

Doi:10. 13353/j. issn. 1004. 9533. 20210329

机器学习预测叶片-网孔管线式高剪切混合器性能

王灵杰¹, 郭俊恒¹, 李文鹏², 程 芹³, 张金利^{1*}

(1. 天津大学化工学院, 天津 300072; 2. 郑州大学化工学院, 郑州 450000; 3. 安徽大学化学化工学院, 合肥 230601)

摘要:高剪切混合器作为一种新型的过程强化设备,工业应用日益广泛,但其工程设计依然依靠经验放大。利用不同定转子构型的叶片-网孔管线式高剪切混合器的功耗、液-液传质系数和乳化性能等数据,采用反向传播神经网络算法、循环神经网络算法和决策树算法等机器学习算法对数据进行分析建模,为高剪切混合器的设计与优化提供工具。结果表明:反向传播神经网络算法和循环神经网络算法都可以准确预测高剪切混合器性能,但是单个神经网络算法存在过拟合和泛化能力差的问题,通过将不同机器学习模型融合进一步提高了模型精度和稳定性。基于自动机器学习的PyCaret程序能够准确拟合数据,但在数据量较小的情况下,其优化能力较差。

关键词:高剪切混合器;机器学习;神经网络;功耗;液-液传质;乳化

中图分类号:TQ021.8 **文献标志码:**A **文章编号:**1004-9533(2022)02-0001-08

Forecast of in-line blade-screen high shear mixer's performance based on machine learning

WANG Lingjie¹, GUO Junheng¹, LI Wenpeng², CHENG Qin³, ZHANG Jinli^{1*}

(1. School of Chemical Engineering and Technology, Tianjin University, Tianjin 300072, China;

2. School of Chemical Engineering and Technology, Zhengzhou University, Zhengzhou 450000, China;

3. College of Chemistry & Chemical Engineering, Anhui University, Hefei 230601, China)

Abstract: As a novel type of process intensification equipment, high-shear mixers were increasingly widely used in industry, but their design still relies on experimental scaling-up. Data on power, liquid-liquid mass transfer coefficient and emulsification of in-line high-shear mixers with different stator and rotor configurations were collected. And regression fitting analysis on the collected data was performed using machine learning algorithms such as back propagation neural network, recurrent neural network, decision tree, etc., which provided information for the design and optimization of high-shear mixers. The results show that back propagation neural network and recurrent neural network algorithms can predict high-shear mixer's performance precisely and the accuracy of the model can be further improved by fusing different machine learning models. The PyCaret program based on auto machine learning can accurately fit the data. However, its optimization performance is poor when the amount of data is small.

Keywords: high shear mixers; machine learning; neural networks; power; liquid-liquid mass transfer; emulsification

收稿日期:2021-03-30 修回日期:2021-05-12
基金项目:国家自然科学基金项目(U20A20151;21776179)。
作者简介:王灵杰(1988-),男,硕士研究生,主要从事机器学习在高剪切方向的研究。
通信作者:张金利,教授,E-mail:zhangjinli@tju.edu.cn。

高剪切混合器作为一种新型的过程强化装备,已广泛应用于化工、食品、制药以及农业领域。高剪切混合器核心部件为定转子,不同的生产过程与操作工况需要采用不同定转子构型及组合方式,这导致高剪切混合器的定转子结构及组合形式复杂多样^[1]。高剪切混合器的结构参数、操作参数与物性参数对其流动、功耗、乳化和传质特性的影响错综复杂,至今仍未形成对上述特性清晰而系统的认识。目前,高剪切混合器的设计、选型、工业放大和操作参数调控仍然主要依赖于工程经验和反复实验,这导致其存在开发与使用成本偏高,放大困难等问题^[2]。因此,急需建立高剪切混合器设计与优化模型。

近些年来,机器学习飞速发展,机器学习建模方法越来越多地应用于模型预测及系统优化。例如,在微波固化材料技术中,由于微波腔内不均匀的电磁场导致物体表面温度不均匀,严重阻碍了固化材料技术的发展;Zhou 等利用机器学习卷积神经网络(Neural Network, NN)实现了温度智能控制,使表面温度的均匀性有了明显地提高,解决了温度不均匀的痛点,满足了航空航天材料的高质量要求^[3]。Wu 等利用机器学习的迁移学习方法,让计算机从高分子数据库中学习已有数据建立模型,并用实验数据微调机器学习模型,极大改善了因实验数据太少不能使用机器学习的缺点,设计了新型高导热聚酰亚胺,其导热系数比传统的提高了 80%^[4]。由于神经网络容易陷入局部极值,孙永利等使用机器学习神经网络和遗传算法结合的方法改善了神经网络容易陷入局部极值的缺点,精确预测了螺旋折流板换热器的壳程换热系数和压降^[5]。李文鹏等使用反向传播神经网络机器学习算法对管式高剪切反应器建模,减少了实验次数,获得了反应器的最优结构^[6]。

