

小波神经网络模型预测二氧化碳+水溶液体系界面张力*

江安^{1,2}, 刘平礼², 李年银², 张云飞¹, 杜新伟³

- (1. 中海油能源发展股份有限公司工程技术分公司, 天津 300452;
2. 西南石油大学, 成都 610500;
3. 中国石油西气东输管道公司, 江苏 常州 213251)

摘要: 二氧化碳+水溶液体系界面张力 (IFT) 是影响地层中气水两相运移特性的重要参数之一, 对二氧化碳捕集、埋存至关重要。为了快速准确地确定二氧化碳+水溶液体系 IFT, 对已有 IFT 实验结果进行了统计整理, 得到了 1 677 组样本数据, 考虑了压力、温度、气体中甲烷、氮气含量、水溶液中一价阳离子 (Na^+ , K^+) 浓度、二价阳离子 (Ca^{2+} , Mg^{2+}) 浓度 6 个因素对 IFT 的影响, 建立了小波神经网络 (WNN) 预测模型对二氧化碳+水溶液体系 IFT 进行预测。模拟结果表明, 随机选取 839 组数据作为训练集样本, 得到的小波神经网络结构为 6-16-1, 该模型预测 IFT 的平均绝对误差 (M_{MAE})、平均相对误差 (M_{MARE})、方差 (M_{MSE}) 和相关度 (R^2) 分别为 1.23 mN/m, 3.30%, 2.30 mN²/m², 0.988。与最新提出的多元拟合模型和 BP 神经网络模型对比结果表明, 小波神经网络模型预测精度最高。

关键词: 小波神经网络; 界面张力; 二氧化碳+水溶液体系

中图分类号: TE311

文献标志码: A

doi: 10.21656/1000-0887.370339

引 言

二氧化碳+水溶液体系 IFT 是影响地层流体运移规律的关键参数, 对二氧化碳埋存及二氧化碳驱油方案设计至关重要^[1-2]。气水 IFT 通常用悬滴法^[3-5]、毛细管上升法测得^[6-8], 但实验周期长、实验设备昂贵、数据处理过程复杂, 尤其是混合气+水溶液体系 IFT 则更难测得。相比之下, 经验关联式能够快速确定气水 IFT。许多学者以实验数据为基础建立了描述二氧化碳+水溶液体系 IFT 的经验关联式^[3, 9-12], 但这些经验关联式只适用于特定条件、通用性差。Li 等^[12]基于交换条件数学期望算法建立了预测二氧化碳+水溶液体系 IFT 的多元回归模型, 可预测混合气+水溶液体系 IFT, 但当气水 IFT 大于 60 mN/m 时, 该模型预测误差较大。因此, 需要建立一种适用范围广、准确性高、使用简便的气水 IFT 预测方法。

BP 神经网络模型可用于对某种算法或者函数的逼近, 目前已应用于许多领域^[13-17]。实践表明, BP 神经网络进行多元参数拟合具有很高的精度, 尤其对于自变量和因变量之间存在非线性关系, BP 神经网络优势更加明显。但是单一的 BP 神经网络预测模型存在以下不足之处:

* 收稿日期: 2016-11-07; 修订日期: 2016-12-20

基金项目: 国家自然科学基金(面上项目)(51574197)

作者简介: 江安(1981—), 男, 工程师(通讯作者。E-mail: 1787182084@qq.com)。

① 隐含层神经元数目对网络预测精度有一定影响,但目前还没有准确的方法确定隐含层神经元数目;② 如果初始点靠近局部最优解, BP 神经网络易陷于局部极小值,从而得不到全局最优解。

本文调研整理了国内外现有的二氧化碳+水溶液体系 IFT 实验数据,得到了 1 677 组悬滴法测得的实验样本数据,随机选取其中一部分样本作为训练集样本,将小波变换与 BP 神经网络模型相融合,考虑了压力,温度,二氧化碳中甲烷、氮气含量,水溶液中一价阳离子(Na^+ , K^+)浓度、二价阳离子(Ca^{2+} , Mg^{2+})浓度 6 个因素对二氧化碳+水溶液体系 IFT 的影响,建立了预测二氧化碳+水溶液体系 IFT 的小波神经网络模型,利用该模型对剩余的样本数据进行 IFT 预测,验证了该预测模型的正确性,并对模型精度进行了对比分析。

