

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理工学院, 1528550, 日本东京;
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、异常数据敏感性强的问题,提出了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 $0\sim 2\,500\text{ s}^{-1}$ 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: TP30 **文献标志码:** A

DOI: 10.7652/xjtuxb202512007 **文章编号:** 0253-987X(2025)12-0080-12

Input Convex Neural Network Modeling for Rheological Performance Evaluation of Non-Newtonian Fluid Residues in Chemical Reactors

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. School of Environment and Society, Institute of Science Tokyo, Tokyo 1528550, Japan;
3. Fuxin Huanfa Waste Disposal Co., Ltd., Fuxin, Liaoning 123000, China)

Abstract: To address the problems of low accuracy and high sensitivity to outliers for rheological performance modeling of non-Newtonian fluid residues in chemical reactors, an Input convex neural network (ICNN) modeling method is proposed for higher viscosity prediction stability and better physical consistency of complex non-Newtonian fluids. For the purpose of this study, a three-layer ICNN model with convexity constraints was first constructed, and non-negative weight restrictions were introduced to secure physical reasonability of the model; then an exponential mapping regularization item was designed to enhance robustness to high-viscosity

收稿日期: 2025-05-25。 作者简介: 张东宽(1995—),男,博士生;姬国钊(通信作者),男,副教授,博士生导师。 基金项目: 辽宁省科学技术计划资助项目(2023JH1/10400007);中央高校基本科研业务费资助项目(DUT24ZD103);中国国家留学基金资助项目(202406060182)。

网络出版时间: 2025-08-12

网络出版地址: <https://link.cnki.net/urlid/61.1069.t.20250811.1339.007>

regimes and outliers; finally, a fitting performance evaluation of the input convex neural network was conducted with viscosity response data of 5 typical residue samples collected from chemical reactors at a shear rate of $0\text{--}2\,500\text{ s}^{-1}$, using the power-law model, Carreau model, linear regression, support vector regression, decision tree, random forest, feedforward neural network models as references for comparison. The results show that among the models, the ICNN model demonstrates better fitting effect and more accurate prediction, with a low mean square error of 2.06×10^3 , and a fitting performance metric of 0.987, having achieved a good balance between accuracy and robustness; besides, the prediction curve of the ICNN model is smoother, having avoided oscillation and distortion that are common with classical models. The model proposed in this study provides an effective method for rheological performance modeling of complex non-Newtonian fluids such as fluid residues in chemical reactors, and it is of significant engineering reference value for the optimization of transport control and processing technologies.

Keywords: chemical reactor residues; non-Newtonian fluid; rheological modeling; input convex neural network; 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,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^[5-7]。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];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得到更

新。线性回归、决策树、随机森林和支持向量回归等传统机器学习方法,由于实现简单且计算效率高,已经应用于流变行为建模^[11-12]。与此同时,输入凸神经网络(ICNN)凭借其独特的结构优势,逐渐被关注^[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,避免了局部回升或突变等行为^[15],面对包含异常值或实验误差的数据时,ICNN 显示出更强的鲁棒性与稳定性,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。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,取自辽宁阜新环发废弃物处置有限公司,编号依次为样品 1~5,其外观如图 1 所示。对 5 种典型釜残样品进行理化性质测试,结果如表 1 所示。各样品 pH 为 6.5~8.3,未表现出强腐蚀性,样品密度为 $1\,165\text{--}1\,250\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ 。在 $105\text{ }^{\circ}\text{C}$ 恒温下烘干后,剩余物质量分数均高于

66%,其中样品5质量分数高达93.83%。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,这反映出化工釜残在组分上的复杂性及潜在流变特性的多样性。