可见基于人工智能和机器学习的建模和优化技术在化工方向发挥越来越重要的作用。然而高剪切混合器设计仅使用了一种机器学习算法,还有多种算法未尝试。因此本工作采用多种机器学习算法对叶片-网孔管线式高剪切混合器的结构参数、操作参数和物性参数对其功耗、液液传质和乳化性能进行建模,以期对叶片-网孔管线式高剪切混合器的设计与优化提供工具。从而减少实验次数,获得高剪切反应器的最优结构,降低成本,缩短开发周期。

1 机器学习算法

1.1 反向传播神经网络算法

反向传播(Back Propagation, BP)神经网络方法,在神经元足够多的情况下,可以在任意精度的情况下,逼近非线性的映射关系^[7]。

BP 神经网络是多层的神经网络,含有输入层、隐含层和输出层。前面 1 层神经元与后 1 层神经元各个相连接,但是本层神经元互不相连。调整权重和阈值,使用梯度下降法的策略,使预测值与实际值的误差最小。

1.2 循环神经网络算法

循环神经网络(Recurrent Neural Network, RNN)是一种深度学习神经网络^[8]。在神经网络中加入反馈连接层,能够对过去的的数据留下印象并且建立不同时间段数据的关系。可认为是同一单元重复构成的链式结构网络,其输出不仅受当前数据的影响而且受以前所有数据的影响。伴随着时间和神经元数量增加,RNN 往往会出现梯度消失和爆炸的现象。

长短时记忆(Long Short Term Memory, LSTM)神经网络也是一种神经网络,它是 RNN 的一种改进模型^[9]。LSTM 利用记忆模块代替普通的神经元,一个记忆模块由输入门、遗忘门和输出门构成。由于遗忘门的存在,LSTM 可以忘记一些不重要的信息,有效防止梯度的消失和爆炸。

门控循环单元(Gated Recurrent Unit, GRU)神经网络是 LSTM 的改进版本^[10]。GRU 比 LSTM 少一个门控单元,优化了 LSTM 内部结构,由于参数的减少,从而大幅提高了训练速度。

1.3 基于树的机器学习算法

决策树(Decision Tree, DT)作为一种机器学习方法,可以进行数据分类和回归^[11]。使用一个基于树的模型,以香农熵的大小为划分依据。因为它的方法非常简单、但却有非常明确的物理含义,可以轻松的变化成“如果-那么”的规则,能够生成具有可解释的类似于流程图的树状结构的准确预测模型,从而使用户能够快速提取有用的信息。

极端随机树(Extremely Randomized Trees, ET)由 Pierre Geurts 等于 2006 年提出^[12]。通过对多个决策树进行打分,根据各个决策树预测值的平均值来预测。

极端梯度提升 (Extreme Gradient Boosting, XG-BOOST) 由陈天齐博士提出^[13]。内部是决策回归树,能处理大量的数据,自定义损失函数。采用弱分类器迭代计算,从而提高预测精确性。

梯度提升回归树 (Gradient Boosting Regressor, GBR) 每次迭代生成一个弱学习器用于拟合损失函数以前累积模型的梯度,之后将弱学习器加入累积模型,从而逐渐降低模型的损失^[14]。

2 实验

2.1 PyCaret 程序

PyCaret 是一个开源的程序,它对计算硬件资源的要求不是很高,8 GB 的运行内存就可以运行^[15];操作系统为 Windows 10,程序语言为 Python,在 Jupyter Notebook 软件下运行。PyCaret 程序十分方便机器学习初学者使用。

PyCaret 具有简洁的、可以方便设置的程序界面,内置 25 种不同的机器学习算法,仅仅用几行代码就可以完成从数据预处理到实现模型部署的整个流程。它包含了如今很多流行的机器学习算法,如:决策树算法、随机森林算法、支持向量机算法和最近邻算法等。PyCaret 可以进行有监督和无监督模型的训练,能够实现分类、回归、异常检测、聚类、

自然语言处理和关联规则挖掘 6 大类功能。

2.2 数据预处理

除 PyCaret 以外,本研究所有机器学习模型的输入数据均采用归一化的方法[式(1)],将输入数据变为-1~1 的值,将有量纲的数据变为无量纲的数据,变成纯量数据后,更有利于机器学习的训练。输出数据采用对数的方法[式(2)]平滑输出数据,使其更符合高斯分布,也更方便机器学习的训练。最后使用式(3)将式(2)的输出数据变为最终的拟合数据。

$$x_{\max \min} = \frac{2(x_{\text{in}} - x_{\min})}{x_{\max} - x_{\min}} - 1 \tag{1}$$

式(1)中: x_{\max} 为每个特征的最大值, x_{\min} 为每个特征的最小值。

$$y_{\text{mid}} = \ln(y_{\text{in}} + 1) \tag{2}$$

$$y_{\text{out}} = e^{y_{\text{mid}}} - 1 \tag{3}$$

2.3 数据描述

2.3.1 流体净功耗 (P_{fluid}) 数据

流体净功耗数据来自程芹和秦宏云的实验,共有 141 组数据^[16,17]。输入参数为转子叶片弯曲角度、定转子剪切间隙、转子叶片个数、转子转速、流体流量、流体密度、连续相黏度、分散相黏度、外层直径和层数,输出参数为 P_{fluid} ,总计 10 个输入变量,1 个输出变量。表 1 为部分流体净功耗数据。

