

网站地图 (<http://www.imech.cas.cn/serv/wzdt/>) |

联系我们 (http://www.imech.cas.cn/serv/lxfs/201212/t20121205_3698646.html) |

所内网 (<http://www.imech.cas.cn/serv/szxx/>) | 所内网 (<https://ioa.imech.ac.cn>) |



<http://english.imech.cas.cn/> | 中国科学院力学研究所
Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences

(<http://www.imech.cas.cn/>)

Search



当前位置: [首页](#) (../..../)>> [新闻动态](#) (../..../)>> [科研进展](#) (../..../)

力学所在干酪根结构的机器学习研究中取得进展

作者: 黄先富 2021-01-06 08:49

[【放大 缩小】](#)

干酪根是页岩油气的主要母质, 其分子模型构建及熟化机理是油气勘探开发的理论基础。力学所赵亚溥研究团队前期针对珍贵的深部页岩样品, 基于大量实验及计算, 构建了目前国际最大的干酪根分子群, 建立了干酪根的时间 - 温度 - 成熟度关系 [Global Challenges 3, 1900006 (2019); Fuel 278, 118264 (2020)]。由于干酪根具有分子量大、官能团多样等特点, 导致干酪根结构模型重构中存在“组合爆炸”难题, 理论存在的干酪根构型数目是一个远大于 $5^{n/4}$ 的天文数字 (n 为碳原子数)。传统构建方法通过大量实验和试错探索合理构型, 效率极低, 这严重限制了干酪根化学 - 力学性质的进一步研究进展。

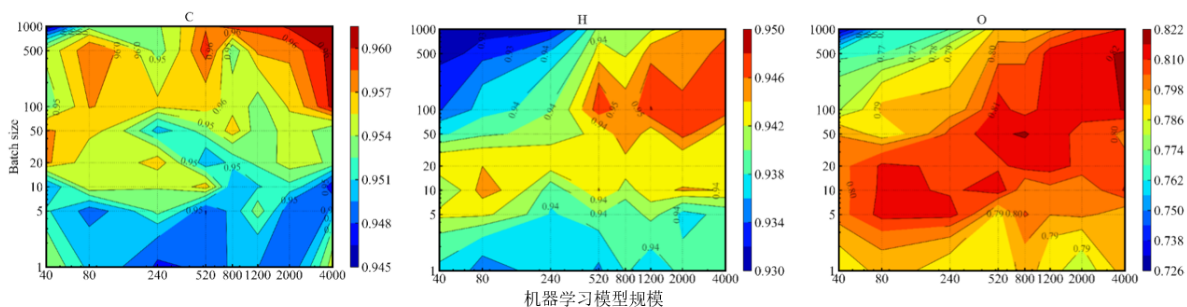
近期, 赵亚溥团队首次采用机器学习结合实验数据的方法预测干酪根组分及其结构特征。在课题组前期分子结构研究的基础上, 研究人员结合深部页岩干酪根实验数据, 构建了超过 10 万组可靠样本库, 为通过机器学习方法智能化构建干酪根模型提供了数据保障。经训练的机器学习模型对干酪根骨架结构预测准确度达到 96.1% (图 1), 对干酪根类型特征的预测准确度约为 90% (图 2)。此外, 采用机器学习方法预测干酪根成熟度也非常准确。

以上研究表明机器学习方法在干酪根组分预测和特征分析中性能十分优异, 为智能化高通量建立我国干酪根分子样本库及化 - 力性质分析平台奠定了坚实基础。

相关成果以 “Predicting the components and types of kerogen in shale by combining machine learning with NMR spectra” 为题发表在国际能源领域主流学术期刊 Fuel, (Kang DL, Wang XH, Zheng XJ, and Zhao YP*. Fuel, 2021, 290: 120006.

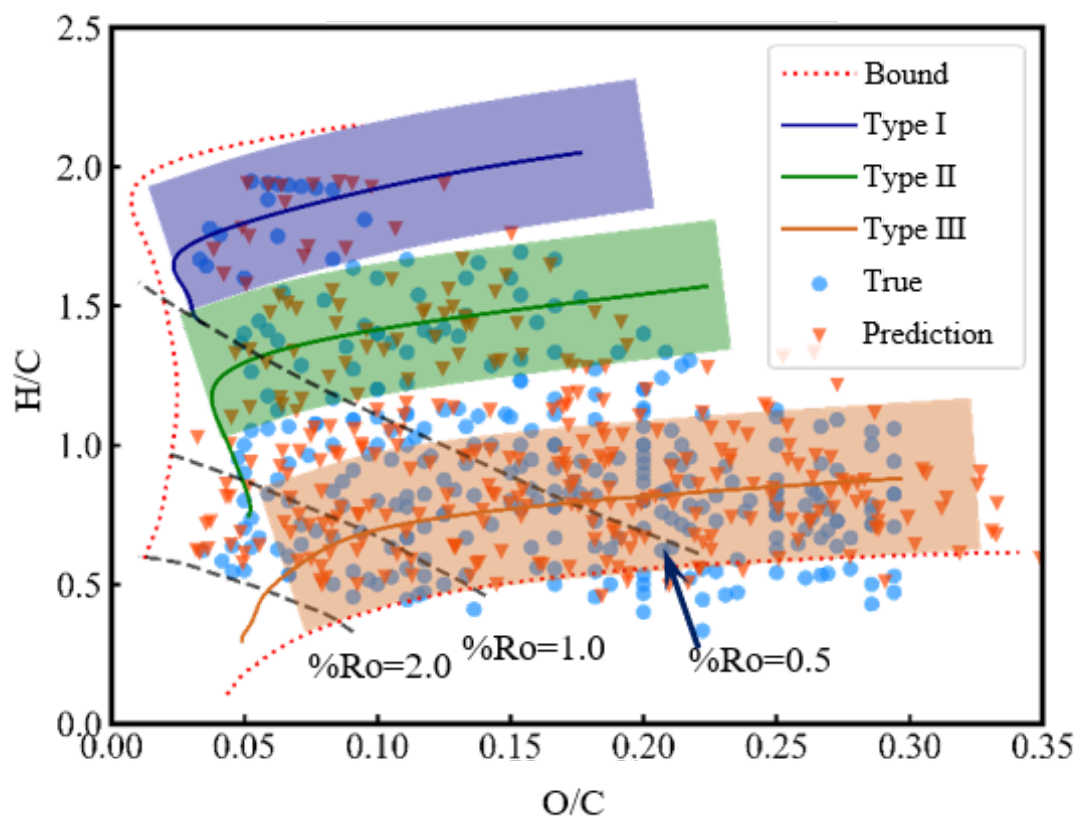
<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.120006>

(<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2020.120006>)。本研究得到国家自然科学基金重点项目(12032019)和中国科学院前沿重点研究计划(QYZDJ-SSW-JSC019)等项目的支持。



(./W020210106319059181609.png)

图1 机器学习方法预测干酪根组分



(./W020210106319059326150.png)

图2 机器学习方法预测干酪根类型



中国科学院 (http://www.cas.cn)
CHINESE ACADEMY OF SCIENCES

中国科学院力学研究所 版权所有 京ICP备05002803号 京公网安备110402500049

地址：北京市北四环西路15号 邮编：100190

(<http://bszs.conac.cn/sitename?method=show&id=081D2D6355AD574EE053022819ACCBA7>)