1 小波神经网络模型原理

1.1 小波变换

如果 $\psi(t) \in L^2(\mathbf{R})$ (二尺度空间)满足“允许性”条件:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\varphi(\omega)|^2 |\omega|^{-1} d\omega < +\infty, \quad (1)$$

那么 $\psi(t)$ 就被称为基小波,式中 $\varphi(\omega)$ 为 $\psi(t)$ 的 Fourier(傅氏)变换.由基小波生成的小波函数系可表示为

$$\psi_{a,b}(t) = |a|^{-1/2} \psi\left(\frac{t-b}{a}\right), \quad (2)$$

式中, a, b 为实数,且 $a \neq 0$,称 $\psi_{a,b}(t)$ 为基小波 $\psi(t)$ 生成的连续小波,也称小波基函数。

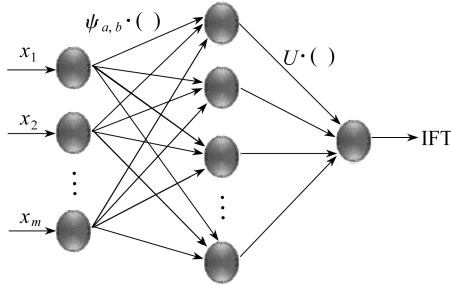


图 1 神经网络拓扑结构

Fig. 1 Illustration of the architecture of the neural network

1.2 模型结构

典型的三层 BP 神经网络模型拓扑结构如图 1 所示,包含输入层、隐含层和输出层,层与层之间采用全连接方式,单层之间不存在连接.神经网络的信息处理功能由神经元来实现,每个神经元的特征由 3 个要素来描述,即激励函数、权重和阈值.激励函数用来描述每个节点的输出特性;权重用来描述每两个节点间的连接强度;阈值可视为特殊的连接权.小波神经网络与 BP 神经网络的区别在于激活函数不是 Sigmoid 非线性函数,而是小波基函数。

设小波神经网络的输入层、隐含层、输出层神经元的个数分别为 $m, n, 1$,对于给定的样本集 $\{(X_i, Y_i)\}, i = 1, 2, \dots, N$, 其神经网络输出结果可由下式表示:

$$y = U \cdot \left(\sum_{j=1}^n \omega_{1j} \psi_{a,b} \left(\sum_{k=1}^m \omega_{jk} x_k \right) \right), \quad (3)$$

误差函数为

$$E(\mathbf{W}) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \|Y_i - d_i\|^2, \quad (4)$$

式中, x_k 为输入层的第 k 个样本; y 为输出值; $U \cdot ()$ 为隐含层到输出层的激励函数; $\psi_{a,b} \cdot ()$ 为小波基函数, 作为输入层到隐含层的激励函数; ω_{ij} 为连接输出层节点和隐含层节点 j 的权值; ω_{jk} 为连接隐含层节点 j 与输入层节点 k 的权值; \mathbf{W} 为网络中所有权值组成的向量, $\mathbf{W} \in R^l$; d_i 为网络输出向量。

1.3 模型训练

小波神经网络采用最速下降法求解, 训练目标是通过不断修正权值 \mathbf{W} 和阈值使误差 $E(\mathbf{W})$ 达到最小。权值和阈值的调整过程分为两个阶段: 第一阶段是从网络的输入层开始逐层向前计算, 每一层神经元状态只影响到下一层神经元的状态, 这是向前传播过程; 第二阶段是对权值和阈值的修正, 如果在输出层不能得到期望的输出信号, 则修改各层神经元的权值和阈值, 从网络的输出层开始逐层向后进行计算和修正, 这是反向传播过程。重复上述两个传播阶段, 直到收敛为止。

为了加快算法的收敛速度, 引入动量因子 α ($0 < \alpha < 1$), 连接隐含层节点 j 与输入层节点 k 的权向量迭代公式如下:

$$\omega_{jk}(t+1) = \omega_{jk}(t) - \eta \frac{\partial E}{\partial \omega_{jk}} + \alpha \Delta \omega_{jk}(t), \quad (5)$$

式中, η ($\eta > 0$) 为学习率。连接输出层节点和隐含层节点 j 的权值 ω_{ij} 、伸缩因子 a_j 、平滑因子 b_j 的迭代公式与式(5)类似。

