

УДК: 004.85, 546.28

Моделирование реологических характеристик водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния

Л. Н. Марченко^{1,3,a}, Я. А. Косенок^{1,b}, В. Е. Гайшун^{1,c}, Ю. В. Бруттан^{2,3,d}

¹Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины,
Беларусь, 246028, г. Гомель, ул. Советская, д. 104

²Псковский государственный университет,
Россия, 180000, г. Псков, пл. Ленина, д. 2

³Научно-образовательный математический центр «Северо-Западный центр математических исследований имени Софьи Ковалевской» Псковского государственного университета,
Россия, 180000, г. Псков, пл. Ленина, д. 2

E-mail: ^a lmarchenko@gsu.by, ^b ykosenok@gsu.by, ^c vgaishun@gsu.by, ^d bruttan@mail.ru

Получено 27.07.2024, после доработки — 16.09.2024.

Принято к публикации 24.09.2024.

Реологическое поведение водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния сильно зависит от динамической вязкости, которая непосредственно влияет на применение наножидкостей. Целью данной работы являются разработка и валидация моделей для прогнозирования динамической вязкости от независимых входных параметров: концентрации диоксида кремния SiO_2 , кислотности pH, а также скорости сдвига γ . Проведен анализ влияния состава суспензии на ее динамическую вязкость. Выявлены статистически однородные по составу группы суспензий, в рамках которых возможна взаимозаменяемость составов. Показано, что при малых скоростях сдвига реологические свойства суспензий существенно отличаются от свойств, полученных на более высоких скоростях. Установлены значимые положительные корреляции динамической вязкости суспензии с концентрацией SiO_2 и кислотностью pH, отрицательные — со скоростью сдвига γ . Построены регрессионные модели с регуляризацией зависимости динамической вязкости η от концентраций SiO_2 , NaOH, H_3PO_4 , ПАВ (поверхностно-активное вещество), ЭДА (этилендиамин), скорости сдвига γ . Для более точного прогнозирования динамической вязкости были обучены модели с применением алгоритмов нейросетевых технологий и машинного обучения (многослойного перцептрона MLP, сети радиальной базисной функции RBF, метода опорных векторов SVM, метода случайного леса RF). Эффективность построенных моделей оценивалась с использованием различных статистических метрик, включая среднюю абсолютную ошибку аппроксимации (MAE), среднюю квадратическую ошибку (MSE), коэффициент детерминации R^2 , средний процент абсолютного относительного отклонения (AARD %). Модель RF показала себя как лучшая модель на обучающей и тестовой выборках. Определен вклад каждой компоненты в построенную модель, показано, что наибольшее влияние на динамическую вязкость оказывает концентрация SiO_2 , далее кислотность pH и скорость сдвига γ . Точность предлагаемых моделей сравнивается с точностью ранее опубликованных в литературе моделей. Результаты подтверждают, что разработанные модели можно рассматривать как практический инструмент для изучения поведения наножидкостей, в которых используются водные суспензии на основе наноразмерных частиц диоксида кремния.

Ключевые слова: наножидкость, концентрация SiO_2 , кислотность pH, динамическая вязкость, регрессия, нейронные сети, машинное обучение

Статья подготовлена в рамках реализации проекта «Научно-образовательный математический центр “Северо-Западный центр математических исследований имени Софьи Ковалевской”» (соглашение № 075-02-2023-937 от 16 февраля 2024 г.).

© 2024 Лариса Николаевна Марченко, Янина Александровна Косенок, Владимир Евгеньевич Гайшун, Юлия Викторовна Бруттан
Статья доступна по лицензии Creative Commons Attribution-NoDerivs 3.0 Unported License.
Чтобы получить текст лицензии, посетите веб-сайт <http://creativecommons.org/licenses/by-nd/3.0/>
или отправьте письмо в Creative Commons, PO Box 1866, Mountain View, CA 94042, USA.

UDC: 004.85, 546.28

Modeling of rheological characteristics of aqueous suspensions based on nanoscale silicon dioxide particles

L. N. Marchanka^{1,3,a}, Ya. A. Kasianok^{1,b}, V. E. Gaishun^{1,c}, Iu. V. Bruttan^{2,3,d}

¹Francisk Skorina Gomel State University,
104 Sovetskaya st., Gomel, 246028, Belarus

²Pskov State University,
2 Lenin sq., Pskov, 180000, Russia

³Scientific and Educational Mathematical Center “Sofia Kovalevskaya Northwestern Center for Mathematical Research” in Pskov State University,
2 Lenin sq., Pskov, 180000, Russia

E-mail: ^a lmarchenko@gsu.by, ^b ykosenok@gsu.by, ^c vgaishun@gsu.by, ^d bruttan@mail.ru

Received 27.07.2024, after completion — 16.09.2024.

Accepted for publication 24.09.2024.

The rheological behavior of aqueous suspensions based on nanoscale silicon dioxide particles strongly depends on the dynamic viscosity, which affects directly the use of nanofluids. The purpose of this work is to develop and validate models for predicting dynamic viscosity from independent input parameters: silicon dioxide concentration SiO_2 , pH acidity, and shear rate γ . The influence of the suspension composition on its dynamic viscosity is analyzed. Groups of suspensions with statistically homogeneous composition have been identified, within which the interchangeability of compositions is possible. It is shown that at low shear rates, the rheological properties of suspensions differ significantly from those obtained at higher speeds. Significant positive correlations of the dynamic viscosity of the suspension with SiO_2 concentration and pH acidity were established, and negative correlations with the shear rate γ . Regression models with regularization of the dependence of the dynamic viscosity η on the concentrations of SiO_2 , NaOH, H_3PO_4 , surfactant (surfactant), EDA (ethylenediamine), shear rate γ were constructed. For more accurate prediction of dynamic viscosity, the models using algorithms of neural network technologies and machine learning (MLP multilayer perceptron, RBF radial basis function network, SVM support vector method, RF random forest method) were trained. The effectiveness of the constructed models was evaluated using various statistical metrics, including the average absolute approximation error (MAE), the average quadratic error (MSE), the coefficient of determination R^2 , and the average percentage of absolute relative deviation (AARD %). The RF model proved to be the best model in the training and test samples. The contribution of each component to the constructed model is determined. It is shown that the concentration of SiO_2 has the greatest influence on the dynamic viscosity, followed by pH acidity and shear rate γ . The accuracy of the proposed models is compared to the accuracy of models previously published. The results confirm that the developed models can be considered as a practical tool for studying the behavior of nanofluids, which use aqueous suspensions based on nanoscale particles of silicon dioxide.

Keywords: nanofluid, SiO_2 concentration, pH acidity, dynamic viscosity, regression, neural networks, machine learning

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2024, vol. 16, no. 5, pp. 1217–1252 (Russian).

We acknowledge Scientific and Educational Mathematical Center “Sofia Kovalevskaya Northwestern Center for Mathematical Research” for financial support of the present study (agreement No. 075-02-2023-937, 16.02.2024).

1. Введение

Высококонцентрированные суспензии диоксида кремния представляют собой наножидкости, которые широко применяются при разработке новых материалов, обладающих уникальными свойствами и регулируемой структурой. На основе коллоидных композиций диоксида кремния изготавливаются полировочные покрытия и стекла, катализаторы и адсорбенты, термоизоляционные и звукоизоляционные пористые материалы, буровые растворы и другие наноматериалы [Айлер, 1982; Брыков, 2009; Готтштайн, 2009].

Наножидкости используются для улучшения свойств материалов, поэтому исследования в основном сосредоточены на изучении и моделировании этих свойств. Поведение наножидкости всегда связано с фильтрацией, поэтому важнейшим параметром высококонцентрированных суспензий с наночастицами является вязкость. Вязкость представляет собой способность сопротивляться потоку и определяет реологические свойства наножидкости [Рудяк, 2015; Mehrabi, Sharifpur, Meyer, 2013; Murshed, Estellé, 2017; Payzullaev et al., 2023]. Среди различных теплофизических свойств наножидкостей вязкость имеет решающее значение в приложениях, связанных с разработкой и эксплуатацией наноматериалов. Поэтому прогнозирование вязкости имеет важное значение, несмотря на сложность протекания гидродинамических и межчастичных взаимодействий в наножидкостях [Mehrabi, Sharifpur, Meyer, 2013].

За последние два десятилетия были проведены экспериментальные и теоретические исследования по оценке влияния на вязкость наножидкости различных параметров, таких как объемная концентрация твердого вещества, размер и форма наночастиц, скорость сдвига, кислотность pH, наличие поверхностно-активного вещества [Das, Putra, Roetzel, 2003; Zhang et al., 2005; Zhang, Gu, 2005; Рудяк и др., 2006; Nguyen et al., 2007a; Murshed, Leong, Yang, 2008; Wang, Li, 2009; Катнов, Степин, 2011; Abareshi et al., 2011; Tiwari, Ghosh, Sarkar, 2012; Mahbulbul, Saidur, Amalina, 2012; Drzazga et al., 2013; Sundar et al., 2013; Rudyak, Dimov, Kuznetsov, 2013; Sharifpur, Adio, Meyer, 2015; Рудяк и др., 2016; Akilu et al., 2016; Рудяк, Минаков, Пряжников, 2018; Черепанов, Попов, 2017; Минаков и др., 2018; Buitrago-Rincon et al., 2022; Ajeena, Farkas, Víg, 2023].

Оценка вязкости по экспериментальным данным является наиболее точной, но проведение лабораторных экспериментов является достаточно дорогостоящей процедурой [Hemmati-Sarapardeh et al., 2018]. Поэтому для оценки влияния параметров на вязкость наножидкости используются три подхода: теоретический, регрессионные модели (так называемые эмпирические корреляции) и использование моделей искусственных нейронных сетей и алгоритмов машинного обучения [Einstein, 1906; Brinkman, 1952; Namburu et al., 2007a; Рудяк, 2015; Рудяк, Минаков, Пряжников, 2018; Hemmati-Sarapardeh et al., 2018].

На основе законов переноса получены функциональные зависимости вязкости от разных параметров, однако данные модели не могут быть применены для всех наножидкостей, поскольку при их выводе всегда имели место определенные ограничения [Sundar et al., 2013; Рудяк, 2015; Sharma, Tiwari, Dixit, 2016; Рудяк, Минаков, Пряжников, 2018].

По экспериментальным данным оценены корреляции, которые представляют собой регрессионные модели вязкости от концентрации твердых частиц, размера и формы наночастиц, температуры, скорости сдвига и других параметров [Maiga et al., 2004; Zhang et al., 2005; Chen et al., 2007; Nguyen et al., 2007a; Namburu et al., 2007a; Chandrasekar, Suresh, Chandra Bose, 2010; Jamshidi et al., 2012; Tiwari, Ghosh, Sarkar, 2012; Sundar et al., 2013; Meybodi et al., 2016; Hemmati-Sarapardeh, Mohagheghian, 2017; Khodadadi et al., 2018; Karimipour et al., 2018; Vakilinejad et al., 2020; Ahmad, Mahmood, Hashim, 2021; Пряжников и др., 2023]. Описание различных теоретических моделей и эмпирических корреляций вязкости дано в [Murshed, Estellé, 2017; Patra, Nayak, Misra, 2020]. Большинство этих моделей основано на результатах измерений определенного типа наножидкости и недостаточно для прогнозирования вязкости других видов наножидкостей.

В последние годы для исследования свойств наножидкостей используются модели искусственного интеллекта, включая искусственные нейронные сети многослойного перцептрона (MLP) и с генетическим алгоритмом (GA-NN), с радиальной базисной функцией (RBF), а также алгоритм машинного обучения на основе опорных векторов наименьших квадратов (LS SVM) [Karimi, Yousefi, Rahimi, 2011; Mehrabi, Sharifpur, Meyer, 2013; Atashrouz, Pazuki, Alimoradi, 2014; Heidari, Sobati, Movahedirad, 2016; Hemmat Esfe et al., 2016; Barati-Harooni, Najafi-Marghmaleki, 2016; Akbari et al., 2017; Zhao, Li, 2017; Ansari et al., 2018; Rostami et al., 2018; Karkevandi-Talkhoonchah et al., 2018; Baghban et al., 2019; Hemmat Esfe et al., 2019; Vaferi, 2020; Sadeghzadeh et al., 2020; Durgam, Kadam, 2021]. Обзор и анализ моделей эмпирических корреляций, нейронных сетей и машинного обучения вязкости и других свойств наножидкостей представлены в работах [Hemmati-Sarapardeh et al., 2018; Ramezanizadeh et al., 2019; Гаджимагомедова и др., 2022].

В работе [Hemmati-Sarapardeh et al., 2021] авторы предлагают современную технологию интеллектуальной системы (CMIS), которая используется для создания прогнозирующей модели относительной вязкости наножидкостей на водной основе. Данная система включает модель многослойного перцептрона (MLP), обученную с помощью метода Левенберга – Марквардта (LM), модель MLP, обученную с помощью байесовской регуляризации (BR) и подхода радиальной базисной функции (RBF). Алгоритм случайного леса (RF) также использовался для прогнозирования вязкости наножидкостей [Gholizadeh et al., 2020]. В представленной модели входными параметрами были температура, доля твердого объема, вязкость базовой жидкости, размер наночастиц и плотность наночастиц, оценена чувствительность модели к входным параметрам. Эволюционный алгоритм GEP адаптирован для получения оценки зависимости вязкости наножидкостей на водной основе от объемной доли и размера наночастиц [Mahdaviara et al., 2021]. Здесь анализ чувствительности модели на входные параметры показал, что вязкость более чувствительна к объемной доле наночастиц. В многопоточной нейронной сети (MFNN) для более точного прогнозирования вязкости наножидкостей рассматриваются два вида данных: данные высокой точности (экспериментальные данные) и данные низкой точности (данные, полученные по известным теоретическим моделям, которые включают в себя физические законы, лежащие в основе фильтрации наножидкостей [Esfahani, 2023]). Модель MFNN состоит из двух основных NN: нейронная сеть низкой точности, NNL, которая обрабатывает данные, полученные из теоретических моделей; вторая — нейронная сеть высокой точности, NNH, которая обрабатывает данные, полученные в результате экспериментальных измерений. Такой подход позволил повысить точность моделирования вязкости наножидкостей в сравнении с другими моделями.

Анализ схем моделирования и алгоритмов машинного обучения для моделирования реологического поведения жидкости, в том числе и наножидкостей, проводится в [Bahiuddin et al., 2024]. Здесь сформулированы общие цели для моделей жидкости: корреляция кривой течения, зависимость реологического поведения от переменных, пространственно-временной анализ. Отмечается, что модели для одного типа часто могут адаптироваться к аналогичному поведению в других жидкостях. Более простые алгоритмы, такие как нейронные сети прямого распространения и регрессия опорных векторов, обычно достаточны для случаев с узкой изменчивостью и небольшими наборами данных. Гибридные подходы, сочетающие метаэвристическую оптимизацию с машинным обучением, подходят для сложных сценариев с несколькими переменными и большими наборами данных.

Таким образом, использование регрессионных моделей и моделей искусственного интеллекта позволило значительно улучшить прогнозные качества моделирования вязкости наножидкостей. Ряд моделей может быть адаптирован к аналогичному поведению различных наножидкостей, однако общая модель поведения вязкости с учетом особенностей протекания фильтрации конкретной наножидкости окончательно не определена. Поэтому исследования наножидкостей

с особенностями протекания процессов требуют разработки новых моделей с учетом имеющихся знаний в данной области.

В данной работе рассматриваются высококонцентрированные суспензии диоксида кремния SiO_2 , которые являются кинетически неустойчивыми системами, что приводит к снижению производительности и ухудшению качества наноматериалов. Для повышения стабильности высококонцентрированных суспензий на основе различных марок аэросилов в композицию вводят специальные стабилизирующие добавки и поверхностно-активные вещества (ПАВ), концентрацией которых можно изменять лиотропные свойства суспензии и тем самым препятствовать образованию структур. Динамическая вязкость является важнейшей реологической характеристикой таких водных суспензий, поскольку ее варьирование определяет тиксотропные и реопексные свойства суспензий.

Исследование коллоидной устойчивости наносуспензий, полученных разбавлением концентрированных силиказолов, проведено в работе [Торнер, 1977]. Рассмотрен широкий диапазон массовых концентраций наночастиц (от 1 до 50 масс. %) и средних размеров первичных частиц (от 10 до 35 нм), получены зависимости динамической вязкости наносуспензий от концентрации и размера наночастиц, построены эмпирические корреляции в широком диапазоне концентраций частиц. Реологическое поведение стабильных высококонцентрированных суспензий с низкой вязкостью, которые могут быть использованы на стадии полировки пластин монокристаллического кремния и других полупроводниковых материалов, исследовано в [Косенок и др., 2011]. Здесь изучены процессы структурообразования и агрегатообразования в суспензиях при стабилизации их органическими и неорганическими веществами и поверхностно-активными добавками. Показано, что относительно небольшие добавки ПАВ приводят к резкому изменению вязкости. Отклонение от этих оптимальных соотношений в составе композиций уменьшает стабильность или приводит к формированию кремниевого геля. Реологическое поведение композиционных суспензий на основе силикатного золя и наноразмерных частиц диоксида кремния исследовано в [Косенок и др., 2014; Косенок и др., 2022]. Установлены законы, описывающие поведение эффективной вязкости от степени равновесного разрушения и тиксотропное восстановление связей структуры в процессе течения композиционной суспензии, которые сравниваются с результатами, полученными экспериментальным путем. Теплопроводность и вязкость наножидкостей с SiO_2 в различных смесях базовых жидкостей ПАВ (этиленгликоль) и воды с различным соотношением компонентов по объему исследованы в [Talib et al., 2015]. Отмечены рост теплопроводности и уменьшение вязкости при снижении содержания ПАВ в смеси. Эмпирические корреляции вязкости и ПАВ (глицерин/этиленгликоль — 60 : 40) при концентрации частиц SiO_2 от 1,0 до 4,0 об. % в диапазоне температур 20–80 °С установлены в [Akilu et al., 2016]. В [Prasad et al., 2022] изучены стабильность, вязкость и теплопроводность наножидкости кобальта и диоксида кремния в водных суспензиях, где в качестве ПАВ использовался глицерин. Отмечается возрастание вязкости в сравнении с наножидкостью без ПАВ, представлены эмпирические корреляции теплопроводности и вязкости от температуры и концентрации SiO_2 .

Экспериментальные исследования показали, что добавление стабилизирующих добавок и ПАВ изменяет вязкость водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния. Значит, варьируя значениями концентрации SiO_2 , стабилизирующих добавок и ПАВ, можно получать наножидкости с требуемыми функциональными свойствами.

Целью данной работы является разработка моделей для прогнозирования динамической вязкости концентрированных водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния. На основе построенных моделей было оценено влияние состава водных суспензий на динамическую вязкость, выявлены закономерности в экспериментальных данных.

2. Материалы и инструменты

Для изготовления водных суспензий на основе диоксида кремния применялись следующие химические вещества: наноразмерный порошок диоксида кремния SiO_2 с удельной поверхностью $50 \text{ м}^2/\text{г}$, ОХ-50 (Evonik); этилендиамин (ЭДА); гидроксид натрия (NaOH); ортофосфорная кислота (H_3PO_4); поверхностно-активные вещества (ПАВ): этиленгликоль; вода дистиллированная. Общая схема технологического процесса получения водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния приведена на рис. 1.

