



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

Студент-исследователь:

Панов Михаил Федорович

студент 2 курса магистратуры ОП

«Системный анализ и математические технологии»



May 11, 2025

Руководитель: ФИО, степень, звание, должность

Консультант: ФИО, если есть



Постановка задачи

Цель: Разработка метода для прогнозирования вязкости жидкости на основе параметров CubicEOS, повышающего точность по сравнению с классическими методами.

Задачи:

1. Сбор и обработка экспериментальных данных из базы ThermoML.
2. Вычисление дополнительных параметров с использованием термодинамических соотношений и уравнений состояния.
3. Определение оптимальных параметров и их комбинаций.
4. Разработка и проверка моделей машинного обучения.
5. Сравнение моделей с классическими методами.



Анализ и обоснование выбора методов

- Классические методы (энтропийное масштабирование, жидкостные корреляции) имеют ограниченную точность.
- Использование CPPCSAFT позволяет рассчитывать термодинамические параметры.
- Машинное обучение обеспечивает более высокую гибкость и точность.
- Генерация новых признаков на основе формул помогает улучшить качество модели.



Сбор и обработка данных

- ThermoML использована как источник экспериментальных данных.
- Данные приведены к единому формату, очищены и дополнены коэффициентами CPPCSAFT.
- Расчёт плотностей по температуре и давлению.



Расчёт параметров и энтропии

- Вычисление избыточной энтропии на основе плотности.
- Анализ производных термодинамических величин.
- Поиск характеристических членов формул для вязкости.



Генерация и отбор признаков

- Реализована собственная система генерации признаков.
- Используются линейная регрессия и лес деревьев для отбора важных признаков.
- Генерация новых формул и отбор наиболее значимых.



Разработка моделей

- Построены и обучены модели машинного обучения (регрессия, деревья).
- Используются как экспериментальные данные, так и вычисленные признаки.
- Многократная валидация и тестирование моделей.



Сравнение с классическими методами

- Масштабирование энтропии.
- Расширенные жидкостные корреляции.
- Метод с генерацией признаков даёт улучшение точности в несколько раз.



- Получены высокоточные модели для прогнозирования вязкости.
- Создана система отбора признаков с возможностью расширения.
- Результаты превосходят традиционные подходы.



Выводы и перспективы

Выводы:

1. Собраны и обработаны данные из ThermoML.
2. Вычислены важные параметры на основе уравнений состояния.
3. Проведена генерация и отбор признаков.
4. Построены и проверены модели машинного обучения.
5. Модели превзошли классические методы.

Перспективы:

- Расширение на другие классы жидкостей.
- Интеграция в инженерные расчётные системы.
- Развитие автоматизированной системы генерации признаков.