2 小波神经网络模型建立

2.1 数据收集与处理

通过对已发表二氧化碳+水溶液体系 IFT 数据进行整理, 获得 1 677 组 IFT 实验数据^[3-5, 9-12, 18-28], 这些数据都是通过悬滴法测得, 实验参数范围如表 1 所示, 实验得到的 IFT 在 4.12~74.80 mN/m 之间。对于二氧化碳+水溶液体系, 二氧化碳中含有氮气或者甲烷, 水溶液中含有一种或几种溶质: NaCl, KCl, Na₂SO₄, MgCl₂ 和 CaCl₂。Li 等^[12]研究表明, 阳离子对二氧化碳+水溶液体系 IFT 的影响主要依赖其阳离子化合价, 化合价相同的阳离子对气水 IFT 影响几乎相同。因此, 本文通过一价阳离子 (Na⁺, K⁺) 和二价阳离子 (Ca²⁺, Mg²⁺) 浓度表征水溶液的类型及矿化度。对于纯水溶液, 其阳离子浓度设为 0。

表 1 小波神经网络模型输入参数范围表

Table 1 The range of input parameters used to develop the WNN model

parameter	pressure	temperature	gas composition C_G /%		cation molality C_C / (mol/kg)	
	p / MPa	T / K	N ₂	CH ₄	Na ⁺ and K ⁺	Ca ²⁺ and Mg ²⁺
max. value	60.05	175.00	75.03	80.00	4.95	5.00
min. value	0.04	5.25	0.00	0.00	0.00	0.00

为了拓宽神经网络输出的增长空间, 提高模型精度, 对原始数据进行归一化处理使其在 [0.05, 0.95] 范围内, 归一化公式如下:

$$P_n = \frac{0.9(P - P_{\min})}{P_{\max} - P_{\min}} + 0.05, \quad (6)$$

式中, P, P_n 为归一化前、后的变量值; P_{\max}, P_{\min} 为所有变量 P 的最大、最小值。

Liu 等^[29] 研究表明, 选择合适的自变量对建立正确的人工神经网络模型至关重要, 若所选的自变量与因变量之间相关度不高甚至不相关, 将影响模型分析及精度。利用逐步回归分析法对自变量进行选择^[30], 主要原理是在全部自变量中按其对因变量的显著程度, 由大到小地逐个引入回归方程, 同时已被引入回归方程的变量在引入新的自变量后若失去重要性, 则需要从回归方程中剔除出去, 以保证在引入新变量前回归方程中只含有对因变量影响显著的自变量, 而不显著的自变量已被剔除。利用 MATLAB 中的 Stepwise 工具箱对样本数据中的压力, 温度, 二氧化碳中甲烷、氮气含量, 水溶液中一价阳离子浓度、二价阳离子浓度 6 个参数进行逐步分析, 最终没有参数被剔除, 利用样本数据中的 6 个参数作为自变量, 建立气水界面张力预测模型。

2.2 模型建立

利用 MATLAB 构建小波神经网络模型预测二氧化碳+水溶液体系的 IFT 步骤如下:

步骤 1 样本数据归一化处理。利用式(6)将所有样本数据进行归一化处理。

步骤 2 样本选择及分类。将统计得到的 1 677 组 IFT 实验数据随机分为训练样本和测试样本。首先搜索每个自变量和因变量对应的最大、最小值, 最大、最小值所在的每一组参数都被选作训练样本, 保证训练样本包含的参数范围达到最大, 然后再随机选取其他的样本作为训练样本, 训练样本选取完成后, 剩余的样本作为测试样本。训练样本用于训练网络, 得到小波神经网络结构; 测试样本用于测试、检验小波神经网络的预测精度。

步骤 3 选择传递函数。隐含层激励函数利用 Morlet 小波^[31], 输出层激励函数为线性函数 (purelin)。

步骤 4 网络初始化。引入训练样本数据, 随机初始化小波函数伸缩因子 $a = \text{randn}(1, n)$; 平移因子 $b = \text{randn}(1, n)$; 网络连接权重 $\omega_{ij} = \text{zeros}(1, M)$, $\omega_{jk} = \text{zeros}(M, n)$; 设置网络学习速率 $\eta = 0.01$, 其中, M 表示隐含层神经元个数。