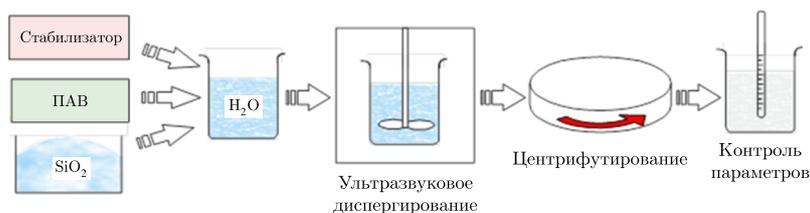


Рис. 1. Схема получения водных полирующих композиций

Получение концентрированных суспензий предусматривало гомогенное распределение порошка диоксида кремния SiO_2 в жидкости. Для контроля величины pH водных композиций использовался лабораторный микропроцессорный ионметр типа И-160. Динамическую вязкость изучали с помощью ротационного вискозиметра REOTEST 2.1 с использованием термостатированной цилиндрической измерительной системы (зазор — $0,4 \text{ мм}$, объем — 10 мл) в диапазоне скоростей сдвига от 3 до $1312,2 \text{ с}^{-1}$. Измерения проводили при температуре $20 \text{ }^\circ\text{C}$, точность поддержания температуры — не менее $0,1 \text{ }^\circ\text{C}$. Погрешность измерений реологических характеристик составляет менее 3 %.

3. Постановка задачи

В результате изучения реологического поведения водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния [Косенок и др., 2014; Рудяк, 2015; Косенок и др., 2022; Prasad et al., 2022] показано, что динамическая вязкость данной суспензии изменяется при варьировании концентрации SiO_2 , кислотности pH и изменении рабочих условий, то есть скорости сдвига γ . В данном исследовании в качестве входных параметров моделей были выбраны концентрация диоксида кремния SiO_2 (%) и кислотность pH, которая регулировалась концентрациями в суспензии гидроксида натрия NaOH (%), фосфорной кислоты H_3PO_4 (%), стабилизирующей добавки (ЭДА, %), поверхностно-активного вещества (ПАВ, %). Рабочие условия учитывались показателем скорости сдвига γ (с^{-1}). В качестве выходного параметра рассматривалась динамическая вязкость суспензии η ($\text{мПа} \cdot \text{с}$).

Концентрация диоксида кремния SiO_2 регулирует стабильность суспензии, интервал вариации ее экспериментальных значений составил 16–47 %. Кислотность pH способствует растворению диоксида кремния SiO_2 , тем самым воздействует на реологические свойства суспензий. Кислотность суспензии изменялась при варьировании концентраций фосфорной кислоты H_3PO_4 , гидроксида натрия NaOH, ЭДА и ПАВ. Исследовались суспензии без фосфорной кислоты H_3PO_4 (концентрация 0 %) и при ее наличии (концентрация 4 %). Концентрация гидроксида натрия NaOH принимала значения 0 %, 0,28 %, 0,3 %. Рассматривались суспензии без добавления стабилизирующей добавки, в этом случае концентрация ЭДА равна 0 %, и при концентрации ЭДА, равной 6,8 % и 13 %. Концентрация ПАВ была представлена в трех вариантах: без ПАВ (концентрация ПАВ равна 0 %) и при его наличии (концентрация ПАВ равна 0,03 % и 0,8 %). Изменяя концентрации NaOH, H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА, получали суспензии различной кислотности, интервал

вариации которой составил от 2 до 12,8 рН. Измерения приводились на 12 скоростях сдвига $\dot{\gamma}$: 3; 5,4; 9; 16,2; 27; 48,6; 81; 145,8; 243; 437,4; 729; 1312 с^{-1} . Варьирование добавок NaOH, ЭДА и ПАВ способствует увеличению или снижению предельной вязкости суспензии, что может иметь большое значение при выборе оптимальной концентрации, при которой суспензия остается стабильной, не образуется структур и осадка [Косенок и др., 2011]. На основе варьирования входных параметров концентраций суспензии при различных скоростях сдвига $\dot{\gamma}$ была сформирована база собственных экспериментальных данных из 177 наблюдений.

По полученным экспериментальным данным с помощью статистических методов, нейросетевых алгоритмов и методов машинного обучения разрабатывались модели для прогнозирования динамической вязкости водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния, а также для оценки влияния состава суспензии на динамическую вязкость.

4. Методология

Предварительный анализ экспериментальных данных предполагал анализ выбросов с помощью критерия Граббса (Grubbs), проверку соответствия данных нормальному закону распределения с помощью гистограмм и квантильных диаграмм, критерия Колмогорова – Смирнова, оценку гомогенности дисперсий с помощью теста Левене (Levene test). Оценка значимости различий средних значений количественных параметров в случае нормального распределения и гомогенности дисперсий проводилась на основе ANOVA с использованием критерия Фишера (Fisher). После выявления значимого различия в средних значениях проводились апостериорные сравнения, которые представляют собой попарные сравнения изучаемых групп для обнаружения различий между ними с помощью критерия Тьюки (Tukey). Для данных, распределение которых отличалось от нормального, для сравнения средних значений применялся непараметрический критерий Краскала – Уоллиса (Kruskal – Wallis H-test). При обнаружении статистически значимых различий между уровнями фактора апостериорные сравнения проводятся с помощью критерия Манна – Уитни (Mann – Whitney U-test) [Montgomery, 2008; Кобзарь, 2012]. Взаимосвязь показателей, неподчиняющихся нормальному закону распределения, оценивалась с помощью коэффициента Спирмена (Spearman), подчиняющихся — с помощью коэффициента Пирсона (Pearson). Значимость коэффициентов корреляции определялась согласно критерию Стьюдента (Student).

Для построения регрессионных моделей и моделей нейронных сетей входные и выходные параметры предварительно были нормализованы. Для скорости сдвига и динамической вязкости использовалась логарифмическая нормализация [Bahiuddin et al., 2019] по формуле

$$y_i = \frac{\ln(x_i) - \ln(x_{\min})}{\ln(x_{\max}) - \ln(x_{\min})},$$

для остальных входных параметров — линейная нормализация:

$$y_i = \frac{x_i - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}},$$

где y_i , x_i , x_{\min} , x_{\max} — нормализованные и экспериментальные значения, минимальное и максимальное значения соответственно.

Оценка коэффициентов множественной линейной регрессии осуществлялась на основе метода наименьших квадратов с регуляризацией. Для обнаружения автокорреляции остатков использовался тест Дарбина – Уотсона (Durbin – Watson), гетероскедастичности — коэффициент корреляции между остатками и независимой переменной [Montgomery, 2008; Кобзарь, 2012]. Информативность входных параметров оценивалась с помощью бета-коэффициентов, частных коэффициентов корреляции и коэффициентов эластичности. Бета-коэффициенты показывают на

сколько средних квадратических отклонений изменится в среднем выходной параметр, если соответствующий входной параметр изменится на среднеквадратическое отклонение при неизменном среднем уровне других входных параметров. Сравнение бета-коэффициентов друг с другом позволяет ранжировать входные показатели по силе их воздействия на выходной. Частные коэффициенты корреляции характеризуют тесноту связи между выходным и входным параметрами при исключении влияния других входных показателей, включенных в модель регрессии. Сравнение частных коэффициентов корреляции друг с другом позволяет ранжировать входные показатели по тесноте их связи с выходным. Средний коэффициент эластичности показывает, на сколько процентов в среднем по совокупности изменится выходной параметр от своей величины при изменении входного параметра на 1 % от своего значения при неизменных значениях других входных параметров [Montgomery, 2008; Кобзарь, 2012].

В терминах машинного обучения задача аппроксимации динамической вязкости по рассматриваемым входным параметрам является задачей регрессии. В качестве признаков каждого объекта использовались значения динамической вязкости при заданных входных параметрах. Таким образом, каждый объект обучающей выборки был представлен 177 значениями. Целевыми параметрами являлись значения динамической вязкости, распределенные в диапазоне от 0,0036 до 551,667 мПа · с⁻¹.

В работе использовались два типа нейросетевых моделей: многослойный перцептрон (MLP) и радиальная базисная функция (RBF) [Хайкин, 2020]. Обучение сетей проводилось следующими оптимизационными методами: метод стохастического градиентного спуска (Stochastic gradient descent, SGD); BFGS (Broyden, Fletcher, Goldfarb, Shanno), RBFT (Redundant Byzantine Fault Tolerance). В качестве функций активации применялись функции: тождественная, логистическая, гиперболическая и экспоненциальная. Обучение и тестирование моделей проводились как на основе случайных выборок, так и бутстреп-выборок (bootstrap). Для моделирования динамической вязкости также использовались алгоритмы машинного обучения — метод машин опорных векторов (Support vector machine, SVM) [Уатт, Борхани, Катсагелос, 2022] и метод случайного леса (Random forest) [Брюс, Брюс, 2018].

Выбор наилучшей модели осуществлялся по анализу остатков моделей, графиков предсказанных и экспериментальных значений. Эффективность моделей оценивалась с помощью следующих статистических метрик:

средней абсолютной ошибки (MAE):

$$\text{MAE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |\eta_i - \widehat{\eta}_i|,$$

средней квадратической ошибки (MSE):

$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\eta_i - \widehat{\eta}_i)^2,$$

среднего процента абсолютного относительного отклонения (AARD %):

$$\text{AARD \%} = \frac{100}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|\eta_i - \widehat{\eta}_i|}{\eta_i},$$

коэффициента детерминации (R^2):

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (\eta_i - \widehat{\eta}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (\eta_i - \bar{\eta})^2},$$

где η_i — эмпирические значения динамической вязкости, $\widehat{\eta}_i$ — значения динамической вязкости, предсказанные моделями, $\bar{\eta}$ — среднее значение динамической вязкости, $\bar{\eta} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \eta_i$, n — число наблюдений.

Чтобы скорректировать объясняющие переменные, которые менее значимы в модели, использовался скорректированный коэффициент детерминации:

$$R_{Adj}^2 = 1 - (1 - R^2) \cdot \frac{n - 1}{n - p - 1},$$

где n — число наблюдений, p — количество входных параметров.

Модель считается надежной, когда значения MAE и MSE стремятся к нулю, а значения R^2 и R_{Adj}^2 близки к 1. При этом считается, что R^2 может быть наиболее информативной оценкой по сравнению с метриками MAE и MSE для оценки точности моделей [Chicco, Warrens, Jurman, 2021].

5. Результаты и обсуждения

5.1. Анализ данных и модель множественной регрессии

Оценим влияние концентрации SiO_2 , кислотности pH и скорости сдвига γ на динамическую вязкость η водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния. Наибольшая вязкость наблюдалась при высоких концентрациях SiO_2 и различной кислотности pH (рис. 2, а). При малых концентрациях SiO_2 с увлечением кислотности имел место незначительный рост вязкости, а при одинаковой кислотности с увеличением концентрации SiO_2 увеличивается вязкость. Наблюдались сочетания концентрации SiO_2 и кислотности pH, когда динамическая вязкость стабилизировалась. Важное значение имеет скорость сдвига γ , при которой проводились измерения динамической вязкости. При малых значениях скорости сдвига γ с увеличением SiO_2 наблюдается резкий рост динамической вязкости η , так как повышение скорости сдвига в композициях ведет к коагуляции частиц диоксида кремния (рис. 2, б), то есть имели место эффекты реопексии. Причины эффекта реопексии до конца не выяснены, они обнаруживаются под действием возмущений, как правило, при достаточно малых скоростях сдвига [Косенок и др., 2014; Косенок и др., 2022]. При этом увеличение вязкости наблюдается и при средних концентрациях SiO_2 , на возникновение которого, возможно, повлияло наличие добавок в суспензию.

Изменение динамической вязкости η от кислотности pH и скорости сдвига γ (рис. 2, в) проявляется в следующем. При малых значениях скорости сдвига γ и варьировании значений кислотности pH динамическая вязкость η отличается нестабильностью, которая устанавливается при более высоких значениях скорости сдвига γ . При уменьшении концентрации ЭДА и добавлении ПАВ, регулирующих кислотность, снижается вязкость суспензий, и суспензии проявляют быструю скорость восстановления (мгновенную тиксотропию) [Косенок, 2019].

Динамическая вязкость η изменялась в пределах от 0,003 до 551,667 мПа · с⁻¹, среднее значение равно $\bar{\eta} = 24,141$, стандартное отклонение составило $SD = 66,321$, медиана равна $Me = 9,989$ и межквартильный размах есть [0,036; 18,389]. Наблюдалась левосторонняя асимметрия распределения данных относительно нормального распределения, коэффициент асимметрии равен 5,602. Рассматривались два фактора: состав суспензии и скорость сдвига, которые оказывают влияние на динамическую вязкость η [Рудяк и др., 2016; Akilu et al., 2016; Prasad et al., 2022; Косенок и др., 2022; Ajeena, Farkas, Víg, 2023]. Фактор «состав суспензии» был представлен 16 уровнями, которые были обусловлены различной концентрацией SiO_2 , NaOH, H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА. Компоненты NaOH, H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА определяли кислотность pH наножидкости

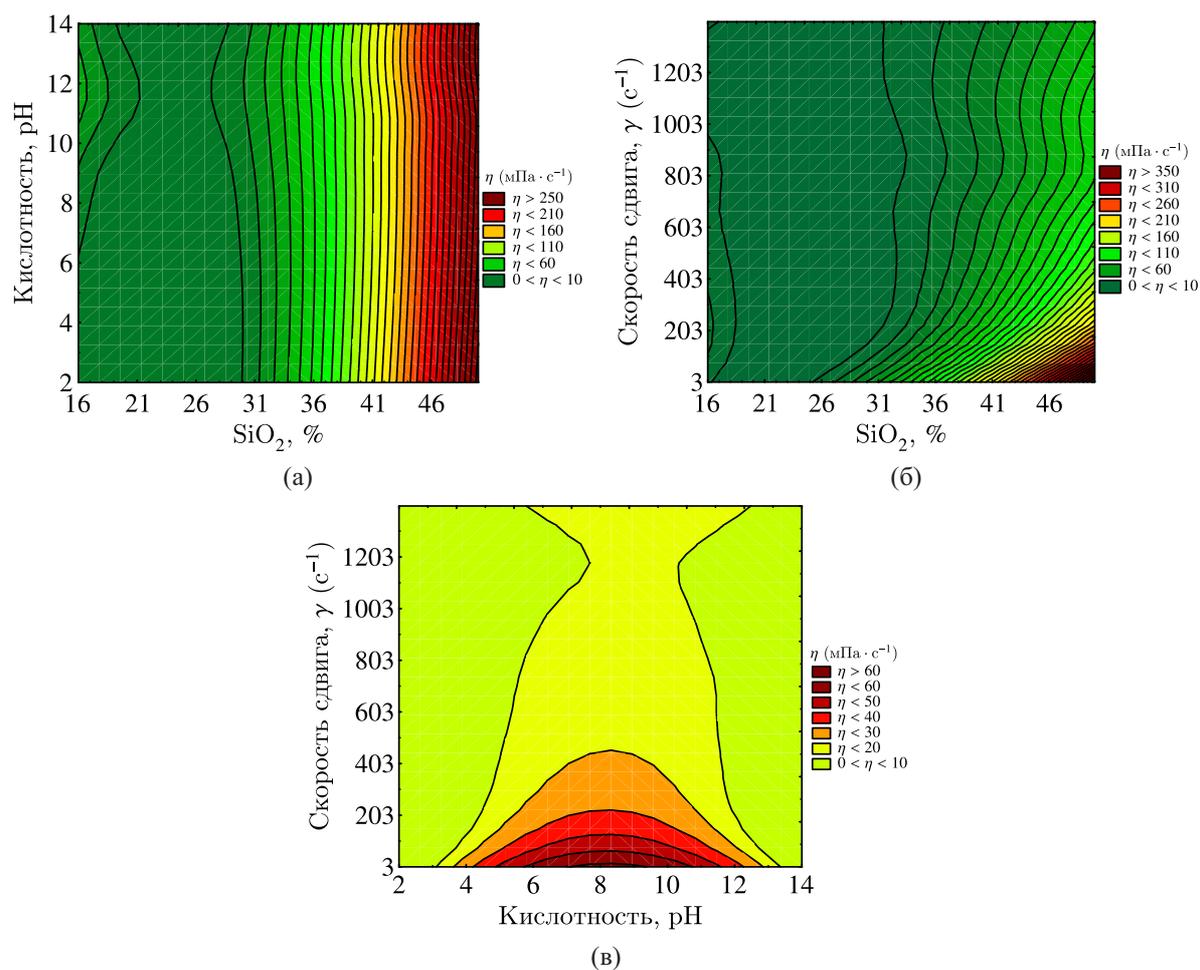


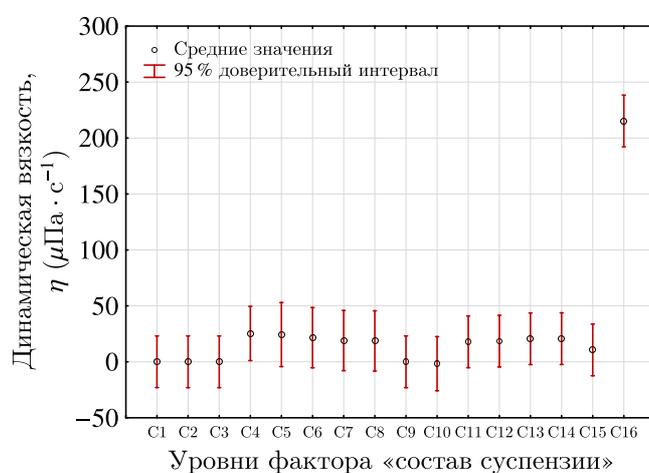
Рис. 2. Изменение динамической вязкости η (мПа·с⁻¹) от концентрации SiO₂ (%), кислотности pH и скорости сдвига γ (с⁻¹)

Таблица 1. Уровни фактора «состав суспензии»

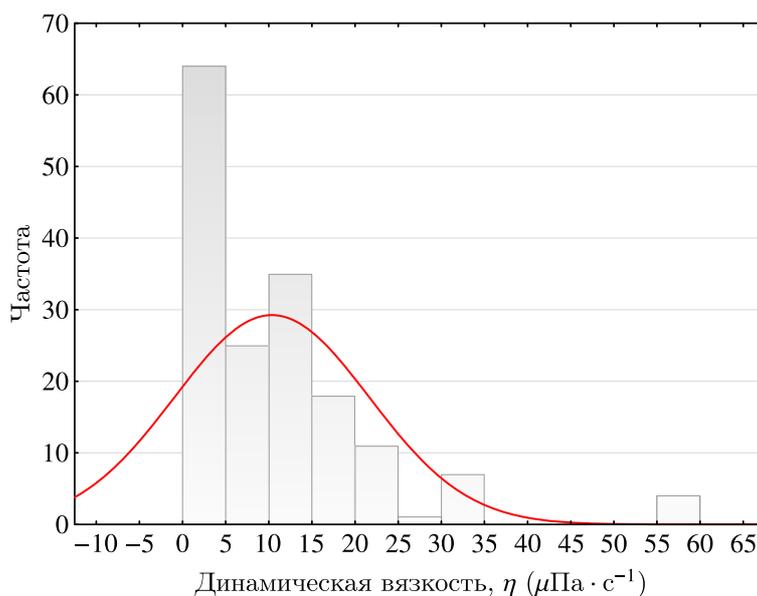
Уровни фактора	Состав суспензии					Кислотность pH
	Концентрация, %					
	SiO ₂	NaOH	H ₃ PO ₄	ПАВ	ЭДА	
C1	16	0	4	0	0	2
C2	18	0	0	0	0	6
C3	20,4	0,30	0	0,8	0	10
C4	20,7	0,50	0	0	0	11
C5	21	2	0	0	0	11,5
C6	21	4	0	0	0	11,8
C7	21	6	0	0	0	12
C8	21	8	0	0	0	12,8
C9	23	0,30	0	0	0	10,5
C10	23	0	0	0	13	12,5
C11	30	0,28	0	0	0	10,5
C12	30	0,28	0	0,03	0	10,5
C13	30	0	0	0	6,8	12
C14	30	0	0	0,03	6,8	12
C15	30	0	0	0	0	6
C16	47	0	0	0	0	10

(таблица 1). Фактор «скорость сдвига» учитывал рабочие условия и был представлен 12 уровнями: $\gamma_1 = 3 \text{ с}^{-1}$, $\gamma_2 = 5,4 \text{ с}^{-1}$, $\gamma_3 = 9 \text{ с}^{-1}$, $\gamma_4 = 16,2 \text{ с}^{-1}$, $\gamma_5 = 27 \text{ с}^{-1}$, $\gamma_6 = 48,6 \text{ с}^{-1}$, $\gamma_7 = 81 \text{ с}^{-1}$, $\gamma_8 = 145,8 \text{ с}^{-1}$, $\gamma_9 = 243 \text{ с}^{-1}$, $\gamma_{10} = 437,4 \text{ с}^{-1}$, $\gamma_{11} = 729 \text{ с}^{-1}$, $\gamma_{12} = 1312 \text{ с}^{-1}$.