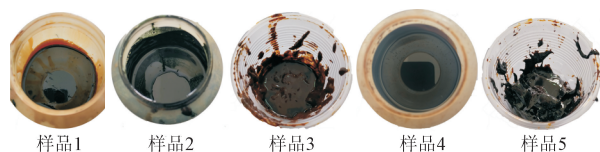


图1 5种化工釜残样品的外观照片

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/($\text{kg} \cdot \text{m}^{-3}$)	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℃ 常温条件下进行,剪切速率为 $0 \sim 2.5 \times 10^3 \text{ s}^{-1}$,涵盖了从低剪切到高剪切的完整流变行为。

1.2 ICNN 结构设计

本文所采用的 ICNN 为 3 层全连接结构,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、336。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

率为 5.0×10^{-3} ,总训练轮数为 1.5×10^5 ^[19-20]。超参数的设置遵循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: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;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]。

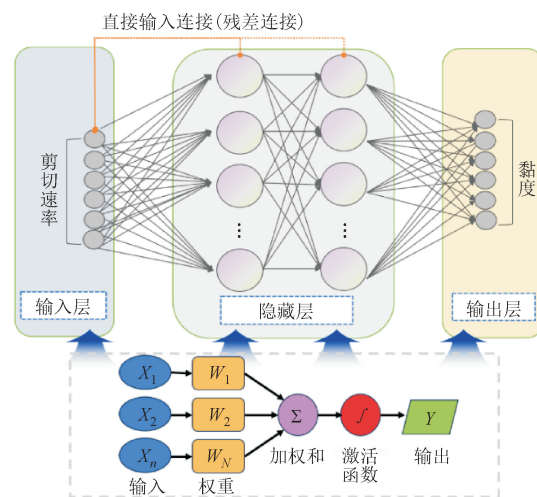


图2 ICNN 结构示意图

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这 4 种典型的机器学习回归模型,可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,本文重点探究 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,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。

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、不含凸性约束的前馈神经网络作为对照模型^[26]。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,通过自由优化参数,能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,并采用 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,均方误差衡量模型预测值与真实值之间的平均偏差。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。为了准确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。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。

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。由图可知,所有样品的黏度随着剪切速率的增加而降低,呈典型的剪切变稀行为,符合非牛顿流体特性,但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、样品 3 的黏度下降趋势

较为平缓,样品 5 的黏度在高剪切速率下表现出明显的下降趋势。在低剪切速率下,样品 4 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 黏度变化比较平稳,表明其流动阻力较小,对剪切变化具有较强的适应性。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,这可能是流变仪在启动过程中产生的误差所致。

