Streszczenie Rozprawy Doktorskiej

Jeremiasz Pilarz

Teoretyczne metody przewidywania prędkości ultradźwięków warunkach zwiększonego ciśnienia i temperatury w wybranych cieczach jonowych

Celem niniejszej dysertacji było wykazanie, że cztery metody obliczeniowe, oparte na różnych podstawach teoretycznych, mogą być skutecznie wykorzystane do prognozowania istotnych z punktu widzenia termodynamiki fazy skondensowanej parametrów, takich jak prędkość dźwięku oraz gęstość, w szerokim zakresie zmienności temperatury i ciśnienia dla wybranych cieczy jonowych. Analizowane w pracy podejścia obliczeniowe, obejmujące metodę spinodalną, równanie stanu CP-PC-SAFT oraz sieci neuronowe wraz z metodami klasycznego uczenia maszynowego, umożliwiły uzyskanie precyzyjnych predykcji powyższych wielkości, przy uwzględnieniu zarówno potencjalnych ograniczeń, jak i korzyści związanych z każdą z użytych metod. W badaniach zostały uwzględnione różnorodne aspekty, takie jak stabilność numeryczna, złożoność obliczeniowa oraz zdolność do uwzględnienia nieliniowych efektów.

Rozprawa została podzielona na cztery główne części: wstęp, część literaturową, część obliczeniową oraz część podsumowania. W części literaturowej dokonano analizy aktualnego stanu wiedzy o cieczach jonowych, ich zastosowań przemysłowych oraz aspektów fizykochemicznych. Omówiono także znaczenie badań fizykochemicznych ze szczególnym naciskiem na prędkość propagacji dźwięku w cieczach jonowych, włączając w to dyskusję o wpływie struktury cieczy na prędkość dźwięku.

W części obliczeniowej przedstawiono cztery odmienne w podstawach teoretycznych podejścia do przewidywania prędkości dźwięku oraz gęstości w szerokim zakresie zmienności ciśnienia i temperatury, stosując metodę spinodalną, równanie stanu CP-PC-SAFT, sieci neuronowe oraz szereg metod klasycznego uczenia maszynowego. Każda z tych metod została szczegółowo opisana, wraz z identyfikacją jej zalet i ograniczeń. W dalszej kolejności przedstawiono wyniki predykcji prędkości dźwięku i gęstości dla badanych cieczy jonowych, wraz z analizą uzyskanych rezultatów.

Dodatkowo, w części poświęconej metodom obliczeniowym wyznaczono oraz dokonano analizy pochodnych termodynamicznych, ze szczególnym uwzględnieniem współczynnika izobarycznej rozszerzalności termicznej. Wykazano, że podczas wyznaczania prędkości dźwięku i gęstości za pomocą sieci neuronowej oraz metod klasycznego uczenia maszynowego można osiągnąć bardzo wysoką dokładność predykcji. Jednakże, wyniki pochodnych termodynamicznych, otrzymanych z tych metod, obarczone są istotnym błędem wynikającym z samych założeń stosowanych w metodach uczenia maszynowego i sieci neuronowych.

Ponadto, w pracy wykazano, że dalsze badania termodynamiczne z użyciem sieci neuronowych i uczenia maszynowego powinny być kontynuowane, a modele predykcyjne stale ulepszane. Zaproponowano, aby w badaniach z użyciem NN/ML szczególny nacisk położono na określenie i przewidywanie warunków termodynamicznych w połączeniu ze strukturą cieczy i innymi jej właściwościami jak np. lepkość, gdzie rozważana ciecz będzie wykazywać niepożądane zjawiska wpływające negatywnie na prędkość dźwięku, takie jak absorpcja fali akustycznej, relaksacja ultradźwiękowa oraz dyspersja prędkości fal akustycznych.