表 1 部分流体净功耗数据
Table 1 Part of P_{fluid} data

角度/ (°)	间隙/ m	叶片/ 个	转速/ (r·min ⁻¹)	流量/ (m ³ ·h ⁻¹)	密度/ (kg·m ³)	连续相黏度/ (mPa·s)	分散相黏度/ (mPa·s)	转子外径/ m	层数/ 层	$P_{\text{fluid}} /$ W
-15	0.000 5	9	1 000	0.202 0	998	1.2	1.5	0.060	2	6.06
15	0.000 5	6	1 000	0.202 0	998	1.2	1.5	0.060	2	6.61
-15	0.000 5	6	1 000	0.202 0	998	1.2	1.5	0.075	3	10.32
-15	0.000 5	6	2 000	0.202 0	998	1.2	1.5	0.075	3	25.79
-15	0.000 5	6	3 000	0.202 0	998	1.2	1.5	0.075	3	36.36
0	0.000 5	6	3 000	0.202 0	998	1.2	1.5	0.060	2	37.50
-15	0.000 5	6	1 000	0.173 1	1 204	33.7	0	0.060	2	51.33
-15	0.000 5	6	1 500	0.056 4	1 243	260.0	0	0.060	2	160.54
-15	0.000 5	6	2 000	0.312 3	1 241	212.5	0	0.060	2	218.71
-15	0.004 0	6	3 000	0.202 0	998	1.2	1.5	0.060	2	30.78

2.3.2 液液总体积传质系数 ($K_L a$) 数据

液液总体积传质系数 $K_L a$ 数据来自秦宏云的实验,共有 35 组数据^[17]。输入参数为定转子剪切间隙、层数、转子叶片个数、转子叶片弯曲角度、转子转速,输出参数为 $K_L a$,总计 5 个输入变量,1 个输出变量。表 2 为部分液液 $K_L a$ 数据。

2.3.3 液液乳化 Sauter 平均直径 (d_{32}) 数据

乳化液滴的 d_{32} 数据来自秦宏云的实验,共有 28 组数据^[17]。输入参数为定转子剪切间隙、层数、转子叶片个数、转子转速、转子叶片弯曲角度,输出参数为液滴的 d_{32} ^[17]。总计 5 个输入变量,1 个输出变量。表 3 为部分液液乳化液滴 d_{32} 数据。

表 2 部分液液 K_La 数据

间隙/ m	层数/ 层	叶片/ 个	转速/ ($\text{r}\cdot\text{min}^{-1}$)	角度/ ($^{\circ}$)	K_La / s^{-1}
0.004 0	2	6	100 0	-15	0.044 0
0.000 5	2	6	200 0	0	0.081 6
0.000 5	3	6	500	-15	0.040 3
0.004 0	2	6	500	-15	0.025 8
0.004 0	2	6	200 0	-15	0.075 8
0.000 5	2	3	500	-15	0.024 2
0.000 5	2	9	500	-15	0.025 7
0.000 5	2	6	0	15	0.009 5
0.000 5	2	6	100 0	-15	0.048 6
0.000 5	2	6	200 0	15	0.076 1

表 3 部分液液乳化液滴 d_{32} 数据

间隙/ m	层数/ 层	叶片/ 个	转速/ ($\text{r}\cdot\text{min}^{-1}$)	角度/ ($^{\circ}$)	液滴 d_{32} / μm
0.000 5	2	9	300 0	-15	10.56
0.000 5	2	6	250 0	0	16.41
0.000 5	3	6	300 0	-15	10.34
0.004 0	2	6	200 0	-15	23.38
0.000 5	2	6	300 0	-15	13.79
0.000 5	2	6	350 0	-15	9.53
0.004 0	2	6	350 0	-15	12.77
0.000 5	2	6	250 0	-15	16.78
0.000 5	3	6	350 0	-15	8.16
0.000 5	2	6	300 0	15	12.18

3 结果与讨论

3.1 流体净功耗模型

3.1.1 流体净功耗 GRU-BP 模型

GRU-BP 神经网络是在算法层面对 2 个网络的结合。将 GRU 层的输出作为 BP 神经网络的输入层,接着是 BPNN 的隐含层,最后是输出层。

$$y = \frac{1}{1 + e^{-x}} \tag{4}$$

$$z_t = \sigma(W_z x_t + U_z h_{t-1}) \tag{5}$$

$$r_t = \sigma(W_r x_t + U_r h_{t-1}) \tag{6}$$

$$\tilde{h}_t = \tanh(W_h x_t + r_t U_h h_{t-1}) \tag{7}$$

$$h_t = z_t h_{t-1} + (1 - z_t) \tilde{h}_t \tag{8}$$

图 1 是 GRU 单元内部结构,式(4)是 sigmoid 激活函数。式(5)中 z_t 为更新门, σ 为 sigmoid 激活函数, x_t 表示 t 时刻输入, h_{t-1} 表示上一隐藏节点输出;