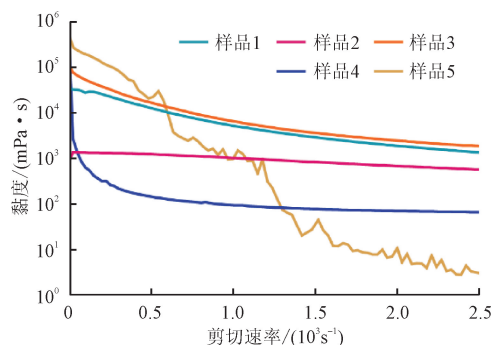


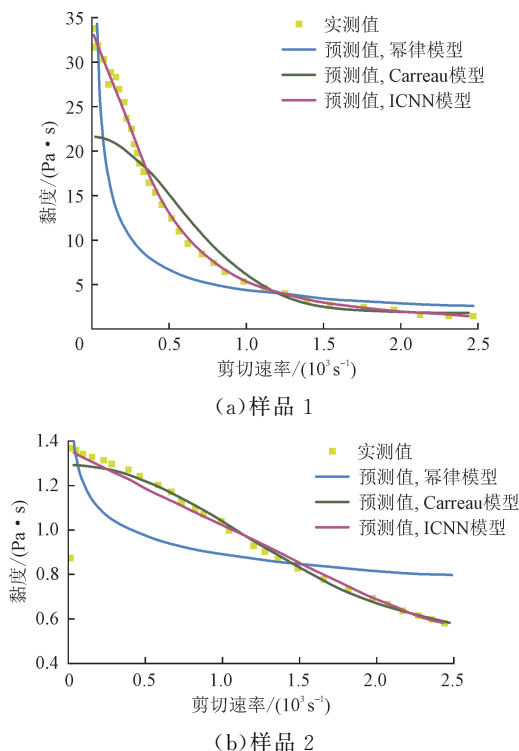
图 3 5 种样品的剪切速率-黏度测试结果

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。



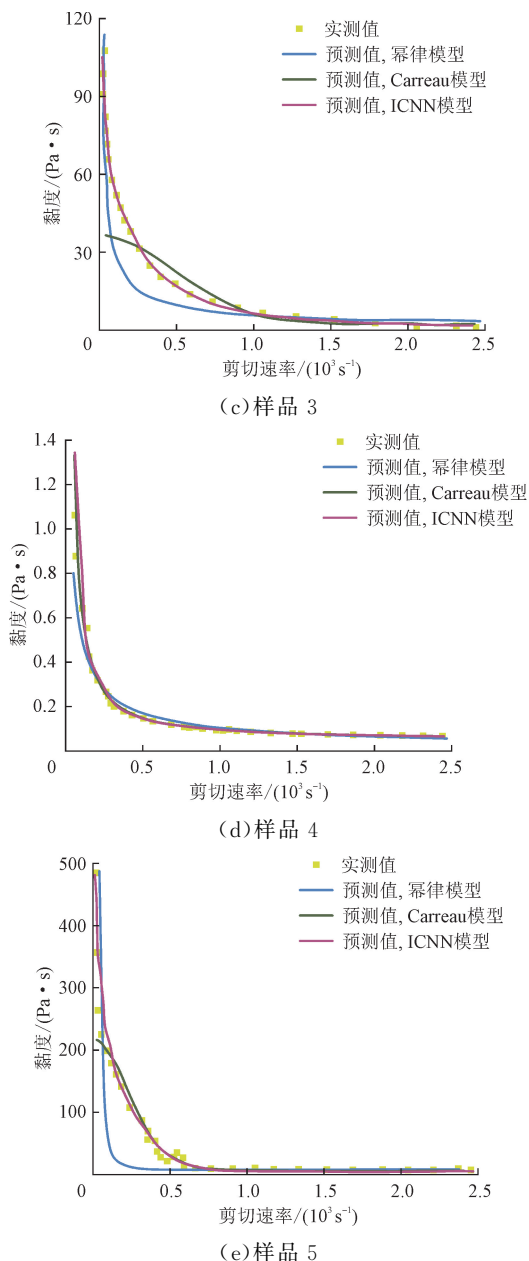


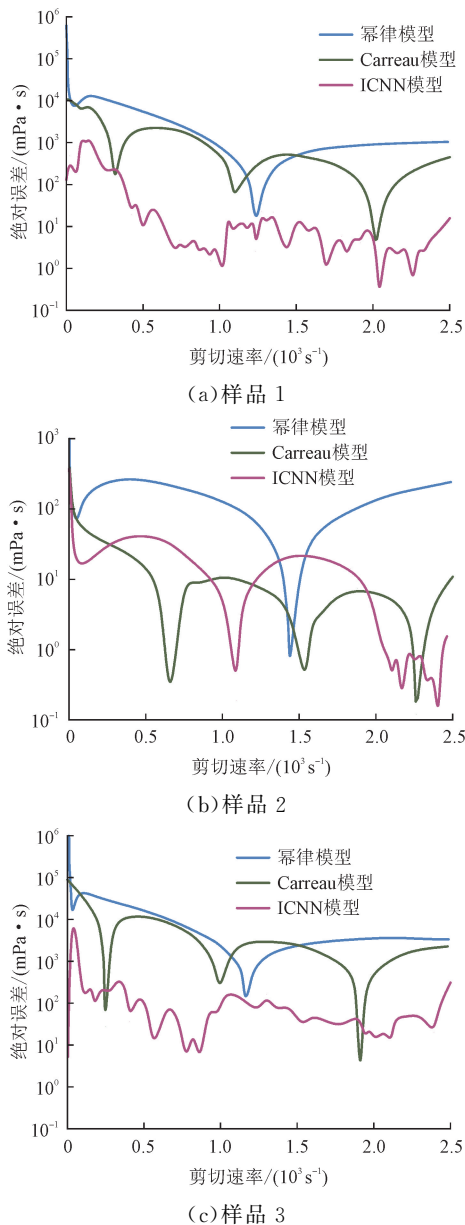
图4 ICNN模型与经典流变模型对不同样品黏度的拟合效果对比

Fig. 4 Comparison of the fitting effect of ICNN model and classic rheological model on viscosity of different samples

由图4可以看出: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,这主要是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时具有更强的适应能力。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、样品5,ICNN模型具有良好的适

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。

图5展示了幂律模型、Carreau模型、ICNN模型在不同釜残样品和剪切速率区间下的绝对误差。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,由于样品3、样品5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。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,在各剪切速率区间的误差最小,且在所有釜残样品上具有极高的拟合精度,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、Carreau模型,这验证了ICNN模型在捕捉实验数据中非线性规律方面的优势。