Для высококонцентрированной суспензии (концентрация SiO_2 равна 47%) среднее значение динамической вязкости η существенно отличается от средних значений других составов (рис. 3, а), статистика Граббса (Grubbs) $G = 7,954$, $p = 0,000$. Поэтому для дальнейшего анализа влияния состава на динамическую вязкость эти наблюдения были исключены из рассмотрения и состав суспензии рассматривался на 15 уровнях: C1, C2, ..., C15. В результате диапазон варьирования динамической вязкости η стал от 0,0037 до 55,167, числовые характеристики: $\bar{\eta} = 10,243$, $SD = 11,254$, $Me = 9,534$, межквартильный размах [0,035; 14,984]. Распределение динамической вязкости имело скошенное распределение относительно нормального, коэффициент асимметрии равен 1,702 (рис. 3, б), статистика Колмогорова – Смирнова $D = 0,181$, $p < 0,010$.



(а)



(б)

Рис. 3. Динамическая вязкость на уровнях фактора «состав суспензии»: а) средние значения динамической вязкости η и 95 % доверительные интервалы; б) гистограмма значений динамической вязкости η без значений концентрации SiO_2 , равной 47 %

Гомогенность дисперсий на уровнях факторов «состав суспензии» и «скорость сдвига» не подтверждена критерием Левене: $L(\text{состав суспензии}) = 5,046$, $p = 0,000$ и $L(\text{скорость сдвига}) = 32,865$, $p = 0,000$. Поэтому сравнение средних вязкостей на уровнях рассматриваемых факторов проводилось с помощью непараметрического H -критерия Краскала – Уоллиса. Для фактора «состав суспензии» имеем $H(14, 165) = 128,905$, $p = 0,000$, значит, средние вязкости для различных составов достоверно различаются. Апостериорные сравнения составов основывались на критерии Манна – Уитни. Тепловая карта различий средних значений динамической вязкости для составов на уровне значимости 0,05 представлена на рис. 4, а. Средние значения динамической вязкости η на уровнях состава суспензий С4–С8 и С11–С15 существенно различаются от средних вязкостей на уровнях С1–С3. При этом суспензия С4 имеет наибольшее среднее значение динамической вязкости в сравнении с остальными суспензиями. Для суспензий С4–С8 и С11–С15 характерны высокая концентрация SiO_2 (от 20,7 % до 30 %) и кислотность рН выше 10, за исключением состава С15, для которого кислотность равна 6. Составы С2 и С15 имеют одинаковую кислотность, но концентрация SiO_2 равна 18 % и 30 % соответственно, что повлияло на динамическую вязкость суспензий. Также средняя динамическая вязкость этих суспензий существенно отличается от средних на уровнях С9 и С10, которые имеют одинаковую концентрацию SiO_2 (23 %), высокую кислотность рН (10,5 и 12,5 соответственно), но различаются составом. В составе С9 содержит 0,3 % NaOH , а состав С10 – 13 % ЭДА. Средняя динамическая вязкость состава С4 (концентрация SiO_2 и кислотность рН равны 20,7 % и 11 соответственно) существенно отличается от средних вязкостей составов С6–С8 (21 % для SiO_2 и 11, 12 и 12,8 для рН соответственно). Здесь различие обусловлено высоким содержанием NaOH (4 %, 6 %, 8 %) в суспензиях С6–С8 против 0,5 % в С4. Нет существенного различия средних вязкостей для составов С1–С3, С9 и С10. Для составов С1 и С2 характерны низкая концентрация SiO_2 и щелочная среда (кислотность рН равна 2 и 6 соответственно), в то время как для суспензий С3, С9 и С10 концентрация SiO_2 и кислотность приблизительно равны (20,4 % SiO_2 и 10 рН для С3 и 21 % SiO_2 для С9 и С10, кислотность которых 10,5 и 12 соответственно). Следовательно, состав суспензий в этом случае существенно не повлиял на среднюю динамическую вязкость суспензий.

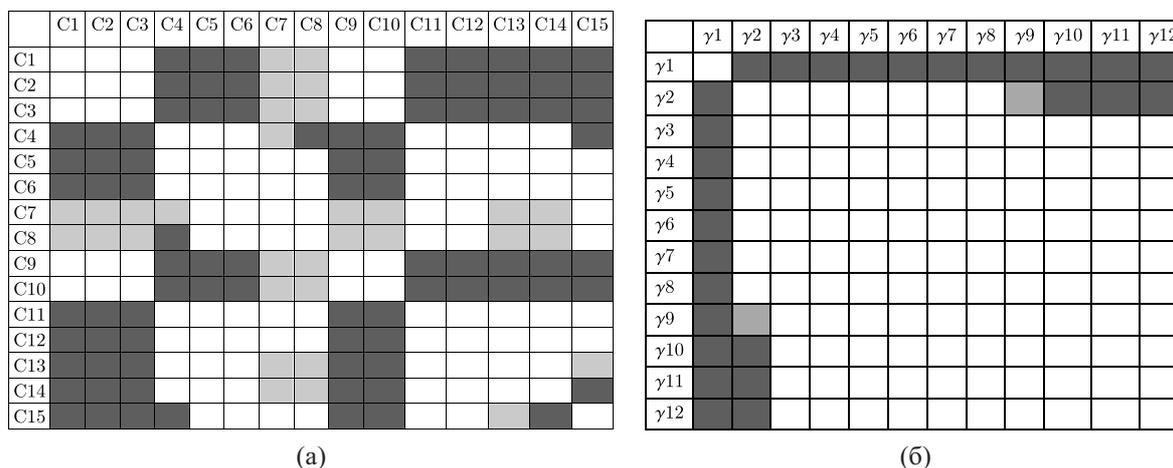


Рис. 4. Тепловая карта различий динамической вязкости: а) на уровнях фактора «состав суспензии» (без учета состава С16); б) на уровнях фактора «скорость сдвига»; ■ – различие на уровне значимости 0,0001, □ – различие на уровне значимости 0,001

Таким образом, были выделены две большие однородные группы суспензий:

группа 1 – С1, С2, С3, С9, С10, для которых характерна низкая средняя динамическая вязкость $\bar{\eta}$ в пределах от 0,019 до 0,027;

группа 2 – С4, С5, С6, С7, С8, С11, С12, С13, С14, С15, для которых характерна низкая средняя динамическая вязкость $\bar{\eta}$ в пределах от 9,546 до 21,211.

Внутри второй группы определены однородные подгруппы:

подгруппа 1 – С4, С5, С6, С11, С12, С13, С14, средняя вязкость $\bar{\eta}$ которых изменяется от 12,445 до 21,211;

подгруппа 2 – С5, С6, С7, С8, С11, С12, С15, средняя вязкость $\bar{\eta}$ которых изменяется от 10,638 до 18,467.

В рамках выделенных однородных групп для получения суспензии, средняя динамическая вязкость которой изменяется в заданных интервалах, можно использовать разные составы, которые входят в эти группы.

Средняя динамическая вязкость η также существенно различается на уровнях фактора «скорость сдвига»: $H(11, 165) = 20,696$, $p = 0,037$ (рис. 4, б). Среднее значение динамической вязкости η при скорости сдвига $\gamma = 3 \text{ с}^{-1}$ (уровень γ_1 фактора «скорость сдвига»), $\bar{\eta} = 25,433$, различается со средними значениями вязкости всех других скоростей сдвига на уровне значимости 0,05 (критерий Манни–Уитни). Среднее значение динамической вязкости η , $\bar{\eta} = 216,197$, при скорости сдвига $\gamma = 5,4 \text{ с}^{-1}$ (уровень γ_2 фактора «скорость сдвига») различается со средними значениями вязкости при скоростях сдвига, равных 243 с^{-1} , $437,4 \text{ с}^{-1}$, 729 с^{-1} , 1312 с^{-1} (уровни γ_9 , γ_{10} , γ_{11} , γ_{12} соответственно). Средние значения динамической вязкости при других скоростях сдвига существенно не различались на уровне значимости 0,05. Данный факт еще раз подтверждает, что при малых скоростях сдвига обнаруживаются эффекты реопексии, которые обусловлены более простыми условиями для образования структуры [Косенок и др., 2011; Косенок и др., 2014; Косенок и др., 2022].

Взаимосвязь динамической вязкости η с концентрацией SiO_2 , кислотностью pH и скоростью сдвига γ оценивалась с помощью непараметрического коэффициента Спирмена (Spearman), так как распределение рассматриваемых параметров отличалось от нормального. Имеет место значимая положительная корреляция между динамической вязкостью η и концентрацией SiO_2 , коэффициент корреляции Спирмена равен $r(\eta, \text{SiO}_2) = 0,490$, и кислотностью pH, $r(\eta, \text{pH}) = 0,351$. Следовательно, при увеличении концентрации SiO_2 или кислотности pH динамическая вязкость η суспензии также растет, что согласуется с эмпирическими корреляциями [Wang et al., 2012; Рудяк, Минаков, Пряжников, 2018; Hemmati-Sarapardeh, Mohagheghian, 2017; Пряжников и др., 2023]. Корреляция между динамической вязкостью η и скоростью сдвига обратная, $r(\eta, \gamma) = -0,350$, что подтверждает существенную обратную зависимость динамической вязкости η от скорости сдвига γ [Рудяк, Минаков, Пряжников, 2018].

Поскольку распределение входных и выходных параметров отличалось от нормального, то для повышения точности и надежности разрабатываемых моделей эмпирические значения были нормализованы. Для скорости сдвига γ и динамической вязкости η использовалась логарифмическая нормализация, для остальных входных параметров – линейная нормализация. Без ограничения общности обозначения входных и выходных параметров далее остались прежними. Поскольку динамическая вязкость η и скорость сдвига γ связаны степенной зависимостью [Торнер, 1977; Рудяк, Минаков, Пряжников, 2018], то такая нормализация позволяет ее линеаризовать. На рис. 5, а и 5, б показаны зависимости динамической вязкости η от скорости сдвига γ для экспериментальных данных и нормализованных данных при концентрации SiO_2 , равной 16 %, 18 %, 23 %, и кислотности pH 2, 6 и 10,5 соответственно. Аналогичная ситуация наблюдалась и для остальных случаев сочетаний SiO_2 и pH. Поэтому для оценки зависимости динамической вязкости η от концентрации SiO_2 , кислотности pH и скорости сдвига γ по нормализованным данным использовалась модель множественной линейной регрессии.

Оцененная модель регрессии с регуляризацией имеет вид

$$\hat{\eta} = 0,161 + 0,641\text{SiO}_2 + 0,281\text{pH} - 0,082\gamma, \quad F(3,173) = 47,339, \quad p = 0,000. \quad (1)$$

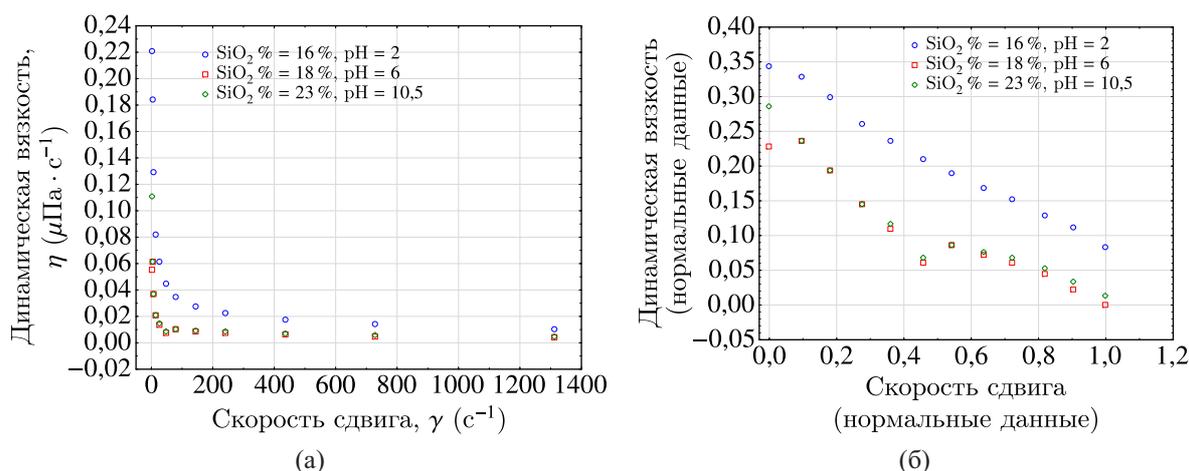


Рис. 5. Зависимость динамической вязкости η (мПа · с) от скорости сдвига γ (с^{-1}) для экспериментальных (а) и нормализованных (б) данных

Вероятность ошибки коэффициентов составляет $p < 0,05$, поэтому статистическая значимость модели регрессии имеет 95%-й доверительный уровень. Скорректированный коэффициент детерминации модели равен $R_{Adj}^2 = 0,441$, следовательно, 44,1 % изменчивости динамической вязкости η обусловлено концентрацией SiO_2 , кислотностью pH и скоростью сдвига γ . Наибольшее влияние на динамическую вязкость η суспензии оказывает концентрация SiO_2 , так как бета-коэффициент равен $\beta = 0,550$, частный коэффициент корреляции равен $r(\eta, \text{SiO}_2, \gamma, \text{pH}) = 0,585$. Для кислотности pH имеем $\beta = 0,267$, $r(\eta, \text{pH}, \text{SiO}_2, \gamma) = 0,333$, для скорости сдвига γ имеем $\beta = -0,087$, $r(\eta, \gamma, \text{SiO}_2, \text{pH}) = -0,116$. Следовательно, можно проранжировать входные параметры по степени влияния на динамическую вязкость следующим образом: SiO_2 , pH и γ . Коэффициенты эластичности концентрации SiO_2 и кислотности pH модели (1) равны $E(\text{SiO}_2) = 0,377$, $E(\text{pH}) = 0,267$, коэффициент скорости сдвига γ — $E(\gamma) = -0,083$. Значит, при изменении средней концентрации SiO_2 на 1 % средняя динамическая вязкость увеличится на 0,377 % при фиксированных кислотности pH и скорости сдвига γ . Аналогично, при изменении средней кислотности pH на 1 % средняя динамическая вязкость увеличится на 0,396 % при фиксированных концентрации SiO_2 и скорости сдвига γ . При увеличении средней скорости сдвига γ на 1 % динамическая вязкость уменьшится на -0,083 % при постоянных концентрации SiO_2 и кислотности pH. Наблюдается положительная автокорреляция остатков модели $e = \hat{\eta} - \eta$ (статистика Дарбина – Уотсона $DW = 1,131$), которая, скорее всего, обусловлена неучтенными в модели факторами. Гетероскедастичность остатков (e) модели отсутствует на уровне значимости 0,05, так как нет корреляции между остатками e и входными параметрами SiO_2 , pH, γ , коэффициенты корреляции Пирсона равны соответственно $r(e, \text{SiO}_2) = -0,03 \cdot 10^{-8}$, $r(e, \text{pH}) = 0,31 \cdot 10^{-8}$, $r(e, \gamma) = 0,27 \cdot 10^{-7}$. Так как статистика Колмогорова – Смирнова $D = 0,1974$; $p < 0,0100$, то остатки не подчиняются нормальному закону распределения (рис. 6, а). Средняя абсолютная ошибка модели (1) равна MAE = 0,0172, средняя квадратическая ошибка равна MSE = 0,044.