步骤 5 模型建立。模型建立和完善的实质为引入训练样本进行训练, 最终得到精度最高的模型。模型训练过程即为权值和阈值的优化过程, 由两部分组成, 具体过程如 1.3 小节所述。利用 MATLAB 中的 Net 函数工具箱对模型进行训练, 在训练过程中, 隐含层数目无法进行自动优化, 本文通过编写迭代程序, 采用试算法优化隐含层神经元的数目^[32]: 具体实施过程为隐含层神经元数目从 10 变化到 30, 步长为 1, 训练 20 次, 最终保留训练误差最小的神经网络模型。

步骤 6 测试样本检验模型精度。引入测试样本, 利用训练样本得到的小波神经网络模型对测试样本进行预测, 输出二氧化碳+水溶液体系的 IFT 实际测量值与预测值对比图。

2.3 模型评价

利用平均绝对误差、平均相对误差、方差和相关度 4 个指标对小波神经网络模型精度进行检验, 指标公式如下:

$$M_{\text{MAE}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\tau_i^{\text{mea}} - \tau_i^{\text{cal}}|, \quad (7)$$

$$M_{\text{MARE}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\left| \frac{\tau_i^{\text{mea}} - \tau_i^{\text{cal}}}{\tau_i^{\text{mea}}} \right| \times 100\% \right), \quad (8)$$

$$M_{\text{MSE}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\tau_i^{\text{mea}} - \tau_i^{\text{cal}})^2, \quad (9)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (\tau_i^{\text{mea}} \tau_i^{\text{cal}} - N \tau_{\text{average}}^{\text{mea}} \tau_{\text{average}}^{\text{cal}})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N ((\tau_i^{\text{mea}})^2 - (\tau_{\text{average}}^{\text{mea}})^2) \sum_{i=1}^N ((\tau_i^{\text{cal}})^2 - (\tau_{\text{average}}^{\text{cal}})^2)}}, \quad (10)$$

其中, τ^{mea} , τ^{cal} 分别表示气水 IFT 的实验值和计算值; N 表示数据点个数; $\tau_{\text{average}}^{\text{mea}}$, $\tau_{\text{average}}^{\text{cal}}$ 表示气水 IFT 实验平均值、计算平均值。

3 结果及分析

3.1 网络训练结果

分别选取样本总数的 1/3, 1/2, 2/3 作为训练样本, 进行小波神经网络训练, 所对应的小波神经网络模型分别记为模型 1、模型 2、模型 3。3 个模型训练 20 次的最小平均绝对误差随隐含层神经元数目的变化如图 2 所示。由图可知, 同一训练样本数目下, 训练样本的 M_{MAE} 随隐含层神经元数目呈波动式变化, 隐含层神经元数目存在一个最优值, 使得 M_{MAE} 最小; 3 个模型所对应的最小 M_{MAE} 分别为 0.82, 0.86, 0.86, 最优隐含层神经元数目分别为 14, 16, 16, 因此训练得到的 3 个模型的结构分别为 6-14-1, 6-16-1, 6-16-1。

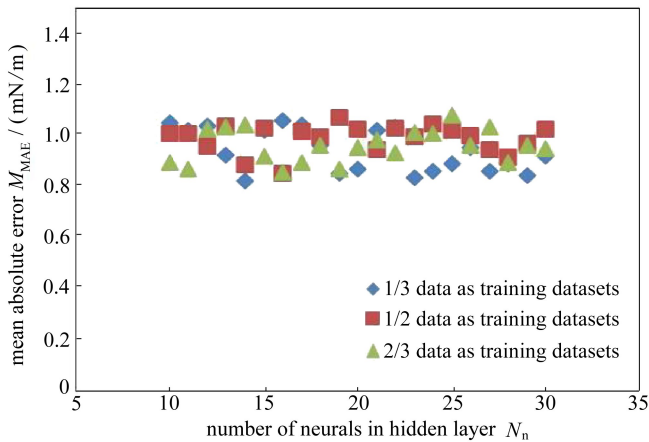


图 2 最小平均误差随隐含层神经元数目变化曲线

Fig. 2 The minimal M_{MAE} value vs. the number of the neurons in the hidden layer