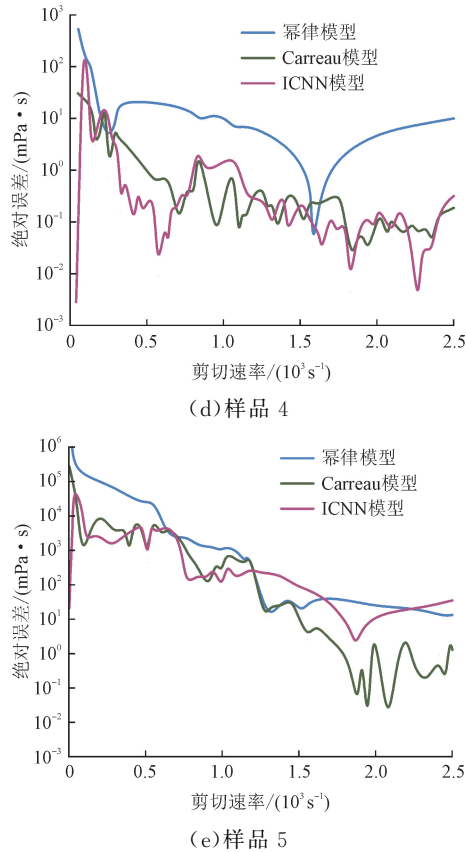


图 5 ICNN 模型与经典流变模型对不同样品黏度的拟合误差对比

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,计算了各模型的拟合优度和均方误差,结果如表 2 所示。幂律模型的均方误差约为 Carreau、ICNN 模型的 24 倍、33 倍,这表明在原始尺度下,幂律模型对黏度的预测偏差较大,较大的均方误差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、一致性系数,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,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。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。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。

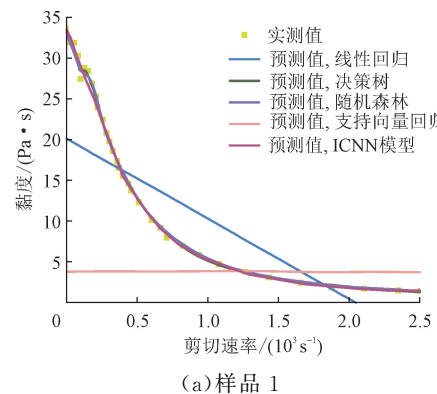
表 2 经典流变模型与 ICNN 的性能指标比较

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,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。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,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。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异常情况,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、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。