式(6)中 r_t 为重置门;式(7)中 \tilde{h}_t 为隐藏节点待选值, \tanh 为双曲正切函数;式(8)中 h_t 为 t 时刻隐藏节点的输出, W_z 、 W_r 、 W_h 、 U_z 、 U_r 和 U_h 为需要更新的参数。

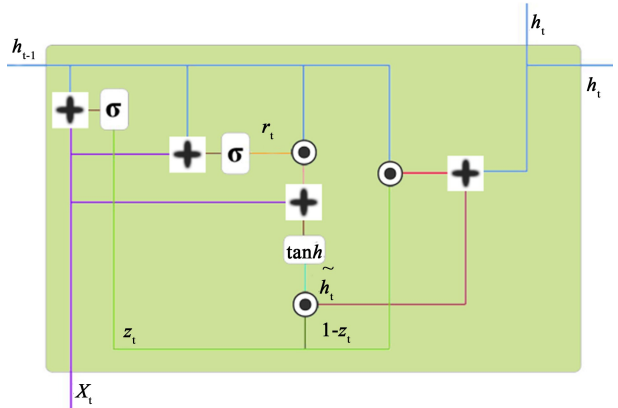


图 1 GRU 单元结构
Fig. 1 The structure of GRU unit

将叶片-网孔管线式高剪切混合器流体净功耗的 141 组数据中的 119 组数据为训练集,22 组数据为测试集。训练时使用式(2)和式(3)对输出数据进行数据变换。使用 GRU-BP 模型 Adam 算法训练数据,得到输入层 10 个神经元,1 层深度为 2 的 GRU 单元后接 3 个神经元的全连接层,全连接层使用 sigmoid 函数激活,输出层为 1 个神经元的 GRU-BP 模型(图 2)。式(9)~式(11)为评价模型平均绝对误差(MAE)、平均相对误差(MRE)和决定系数(R^2)。模型训练后的 MAE、MRE、 R^2 如表 4 所示。图 3 为 GRU-BP 模型预测值与实验值的对比,最大相对误差为 24.94%。

$$\text{MAE} = \frac{1}{M} \sum_{e=1}^M |Y_{\text{sim},e} - Y_{\text{rea},e}| \tag{9}$$

$$\text{MRE} = \frac{100\%}{M \cdot Y_{\text{rea},e}} \sum_{e=1}^M |Y_{\text{sim},e} - Y_{\text{rea},e}| \tag{10}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_1^M (Y_{\text{sim},e} - Y_{\text{rea},e})^2}{\sum_1^M (Y_{\text{rea},e} - Y_{\text{rea}})^2} \tag{11}$$

式(9)~式(11)中: Y_{sim} 为预测值, Y_{rea} 为实验值。

表 4 叶片网孔型流体净功耗 GRU-BP 模型表现

GRU-BP model			
数据集	MAE	MRE/%	R^2
GRU-BP 训练集	2.381 1	2.60	0.998 7
GRU-BP 测试集	2.347 4	4.89	0.999 2

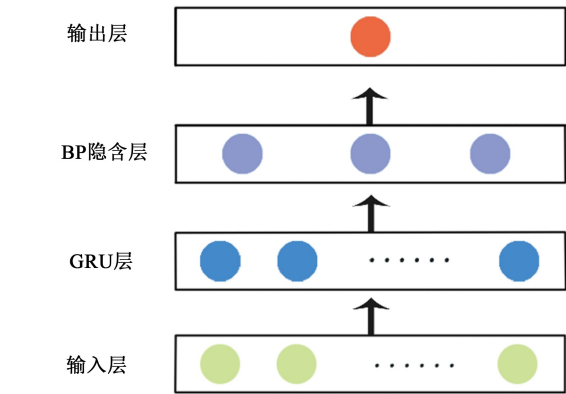


图 2 经过优化的 GRU-BP 结构

Fig. 2 Optimized structure of the GRU-BP model

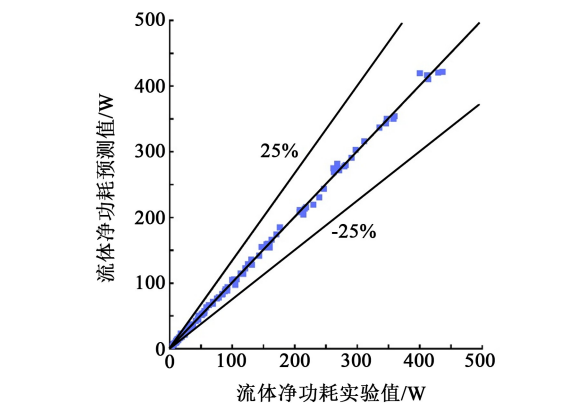


图 3 GRU-BP 模型预测 P_{fluid} 值和实验结果对比

Fig. 3 Comparison of predicted P_{fluid} value and experimental value with GRU-BP model