Рассмотрим более детально влияние компонент SiO_2 , NaOH, H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА, определяющих кислотность pH, на динамическую вязкость η . Оцененная модель множественной линейной регрессии (с регуляризацией) имеет вид

$$\hat{\eta} = 0,348 + 0,754\text{SiO}_2 + 0,376\text{NaOH} - 0,276\text{ПАВ} - 0,134\gamma - 0,124\text{ЭДА} - 0,072\text{H}_3\text{PO}_4, \quad (2)$$

$$F(6,170) = 47,756, \quad p = 0,000.$$

Коэффициенты модели имеют 95%-й доверительный уровень. Скорректированный коэффициент детерминации модели равен $R_{Adj}^2 = 0,614$, поэтому 61,4 % изменчивости динамической

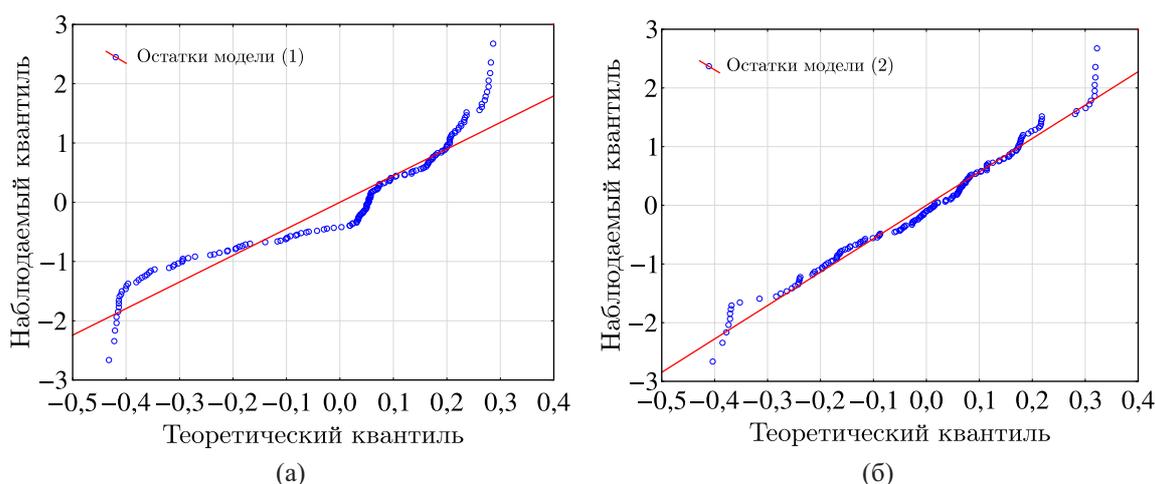


Рис. 6. Графики Q-Q остатков моделей регрессии: а) модель (1); б) модель (2)

Таблица 2. Бета-коэффициенты, частные коэффициенты корреляции, коэффициенты эластичности входных параметров

	SiO ₂	NaOH	ПАВ	γ	ЭДА	H ₃ PO ₄
Бета-коэффициенты, β	0,647	0,366	-0,246	-0,143	-0,126	-0,064
Частные коэффициенты корреляции	0,670	0,462	-0,352	-0,225	-0,190	-0,091
Коэффициенты эластичности, E	0,444	0,103	-0,039	-0,137	-0,032	-0,009

вязкости η обусловлено изменчивостью входных параметров. Сравнение по абсолютной величине бета-коэффициентов между собой и частных коэффициентов корреляции друг с другом (таблица 2) позволило проранжировать входные параметры по степени воздействия на динамическую вязкость η следующим образом: SiO₂, NaOH, ПАВ, ЭДА, γ , H₃PO₄. При увеличении на 1 % средней концентрации SiO₂ при фиксированных концентрациях NaOH, ПАВ, ЭДА и H₃PO₄ и скорости сдвига γ средняя динамическая вязкость η увеличится на 0,444 %. Аналогичные выводы можно сделать и для входных параметров NaOH, ПАВ, ЭДА, H₃PO₄ (таблица 2).

Остатки модели подчиняются нормальному закону распределения, статистика Колмогорова – Смирнова $D = 0,075$; $p > 0,05$, и наблюдаемые и теоретические квантили почти все лежат на одной линии (график Q-Q, рис. 6, б). Так как статистика Дарбина – Уотсона $DW = 0,109$, то наблюдается положительная автокорреляция остатков. Гетероскедастичность остатков отсутствует, так как отсутствует корреляция между остатками и входными параметрами: $r(e, \text{SiO}_2) = -0,4 \cdot 10^{-8}$, $r(e, \text{NaOH}) = 0,15 \cdot 10^{-7}$, $r(e, \text{ПАВ}) = 0,16 \cdot 10^{-8}$, $r(e, \gamma) = 0,24 \cdot 10^{-7}$, $r(e, \text{ЭДА}) = -0,7 \cdot 10^{-9}$, $r(e, \text{H}_3\text{PO}_4) = 0,53 \cdot 10^{-9}$. Средняя абсолютная ошибка модели (2) равна MAE = 0,140, средняя квадратическая ошибка равна MSE = 0,030.

Таким образом, построенные модели регрессии (1) и (2) имеют удовлетворительную предсказательную точность и могут использоваться для прогнозирования динамической вязкости η от соответствующих входных параметров.

Для повышения точности моделирования были построены нейросетевые модели с использованием классических алгоритмов машинного обучения и нейросетевых алгоритмов.

5.2. Моделирование динамической вязкости на основе нейросетевых алгоритмов и машинного обучения

5.2.1. Многослойный перцептрон (MLP) и радиальная базисная функция (RBF)

Обучение нейронных сетей выполнялось с использованием набора нормализованных данных, состоящих из 177 комбинаций значений параметров суспензий на основе наноразмерных

частиц диоксида кремния. Обучение проводилось по случайным подвыборкам и бутстрэп-выборкам из 70 значений, контрольная и тестовая выборки определены объемом 15 значений. В работе использовались три типа моделей: MLP с минимальным и максимальным числом скрытых и выходных нейронов (3 и 15 соответственно) и алгоритмами оптимизации BFGS, RBF, SGD. Для обучения MLP применялись случайные выборки и бутстрэп-выборки, а также регуляризация весов. Выбор оптимальной модели осуществлялся по анализу остатков моделей и метрике «средняя квадратическая ошибка MSE».

Рассмотрим нейронную сеть, моделирующую динамическую вязкость η от концентрации SiO_2 , кислотности pH и скорости сдвига γ . Из построенных моделей с различными алгоритмами оптимизации были отобраны следующие: модель MLP 3-10-1, у которой 3 входных, 10 скрытых нейронов и 1 выходной нейрон, с оптимизирующей функцией BFGS и случайными выборками, гиперболическими функциями активации для скрытых и выходных нейронов; модель MLP 3-7-1 с алгоритмом обучения SGD и случайными выборками, с гиперболической и логистической функциями для скрытых и выходных нейронов соответственно; модель RBF 3-11-1 с алгоритмом обучения RBFT, случайными выборками, с функциями активации «гауссиан» и «тождественная» для скрытых и выходных нейронов соответственно. Остатки обучающей и тестовой выборок модели RBF 3-11-1 подчиняются нормальному закону распределения (рис. 7, в, е), моделей MLP 3-10-1 (рис. 7, а, з) и MLP 3-7-1 – нет (рис. 7, б, д). Значения метрики MSE для обучающей, контрольной и тестовой выборок моделей представлены в таблице 3. Наименьшее значение MSE имеет для модели RBF 3-11-1, поэтому она будет использоваться в дальнейшем анализе. Построенная модель RBF 3-11-1 в большей степени чувствительна к входному параметру SiO_2 , так как его глобальный коэффициент чувствительности равен 4,036. Коэффициенты глобальной чувствительности кислотности pH и скорости сдвига γ равны 2,051 и 0,637 соответственно.

Таблица 3. Результаты обучения моделей MLP, RBF, SVM

Модель	Выборка	Алгоритм обучения	MSE на обучающей выборке	MSE на контрольной выборке	MSE на тестовой выборке
MLP 3-10-1	случайная	BFGS	0,017	0,012	0,019
MLP 3-7-1	случайная	SGD	0,022	0,017	0,023
RBF 3-11-1	случайная	RBFT	0,013	0,014	0,015

Далее построим нейронные сети динамической вязкости η , у которой входными параметрами являлись концентрации SiO_2 , NaOH, H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА и скорость сдвига γ .

Наилучшими моделями оказались следующие: с 6 входными, 3 скрытыми и 1 выходным нейронами, с оптимизирующей функцией BFGS и бутстрэп-выборками, логистической функцией активации для скрытых нейронов и тождественной функцией для выходных нейронов (модель MLP 6-3-1, BFGS); MLP 6-6-1 с алгоритмом обучения SGD и бутстрэп-выборками, с логистическими функциями для скрытых и выходных нейронов (модель MLP 6-6-1, SGD); RBF 6-11-1 с алгоритмом обучения RBFT, случайными выборками, с функциями активации «гауссиан» и «тождественная» для скрытых и выходных нейронов соответственно (модель RBF 6-11-1). Значения метрики MSE по обучающей, контрольной и тестовой выборкам лучших моделей приводятся в таблице 4, графики Q-Q и значения статистики Колмогорова – Смирнова представлены на рис. 8. Значения метрики MSE по обучающей, тестовой и контрольной выборкам модели MLP 6-6-1, SGD, больше, чем у модели MLP 6-3-1, BFGS, и меньше, чем у модели RBF 6-11-1. Однако остатки обучающей выборки модели MLP 6-6-1, SGD, подчиняются нормальному закону распределения, поэтому в дальнейших исследованиях будет использоваться данная модель.

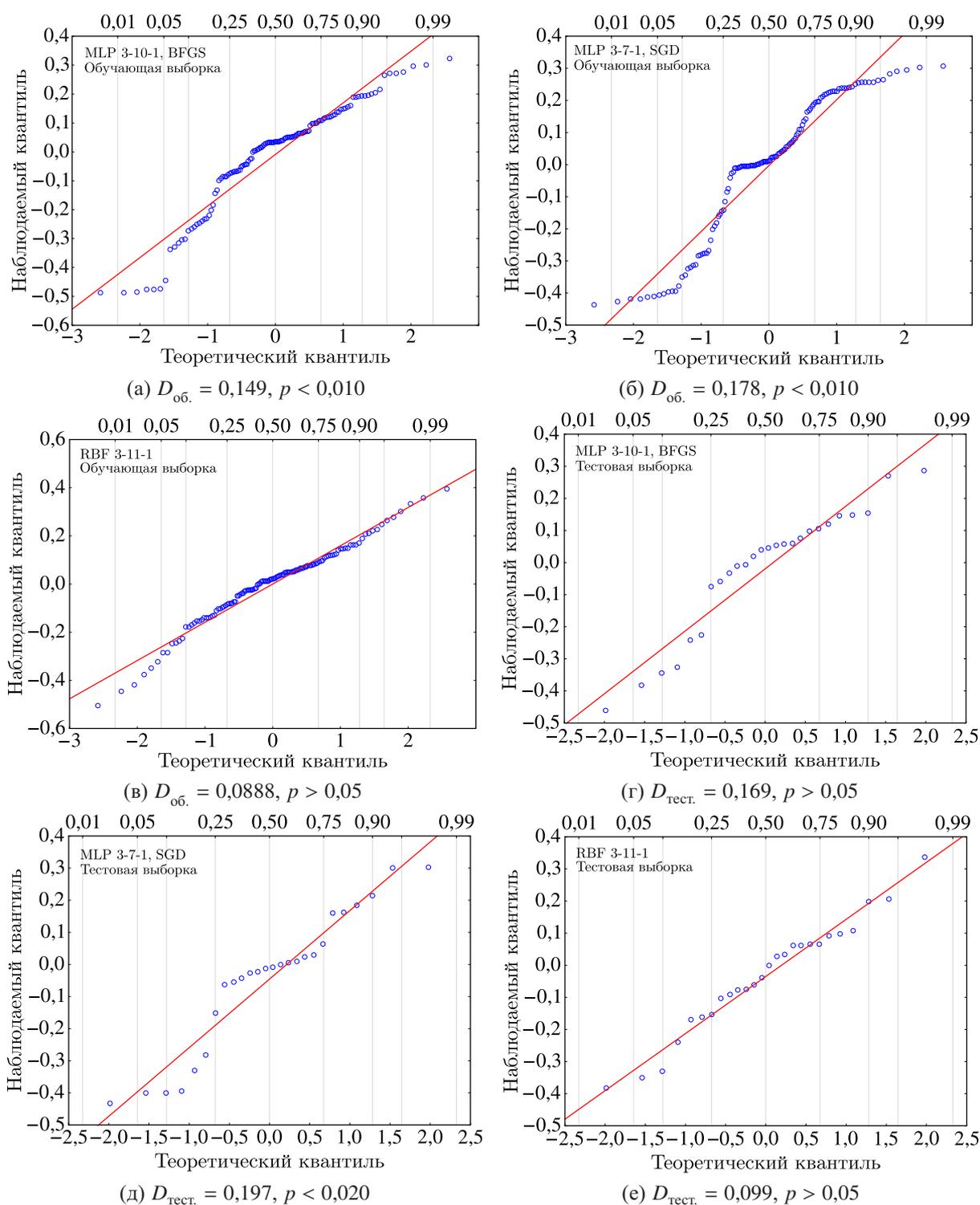


Рис. 7. Графики Q-Q остатков обучающих и тестовых выборок нейросетевых моделей динамической вязкости η от SiO_2 , pH, γ : MLP 3-10-1 (а, г); MLP 3-7-1 (б, д); RBF 3-11-1 (в, е)

Чувствительность модели MLP 6-6-1, SGD, к входным параметрам можно проранжировать следующим образом: SiO_2 , NaOH, ПАВ, ЭДА, γ , H_3PO_4 , так как коэффициенты глобальной чувствительности равны 2,140; 1,395; 1,179; 1,115; 1,023; 0,998 соответственно.

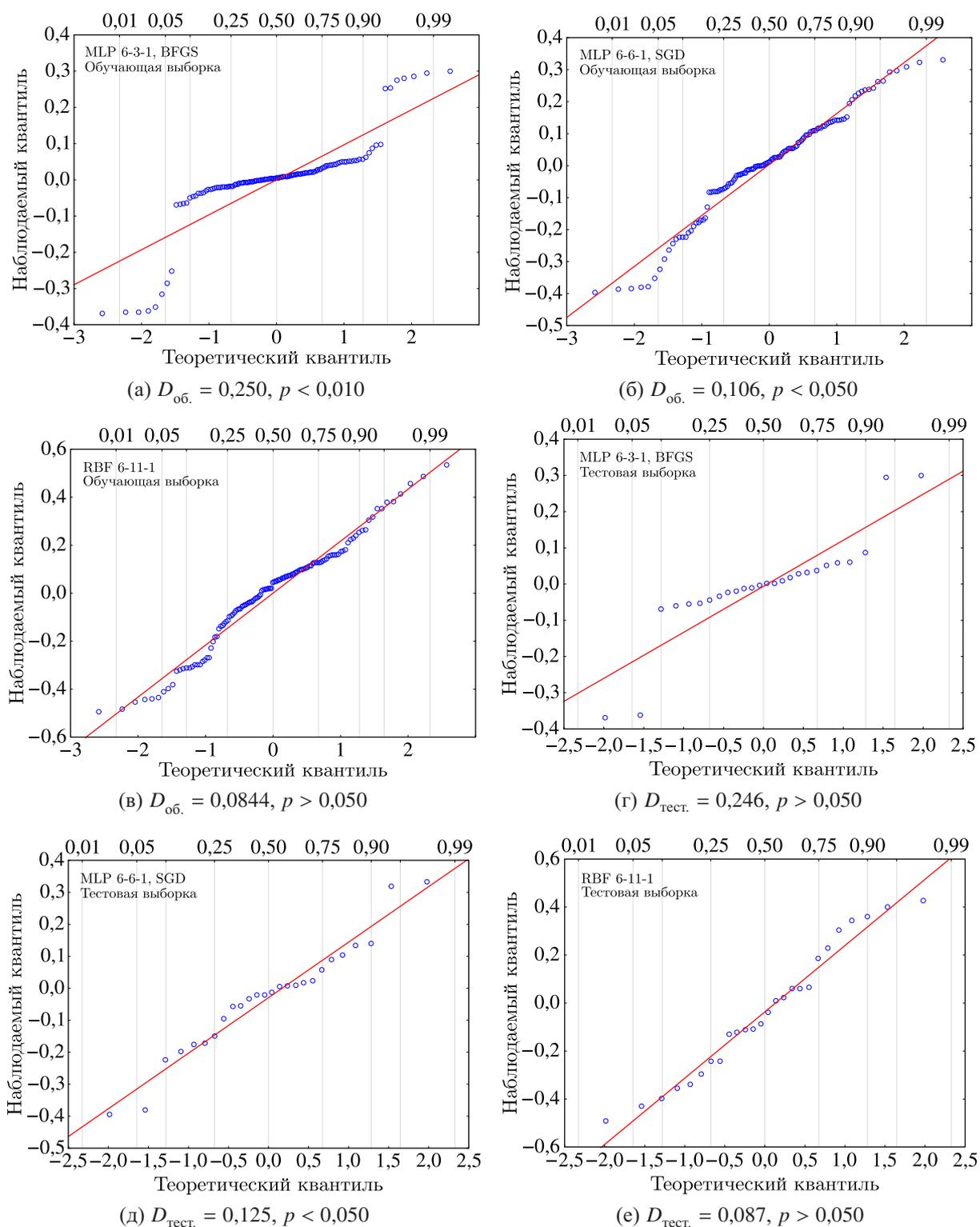


Рис. 8. Графики Q-Q остатков обучающих и тестовых выборок нейросетевых моделей динамической вязкости от SiO_2 , NaOH , H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА, γ : MLP 6-3-1 (а, г); MLP 6-6-1 (б, д); RBF 6-11-1 (в, е)

5.2.2. Случайный лес

Алгоритм машинного обучения «случайный лес» (Random Forest, RF) основан на построении ансамбля деревьев решений, каждое из которых строится по выборке, получаемой из исход-

Таблица 4. Результаты обучения моделей MLP, RBF, SVM

Модель	Выборка	Алгоритм обучения	MSE на обучающей выборке	MSE на контрольной выборке	MSE на тестовой выборке
MLP 6-3-1	бутстреп	BFGS	0,006	0,010	0,010
MLP 6-6-1	бутстреп	SGD	0,012	0,015	0,015
RBF 6-11-1	случайная	RBFT	0,023	0,027	0,036

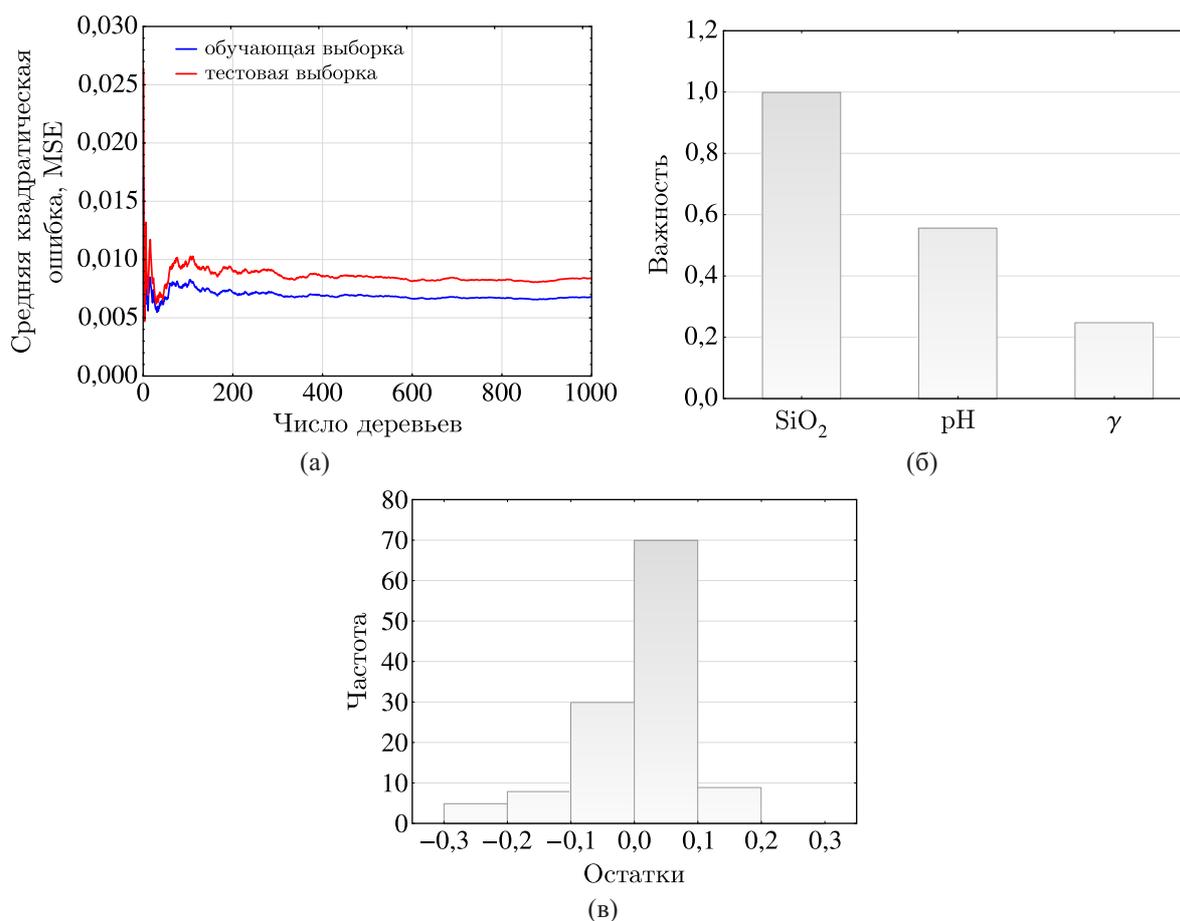


Рис. 9. Результаты модели RF динамической вязкости η от SiO_2 , pH, γ : а) оценки ошибки регрессии в зависимости от числа деревьев, объединяемых в ансамбль; б) значимость входных параметров регрессии в масштабе 0–1; в) гистограмма остатков обучающей выборки

ной обучающей выборки с помощью бутстрепа [Breiman et al., 1984; Но, 1998; Breiman, 2001; Брюс, Брюс, 2018].