3.2 模型评价效果

利用 3.1 小节训练得到的 3 个小波神经网络模型对测试样本 IFT 进行预测, IFT 预测值与实验值对比曲线如图 3 所示。由图可知, 3 个小波神经网络模型计算得到的 IFT 值与实验 IFT 值都分布在 45° 直线附近, 模型 1 得到的数据点分布范围比较宽, 说明模型 1 对测试样本的预测精度比模型 2、模型 3 要低。3 个模型对相应的测试样本预测精度如表 2 所示, 由表 2 可知, 模型 1 各项预测精度指标都劣于模型 2、模型 3。模型 2 和模型 3 具有较高预测精度, 并且两者的预测精度相差不大。这说明当训练样本数目较少时, 会导致神经元之间训练不充分, 模型预测精度不高; 模型 2 和模型 3 对比表明, 当训练样本数目达到一定数量后, 增加训练样本数, 模型的预测精度不再增大。因此本文选用模型 2 与已有的 IFT 预测模型进行对比, 详见 3.3 小节。

表2 不同小波模型预测误差统计分析

Table 2 Statistical results of different wavelet models

	$M_{MAE} / (\text{mN/m})$	$M_{MARE} / \%$	$M_{MSE} / (\text{mN}^2/\text{m}^2)$	R^2
model 1	1.60	4.40	4.13	0.977
model 2	1.23	3.30	2.30	0.988
model 3	1.23	3.28	2.28	0.988

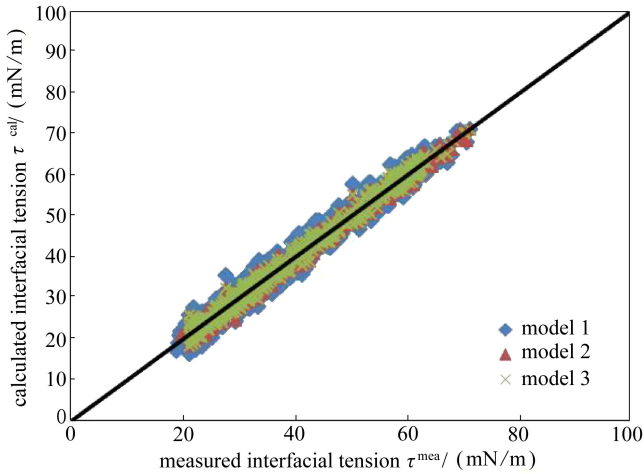


图3 测试样本实验值与预测值对比图

Fig. 3 Comparison between the calculated IFT and the experimental data for prediction datasets

3.3 模型对比分析

已发表的实验数据表明,二氧化碳+水溶液体系 IFT 受温度,压力,气体中甲烷、氮气含量,水溶液中一价阳离子浓度、二价阳离子浓度的影响,Zhang 等^[1]、Li 等^[12]提出的方法全面考虑了上述因素建立了二氧化碳+水溶液体系 IFT 预测模型,比其他经验公式模型考虑因素更加全面.为了进一步检验小波神经网络模型的精度,本文对比了 Li 方法^[12]、BP 神经网络法、小波神经网络法 3 种方法的预测精度,结果如图 4 所示.可以看出 Li 方法得到的数据点在 45° 直线附近分布范围较广,说明其预测精度较差,这是由于 Li 方法的本质为多项式拟合,预测精度受到多项式拟合方法本身的影响;BP 神经网络法与小波神经网络法相比,预测精度相近,BP 神经网络法对某些数据点的预测误差较大,这可能是 BP 神经网络隐含层激励函数为 Sigmoid 函数,易陷入局部最优解,导致 BP 神经网络模型对某些点的预测精度较差.

表 3 为 3 种模型预测精度指标,可以看出,小波神经网络模型的 4 项预测指标均优于 Li 方法^[12]和 BP 神经网络模型,能够更精确地对二氧化碳+水溶液体系 IFT 进行预测.

表3 不同模型预测误差统计分析

Table 3 Statistical results of different prediction models

	$M_{MAE} / (\text{mN/m})$	$M_{MARE} / \%$	$M_{MSE} / (\text{mN}^2/\text{m}^2)$	R^2
Li et al. ^[12]	2.84	8.02	12.41	0.756
BP-neural network	1.28	3.34	3.14	0.875
WNN	1.23	3.30	2.30	0.988