3.1.2 流体净功耗树模型

使用 PyCaret 程序默认设置对流体净功耗数据进行拟合,在 141 组数据中 119 组数据为训练集,22 组数据为测试集。输入数据和输出数据均不作任何数据变换。在 PyCaret 程序创建的 25 种常用的机器学习模型中,选出 MAE 较小的 3 个模型,按照 MAE 从小到大排列与 GRU-BP 模型比较,模型的 MAE、MRE 和 R^2 如表 5 所示。从表 5 可以看到,经过 PyCaret 优化的 ET 模型不仅其 MRE 为 1.48% 小于 GRU-BP 模型的 2.96%,而且其 MAE 为 1.111 9 也小于 GRU-BP 模型的 2.375 8。由此可见,自动机器学习模型对于仅有少数机器学习背景的科研人员 and 工程师还是非常有用的,可以用于大数据量的建模与预测。

3.2 液液总体积传质系数 K_La 模型

3.2.1 K_La 的 RNN、BP 模型

将叶片-网孔管线式高剪切混合器的液液总体

表 5 4 种不同 P_{fluid} 模型比较

Table 5 Comparison of 4 different P_{fluid} models			
模型简称	MAE	MRE/%	R^2
ET	1.111 9	1.48	0.998 7
GBR	1.143 1	4.99	0.998 7
XGBOOST	2.324 1	1.65	0.998 6
GRU-BP	2.375 8	2.96	0.998 7

积传质系数 K_La 共计 35 组数据,分为 28 组训练数据和 7 组测试数据;使用 BP 算法,激活函数为 sigmoid 函数,在输入层、隐含层和输出层之间进行数据传输。最终得到了输入层 5 个神经元、隐含层 3 个神经元、输出层 1 个神经元的 5-3-1 网络结构的 BP₁ 模型。模型训练后的 MAE、MRE、 R^2 如表 6 所示,模型在所有数据集上的最大相对误差为 19.74%。

表 6 叶片网孔型 K_La 模型表现

Table 6 The performance of blade screen K_La model			
数据集	MAE	MRE/%	R^2
BP ₁ 训练集	0.002 4	6.34	0.982 6
BP ₁ 测试集	0.003 5	7.18	0.971 0
RNN ₁ 训练集	0.002 8	6.40	0.980 1
RNN ₁ 测试集	0.003 9	9.94	0.978 3

使用和 BP₁ 模型同样的训练集和测试集,采用 RNN 模型 Adam 算法训练数据,得到输入层 5 个神经元,1 层 RNN 单元,RNN 单元的深度为 3,输出层 1 个神经元的 RNN₁ 模型。模型训练后的 MAE、MRE、 R^2 如表 6 所示,模型在所有数据集上的最大相对误差为 19.70%。

使用模型融合方法,将不同模型的输出乘以权重值加和后作为融合模型的输出,可以减轻神经网络容易过拟合,泛化能力差的问题。不同融合模型的预测精度如图 4 所示。图 4 中除 BP₁、RNN₁ 外,

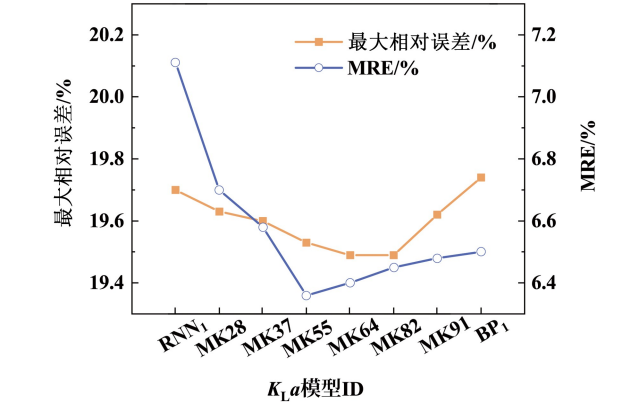


图 4 不同 K_La 模型表现

Fig. 4 The performance of different K_La models

其余模型名称的命名规则与 MK55 相同;MK55 中的 M 是 Model 的简写,K 是 $K_L a$ 的简写,第 1 个 5 表示 BP_L 模型的权重为 0.5、第 2 个 5 表示 RNN_L 模型的权重为 0.5。从图 4 中可以看出,MK55 模型有最小的平均相对误差,其平均相对误差为 6.36%;因此,选取 MK55 作为叶片-网孔管式高剪切混合器 $K_L a$ 的最终预测模型[式(12)]。图 5 为 MK55 模型预测不同结构参数和操作参数对 $K_L a$ 的影响,图 5 中的圆球形表示的是实验数据。由图 5 知, $K_L a$ 随着转子叶片