Для построения модели RF прогнозирования динамической вязкости η от концентрации SiO_2 , кислотности pH и скорости сдвига γ , количество деревьев было установлено равным 1000, количество предикатных переменных – 3, минимальное количество узлов – 7, максимальное количество уровней – 10, минимальное число в дочернем узле – 5, максимальное количество узлов – 100, доля случайных тестовых данных – 30 %, доля подвыборки – 50 %, число циклов для подсчета средней ошибки – 10. График среднеквадратической ошибки (рис. 9, а) показывает, что увеличение количества деревьев более 250 не влияет на точность прогнозирования и указывает на надежность модели RF. Сходимость регрессий обучающей и тестовой выборок

при построении ансамблей деревьев регрессии обеспечивалось на 250 деревьях из рассматриваемых 1000 (рис. 9, а), значение средней квадратической ошибки оставалось практически неизменным — около 0,005. Ранжирование входных параметров по значимости для построения регрессии методом «случайный лес» (рис. 9, б) согласуется с результатами, полученными в результате анализа релевантности и множественной регрессии: наиболее важный входной параметр — концентрация диоксида кремния SiO_2 , далее кислотность pH и скорость сдвига γ . Остатки модели RF не подчиняются нормальному закону распределения, статистика Колмогорова–Смирнова $D = 0,167$; $p < 0,010$ (рис. 9, в). Для модели RF прогнозирования динамической вязкости от диоксида кремния SiO_2 , кислотности pH и скорости сдвига γ средняя абсолютная ошибка обучающей выборки равна $\text{MAE} = 0,057$, среднеквадратическая ошибка равна $\text{MSE} = 0,007$.

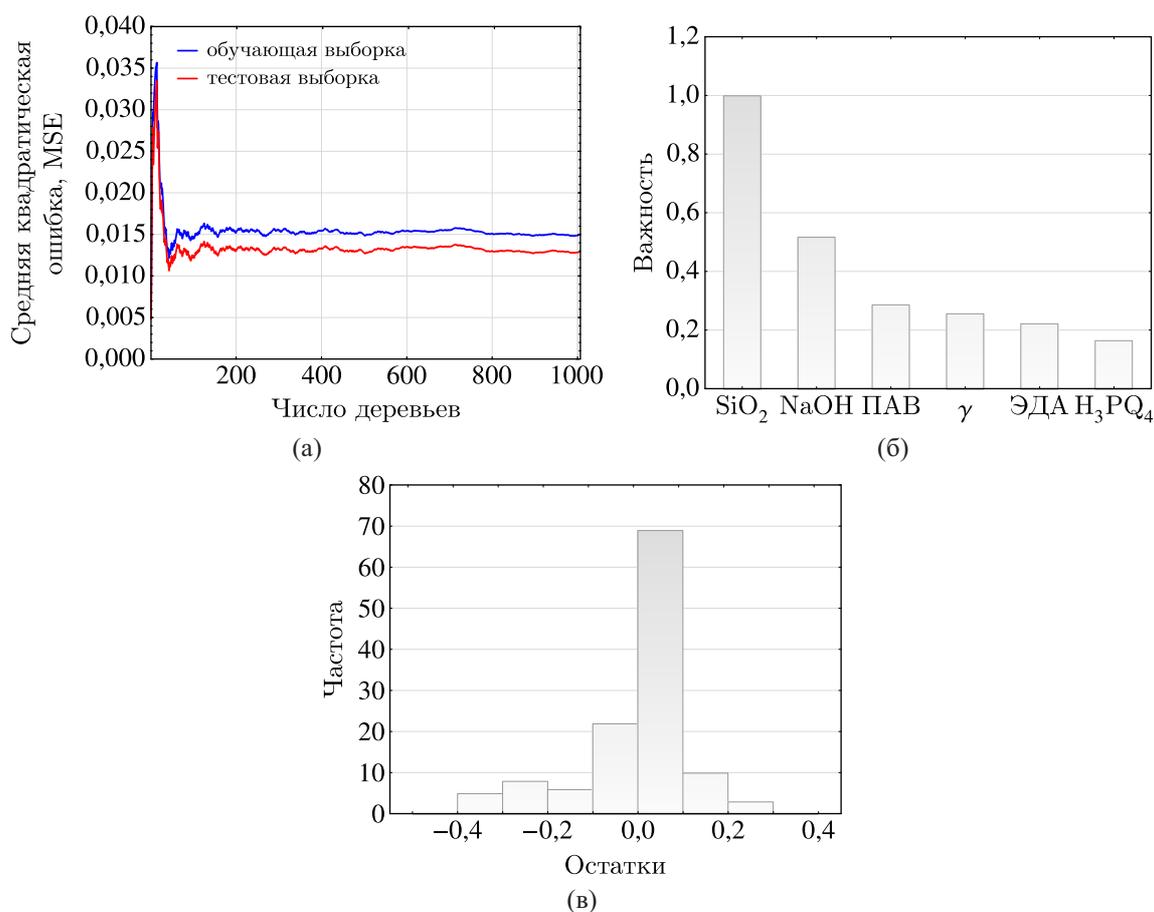


Рис. 10. Результаты модели RF динамической вязкости η от SiO_2 , NaOH, H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА, γ : а) оценки ошибки регрессии в зависимости от числа деревьев, объединяемых в ансамбль; б) значимость входных параметров регрессии в масштабе 0–1; в) гистограмма остатков модели обучающей выборки

Далее построим модель RF для прогнозирования динамической вязкости η суспензии, входными параметрами которой являлись концентрации SiO_2 , NaOH, H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА и γ . Параметры модели RF были аналогичны, как и в предыдущем случае, изменялось только количество входных переменных. Сходимость регрессий обучающей и тестовой выборок обеспечивались на 160 деревьях из рассматриваемых 1000 (рис. 10, а), значение средней квадратической ошибки оставалось практически неизменным — около 0,01. Важность входных параметров по значимости для построения регрессии алгоритмом «случайный лес» (рис. 10, б) следующая: SiO_2 , NaOH, ПАВ, γ , ЭДА, H_3PO_4 . Три компонента — SiO_2 , NaOH, ПАВ — являются наиболее

значимыми для моделей регрессии (2), нейронной сети MLP 6-6-1, SGD и случайного леса RF. Остатки модели не подчиняются нормальному закону распределения, статистика Колмогорова – Смирнова $D = 0,199$; $p < 0,010$ на уровне значимости 0,05 (рис. 10, в). Для модели случайного леса прогнозирования динамической вязкости η от диоксида кремния SiO_2 , кислотности pH и скорости сдвига γ средняя абсолютная ошибка равна $\text{MAE} = 0,084$, среднеквадратическая ошибка равна $\text{MSE} = 0,015$.

5.2.3. Метод машин опорных векторов (SVM)

Метод машин опорных векторов (SVM) применяется для отображения исходного пространства входных параметров в некоторое гиперпространство, в котором строятся две параллельные плоскости, положение которых различается на значение параметра свободного члена регрессии. Для того чтобы построить эти гиперплоскости, начиная с некоторого приближения, из обучающей выборки выбираются векторы и добавляются в множество опорных SV. Далее определяется целевая функция задачи оптимизации — минимизация отклонения для всех векторов, не попавших между построенными гиперплоскостями, а также определяется двойственная задача [Sacks et al., 1989; Smola, Schölkopf, 2004]. Нелинейное отображение предполагает задание функции, которая является ядром отображения.

Построим модели для прогнозирования динамической вязкости η от входных параметров с использованием алгоритма машинного обучения — метода опорных векторов (SVM). Модели на основе машин опорных векторов реализованы для случая регрессии Epsilon-Support Vector Regression векторов с ключевым параметром epsilon. В качестве ядра отображения была выбрана радиальная базисная функция (RBF). Для исключения влияния содержания выборок (обучающей и тестовой) на оценки моделей использовалась кросс-валидация. Обучающая выборка составляла 75 % от исходной.

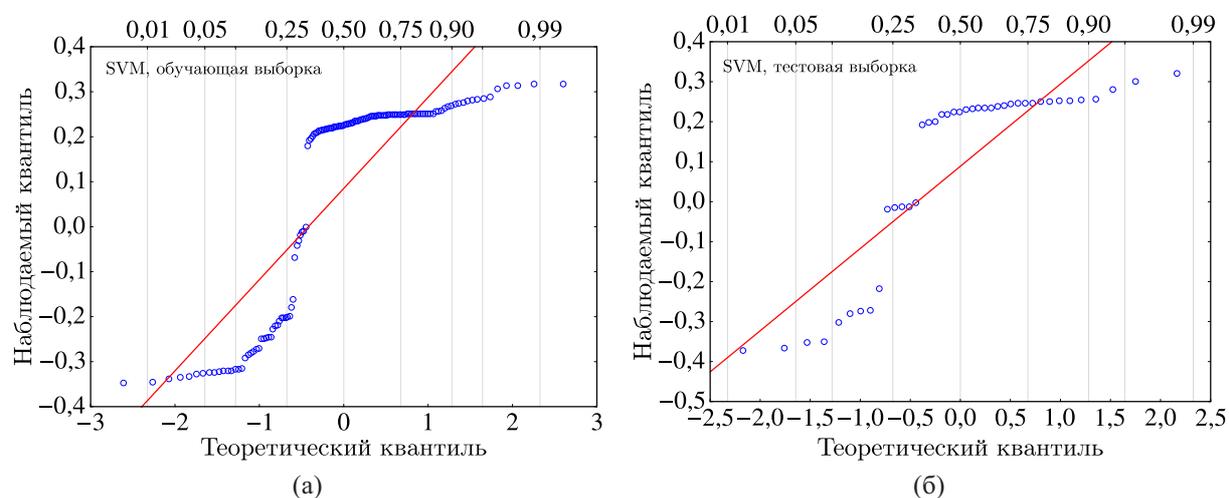


Рис. 11. Графики Q-Q остатков модели на основе метода машин опорных векторов (SVM) динамической вязкости η от SiO_2 , pH, γ : а) обучающая выборка; б) тестовая выборка

В случае когда входными параметрами были концентрация SiO_2 , кислотность pH и скорость сдвига γ , получили модель, средняя квадратическая ошибка MSE которой для обучающей выборки равна 0,062, для тестовой выборки — 0,060. Ошибка кросс-валидации составила 0,172. Параметр C, влияющий на качество построения поверхности решений за счет ее упрощения, равен 7, значение epsilon, которое регулирует возможность учета ошибки, равно 0,5. Число опорных векторов равно 52. Остатки обучающей и тестовой выборок не подчиняются нормальному

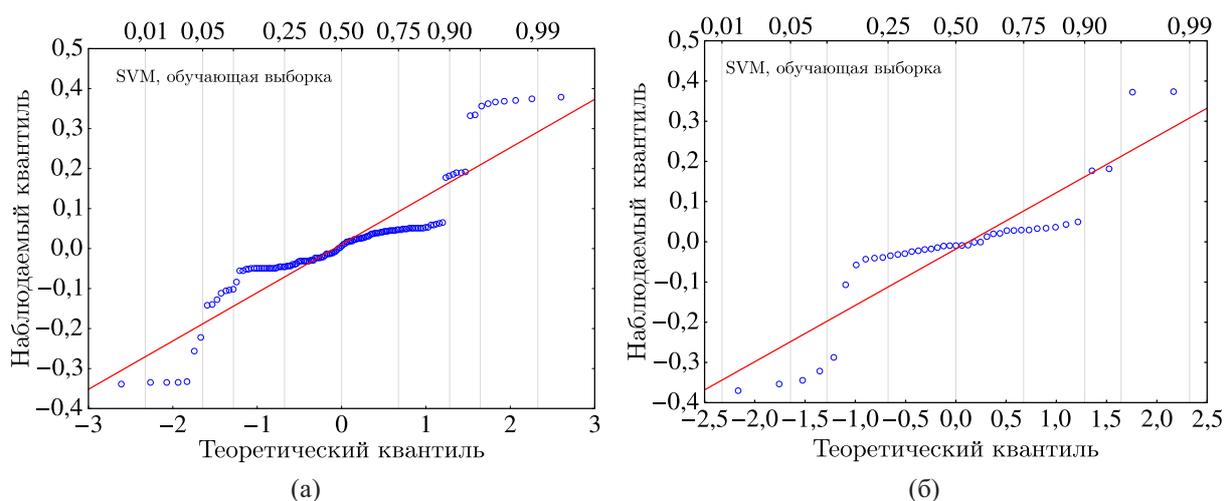


Рис. 12. Графики Q-Q остатков модели на основе метода машин опорных векторов (SVM) динамической вязкости η от SiO_2 , NaOH , H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА, γ : а) обучающая выборка; б) тестовая выборка

закону распределения на уровне значимости 0,05 (рис. 11, а, б), статистика Колмогорова – Смирнова для обучающей и тестовой выборок равна $D_{\text{об.}} = 0,336$, $p < 0,010$, и $D_{\text{тест.}} = 0,329$, $p < 0,010$.

Метод машин опорных векторов SVM с входными параметрами SiO_2 , NaOH , H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА, γ дал следующие результаты. Для обучающей выборки $\text{MSE} = 0,017$, для тестовой выборки $\text{MSE} = 0,023$, ошибка кросс-валидации составила 0,081, параметр $C = 10$, $\text{epsilon} = 0,1$. Число опорных векторов равно 59. Остатки обучающей и тестовой выборок не подчиняются нормальному закону распределения на уровне значимости 0,05 (рис. 12, а, б), статистика Колмогорова – Смирнова для обучающей и тестовой выборок равна $D_{\text{об.}} = 0,229$, $p < 0,010$, и $D_{\text{тест.}} = 0,264$, $p < 0,010$.

5.3. Сравнение моделей

Для сравнения построенных моделей использовались следующие статистические метрики: средняя абсолютная ошибка MAE, среднеквадратическая ошибка MSE, скорректированный коэффициент детерминации R^2_{Adj} и анализ графиков. Значения метрик MAE, MSE, R^2_{Adj} для обучающей и тестовой выборок представлены в таблице 5.

Таблица 5. Сравнение моделей искусственного интеллекта для обучающих и тестовых выборок и регрессионной модели на основе статистических метрик

Входные параметры	Модель	Выборка	Метрики		
			R^2_{Adj}	MAE	MSE
SiO_2 , pH, γ	RBF 3-11-1	обучающая	0,494	0,119	0,013
		тестовая	0,584	0,138	0,015
	RF	обучающая	0,919	0,057	0,007
		тестовая	0,972	0,062	0,008
	SVM	обучающая	0,219	0,240	0,062
		тестовая	0,177	0,228	0,060
Регрессионная модель	все значения	0,441	0,017	0,044	
SiO_2 , NaOH , H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА, γ	MLP 6-6-1, SGD	обучающая	0,653	0,120	0,027
		тестовая	0,695	0,124	0,029
	RF	обучающая	0,819	0,084	0,015
		тестовая	0,805	0,073	0,013
	SVM	обучающая	0,784	0,083	0,017
		тестовая	0,685	0,089	0,023
	Регрессионная модель	все значения	0,614	0,140	0,030

На основании таблицы 5 по наибольшему значению скорректированного коэффициента детерминации R_{Adj}^2 и наименьших значениях метрик MAE и MSE определяем, что наилучшими моделями являются модели случайного леса RF. Для входных параметров SiO_2 , pH, γ имеем $R_{Adj}^2 = 0,919$, MAE = 0,057, MSE = 0,007 по обучающей выборке, для входных параметров SiO_2 , NaOH, H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА, γ – $R_{Adj}^2 = 0,819$, MAE = 0,084, MSE = 0,015 по обучающей выборке.

Графики рассеивания экспериментальных и предсказанных значений наглядно показывают точность предсказанной динамической вязкости с помощью построенных моделей (рис. 13, а, б). Анализ графиков подтверждает, что модели RF являются лучшими для прогнозирования динамической вязкости η от входных параметров в обоих случаях, так как предсказанные значения лежат ближе к прямой $y = x$.

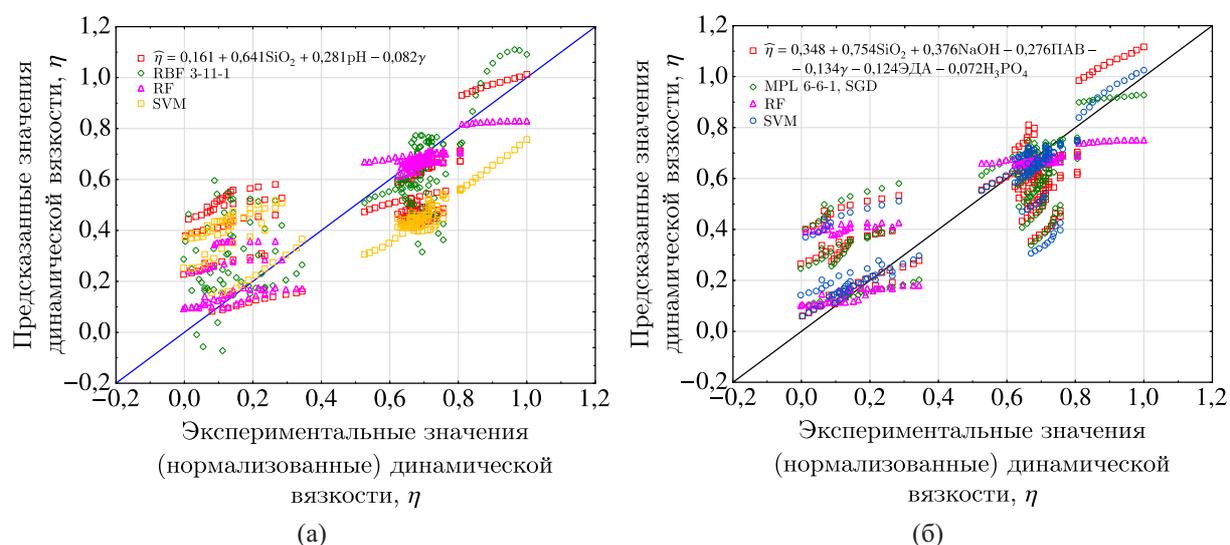


Рис. 13. Графики рассеивания динамической вязкости η от входных параметров: а) SiO_2 , pH, γ ; б) SiO_2 , NaOH, H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА, γ

На основании анализа влияния факторов «состав суспензии» и «скорость сдвига» на динамическую вязкость η были определены составы водных суспензий, на которых средняя динамическая вязкость не различается. Исследуем более подробно построенные модели динамической вязкости η с входными параметрами SiO_2 , pH, γ . Распределение абсолютного относительного отклонения $ARD \% = \frac{|\eta_i - \hat{\eta}_i|}{\eta_i}$ экспериментальных и предсказанных значений (нормализованных) в зависимости от концентрации SiO_2 и кислотности pH для построенных моделей динамической вязкости η от входных параметров SiO_2 , pH, γ представлено на двухмерных контурных графиках (рис. 14). Для регрессионной модели (1) основная часть этого рисунка покрыта значениями ARD %, которые меньше 40 %. Для нейросетевой модели RBF значения ARD % в большинстве случаев менее 20 %. Модель, построенная с помощью алгоритма RF, имеет наибольшую площадь с ARD меньше 4 %. Что касается модели, построенной с помощью алгоритма SVM, то наибольшую площадь занимают значения ARD, которые меньше 52 %. Наибольшие значения ARD % для всех моделей наблюдаются при малых концентрациях SiO_2 , то есть когда нормированные значения концентрации SiO_2 менее 0,4.