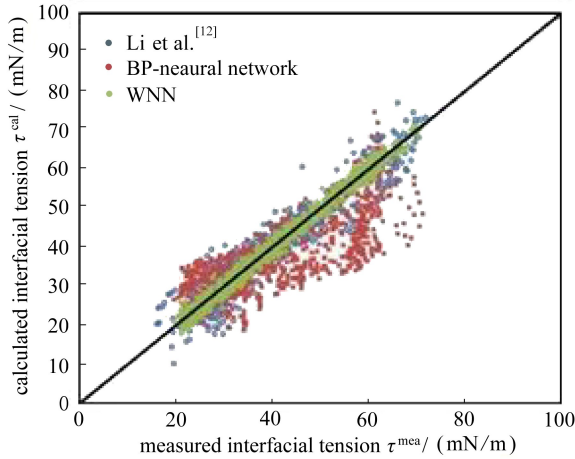


图4 不同模型 IFT 预测结果对比图

Fig. 4 Comparison between the calculated IFT and the experimental data for prediction datasets

4 结 论

1) 将神经网络技术和小波变换函数相结合,建立了小波神经网络模型预测二氧化碳+水溶液体系 IFT,该模型可以考虑压力,温度,二氧化碳中甲烷、氮气含量,水溶液中一价阳离子(Na^+ , K^+)浓度、二价阳离子(Ca^{2+} , Mg^{2+})浓度 6 个因素对 IFT 的影响。

2) 随机选取 839 组样本作为训练样本,训练得到的小波神经网络模型结构为 6-16-1。

3) 小波神经网络模型、BP 神经网络模型、多元拟合模型预测二氧化碳+水溶液体系的 IFT 的模型相关度分别为 0.988, 0.875, 0.756。小波神经网络模型自身具有算法优势,与多元拟合模型相比,预测精度大幅提高;同时小波神经网络模型能克服 BP 网络模型局部最优的问题,避免了局部预测误差较大的问题,预测精度比 BP 网络模型高。

4) 小波神经网络模型以现有的实验数据为基础对 IFT 进行预测,进一步提高实验精度、增加样本数量,可提高模型的预测精度和适用范围。

参考文献(References):

- [1] ZHANG Ji-yuan, FENG Qi-hong, WANG Shu-hua, et al. Estimation of CO_2 -brine interfacial tension using an artificial neural network[J]. *The Journal of Supercritical Fluids*, 2016, **107** (1): 31-37.
- [2] 余迎松. 液气界面张力垂直分量引起的基底弹性变形[J]. 应用数学和力学, 2012, **33**(9): 1025-1042. (YU Yin-song. Substrate elastic deformation due to vertical component of liquid-vapor interfacial tension[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2012, **33**(9): 1025-1042. (in Chinese))
- [3] Hebach A, Oberhof A, Dahmen N, et al. Interfacial tension at elevated pressures—measurements and correlations in the water+carbon dioxide system[J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2002, **47**(6): 1540-1546.
- [4] Chalbaud C, Robin M, Lombard J-M, et al. Interfacial tension measurements and wettability evaluation for geological CO_2 storage[J]. *Advances in Water Resources*, 2009, **32**(1): 98-109.
- [5] Aggelopoulos C A, Robin M, Vizika O. Interfacial tension between CO_2 and brine ($\text{NaCl}+$