个数先增大后减小;随着转子叶片弯曲角度增大而减小;低转速下,层数增加, $K_L a$ 增加。改变高剪切混合器的结构参数和操作参数,可以形成 107 632 个组合,在此范围内利用 MK55 模型进行参数寻优,发现:定转子剪切间隙为 0.000 5 m、转子层数为 2 层、转子有 6 个叶片、转子叶片弯曲角度为 -15° 、转子转速为 $3\,000\text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$ 时,可以获得最高的 $K_L a$ 值;此条件下,经 GRU-BP 模型预测的流体净功耗为 35.02 W。

$$MK55 = 0.5 \times BP_L + 0.5 \times RNN_L \quad (12)$$

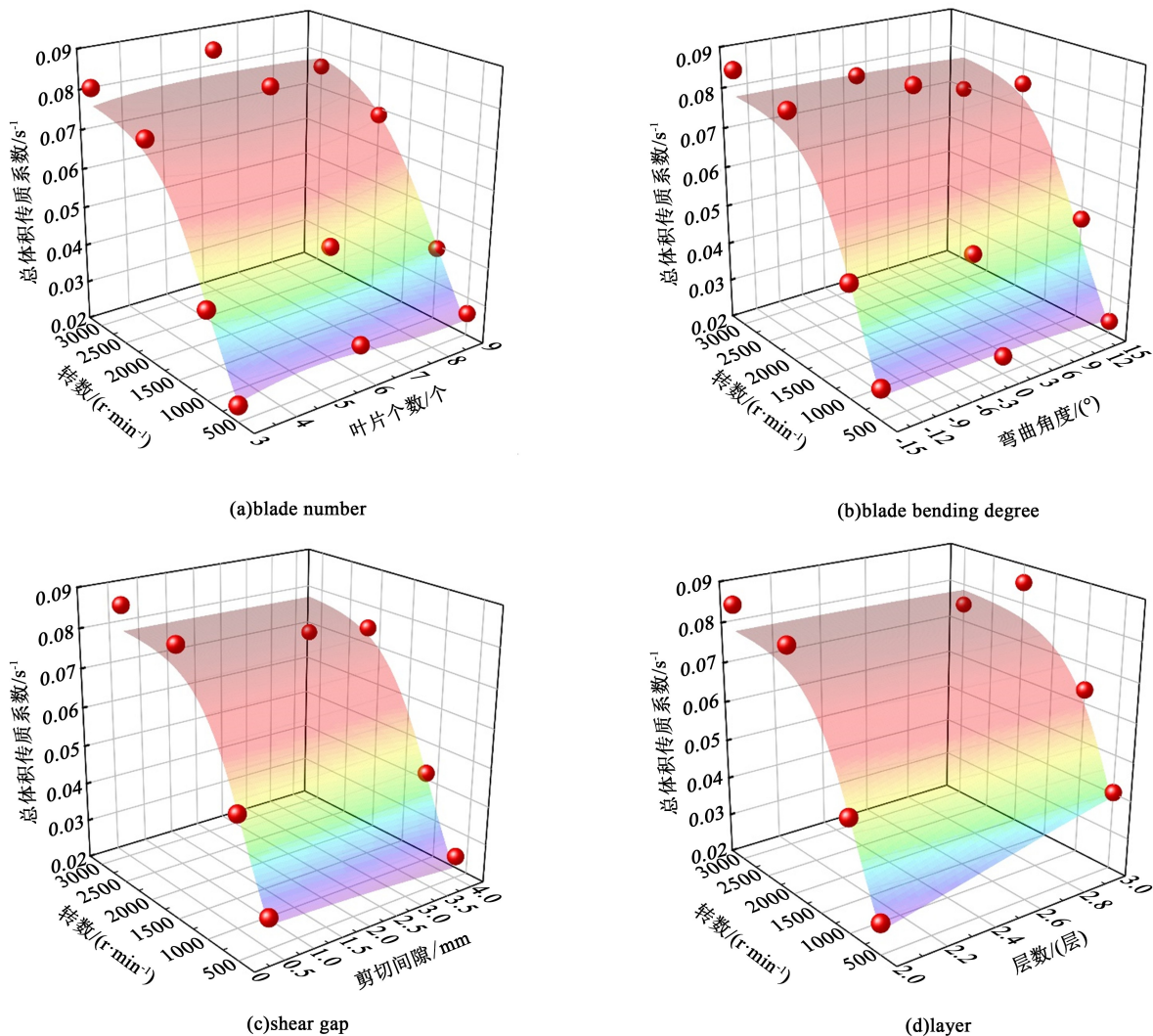


图 5 MK55 模型估算不同结构参数和转速时叶片网孔 $K_L a$ 的值

Fig. 5 The blade screen $K_L a$ MK55 model to estimate values of different configuration parameters and speeds

3.2.2 $K_L a$ 的树模型

使用 PyCaret 程序默认设置对总体积传质系数 35 组数据进行拟合,在 35 组数据中 28 组数据为训练集,7 组数据为测试集。输入数据和输出数据均不作任何数据变换。在 PyCaret 程序创建的 25 种常

用的机器学习模型中,选取 2 个 MAE 较小的模型与 MK55 模型比较,模型的 MAE、MRE 和 R^2 如表 7 所示。表 7 的 DT 模型和 ET 模型对高剪切混合器性能的拟合均优于 MK55 模型。