Еще одна оценка ошибок для моделей с входными параметрами SiO_2 , pH, γ была проведена путем разделения значений входных параметров на различные диапазоны (рис. 15). В столбчатых диаграммах приведены доли среднего абсолютного относительного отклонения ARD %

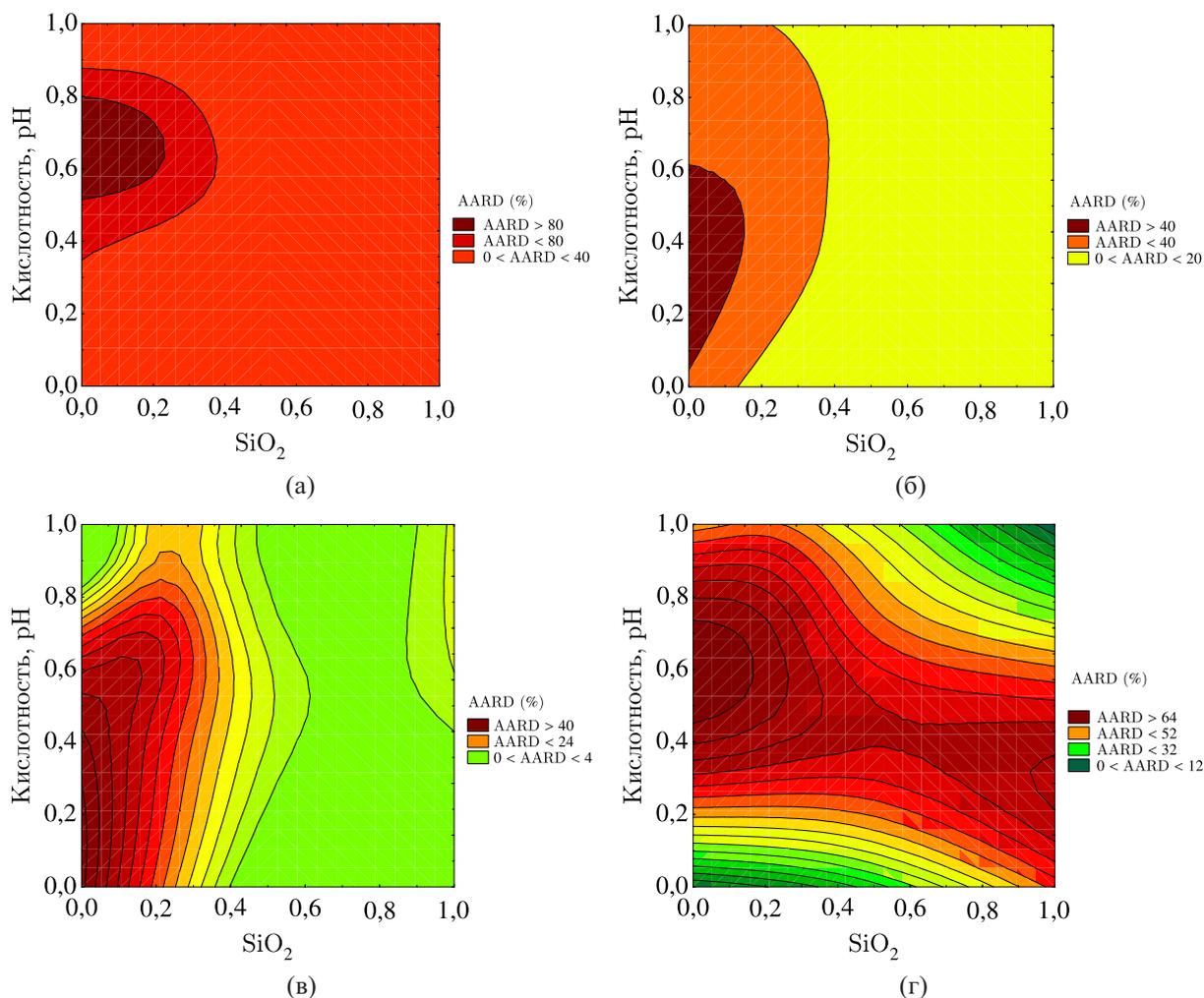


Рис. 14. Контурные графики изменения абсолютного относительного отклонения $ARD\%$ в зависимости от концентрации SiO_2 и кислотности pH (по нормированным данным) моделей: а) регрессионная модель (1); б) модель RBF; в) модель RF; г) модель SVM

от общего среднего абсолютного относительного отклонения $AARD\%$ моделей для указанного диапазона входного параметра.

Наибольшая доля $AARD\%$ находится в диапазоне концентрации диоксида кремния SiO_2 от 20% до 30% (рис. 15, а) для всех моделей. Регрессионная модель (1), модели RF и SVM дают большие доли $AARD\%$ в диапазоне pH от 6 до 11,5, а модель RBF 3-11-1 — в диапазоне pH от 2 до 6 (рис. 15, б). Доли $AARD\%$ в зависимости от скорости сдвига $\dot{\gamma}$ незначительно различаются на указанных интервалах, за исключением диапазона 3–10 (c^{-1}), на котором у регрессионной модели (1) наибольшее $AARD\%$ (рис. 15, б). Следовательно, при моделировании динамической вязкости η прогнозы, относящиеся к указанным диапазонам, скорее всего, подвержены ошибкам. Тем не менее согласно метрикам R_{Adj}^2 , MAE, MSE (таблица 5) построенные модели обладают удовлетворительными прогнозными качествами. Наименьшее $AARD\%$ наблюдается у высококонцентрированных суспензий, для которых концентрация SiO_2 не менее 30% (рис. 15, а).

Согласно метрикам R_{Adj}^2 , MAE, MSE наилучшей моделью является модель RF (таблица 5), для которой наименьшее $AARD\%$ наблюдается в диапазонах 16–20%, 2–6, 10–50 (c^{-1}) для концентрации SiO_2 , кислотности pH и скорости сдвига $\dot{\gamma}$ соответственно. Однако для прогнозиро-

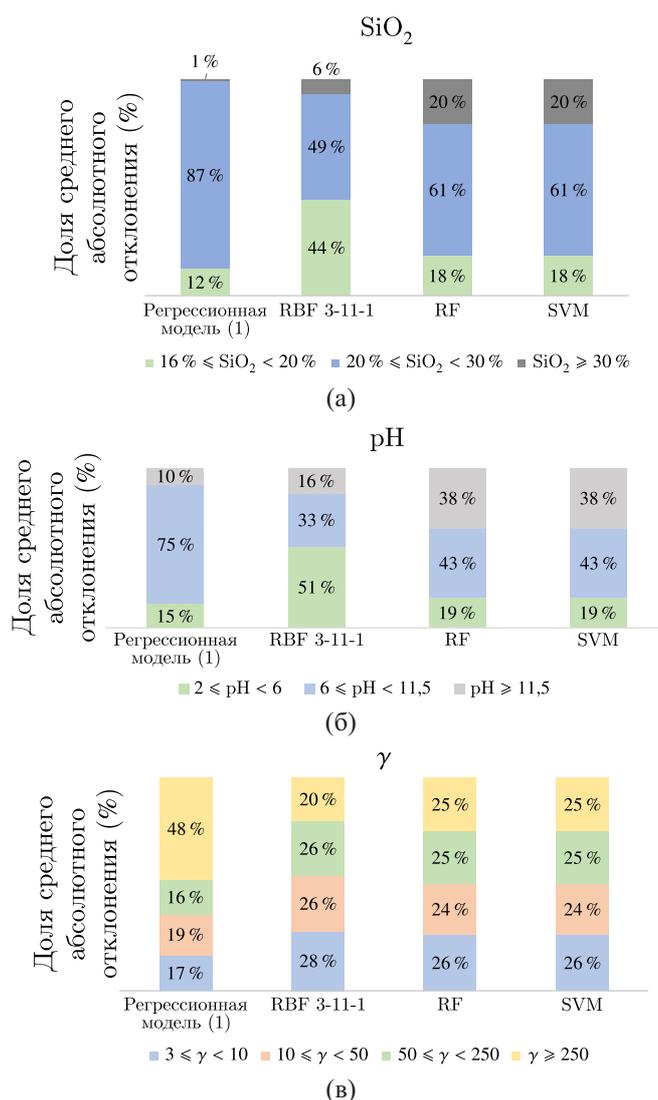


Рис. 15. Доли средних абсолютных относительных отклонений (%) от общего среднего абсолютного относительного отклонения AARD % моделей в различных диапазонах концентрации диоксида кремния SiO₂ (а), кислотности pH (б) и скорости сдвига γ (в)

вания динамической вязкости η на разных диапазонах входных параметров можно использовать модели, для которых доля AARD % в общем AARD % конкретной модели является наименьшей на выбранном интервале.

Связь между входными параметрами SiO₂, pH, γ и прогнозируемой динамической вязкостью η также оценивалась с использованием контурных графиков, представленных на рис. 16–19. Как можно видеть, тенденция изменений вязкости с входными параметрами хорошо согласуется с ранее приведенными соотношениями входных параметров и отклика моделей. Кроме того, контурные графики на рис. 16–19 соответствуют контурным графикам на рис. 2.

В литературе были проведены различные исследования для создания прогнозной модели вязкости наножидкости с использованием моделей и методов искусственного интеллекта. В работе [Hemmati-Sarapardeh et al., 2018] использовалась модель MLP для моделирования вязкости различных наножидкостей, в том числе и диоксида кремния SiO₂, точность моделирования составила $RMSE = \sqrt{MSE} = 0,1$. Модель LS-SVM использовалась для прогнозирования вязкости на-

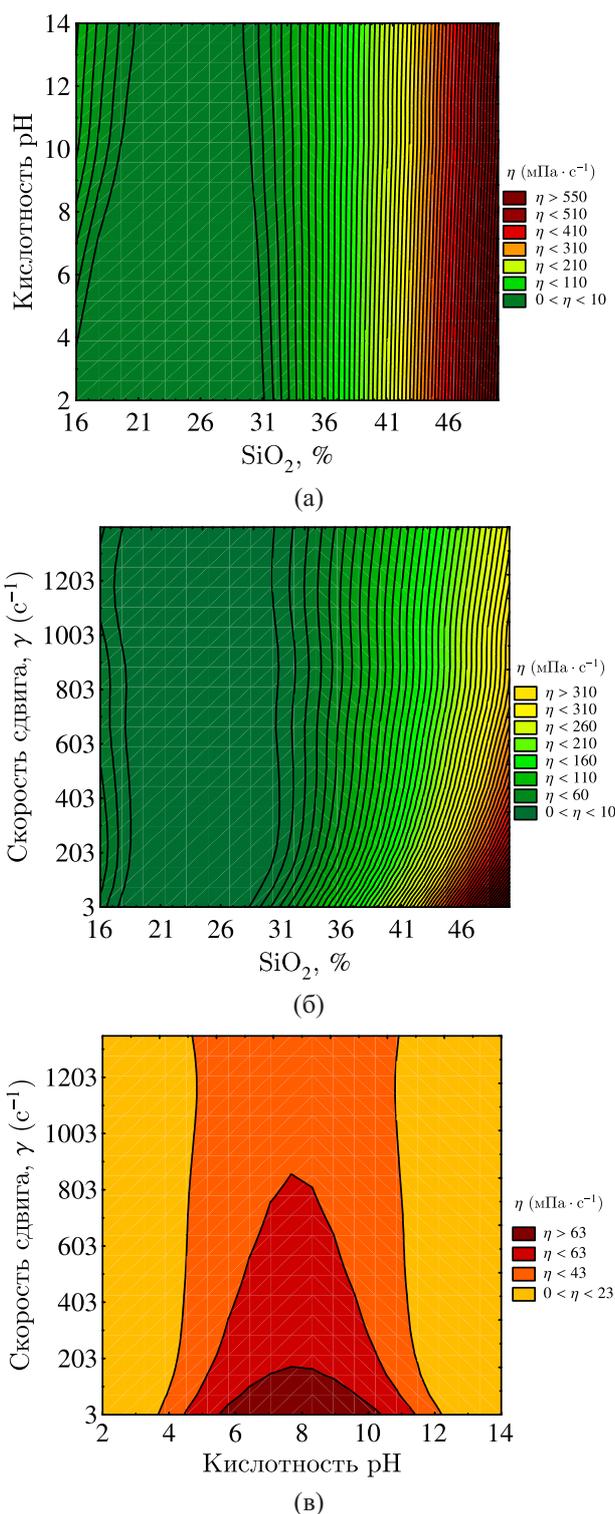


Рис. 16. Изменения прогнозируемой вязкости η с различными входными параметрами SiO₂ (а), кислотности pH (б), и скорости сдвига γ (в) согласно регрессионной модели (1)

ножидкостей с наночастицами четырех типов, включая SiO₂, точность RMSE = 37,084 [Mejbodi et al., 2015; Mejbodi et al., 2016]. Средняя абсолютная ошибка MAE составила 5,5 в исследованиях [Ahmadi et al., 2019], где строились модели MLP и RBF по данным из литературных

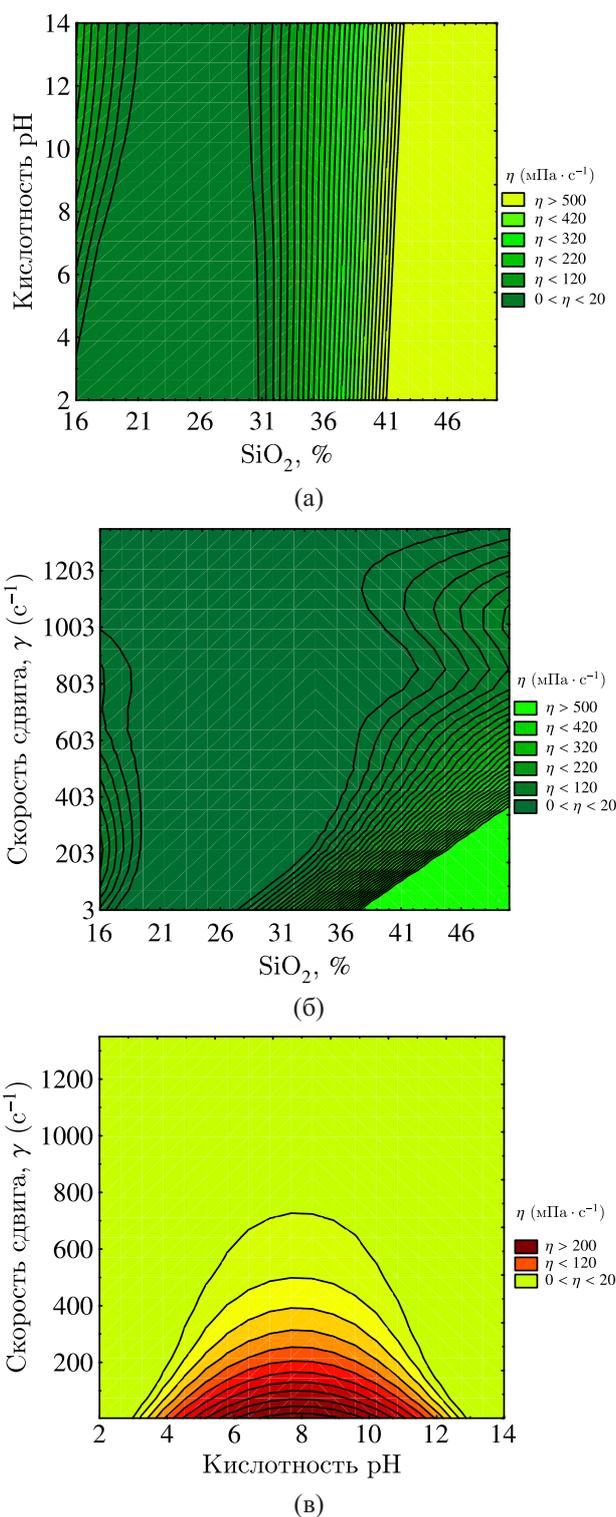


Рис. 17. Изменения прогнозируемой вязкости η с различными входными параметрами SiO_2 (а), кислотности pH (б) и скорости сдвига γ (в) согласно модели RBF 3-11-1

источников. В нашем исследовании результаты анализа ошибок RMSE методов, используемых для оценки вязкости наножидкостей, имеют аналогичную или меньшую ошибку, чем результаты

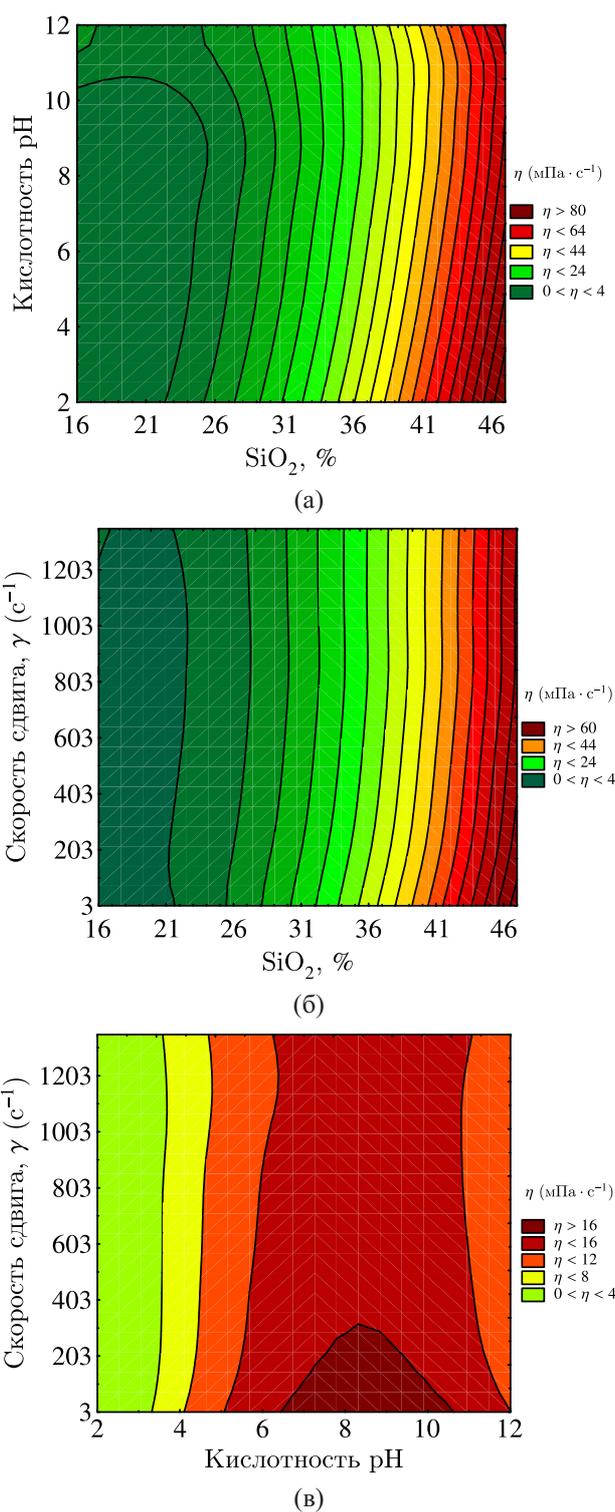


Рис. 18. Изменения прогнозируемой вязкости η с различными входными параметрами SiO_2 (а), кислотности рН (б) и скорости сдвига γ (в) согласно модели RF

анализа ошибок RMSE в иных исследованиях прогнозирования динамической вязкости водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния SiO_2 .

