



March 25, 2025

Прогнозирование вязкости жидкостей с использованием машинного обучения на основе параметров кубических уравнений состояния



Проблема, объект и предмет исследования

Проблема: Точность предсказания вязкости жидкостей, состоящих из простых углеводородов.

Объект: Вязкость жидких смесей углеводородов в различных термодинамических условиях.

Предмет: Методы прогнозирования вязкости жидкостей, включая аналитические модели и подходы машинного обучения.



- Проанализирована база данных ThermoML на предмет соответствующих данных.
- Собраны экспериментальные данные по вязкости.
- Данные дополнены коэффициентами веществ в уравнении CPPCSAFT.
- Вычислены плотности для экспериментальных данных на основе давления и температуры.
- Посчитана избыточная энтропия с помощью полученной плотности.



- Найдены члены, характерные для формул вязкости.
- Данные дополнены производными признаками, дающими наибольший вклад в формулы.
- Обучены символьные модели.
- Обучены модели машинного обучения, предсказывающие вязкость жидкости с помощью экспериментальных данных, коэффициентов уравнения состояния и вычисленных параметров.
- Произведено сравнение точности полученных моделей с методами масштабирования энтропии и расширенной жидкостной корреляции.



Задачи

- Сбор и обработка экспериментальных данных по вязкости из базы данных ThermoML.
- Вычисление дополнительных параметров с использованием термодинамических соотношений и уравнений состояния.
- Определение оптимальных параметров, включая их преобразования и комбинации, для повышения точности прогнозирования вязкости.
- Разработка и проверка моделей машинного обучения, которые прогнозируют вязкость на основе имеющихся параметров.
- Сравнение моделей ML с известными методами.



Цель исследования

Разработать метод для прогнозирования вязкости жидкости на основе параметров кубических уравнений состояния (CubicEOS), повышающий точность прогнозирования по сравнению с классическими методами.