图 6 是表 7 决策树模型 DT 估算不同剪切间隙

表 7 3 种不同 K_La 模型比较

模型简称	MAE	MRE/%	R^2
DT	0.000 590	1.58	0.996 3
ET	0.000 757	1.83	0.992 1
MK55	0.002 739	6.36	0.980 1

和转速时 K_La 值的变化情况。通过图 5 与图 6 比较,MK55 模型输出值是平滑的,决策树模型输出值是阶跃的。因此,虽然决策树的 MRE 和 MAE 都优于 MK55 模型,但在数据量较小的情况下,决策树模型由于其输出不能平滑变化,不能对高剪切混合器进行较好地优化。

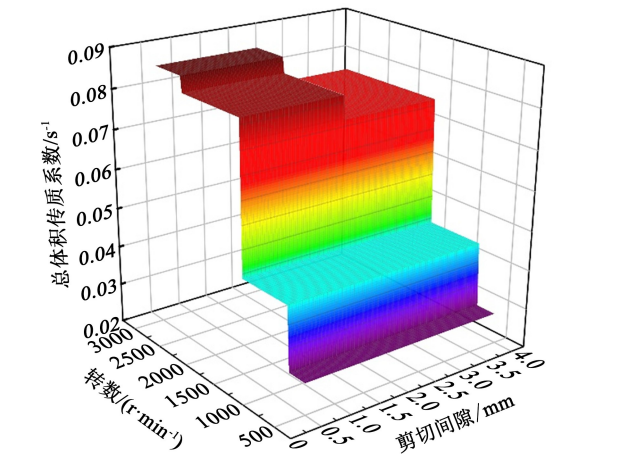


图 6 决策树模型估算不同剪切间隙和转速时叶片网孔 K_La 的值

Fig. 6 The blade screen K_La decision tree model to estimate values of different shear gaps and speeds

3.3 乳化液滴 d_{32} 模型

将叶片-网孔管线式高剪切混合器的乳化液滴 d_{32} 共计 28 组数据分为 23 组训练数据和 5 组测试数据,使用 BP 模型 Adam 算法训练数据,得到 5-2-1 网络结构的 BP₂ 模型。模型训练后的 MAE、MRE、 R^2 如表 8 所示,模型在所有数据集上的最大相对误差为 10.34%。

表 8 叶片网孔型 d_{32} 模型表现

数据集	MAE	MRE/%	R^2
BP ₂ 训练集	0.289 2	1.98	0.992 7
BP ₂ 测试集	0.699 9	5.53	0.980 3
RNN ₂ 训练集	0.663 3	4.42	0.963 5
RNN ₂ 测试集	0.569 7	4.56	0.985 4

使用和 BP₂ 模型同样的训练集和测试集,使用

RNN 模型 Adam 算法训练数据,得到输入层 5 个神经元,1 层 RNN 单元,RNN 单元的深度为 1,输出层 1 个神经元的 RNN₂ 模型。模型训练后的 MAE、MRE、 R^2 如表 8 所示,模型在所有数据集上的最大相对误差为 12.10%。

图 7 是不同乳化液滴 d_{32} 模型的比较,除 BP₂、RNN₂ 外,其余模型的命名规则与 MD91 相同;MD91 模型名称的命名规则为:M 代表 Model、D 代表 d_{32} ,9 表示 BP₂ 模型的权重为 0.9,1 表示 RNN₂ 模型的权重为 0.1。

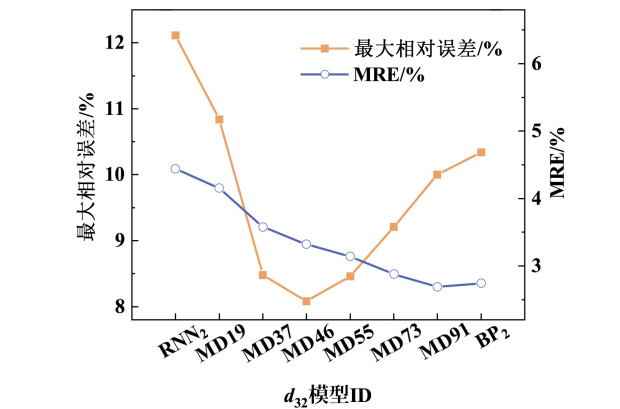


图 7 不同叶片网孔 d_{32} 模型表现

Fig. 7 The performance of different blade screen d_{32} models

从图 7 中可以看出,各个模型 MRE 变化相对于其最大相对误差变化比较小,MD91 模型有最小的平均相对误差,其平均相对误差为 2.69%;因此,选取 MD91 作为乳化液滴 d_{32} 的最终预测模型(式 13)。改变高剪切混合器的结构参数和操作参数,可以形成 55 552 个组合,在此范围内利用 MD91 模型进行参数寻优,发现:定转子剪切间隙为 0.000 5 m,转子层数为 3 层,转子有 9 个叶片,转子叶片弯曲角度为 15°,在转速 3 500 r·min⁻¹ 下,可以获得最小的 d_{32} 。在此条件下,经 GRU-BP 模型预测的流体净功耗为 57.26 W。

$$MD91 = 0.9 \times BP_2 + 0.1 \times RNN_2 \quad (13)$$

4 结论

1) BPNN、RNN、GRU-BP 算法可以准确预测高剪切混合器的功耗、液液质和乳化性能,通过对不同机器学习模型进行融合,可以使预测模型的最大相对误差继续下降,模型精度进一步提升。经过模型融合液液 K_La 模型最大相对误差由 19.74% 下