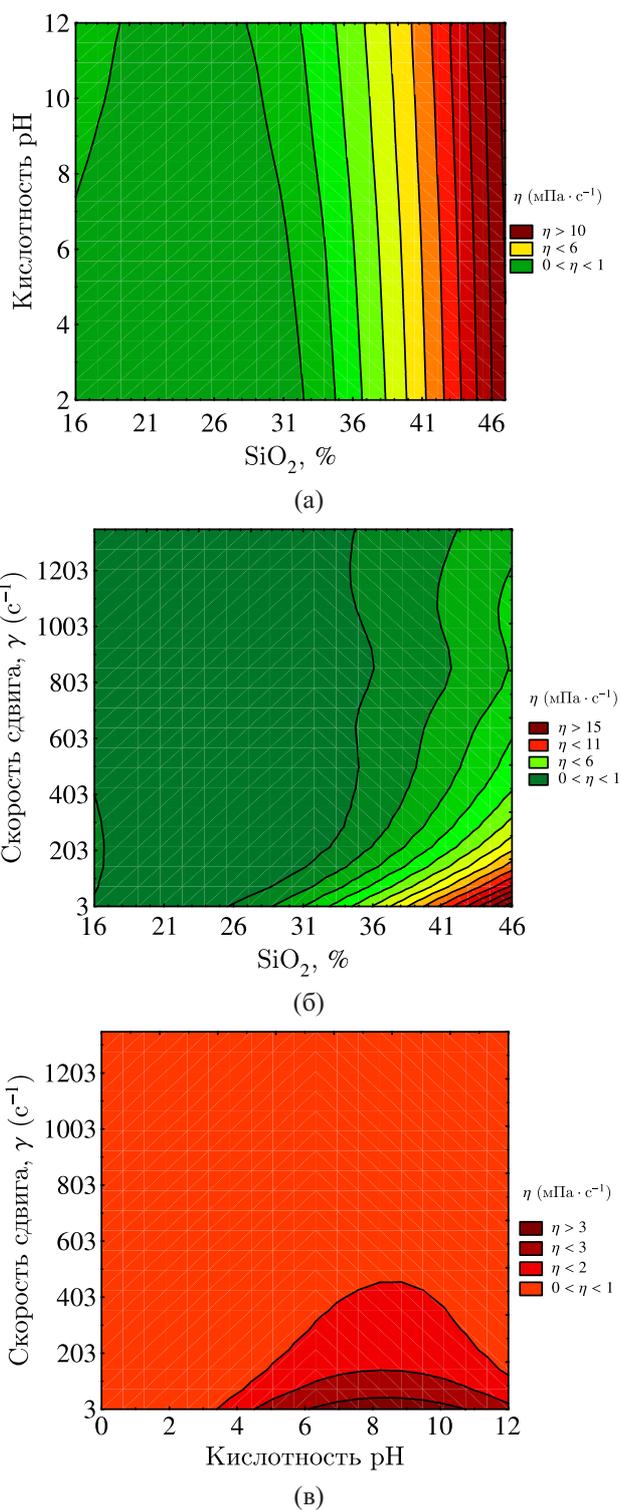


Рис. 19. Изменения прогнозируемой вязкости η с различными входными параметрами SiO_2 (а), кислотности pH (б) и скорости сдвига γ (в) согласно модели SVM

Следовательно, построенные модели обладают удовлетворительной точностью при прогнозировании динамической вязкости водных суспензий на основе наноразмерных частиц диоксида кремния в зависимости от входных параметров и не противоречат аналогичным исследо-

ваниям. Полученные результаты могут быть использованы для разработки новых водных суспензий диоксида кремния, которые находят практическое применение при изготовлении новых наноматериалов.

6. Заключение

Целью данного исследования была разработка моделей для прогнозирования динамической вязкости концентрированной водной суспензии на основе наноразмерных частиц диоксида кремния при различных составах и рабочих условиях. Были построены регрессионные модели, нейросетевые модели MLP и RBF, а также модели на основе алгоритмов машинного обучения SVM и Random Forest. Рассматривались два варианта входных параметров: первый вариант — концентрация SiO_2 , кислотность pH и скорость сдвига γ , во втором — концентрации SiO_2 , NaOH, H_3PO_4 , ПАВ, ЭДА, скорость сдвига γ . Оценивалась эффективность моделей с использованием различных статистических критериев и анализов графиков. На основании результатов исследований можно сделать следующие выводы.

С помощью статистических методов и критериев выявлены однородные группы составов суспензий, средние значения динамической вязкости которых статистически не различаются. В рамках однородных групп можно взаимозаменять составы, при этом средняя вязкость не изменится на уровне значимости 0,05. Показано, что при различных скоростях сдвига средняя вязкость значительно различается только при малых скоростях.

Установлена статистическая взаимосвязь динамической вязкости η с концентрацией SiO_2 , кислотностью pH и скоростью сдвига γ . Динамическая вязкость η сонаправлена с концентрацией SiO_2 и кислотностью pH, противоположно направлена со скоростью сдвига γ .

Результаты, полученные с помощью статистического анализа и анализа графиков, показали, что регрессионные и нейросетевые модели, а также модели, построенные с помощью алгоритмов машинного обучения SVM и Random Forest, могут быть использованы для прогнозирования динамической вязкости суспензии. Самые малые статистические метрики MSE, MAE и наибольшие значения скорректированного коэффициента детерминации R^2_{Adj} обеспечивают модели RF. Исследована точность моделей динамической вязкости η в различных диапазонах входных параметров SiO_2 , pH и γ . Для дальнейшей проверки модели сравнивались с моделями динамической вязкости наножидкостей с частицами SiO_2 из литературных источников. Статистические метрики построенных моделей находятся в пределах точности сравниваемых моделей. Динамическая вязкость η наиболее чувствительна к концентрациям SiO_2 , NaOH и ПАВ.

Развитие и совершенствование предложенного анализа, нейросетевых алгоритмов и моделей машинного обучения могут идти по пути проведения увеличения датасета и варьирования технологических параметров, применяющихся в качестве входных данных модели.

Список литературы (References)

- Айлер Р. Химия кремнезема. — М.: Мир, 1982. — Ч. 2. — 1128 с.
Ajler R. Himiya kremnezema [Silica chemistry]. — Moscow: Mir, 1982. — Part 2. — 1128 p. (in Russian).
- Брыков А. С. Силикатные растворы и их применение. — СПб.: СПбГТИ (ТУ), 2009. — 54 с.
Brykov A. S. Silikatnye rastvory i ih primenenie [Silicate solutions and their application]. — Saint Petersburg: SPbGTI (TU), 2009. — 54 p. (in Russian).
- Брюс П., Брюс Э. Практическая статистика для специалистов Data Science / пер. с англ. — СПб.: БХВ-Петербург, 2018. — 304 с.
Bryus P., Bryus E. Practical statistics for Data Scientists. — O'Reilly Media, Inc., 2017. (Russ. ed.: Bryus P., Bryus E. Prakticheskaya statistika dlya specialistov Data Science. — Saint Petersburg: BHV-Peterburg, 2018. — 304 p.)

- Гаджимогомедова З. М., Бутакова М. А., Пашиков Д. М., Чернов А. В., Кирсанова Д. Ю., Солдатов С. А., Солдатов А. В.* Технологии искусственного интеллекта для наноструктурных материалов // Российские нанотехнологии. — 2022. — Т. 17, № 1. — С. 3–13.
Gadzhimagomedova Z. M., Butakova M. A., Pashkov D. M., Chernov A. V., Kirsanova D. Yu., Soldatov S. A., Soldatov A. V. Tekhnologii iskusstvennogo intellekta dlya nanostrukturnykh materialov [Artificial intelligence technologies for nanostructured materials] // Rossijskie nanotekhnologii. — 2022. — Vol. 17, No. 1. — P. 3–13 (in Russian).
- Готтштайн Г.* Физико-химические основы материаловедения / под ред. В. П. Зломанова; пер. с англ. К. Н. Золотовой и Д. О. Чаркина. — М.: Бином, Лаб. знаний, 2009. — 400 с.
Gottshajn G. Fiziko-himicheskie osnovy materialovedeniya [Physicochemical foundations of materials science] / pod red. V. P. Zlomanova; per. s angl. K. N. Zolotovoj i D. O. Charkina. — Moscow: Binom, Lab. znaniy, 2009. — 400 p. (in Russian).
- Катнов В. Е., Степин С. Н.* Стабилизация и концентрирование водных суспензий наночастиц диоксида кремния // Вестник Казанского технологического университета. — 2011. — Вып. 12. — С. 32–37.
Katnov V. E., Stepin S. N. Stabilizaciya i koncentrirovaniye vodnykh suspenzij nanochastich dioksida kremniya [Stabilization and concentration of aqueous suspensions of silicon dioxide nanoparticles] // Vestnik Kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta. — 2011. — No. 12. — P. 32–37 (in Russian).
- Кобзарь А. И.* Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников. — М.: Физматлит, 2012. — 816 с.
Kobzar A. I. Prikladnaya matematicheskaya statistika [Applied mathematical statistics]. Dlya inzhenerov i nauchnykh rabotnikov. — Moscow: Fizmatlit, 2012. — 816 p. (in Russian).
- Косенок Я. А.* Водные композиции наноразмерных частиц диоксида кремния для химико-механической полировки пластин монокристаллического кремния: автореферат дис. ... канд. техн. наук: 05.16.08. — Минск: Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, 2019. — 28 с.
Kosenok Ya. A. Vodnye kompozicii nanorazmernykh chastic dioksida kremniya dlya himiko-mekhanicheskoy polirovki plastin monokristallicheskogo kremniya [Aqueous compositions of nanosized silicon dioxide particles for chemical-mechanical polishing of monocrystalline silicon wafers]: avtoreferat dis. ... kand. tekhn. nauk: 05.16.08. — Minsk: Belorusskij gosudarstvennyj universitet informatiki i radioelektroniki, 2019. — 28 p. (in Russian).
- Косенок Я. А., Гайшун В. Е., Васьякевич В. В., Тюленкова О. И., Маевский А. А., Савицкая Т. А., Кимленко И. М.* Концентрированные композиции на основе наноразмерных частиц диоксида кремния, полученные по ионообменной технологии // Вестник Гомельского государственного технического университета им. П. О. Сухого. — 2022. — № 3 (90). — С. 55–61.
Kosenok Ya. A., Gajshun V. E., Vas'kevich V. V., Tyulenкова O. I., Maevskij A. A., Savickaya T. A., Kimlenko I. M. Koncentrirovannye kompozicii na osnove nanorazmernykh chastic dioksida kremniya, poluchennye po ionoobmennoj tekhnologii [Concentrated compositions based on nano-sized particles of silicon dioxide obtained using ion exchange technology] // Vestnik Gomel'skogo gosudarstvennogo tekhnicheskogo universiteta im. P. O. Suhogo. — 2022. — No. 3 (90). — P. 55–61 (in Russian).
- Косенок Я. А., Гайшун В. Е., Тюленкова О. И., Туров В. В., Савицкий Д. П.* Исследование структурообразования в водных полирующих суспензиях на основе наноразмерного диоксида кремния для применения в электронике // Металлофизика и новейшие технологии. — 2011. — Т. 33. — С. 41–47.
Kosenok Ya. A., Gajshun V. E., Tyulenкова O. I., Turov V. V., Savickij D. P. Issledovanie strukturoobrazovaniya v vodnykh poliruyushchih suspenziyah na osnove nanorazmernogo dioksida kremniya dlya primeneniya v elektronike [Investigation of structure formation in aqueous polishing suspensions based on nanoscale silicon dioxide for use in electronics] // Metallofizika i novejschie tekhnologii. — 2011. — Vol. 33. — P. 41–47 (in Russian).
- Косенок Я. А., Гайшун В. Е., Тюленкова О. И., Туров В. В., Савицкий Д. П.* Реологические свойства композиционных суспензий на основе силикатного золя и наноразмерных частиц диоксида кремния для применения в электронике // Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. — 2014. — Т. 12, № 2. — С. 269–277.
Kosenok Ya. A., Gajshun V. E., Tyulenкова O. I., Turov V. V., Savickij D. P. Reologicheskie svojstva kompozicionnykh suspenzij na osnove silikatnogo zolya i nanorazmernykh chastic dioksida kremniya dlya primeneniya v elektronike [Rheological properties of composite suspensions based on silicate sol and nanoscale particles of silicon dioxide for use in electronics] // Nanosistemy, nanomaterialy, nanotekhnologii. — 2014. — Vol. 12, No. 2. — P. 269–277 (in Russian).
- Минаков А. В., Михиенкова Е. И., Неверов А. Л., Бурюкин Ф. А.* Экспериментальное исследование влияния добавки наночастиц на реологические свойства суспензии // Журнал технической физики. — 2018. — Т. 44, № 5. — С. 3–11.

- Minakov A. V., Mihienkova E. I., Neverov A. L., Buryukin F. A.* Eksperimental'noe issledovanie vliyaniya dobavki nanochastic na reologicheskie svoystva suspenzii [Experimental study of the effect of nanoparticle additives on the rheological properties of suspensions] // Zhurnal tekhnicheskoy fiziki. — 2018. — Vol. 44, No. 5. — P. 3–11 (in Russian).
- Пряжников М. И., Скоробогатова А. Д., Немцев И. В., Минаков А. В.* Коллоидная стабильность и вязкость концентрированных водных силиказолей // Журн. Сиб. федер. ун-та. Химия. — 2023. — № 16 (3). — С. 447–458.
- Pryazhnikov M. I., Skorobogatova A. D., Nemcev I. V., Minakov A. V.* Kolloidnaya stabil'nost' i vyazkost' koncentrirovannykh vodnykh silikazolej [Colloidal stability and viscosity of concentrated aqueous silicasols] // Zhurn. Sib. feder. un-ta. Himiya. — 2023. — No. 16 (3). — P. 447–458 (in Russian).
- Рудяк В. Я.* Современное состояние исследований вязкости наножидкостей // Вестник НГУ. Сер. Физика. — 2015. — Т. 10, № 1. — С. 5–22.
- Rudyak V. Ya.* Sovremennoe sostoyanie issledovaniy vyazkosti nanozhidkостей [Current state of research on the viscosity of nanofluids] // Vestnik NGU. Ser. Fizika. — 2015. — Vol. 10, No. 1. — P. 5–22 (in Russian).
- Рудяк В. Я., Белкин А. А., Егоров В. В., Томилина Е. А.* Моделирование процессов переноса методом молекулярной динамики. II. Сила сопротивления и эффективная вязкость в наносuspensionях // Новосибирск: НГАСУ (Сибстрин). — 2006. — № 1 (18). — С. 52.
- Rudyak V. Ya., Belkin A. A., Egorov V. V., Tomilina E. A.* Modelirovanie processov perenosa metodom molekulyarnoy dinamiki. II. Sila soprotivleniya i effektivnaya vyazkost' v nanosuspensionyah [Modeling of transport processes by molecular dynamics. II. Drag force and effective viscosity in nanosuspensions] // Novosibirsk: NGASU (Sibstrin). — 2006. — No. 1 (18). — 52 p. (in Russian).
- Рудяк В. Я., Минаков А. В., Пряжников М. И.* Современное состояние исследований вязкости наножидкостей // Труды Новосибирского государственного архитектурно-строительного университета (Сибстрин). — 2018. — Т. 21, № 1 (67). — С. 30–41.
- Rudyak V. Ya., Minakov A. V., Pryazhnikov M. I.* Sovremennoe sostoyanie issledovaniy vyazkosti nanozhidkостей [Current state of research on the viscosity of nanofluids] // Trudy Novosibirskogo gosudarstvennogo arhitekturno-stroitel'nogo universiteta (Sibstrin). — 2018. — Vol. 21, No. 1 (67). — P. 30–41 (in Russian).
- Рудяк В. Я., Минаков А. В., Сметанина М. С., Пряжников М. И.* Экспериментальные данные о зависимости вязкости наножидкостей на основе воды и этиленгликоля от размера и материала частиц // Доклады Академии наук. — 2016. — Т. 467, № 3. — С. 289–291.
- Rudyak V. Ya., Minakov A. V., Smetanina M. S., Pryazhnikov M. I.* Eksperimental'nye dannye o zavisimosti vyazkosti nanozhidkостей na osnove vody i etilenglikolya ot razmera i materiala chastic [Experimental data on the dependence of the viscosity of nanofluids based on water and ethylene glycol on the size and material of particles] // Doklady Akademii nauk. — 2016. — Vol. 467, No. 3. — P. 289–291 (in Russian).
- Торнер Р. В.* Основные процессы переработки полимеров. Теория и методы расчета. — М.: Химия, 1977. — 456 с.
- Torner R. V.* Osnovnye processy pererabotki polimerov. Teoriya i metody rascheta [The main processes of polymer processing. Theory and methods of calculation]. — Moscow: Himiya, 1977. — 456 p. (in Russian).
- Хайкин С.* Нейронные сети: полный курс. — 2-е издание. — М.: Вильямс, 2020. — 1104 с.
- Hajkin S.* Neironnye seti: polnyj kurs [Neural networks: a complete course]. — Moscow: Vil'yams, 2020. — 1104 p. (in Russian).
- Черепанов И. Н., Попов В. А.* Экспериментальное исследование влияния концентрации на параметры наножидкости // Вестник Пермского университета. Физика. — 2017. — № 2 (36). — С. 26–32.
- Cherepanov I. N., Popov V. A.* Eksperimental'noe issledovanie vliyaniya koncentracii na parametry nanozhidkosti [Experimental study of the effect of concentration on nanofluid parameters] // Vestnik Permskogo universiteta. Fizika. — 2017. — No. 2 (36). — P. 26–32 (in Russian).
- Уатт Дж., Борхани Р., Катсаггелос А.* Машинное обучение. Основы, алгоритмы и практика применения. — СПб.: БХВ-Петербург, 2022. — 640 с.
- Uatt Dzh., Borkhani R., Katsaggelos A.* Mashinnoe obuchenie. Osnovy, algoritmy i praktika primeneniya [Machine learning. Foundations, algorithms and applications]. — Saint Petersburg: BHV-Peterburg, 2022. — 640 p. (in Russian).
- Prasad T. R., Krishna K. R., Sharma K. V., Mantravadi N.* Vязкость и теплопроводность наножидкостей кобальта и диоксида кремния в оптимальной смеси глицерина и воды // Коллоидный журнал. — 2022. — Т. 84, № 2. — С. 213–227.
- Abareshi M., Sajjadi S. H., Zebarjad S. M., Goharshadi E. K.* Fabrication, characterization, and measurement of viscosity of α -Fe₂O₃-Glycerol nanofluids // Journal of Molecular Liquids. — 2011. — Vol. 163, No. 1. — P. 27–32.