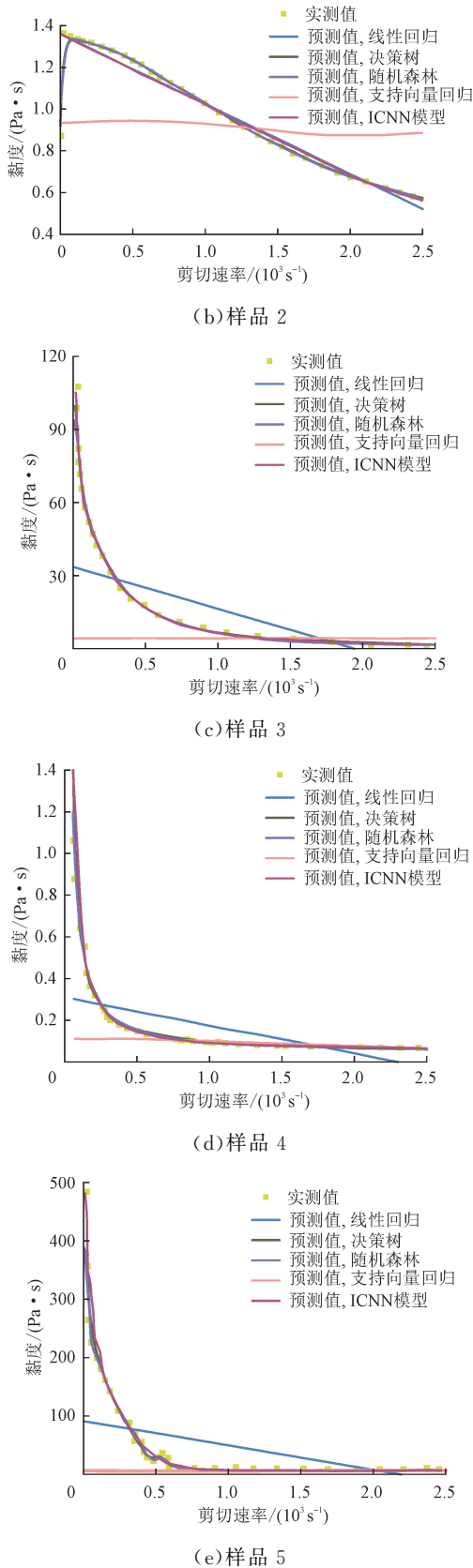
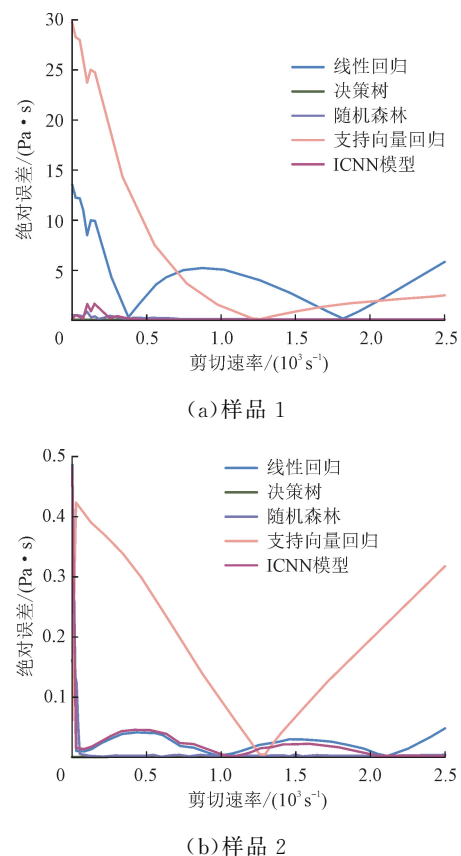
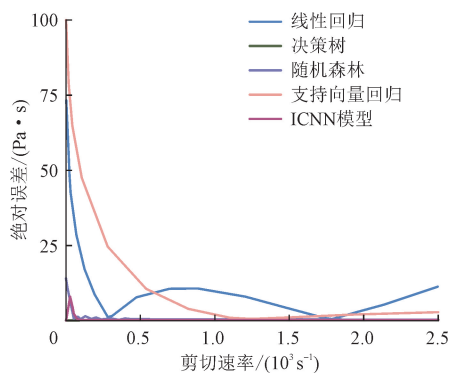


