDBARY S H. Generating a large family of nonlinear activation functions (LFNAFs) in neural networks [J]. The Journal of Supercomputing, 2025, 81(5): 661.
- [19] GUJARATI K R, BATHALA L, VENKATESH V, et al. Transformer-based automated segmentation of the median nerve in ultrasound videos of wrist-to-elbow region [J]. IEEE Transactions on Ultrasonics, Ferroelectrics, and Frequency Control, 2024, 71(1): 56-69.
- [20] 范昌浩, 李明佳, 李梦杰, 等. 基于可解释机器学习的固体填充床储热装置快速设计研究 [J]. 西安交通大学学报, 2024, 58(11): 87-97.
- Fan Changhao, Li Mingjia, Li Mengjie, et al. Research on rapid design of solid packed-bed heat storage devices based on interpretable machine learning [J]. Journal of Xi'an Jiaotong University, 2024, 58(11): 87-97.
- [21] 徐岸, 吴永明, 郑洋. 基于自监督与蒸馏约束的正则化类增量学习方法 [J]. 计算机辅助设计与图形学学报, 2024, 36(05): 775-785.
- Xu An, Wu Yongming, Zheng Yang. A regularized class incremental learning method based on self-supervision with distillation constraints [J]. Journal of Computer-Aided Design & Computer Graphics, 2024, 36(05): 775-785.
- [22] 李锋, 彭天波. 包含 Mullins 效应的 HDR 热-超-黏弹性本构模型 [J]. 力学学报, 2024, 54(9): 1-9.
- Li Feng, Peng Tianbo. AN HDR THERMAL-HYPER-VISCOELASTIC CONSTITUTIVE MODEL WITH MULLINS EFFECT [J]. Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics, 2024, 54(9): 1-9.
- [23] 张卓伦, 袁帅鹏, 李铁克, 等. 基于两级决策树模型的轧制时间预测方法 [J]. 计算机集成制造系统, 2025, 31(01): 197-210.
- Zhang Zhuolun, Yuan Shuaipeng, Li Tieke, et al. Steel rolling time prediction method based on two-level decision tree model [J]. Computer Integrated Manufacturing Systems, 2025, 31(01): 197-210.
- [24] 高旺, 刘裕荐, 郭雅娟, 等. 基于随机森林的GNSS观测粗差拟准检定方法 [J]. 仪器仪表学报, 2025, 46(01): 42-53.
- Gao Wang, Liu Yujian, Guo Yajuan, et al. Quasi-accurate detection method for GNSS observation gross errors based on random forest [J]. Chinese Journal of Scientific Instrument, 2025, 46(01): 42-53.
- [25] 李晓颖, 单嫻, 张哲硕, 等. 基于G-Loss的在线支持向量回归算法 [J]. 系统科学与数学, 2025, 45(02): 587-602.
- Li Xiaoying, Shan Xian, Zhang Zheshuo, et al. Online support vector regression algorithm based on G-Loss [J]. Journal of Systems Science and Mathematical Sciences, 2025, 45(02): 587-602.
- [26] CHEN Z, LI X, WANG W, et al. Residual strength prediction of corroded pipelines using multilayer perceptron and modified feedforward neural network [J]. Reliability Engineering & System Safety, 2023, 231: 108980.
- [27] YANG A, SUN S, QI L, et al. Development of an interpretable QSPR model to predict the octanol-water partition coefficient based on three artificial intelligence algorithms [J]. Green Chemical Engineering, 2025, 6(2): 193-199.