- Ahmad M.N., Mahmood A.K., Hashim K.F.* Artificial intelligence model and correlation for characterization and viscosity measurements of mono & hybrid nanofluids concerned graphene oxide/silica // *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry*. — 2021. — Vol. 145, No. 10. — P. 2209–2224.
- Ahmadi M.H., Sadeghzadeh M., Maddah H., Solouk A., Kumar R., Chau K.* Precise smart model for estimating dynamic viscosity of SiO₂/ethylene glycol–water nanofluid // *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*. — 2019. — Vol. 13, No. 1. — P. 1095–1105.
- Ajeena A.M., Farkas I., Víg P.* A comparative experimental investigation of dynamic viscosity of ZrO₂/DW and SiC/DW nanofluids: Characterization, rheological behavior, and development of new correlation // *Heliyon*. — 2023. — Vol. 9, No. 10. — e21113.
- Akbari M., Afrand M., Arshi A., Karimipour A.* An experimental study on rheological behavior of ethylene glycol based nanofluid: proposing a new correlation as a function of silica concentration and temperature // *Journal of Molecular Liquids*. — 2017. — Vol. 233. — P. 352–357.
- Akili S., Baheta A.T., Sharma K.V., Vandrugi S.K.* Properties of silica nanofluid in glycerol-ethylene glycol mixture as base liquid // *ARPN Journal of Engineering and Applied Sciences*. — 2016. — Vol. 11, No. 22. — P. 13019–13024.
- Ansari H., Zarei M., Sabbaghi S., Keshavarz P.* A new comprehensive model for relative viscosity of various nanofluids using feed-forward back-propagation MLP neural networks // *Int. Commun. Heat Mass Tran.* — 2018. — Vol. 91. — P. 158–164.
- Atashrouz S., Pazuki G., Alimoradi Y.* Estimation of the viscosity of nine nanofluids using a hybrid GMDH-type neural network system // *Fluid Phase Equil.* — 2014. — Vol. 372. — P. 43–48.
- Baghban A., Jalali A., Shafiee M., Ahmadi M.H., Chau K.-W.* Developing an ANFISbased swarm concept model for estimating the relative viscosity of nanofluids // *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*. — 2019. — Vol. 13. — P. 26–39.
- Bahiuddin I., Fatah A.Y.A., Mazlan S.A., Shapiai M.I., Imaduddin F., Sabino U., Utami D., Muhtazaruddin M.N.B.* Comparing the linear and logarithm normalized extreme learning machine in flow curve modeling of magnetorheological fluid // *Indonesian Journal of Electrical Engineering and Computer Science*. — 2019. — No. 13. — P. 1065–1072.
- Bahiuddin I., Mazlan S.A., Imaduddin F., Shapiai M.I., Sugeng D.A.* Review of modeling schemes and machine learning algorithms for fluid rheological behavior analysis // *Journal of the Mechanical Behavior of Materials*. — 2024. — Vol. 33, No. 1. — id.20220309. — 21 pp.
- Barati-Harooni A., Najafi-Marghmaleki A.* An accurate RBF-NN model for estimation of viscosity of nanofluids // *Journal of Molecular Liquids*. — 2016. — Vol. 224. — P. 580–588.
- Barati-Harooni A., Najafi-Marghmaleki A., Mohebbi A., Mohammadi A.H.* On the prediction of viscosity of Newtonian nanofluids // *Journal of Molecular Liquids*. — 2017. — Vol. 241. — P. 1079–1090.
- Breiman L.* Random forests // *Machine Learning*. — 2001. — Vol. 45, No. 1. — P. 5–32.
- Breiman L., Friedman J.H., Olshen R.A., Stone C.J.* Classification and regression trees. — 1st ed. — New York: Chapman and Hall, CRC, 1984. — 368 p.
- Brinkman H.C.* The viscosity of concentrated suspensions and solutions // *The Journal of Chemical Physics*. — 1952. — Vol. 20, No. 4. — P. 571–571.
- Buitrago-Rincon D.L., Sadtler V., Mercado R.A., Roques-Carmes T., Benyahia L., Durand A., Ferji K., Marchal P., Pedraza-Avella J.A., Lemaitre C.* Effect of silica nanoparticles in xanthan gum solutions: evolution of viscosity over time // *Nanomaterials*. — 2022. — Vol. 12, No. 11. — P. 1906.
- Chandrasekar M., Suresh S., Chandra Bose A.* Experimental investigations and theoretical determination of thermal conductivity and viscosity of Al₂O₃ / Water nanofluid // *Experimental Thermal and Fluid Science*. — 2010. — Vol. 34, No. 2. — P. 210–216.

- Chen H., Ding Y., He Y., Tan C.* Rheological behaviour of ethylene glycol based titania nanofluids // *Chemical Physics Letters*. — 2007. — Vol. 444, No. 4–6. — P. 333–337.
- Chicco D., Warrens M.J., Jurman G.* The coefficient of determination R-squared is more informative than SMAPE, MAE, MAPE, MSE and RMSE in regression analysis evaluation // *PeerJ Computer Science*. — 2021. — No. 7. — P. e623.
- Das S.K., Putra N., Roetzel W.* Pool boiling characteristics of nano-fluids // *International Journal of Heat and Fluid Flow*. — 2003. — Vol. 46, No. 5. — P. 851–862.
- Drzazga M., Gierczycki A., Dzido G., Lemanowicz M.* Influence of nonionic surfactant addition on drag reduction of water based nanofluid in a small diameter pipe // *Chinese Journal of Chemical Engineering*. — 2013. — Vol. 21, No. 1. — P. 104–108.
- Durgam S., Kadam G.* Investigation on thermal conductivity and viscosity of nanofluids using analytical and machine learning models // *arXiv preprint*. — 2021. — arXiv:2102.12120. — 17 p.
- Einstein A.* Eine neue Bestimmung der Molekiildimensionen // *Annalen der Physik*. — 1906. — Vol. 19. — P. 289–306.
- Esfahani I.C.* A data-driven physics-informed neural network for predicting the viscosity of nanofluids // *AIP Advances*. — 2023. — Vol. 13, No. 2. — P. 025206.
- Gholizadeh M., Jamei M., Ahmadianfar I., Pourrajab R.* Prediction of nanofluids viscosity using random forest (RF) approach // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. — 2020. — Vol. 201. — P. 104010.
- Heidari E., Sobati M.A., Movahedirad S.* Accurate prediction of nanofluid viscosity using a multilayer perceptron artificial neural network, MLP-ANN // *Chemometrics and intelligent laboratory systems*. — 2016. — Vol. 155. — P. 73–85.
- Hemmat Esfe M., Hassani Ahangar M.R., Rejvani M., Toghraie D., Hajmohammad M.H.* Designing an artificial neural network to predict dynamic viscosity of aqueous nanofluid of TiO_2 using experimental data // *International Communications in Heat and Mass Transfer*. — 2016. — Vol. 75. — P. 192–196.
- Hemmat Esfe M., Goodarzi M., Reiszadeh M., Afrand M.* Evaluation of MWCNTs-ZnO/5W50 nanolubricant by design of an artificial neural network for predicting viscosity and its optimization // *Journal of Molecular Liquids*. — 2019. — Vol. 277. — P. 921–931.
- Hemmati-Sarapardeh A., Hatami S., Taghvaei H., Naseri A., Band S.S., Chau K.* Designing a committee of machines for modeling viscosity of water-based nanofluids // *Engineering Applications of Computational Fluid Mechanics*. — 2021. — Vol. 15, No. 1. — P. 1967–1987.
- Hemmati-Sarapardeh A., Mohagheghian E.* Modeling interfacial tension and minimum miscibility pressure in paraffin-nitrogen systems: application to gas injection processes // *Fuel*. — 2017. — Vol. 205. — P. 80–89.
- Hemmati-Sarapardeh A., Varamesh A., Husein M.M., Karan K.* On the evaluation of the viscosity of nanofluid systems: Modeling and data assessment // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. — 2018. — Vol. 81. — P. 313–329.
- Ho T.K.* The random subspace method for constructing decision forests // *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*. — 1998. — Vol. 20, No. 8. — P. 832–844.
- Jamshidi N., Farhadi M., Ganji D.D., Sedighi K.* Experimental investigation on the viscosity of nanofluids // *IJE Transactions B: Applications*. — 2012. — Vol. 25, No. 3. — P. 201–209.
- Karimi H., Yousefi F., Rahimi M.R.* Correlation of viscosity in nanofluids using genetic algorithm-neural network (GA-NN) // *Heat Mass Transf.* — 2011. — Vol. 47. — P. 1417–1425.
- Karimipour A., Ghasemi S., Darvanjooghi M.H.K., Abdollahi A.* A new correlation for estimating the thermal conductivity and dynamic viscosity of CuO/liquid paraffin nanofluid using neural network method // *Int. Commun. Heat Mass Tran.* — 2018. — Vol. 92. — P. 90–99.

- Karkevandi-Talkhooncheh A., Rostami A., Hemmati-Sarapardeh A., Ahmadi M., Husein M.M., Dabir B.* Modeling minimum miscibility pressure during pure and impure CO₂ flooding using hybrid of radial basis function neural network and evolutionary techniques // *Fuel*. — 2018. — Vol. 220. — P. 2702–2282.
- Khodadadi H., Aghakhani S., Majd H., Kalbasi R., Wongwises S., Afrand M.* A comprehensive review on rheological behavior of mono and hybrid nanofluids: Effective parameters and predictive correlations // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. — 2018. — Vol. 127. — P. 997–1012.
- Mahbubul I.M., Saidur R., Amalina M.A.* Latest developments on the viscosity of nanofluids // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. — 2012. — Vol. 55. — P. 874–885.
- Mahdaviara M., Rostami A., Shahbazi K., Shokrollahi A., Ghazanfari Hossein M.* Estimating aqueous nanofluids viscosity via GEP modeling: correlation development and data assessment // *Iranian journal of chemistry & chemical engineering – international english edition*. — 2021. — Vol. 41, No. 1. — P. 266–283.
- Maiga S. E. B., Nguyen C. T., Galanis N., Roy G.* Heat transfer behaviours of nanofluids in a uniformly heated tube // *Superlattices and Microstructures*. — 2004. — Vol. 35. — P. 543–557.
- Mehrabi M., Sharifpur M., Meyer J.P.* Viscosity of nanofluids based on an artificial intelligence model // *International Communications in Heat and Mass Transfer*. — 2013. — Vol. 43. — P. 16–21.
- Meybodi M.K., Daryasafar A., Koochi M.M., Moghadasi J., Meybodi R.B., Ghahfarokhi A.K.* A novel correlation approach for viscosity prediction of water based nanofluids of Al₂O₃, TiO₂, SiO₂ and CuO // *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*. — 2016. — Vol. 58. — P. 19–27.
- Meybodi M.K., Naseri S., Shokrollahi A., Daryasafar A.* Prediction of viscosity of water-based Al₂O₃, TiO₂, SiO₂, and CuO nanofluids using a reliable approach // *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*. — 2015. — Vol. 149. — P. 60–69.
- Montgomery D. C.* Design and analysis of experiments. — John Wiley & Sons, 2008. — 680 p.
- Murshed S., Leong K., Yang C.* Investigations of thermal conductivity and viscosity of nanofluids // *International Journal of Thermal Sciences*. — 2008. — Vol. 47. — P. 560–568.
- Murshed S.S., Estellé P.* A state of the art review on viscosity of nanofluids // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. — 2017. — Vol. 76. — P. 1134–1152.
- Namburu P.K., Kulkarni D.P., Dandekar A., Das D.K.* Experimental investigation of viscosity and specific heat of silicon dioxide nanofluids // *Micro & Nano Letters*. — 2007a. — Vol. 2, No. 3. — P. 67–71.
- Namburu P.K., Kulkarni D.P., Misra D., Das D.K.* Viscosity of copper oxide nanoparticles dispersed in ethylene glycol and water mixture // *Experimental Thermal and Fluid Science*. — 2007b. — Vol. 32. — P. 397–402.
- Nguyen C., Desgranges F., Roy G., Galanis N., Maré T., Boucher S., Mintsa H.A.* Temperature and particle-size dependent viscosity data for water-based nanofluids // *Hysteresis Phenomenon, International Journal of Heat and Fluid Flow*. — 2007a. — Vol. 28, No. 6. — P. 1492–1506.
- Nguyen C.T., Desgranges F., Roy G., Galanis N., Mare T., Boucher S., Mintsa H.A.* Temperature and particle-size dependent viscosity data for water-based nanofluids – hysteresis phenomenon // *Int. J. Heat Fluid Flow*. — 2007b. — Vol. 28. — P. 1492–1506.
- Patra A.K., Nayak M.K., Misra A.* Viscosity of nanofluids – A review // *International Journal of Thermofluid Science and Technology*. — 2020. — Vol. 7, No. 2. — P. 070202.
- Payzullaev A., Allaev B., Mirzaev S., Abdiev J., Urinov J., Parkash A.* The impact of silicon dioxide nanoparticle size on the viscosity and stability of nanofluids: a comprehensive study // *ECS Advances*. — 2023. — Vol. 2, No. 3. — id.031001. — 6 p.
- Ramezanizadeh M., Ahmadi M.H., Nazari M.A., Sadeghzadeh M., Chen L.* A review on the utilized machine learning approaches for modeling the dynamic viscosity of nanofluids // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. — 2019. — Vol. 114 (C). — P. 109345.

- Rostami A., Kalantari-Meybodi M., Karimi M., Tatar A., Mohammadi A.H. Efficient estimation of hydrolyzed polyacrylamide (HPAM) solution viscosity for enhanced oil recovery process by polymer flooding // *Oil & Gas Sciences and Technology – Revue d'IFP Energies Nouvelles*. — 2018. — Vol. 73. — P. 22.
- Rudyak V. Ya., Dimov S., Kuznetsov V. On the dependence of the viscosity coefficient of nanofluids on particle size and temperature // *Tech. Phys. Lett.* — 2013. — Vol. 39. — P. 779–782.
- Sacks J., Welch W.J., Mitchell T.J., Wynn H.P. Design and analysis of computer experiments // *Statistical Science*. — 1989. — Vol. 4, No. 4. — P. 409–423.
- Sadeghzadeh M., Maddah H., Ahmadi M.H., Khadang A., Ghazvini M., Mosavi A., Nabipour N. Prediction of thermo-physical properties of $\text{TiO}_2\text{-Al}_2\text{O}_3$ / Water nanoparticles by using artificial neural network // *Nanomaterials*. — 2020. — Vol. 10, No. 4. — P. 697.
- Sharifpur M., Adio S. A., Meyer J. P. Experimental investigation on the viscosity, electrical conductivity and pH of SiO_2 -ethylene glycol nanofluids // *11th International Conference on Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics (HEFAT 2015)*. — Kruger National Park, South Africa, 2015. — DOI: 10.13140/RG.2.1.5009.5846
- Sharma A. K., Tiwari A. K., Dixit A. R. Rheological behaviour of nanofluids: a review // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. — 2016. — Vol. 53. — P. 779–791.
- Smola A. J., Schölkopf B. A tutorial on support vector regression // *Statistics and Computing*. — 2004. — Vol. 14. — P. 199–222.
- Sundar L. S., Sharma K. V., Naik M. T., Singh M. K. Empirical and theoretical correlations on viscosity of nanofluids: a review // *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. — 2013. — Vol. 25. — P. 670–686.
- Sundar L. S., Singh M. K., Sousa A. C. M. Investigation of thermal conductivity and viscosity of Fe_3O_4 nanofluid for heat transfer applications // *International Communications in Heat and Mass Transfer*. — 2013. — Vol. 44. — P. 7–14.
- Talib S. F. A., Azmi W. H., Zakaria I., Mohamed WANW., Mamat A. M. I., Ismail H., Daud W. R. W. Thermophysical properties of silicon dioxide (SiO_2) in ethylene glycol / Water mixture for proton exchange membrane fuel cell cooling application // *Energy Procedia*. — 2015. — Vol. 79. — P. 366–371.
- Tiwari A. K., Ghosh P., Sarkar J. Investigation of thermal conductivity and viscosity of nanofluids // *Journal of Environmental Research And Development*. — 2012. — Vol. 7, No. 2. — P. 768–777.
- Vaferi B. Application of artificial neural networks for accurate prediction of thermal and rheological properties of nanofluids // *Deterministic Artificial Intelligence*. — IntechOpen, 2020. — <http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.89101>
- Vakilnejad A., Aroon M. A., Al-Abri M., Bahmanyar H., Al-Ghafri B., Myint M. T. Z., Vakili-Nezhaad G. R. Experimental investigation and modeling of the viscosity of some water-based nanofluid // *Chemical Engineering Communications*. — 2020. — Vol. 208, No. 7. — P. 1–15.
- Wang T., Ni M. J., Luo Z. Y., Shou C. H., Cen K. Viscosity and aggregation structure of nanocolloidal dispersions // *Chin. Sci. Bull.* — 2012. — Vol. 57. — P. 3644–3651.
- Wang X.-J., Li X.-F. Influence of pH on nanofluids' viscosity and thermal conductivity // *Chinese Physics Letters*. — 2009. — Vol. 26, No. 5. — P. 05660.
- Zhang Q., Gu M. Rheological properties and gelcasting of concentrated aqueous silicon suspension // *Materials Science and Engineering*. — 2005. — Vol. A 399, No. 1. — P. 351–357.
- Zhang Q., Li W., Gu M., Jin Y. Dispersion and rheological properties of concentrated silicon aqueous suspension // *Powder Technology*. — 2005. — Vol. 161, No. 2. — P. 130–134.
- Zhao N., Li Z. Experiment and artificial neural network prediction of thermal conductivity and viscosity for alumina-water nanofluids // *Materials*. — 2017. — Vol. 10. — P. 552.