图6 ICNN与典型机器学习模型对不同样品黏度的拟合效果对比

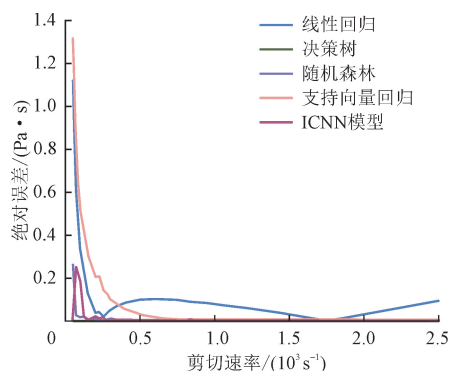
Fig. 6 Comparison of the fitting effects of ICNN and typical machine learning model on viscosity of different samples

图7展示了ICNN与4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。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。线性回归模型建立在线性关系假设基础上,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,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。

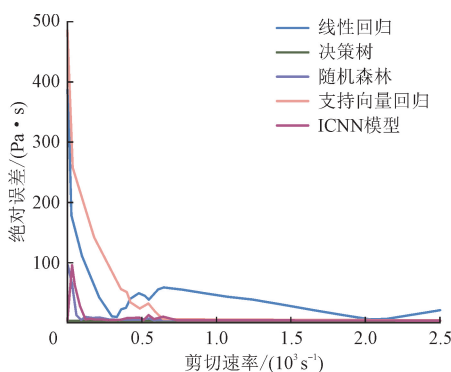




(c) 样品 3



(d) 样品 4



(e) 样品 5

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。由表 3 可知:线性回归模型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;决策树模型虽

然在表面上取得均方误差为 0 和拟合优度为 1,但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;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,整体性能优于传统模型,但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、拟合优度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。

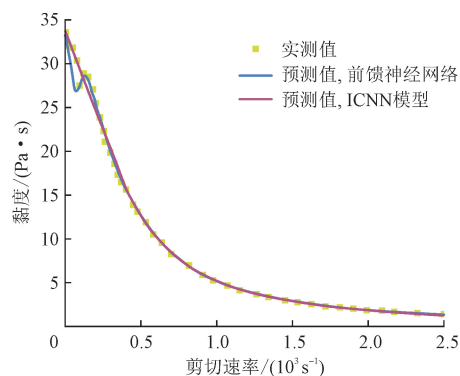
表 3 机器学习模型与 ICNN 的性能比较

Table 3 Performance comparison of machine learning models and ICNN

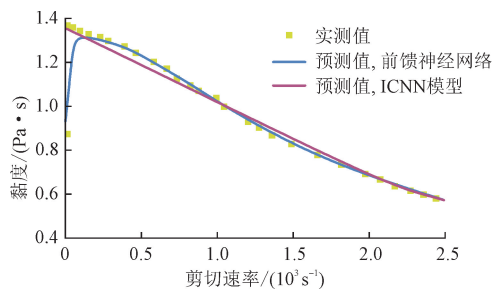
模型	均方误差	拟合优度
线性回归	1.49×10^4	5.52×10^{-1}
决策树	0	1
随机森林	1.90×10^3	9.90×10^{-1}
支持向量回归	2.03×10^4	-6.56×10^{-2}
ICNN	2.39×10^3	9.79×10^{-1}

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,可知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,ICNN 模型表现出更强的鲁棒性和物理一致性。