- CaCl₂) at elevated pressures and temperatures: the additive effect of different salts[J]. *Advances in Water Resources*, 2011, **34**(4): 505-511.
- [6] Massoudi R, King Jr A D. Effect of pressure on the surface tension of water. Adsorption of low molecular weight gases on water at 25°[J]. *The Journal of Physical Chemistry*, 1974, **78**(22): 2262-2266.
- [7] Chun B S, Wilkinson G T. Interfacial tension in high-pressure carbon dioxide mixtures[J]. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 1995, **34**(12): 4371-4377.
- [8] Wesch A, Dahmen N, Ebert K, et al. Grenzflächenspannungen, tropfengrößen und kontaktwinkel im zweiphasensystem H₂O/CO₂ bei temperaturen von 298 bis 333 K und drücken bis 30 MPa[J]. *Chemie Ingenieur Technik*, 1997, **69**(7): 942-946.
- [9] Bennion D B, Bachu S. Correlations for the interfacial tension between supercritical phase CO₂ and equilibrium brines at in situ conditions[C]//*SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Colorado, USA, 2008: 1-13.
- [10] Georgiadis A, Maitland G, Trusler J P M, et al. Interfacial tension measurements of the (H₂O +CO₂) system at elevated pressures and temperatures[J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2010, **55**(10): 4168-4175.
- [11] LI Xue-song, Boek E, Maitland G C, et al. Interfacial tension of (brines+CO₂): (0.864 NaCl +0.136 KCl) at temperatures between (298 and 448) K, pressures between (2 and 50) MPa, and total molalities of (1 to 5) mol·kg⁻¹ [J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2012, **57**(4): 1078-1088.
- [12] LI Zhao-min, WANG Shu-hua, LI Song-yan, et al. Accurate determination of the CO₂-brine interfacial tension using graphical alternating conditional expectation [J]. *Energy & Fuels*, 2013, **28**(1): 624-635.
- [13] 任双双, 杨胜来, 沈飞. BP 神经网络预测最小混相压力[J]. 断块油气田, 2010, **17**(2): 216-218.(REN Shuang-shuang, YANG Sheng-lai, SHEN Fei. Prediction minimum miscibility pressure with BP neural network[J]. *Fault-Block Oil & Gas Field*, 2010, **17**(2): 216-218.(in Chinese))
- [14] 韩晋, 杨岳, 陈峰, 等. 基于非等时距加权灰色模型与神经网络的组合预测算法[J]. 应用数学和力学, 2013, **34**(4): 408-419.(HAN Jin, YANG Yue, CHEN Feng, et al. Combination forecasting algorithm based on non-equal interval weighted grey model and neural network[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2013, **34**(4): 408-419.(in Chinese))
- [15] 盛仲飙, 同晓荣. BP 神经网络在曲线拟合中的应用[J]. 科学技术与工程, 2011, **11**(28): 6998-7000.(SHENG Zhong-biao, TONG Xiao-rong. The application of BP neural network in curve fitting[J]. *Science Technology and Engineering*, 2011, **11**(28): 6998-7000.(in Chinese))
- [16] 黄海萍. 基于 BP 神经网络的中国电力需求预测[J]. 科学技术与工程, 2007, **7**(4): 612-616.(HUANG Hai-ping. Combination estimate for electric demand of China[J]. *Science Technology and Engineering*, 2007, **7**(4): 612-616.(in Chinese))
- [17] 曹成涛, 崔凤, 林晓辉. 基于神经网络的交通状态模糊判别方法[J]. 科学技术与工程, 2010, **10**(21): 5195-5199.(CAO Cheng-tao, CUI Feng, LIN Xiao-hui. Traffic condition fuzzy recognition based on neural network[J]. *Science Technology and Engineering*, 2010, **10**(21): 5195-5199.(in Chinese))
- [18] REN Quan-yuan, CHEN Guang-jin, YAN Wei, et al. Interfacial tension of (CO₂+CH₄)+water from 298 K to 373 K and pressures up to 30 MPa[J]. *Journal of Chemical & Engineering Da-*