降至 19.53%, 平均相对误差由 7.11% 下降至 6.36%。乳化液滴 d_{32} 模型最大相对误差由 12.10% 下降至 10.00%, 平均相对误差由 4.44% 下降至 2.69%。从而为高剪切混合器的结构与操作参数设计提供工具。

2) 为了获得最适宜的液液传质和乳化性能, 利用机器学习模型对高剪切混合器的操作与结构参数进行了优化设计。最适宜参数组合为: 定转子剪切间隙为 0.000 5 m, 转子层数为 2 层, 转子叶片数为 6 个, 转子叶片弯曲角度为 -15° , 转子转速为 $3\,000\text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$ 时, 可以获得最高的 $K_L a$ 值; 定转子剪切间隙为 0.000 5 m, 转子层数为 3 层, 转子叶片数为 9 个, 转子叶片弯曲角度为 15° , 转子转速为 $3\,500\text{ r}\cdot\text{min}^{-1}$ 时, 可以获得最小的乳化液滴 d_{32} 。

3) 基于自动机器学习的 PyCaret 程序能够准确拟合数据, 但在数据量较小的情况下, 其优化能力较差。

参考文献:

[1] ZHANG J, XU S, LI W. High shear mixers: A review of typical applications and studies on power draw, flow pattern, energy dissipation and transfer properties[J]. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification, 2012, 57/58: 25-41

[2] QIN H, ZHANG C, XU Q, *et al.* Geometrical improvement of inline high shear mixers to intensify micromixing performance[J]. Chemical Engineering Journal, 2017, 319: 307-320

[3] ZHOU J, LI Y, LI D, *et al.* Online learning based intelligent temperature control during polymer composites microwave curing process[J]. Chemical Engineering Journal, 2019, 370: 455-465

[4] WU S, KONDO Y, KAKIMOTO M A, *et al.* Machine-learning-assisted discovery of polymers with high thermal conductivity using a molecular design algorithm[J]. Npj Computational Materials, 2019, doi:10.1038/s41524-019-0203-2

[5] 孙永利, 王华金, 郝丽, 等. 基于神经网络和遗传算法的螺旋折流板换热器性能预测[J]. 化学工业与工程, 2016, 33(4): 49-55

SUN Yongli, WANG Huajin, HAO Li, *et al.* Performance prediction of shell-and-tube heat exchangers with helical baffles using multilayer perception neural net-

works optimized with genetic algorithm[J]. Chemical Industry and Engineering, 2016, 33(4): 49-55 (in Chinese)

[6] LI W, XIA F, ZHAO S, *et al.* Mixing performance of an inline high-shear mixer with a novel pore-array liquid distributor[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2019, 58(44): 20213-20225

[7] REN C, AN N, WANG J, *et al.* Optimal parameters selection for BP neural network based on particle swarm optimization: A case study of wind speed forecasting[J]. Knowledge-Based Systems, 2014, 56: 226-239

[8] SONG J, GUO Y, GAO L, *et al.* From deterministic to generative: Multimodal stochastic RNNs for video captioning[J]. IEEE Transactions on Neural Networks and Learning Systems, 2019, 30(10): 3047-3058

[9] YUAN X, LI L, WANG Y. Nonlinear dynamic soft sensor modeling with supervised long short-term memory network[J]. IEEE Transactions on Industrial Informatics, 2020, 16(5): 3168-3176

[10] CHE Z, PURUSHOTHAM S, CHO K, *et al.* Recurrent neural networks for multivariate time series with missing values[J]. Scientific Reports, 2018, doi:10.1038/s41598-018-24271-9

[11] YU Z, HAGHIGHAT F, FUNG B C M, *et al.* A decision tree method for building energy demand modeling[J]. Energy and Buildings, 2010, 42(10): 1637-1646

[12] GEURTS P, ERNST D, WEHENKEL L. Extremely randomized trees[J]. Machine Learning, 2006, 63(1): 3-42

[13] CHEN T, GUESTRIN C. XGBoost: A scalable tree boosting system[C]//Proceedings of the 22nd ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining. New York, USA: ACM, 2016

[14] FRIEDMAN J H. Stochastic gradient boosting[J]. Computational Statistics & Data Analysis, 2002, 38(4): 367-378

[15] PyCaret.org. PyCaret [EB/OL]. <https://pycaret.org/about>. PyCaret version 1.0.0, 2020-04-30

[16] CHENG Q, XU S, SHI J, *et al.* Pump capacity and power consumption of two commercial in-line high shear mixers[J]. Industrial & Engineering Chemistry Research, 2013, 52(1): 525-537

[17] 秦宏云. 管线型高剪切混合器的几何构型优化[D]. 天津: 天津大学, 2018