(a) 样品 1



(b) 样品 2

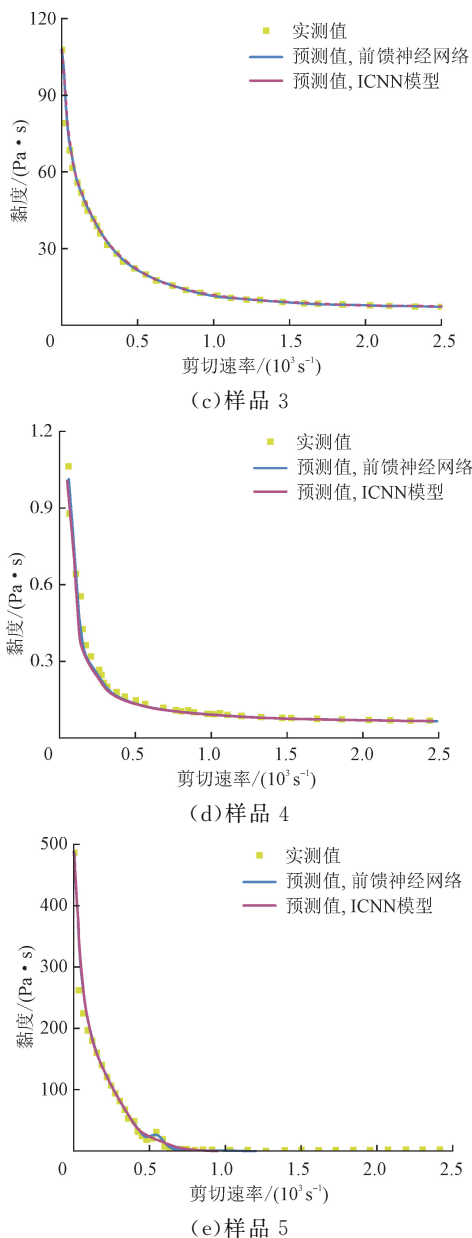


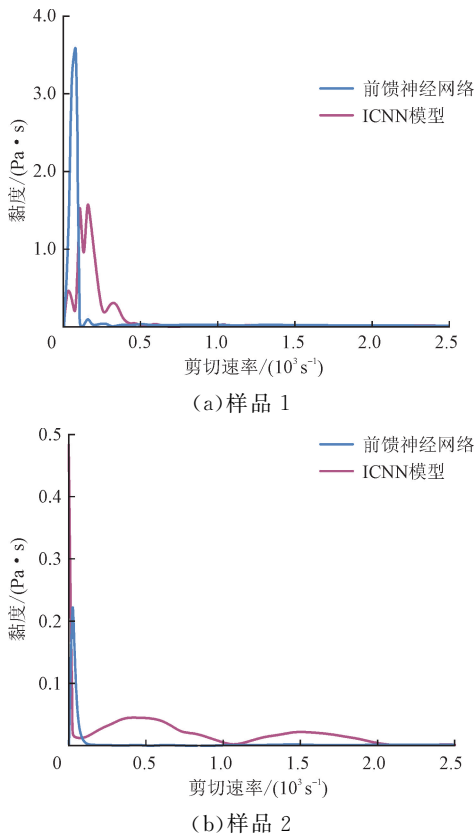
图8 ICNN与前馈神经网络对不同样品黏度的预测性能对比

Fig. 8 Comparison of viscosity predictions between ICNN and FNN on viscosity of different samples

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,容易发生过拟合。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、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。

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,结合图8可知,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,虽然局部误差稍高,但整体曲线走势更符合黏度与剪切速率的物理关系,具有更高的可信度与解释性。对于样品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。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,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,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。



