研究论文

DOI：10.11949/0438-1157.

基于剩余熵标度的中低密度气体黏度通用预测模型

李卓[1,2]，段远源[2]，彭夏尧[2]，徐柳[3]，张凯[1]

（[1] 中国运载火箭技术研究院，北京 100076；[2] 清华大学热科学与动力工程教育部重点实验室，北京 100084；[3] 中国计量科学研究院，北京 100029）

摘要： 气体黏度是表征动量输运能力的关键热物理性质。针对气相黏度预测中零密度极限约束不足和跨流体种类通用性不足等问题，本文建立了基于剩余熵标度的纯气体黏度预测模型。模型以Boyle标度碰撞积分计算稀薄气体黏度，采用通用三项截断维里方程计算剩余熵，并通过符号回归构建对数无量纲黏度与无量纲剩余熵的显式关联式。结果表明，模型可较好描述单原子、双原子及典型多原子气体黏度随温度和压力的变化规律，总体平均绝对相对偏差为1.80%，与流体黏度专用关联方程计算结果相当。该模型形式简单、计算便捷，适用于中低密度气相区域纯气体黏度的快速预测。

关键词： 气体黏度；剩余熵标度；稀薄气体；维里方程；符号回归

中图分类号： O 552.3+2；TK 121　　**文献标志码：** A

文章编号： 0438-1157（XXXX）XX-0001-16

A general prediction model for the viscosity of low- to moderate-density gases based on residual entropy scaling

LI Zhuo[1,2], DUAN Yuanyuan[2], PENG Xiayao[2], XU Liu[3], ZHANG Kai[1]

([1] *China Academy of Launch Vehicle Technology, Beijing* 100076, *China*; [2] *Key Laboratory for Thermal Science and Power Engineering of Ministry of Education, Tsinghua University, Beijing* 100084, *China*; [3] *National Institute of Metrology, Beijing* 100029, *China*)

Abstract: Gas viscosity is a key thermophysical property characterizing momentum transport. To address the inadequate zero-density-limit constraint and limited generalizability across different fluids in existing gas-viscosity predictions, a residual-entropy-scaling model for the viscosity of pure gases is developed. The dilute-gas viscosity is calculated using Boyle-scaled collision integrals, while the residual entropy is determined from a generalized virial equation of state truncated after the third virial coefficient. Symbolic regression is then employed to establish an explicit correlation between the logarithmic dimensionless viscosity and the dimensionless residual entropy. The results show that the model accurately describes the temperature and pressure dependence of the viscosities of monatomic, diatomic, and representative polyatomic gases, with an overall average absolute relative deviation of 1.80%, comparable to that of fluid-specific viscosity correlations. Owing to its simple form and computational convenience, the model is suitable for the rapid prediction of pure-gas viscosity in low- and moderate-density gas-phase regions.

收稿日期： 2026-07-29　　**修回日期：** 2026-09-10

通信作者： 张凯(1986—)，男，博士，高级工程师，zhangkai156@126.com

第一作者： 李卓(1999—)，男，博士研究生，liz21@mails.tsinghua.edu.cn

基金项目： 国家自然科学基金项目(52276169)；北京市自然科学基金项目(3254055)

引用本文： 李卓, 段远源, 彭夏尧, 徐柳, 张凯. 基于剩余熵标度的中低密度气体黏度通用预测模型[J]. 化工学报, XXXX, XX(XX): 1-16

Citation: LI Zhuo, DUAN Yuanyuan, PENG Xiayao, XU Liu, ZHANG Kai. A general prediction model for the viscosity of low- to moderate-density gases based on residual entropy scaling[J]. CIESC Journal, XXXX, XX(XX): 1-16

Keywords: gas viscosity; residual entropy scaling; dilute gas; Virial equation; symbolic regression

引 言

黏度是表征流体动量输运能力的基本热物理性质[1]。在航空航天、能源动力、天然气开发以及煤气化等化工过程中，所涉及的流体常处于密度不高的常压至中压范围，在温度较高时部分高压工况也处于中低密度状态，因此准确预测中低密度下的气体黏度具有重要工程意义和实际需求。

在极低密度条件下，气体黏度主要由分子两体碰撞决定，仅为温度的函数；随着压力升高，分子间多体相互作用增强，黏度开始表现出明显的密度和压力相关性。现有气体黏度预测方法主要包括经验关联模型和半理论模型。在零密度极限下，基于气体动理论的半理论模型通常以Chapman－Enskog理论为基础，从分子间相互作用出发计算稀薄气体黏度，微观物理基础明确[2-3]；经验关联模型利用实验数据拟合黏度随温度和密度的变化关系，能够对数据充分的气体实现高精度描述，相关模型已集成于REFPROP等热物性计算软件中[4-5]；半理论模型则基于一定的理论（如扩展对比态原理[6-7]）描述黏度变化规律，在实验数据有限时具有较好的工程适用性。国内学者也围绕气体黏度预测开展了大量研究：马沛生等[8]对气体常压黏度数据进行了系统评定并建立了温度关联式；王利生和郭天民[9]将状态方程与黏度模型相结合，发展了适用于油气藏流体的统一黏度模型；刘志刚等[10]系统评价并改进了Reichenberg、Chung、Lucas和Golubev等低压纯气体黏度估算方法；王巍等[11]采用温度－压力二元回归方法建立了天然气纯组分黏度快速预测模型。这些研究推动了气体黏度的工程预测，但专用经验关联式通常依赖大量实验数据和拟合参数，现有通用半理论方法预测精度和复杂分子适用性仍有不足；分子动力学模拟和从头算方法物理机理明晰，但计算成本较高、适用流体种类有限，尚难满足快速准确计算需求。如何减少实验数据依赖的同时兼顾预测精度和通用性，是中低密度气体黏度建模需要解决的问题。