- ta, 2000, **45**(4): 610-612.
- [19] YAN Wei, ZHAO Guo-ying, CHEN Guang-jin, et al. Interfacial tension of (methane+nitrogen)+water and (carbon dioxide+nitrogen)+water systems[J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2001, **46**(6): 1544-1548.
- [20] Hebach A, Oberhof A, Dahmen N, et al. Interfacial tension at elevated pressures measurements and correlations in the water+carbon dioxide system[J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2002, **47**(6): 1540-1546.
- [21] Chiquet P, Daridon J L, Broseta D, et al. CO₂/water interfacial tensions under pressure and temperature conditions of CO₂ geological storage[J]. *Energy Conversion and Management*, 2007, **48**(3): 736-744.
- [22] Bachu S, Bennion D B. Interfacial tension between CO₂, freshwater, and brine in the range of pressure from (2 to 27) MPa, temperature from (20 to 125) °C, and water salinity from (0 to 334 000) mg·L⁻¹[J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2008, **54**(3): 765-775.
- [23] Bachu S, Bennion D B. Dependence of CO₂-brine interfacial tension on aquifer pressure, temperature and water salinity[J]. *Energy Procedia*, 2009, **1**(1): 3157-3164.
- [24] Chalbaud C A, Robin M, Egermann P. Interfacial tension data and correlations of brine-CO₂ systems under reservoir conditions[C]//*SPE Annual Technical Conference and Exhibition*. Texas, USA, 2006: 1-18.
- [25] Aggelopoulos C A, Robin M, Perfetti E, et al. CO₂/CaCl₂ solution interfacial tensions under CO₂ geological storage conditions; influence of cation valence on interfacial tension[J]. *Advances in Water Resources*, 2010, **33**(6): 691-697.
- [26] Bikkina P K, Shoham O, Uppaluri R. Equilibrated interfacial tension data of the CO₂-water system at high pressures and moderate temperatures[J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2011, **56**(10): 3725-3733.
- [27] LI Xue-song, Boek E S, Maitland G C, et al. Interfacial tension of (brines+CO₂): CaCl₂(aq), MgCl₂(aq), and Na₂SO₄(aq) at temperatures between (343 and 423) K, pressures between (2 and 50) MPa, and molalities of (0.5 to 5) mol·kg⁻¹[J]. *Journal of Chemical & Engineering Data*, 2012, **57**(5): 1369-1375.
- [28] Kvamme B, Kuznetsova T, Hebach A, et al. Measurements and modelling of interfacial tension for water+carbon dioxide systems at elevated pressures[J]. *Computational Materials Science*, 2007, **38**(3): 506-513.
- [29] LIU Hui, TIAN Hong-qi, LI Yan-feng, et al. Comparison of four Adaboost algorithm based artificial neural networks in wind speed predictions[J]. *Energy Conversion and Management*, 2015, **92**(1): 67-81.
- [30] 叶峰. 运用 MATLAB 软件进行回归分析建模[J]. 成都航空职业技术学院学报, 2007, **23**(2): 44-47. (YE Feng. Multiple regression modeling by using MATLAB software[J]. *Journal of Chengdu Aeronautic Vocational and Technical College*, 2007, **23**(2): 44-47. (in Chinese))
- [31] 周荣义, 李树清, 牛会永. 小波神经网络在矿井安全管理评价中的应用[J]. 煤炭科学技术, 2006, **34**(5): 67-70. (ZHOU Rong-yi, LI Shu-qing, NIU Hui-yong. Application of wavelet neural network in mine safety management assessment[J]. *Coal Science and Technology*, 2006, **34**(5): 67-70. (in Chinese))
- [32] Jung S, Kwon S D. Weighted error functions in artificial neural networks for improved wind energy potential estimation[J]. *Applied Energy*, 2013, **111**: 778-790.

Prediction of Interfacial Tension Between CO₂ and Brine With the Wavelet Neural Network Method

JIANG An^{1,2}, LIU Ping-li², LI Nian-yin², ZHANG Yun-fei¹, DU Xin-wei³

(1. CNOOC EnerTech-Drilling & Production Co., Tianjin 300452, P.R.China;

2. Southwest Petroleum University, Chengdu 610500, P.R.China;

3. West-East Gas Pipeline Company of CNPC, Changzhou, Jiangshu 213251, P.R.China)

Abstract: Interfacial tension (IFT) between CO₂ and formation water is one of the most important parameters for CO₂ capture and storage, for it controls the transport properties of both phases in the formation. In order to rapidly and accurately predict the IFT of the CO₂-brine system, 1 677 sets of measured IFT data from previous studies were acquired. A wavelet neural network (WNN) prediction model was proposed in view of 6 parameters including the pressure, the temperature, the CH₄ molality and the N₂ molality in CO₂ gas, the monovalent cation (Na⁺ and K⁺) concentration and the bivalent cation (Ca²⁺ and Mg²⁺) concentration. The simulation results show that a 3-layer (6-16-1) WNN model comes out of 839 data as the training datasets. The mean absolute error (M_{MAE}), the mean relative error (M_{MARE}), the root mean squared error (M_{MSE}) and the determination coefficient (R^2) of the WNN model were 1.23 mN/m, 3.30%, 2.30 mN²/m² and 0.988, respectively. The performance of the WNN model was further compared with one newly proposed multivariate fitting model and the BP neural network model. The comparison results suggest that the WNN model is better than the other 2.

Key words: wavelet neural network; interfacial tension; CO₂-brine system

Foundation item: The National Natural Science Foundation of China (General Program) (51574197)

引用本文/Cite this paper:

江安, 刘平礼, 李年银, 张云飞, 杜新伟. 小波神经网络模型预测二氧化碳+水溶液体系界面张力[J]. 应用数学和力学, 2017, **38**(10): 1136-1145.

JIANG An, LIU Ping-li, LI Nian-yin, ZHANG Yun-fei, DU Xin-wei. Prediction of interfacial tension between CO₂ and brine with the wavelet neural network method[J]. *Applied Mathematics and Mechanics*, 2017, **38**(10): 1136-1145.