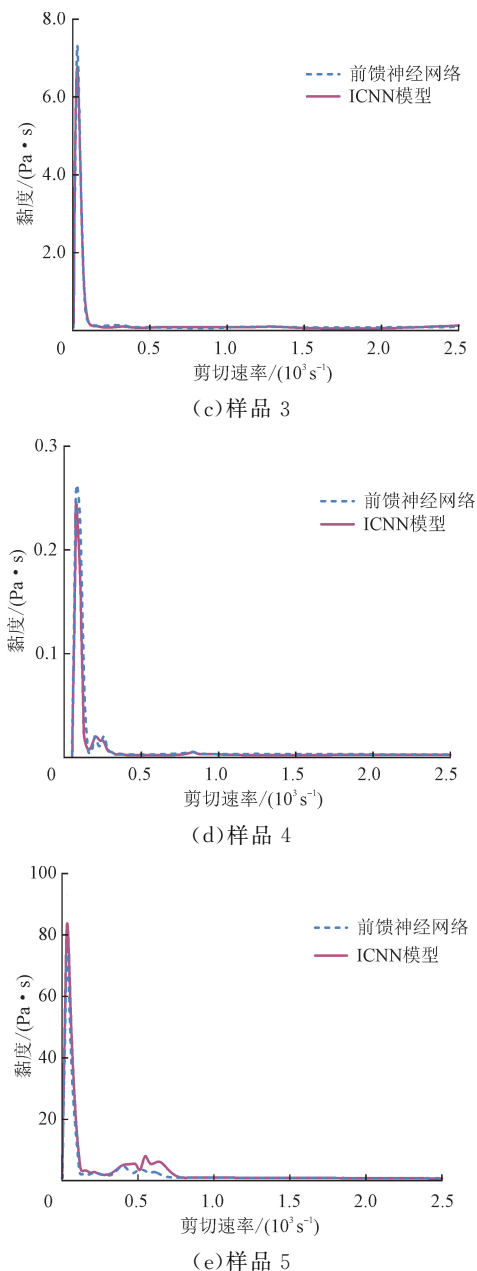


图 9 ICNN 模型与前馈神经网络对不同样品黏度的预测误差对比

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。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;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。得益于模型中的凸性结构和单调性约束,ICNN 能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。

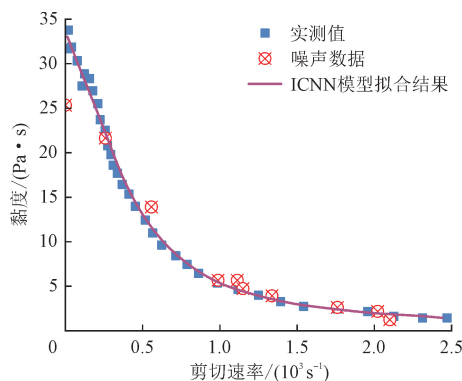


图 10 含 $\pm 30\%$ 噪声扰动时 ICNN 模型对黏度的拟合结果

Fig. 10 Fitting results of ICNN model on viscosity with $\pm 30\%$ noise disturbance

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,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,但在高黏度、低剪切速率及复杂数据的预测精度、稳定性方面,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,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,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

型的物理合理性与鲁棒性,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%数据上被施加±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。

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(6): 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(6): 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(1): 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(1): 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(5): 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(5): 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-slurry ability 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(3): 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(3): 124-134.
- [7] 徐家通,周子愉,廖晴雨,等. 复杂流体屈服应力的测定:理论、方法及应用[J]. 高分子通报, 2025, 38(5): 689-717.
- XU Jiatong, ZHOU Ziyu, LIAO Baoliang, 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(1): 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 Tunnelling Technology, 2024, 61(1): 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(5): 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(5): 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 Tongtong, WANG Dong, XIA Tangbin, 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(1): 47-54.
- ZHANG Zhengqi, LEI Zhikun, ZHANG Tiantian, et al. Preparation and high temperature rheological properties of high viscosity asphalt [J]. *Journal of Materials Science and Engineering*, 2025, 43(1): 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(5): 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(5): 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, 56(12): 3498-3506.
- LI Feng, PENG Tianbo. An HDR thermal-hyper-viscoelastic constitutive model with Mullins effect [J]. *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics*, 2024, 56(12): 3498-3506.
- [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(1): 197-210.
- ZHANG Zhuolun, YUAN Shuaipeng, LI Tiek, et al. Steel rolling time prediction method based on two-level decision tree model [J]. *Computer Integrated Manufacturing Systems*, 2025, 31(1): 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(1): 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(1): 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(2): 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(2): 587-602.
- [26] CHEN Zhanfeng, LI Xuyao, WANG Wen, 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 Ao, SUN Shirui, QI Lu, 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.

(编辑 赵炜 李慧敏)