剩余熵标度为描述输运性质变化规律提供了新方法。剩余熵反映真实流体相对于同温同密度理想气体的熵差，能够定量描述分子间相互作用引起的微观有序度变化。Rosenfeld[12-13]发现，经过适当无量纲化后，模型流体的约化输运性质与剩余熵之间存在近似单值关系，使输运性质的建模维度和难度得以降低。对于中低密度实际流体的剩余熵标度模型，作为参考的零密度极限输运性质的处理尤为关键。Novak[14-18]采用同温度下的稀薄气体黏度作为参考量，使无量纲黏度在零密度极限下自然趋于1。此后，相关方法已被用于惰性气体、天然气、制冷剂及其它工业流体的黏度预测[19-24]。然而，已有剩余熵标度模型大多针对某种流体或某类特定流体建立，且包含物质专用拟合参数，缺少能够统一处理多类中低密度气体的显式通用预测模型。

建立中低密度气体黏度通用模型需要解决零密度极限基准和有限密度修正问题。零密度极限下，分子间多体相互作用可以忽略，动量输运主要由分子对碰撞决定，这种仅考虑两体相互作用的气体也被称为稀薄气体。随着密度升高，多体相互作用逐渐增强，可利用截断维里方程计算气体的剩余熵，并通过剩余熵标度描述由此引起的黏度变化。稀薄气体黏度、维里状态方程和剩余熵标度分别承担零密度基准、热力学状态描述和有限密度黏度修正的任务，共同构成中低密度气体黏度预测的物理框架。本文模型以通用维里系数预测模型和通用稀薄气体黏度模型为基础[25-29]。本文采用的第二、第三维里系数模型和Boyle标度稀薄气体黏度模型均以球形流体为基准，并根据分子结构和相互作用特征逐步引入非极性、极性、缔合及量子效应修正，从而在统一框架下结合合理的分类描述不同类型气体特性。

本文建立基于剩余熵标度的中低密度纯气体黏度通用预测模型。模型采用由通用第二维里系数获得的Boyle温度和Boyle长度标度碰撞积分，计算同温度下的稀薄气体黏度，从而确定真实气体黏度的零密度极限；采用第二、第三维里系数构成的三项截断维里方程计算气体密度和剩余熵。根据Rainwater－Friend理论，模型引入温度关联函数描述不同温度下的一阶剩余熵贡献，并采用高阶修正项表征密度升高后分子间多体相互作用引起的非线性黏度增量，进一步通过符号回归获得形式简洁的显式关联式。本文收集并筛选了10478个实验数据点，覆盖88种纯气体，用于模型建立和性能评价，并从不同流体类型和工况范围考察模型的预测能

力及适用边界。本文旨在形成一种物理边界正确、输入参数易得、计算形式简洁且具有跨流体通用性的中低密度气体黏度预测方法。

1 数据收集与筛选

1.1 气体分组

为保持不同模型之间的一致性，本文沿用稀薄气体黏度模型的分组方法[29]，综合考虑分子结构复杂性、烃类与否、静电力作用、缔合作用和量子效应，将所研究的纯气体划分为0～8共9个组别。该分组仅用于确定不同分子相互作用所对应的模型修正形式，并不针对单一流体引入专属黏度拟合参数。具体分组定义及代表气体见表1，本文涉及的全部气体及其基本物性参数见附表1。

表1 本文采用的气体分组定义

Table 1 Classification of fluid groups in this work

组序号	气体类型	代表气体
0	单原子	Ar、Kr、Xe
1	非极性双原子	N_2、O_2
2	非极性碳氢多原子	CH_4、C_2H_6、C_2H_4
3	非极性非碳氢多原子	CO_2、SF_6
4	极性碳氢多原子	C_3H_8、C_3H_6
5	弱极性非碳氢(μ<0.97 D)	N_2O、R11(CCl_3F)
6	强极性非碳氢(μ≥0.97 D)	H_2S、SO_2
7	缔合	NH_3、H_2O
8	量子	He、Ne、H_2

1.2 数据收集与筛选

本文所用纯气体黏度实验数据主要来源于ThermoData Engine(TDE)10.1数据库[30]，并补充整理了部分近年来新发表的实验数据。数据收集完成后，分两步筛选。首先，仅保留气相及远临界区低密度状态数据：对于亚临界温区，依据饱和边界判断数据点所处相区，剔除液相、两相区及相态无法可靠确定的数据；对于超临界温区，则要求压力小于临界压力。进一步地，基于本文计算剩余熵采用的三项截断维里方程适用性，可再次筛选：若截断维里方程无法获得合理的气相密度解，或其计算密度与REFPROP 10.0参考密度的相对偏差超过1%，则认为该状态点超出截断维里方程的适用范围并予以剔除[28]。

图1以乙烷为例，展示原始黏度数据及其筛选结果在温度－压力坐标中的分布。灰色点表示位于液相、两相区或超过临界压力而被剔除的数据；蓝色点表示处于气相但截断维里方程密度计算值与专用状态方程密度计算值的相对偏差超过1%的数据，这些数据主要集中在近临界区域；红色点表示最终保留的数据。相态筛选确定了本文的气体研究对象，维里方程适用性筛选则进一步限定了能够可靠计算剩余熵的状态范围。经过上述收集、核对和筛选，本文最终获得10478个纯气体黏度实验数据点，覆盖88种纯气体，用于后续模型参数回归和整体性能评价。

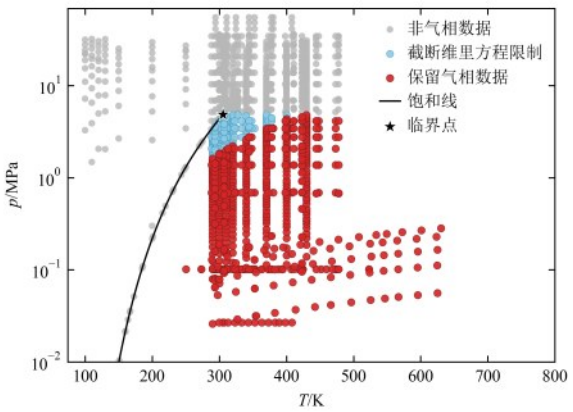

图1 乙烷原始黏度数据及其筛选结果的温度－压力分布

Fig.1 Temperature－pressure distribution of the original and the filtered viscosity data for ethane

1.3 评价指标与对比方法

为定量评价模型的预测性能，本文采用相对偏差(RD)、平均相对偏差(ARD)和平均绝对相对偏差(AARD)作为评价指标。相对偏差(RD)定义为

$$\mathrm{RD}=\frac{\eta_{\mathrm{cal}}-\eta_{\mathrm{exp}}}{\eta_{\mathrm{exp}}}\times 100\% \tag{1}$$

式中，η_{cal}为模型计算黏度，η_{exp}为黏度实验值。平均相对偏差(ARD)定义为

$$\mathrm{ARD}=\frac{1}{N}\sum^{N}\mathrm{RD} \tag{2}$$

式中，N为参与统计的数据点数。平均绝对相对偏差(AARD)定义为

$$\mathrm{AARD}=\frac{1}{N}\sum^{N}|RD| \tag{3}$$

ARD用于反映模型预测结果相对于实验数据的整体正负偏差趋势，AARD用于评价模型预测值与实验值之间的平均偏离程度。

为进一步评价本文模型的预测水平，本文还将计算结果与REFPROP 10.0进行比较[4-5]。REFPROP针对数据较充分的常用流体采用物质专属或高精度参考黏度模型，对部分缺少专用关联式的流体则

采用扩展对比态或其他通用估算方法。需要指出的是，本文模型与REFPROP模型的建模目标有所不同。REFPROP中的高精度黏度模型通常针对不同流体分别建立，并依赖相应流体的大量实验数据和物质专属拟合参数；本文模型则采用统一的稀薄气体黏度基准、截断维里方程和剩余熵标度表达式，不针对每种流体单独拟合黏度参数。二者的比较不仅用于评价预测精度，也用于考察在减少流体专属实验数据和拟合参数依赖后，通用模型所能达到的预测水平。

2 理论基础与模型方法

2.1 截断维里方程与气体剩余熵

作为理论基础最明确的状态方程之一，维里状态方程可以通过对流体的压缩因子以密度或压力进行级数展开得到，以表达实际流体与其理想状态的偏离：

$$Z=\frac{p}{\rho RT}=1+B(T)\rho+C(T)\rho^2+\cdots\cdots \tag{4}$$

上式以密度ρ展开，Z为压缩因子，p为压力，R=8.3144626 J·mol^{-1}·K^{-1}为通用气体常数，T为温度，系数B和C分别为第二、第三密度维里系数，均仅为温度的函数。本工作采用Xu等[25-27]提出的适用于极广温区和多种流体的第二和第三维里系数通用对比态关联模型。第二维里系数模型如下所示：

$$B_r=\frac{Bp_c}{RT_c} \tag{5}$$

$$B_r=f_0(T_r)+\omega f_1(T_r)+f_2(T_r) \tag{6}$$

式中，下标r表示对比，下标c表示临界，T_r为对比温度，ω表示偏心因子，f_0为简单球形项（组0）：

$$f_0=119.5\exp\left(-5.653T_r^{0.05}\right)-\frac{0.5925}{T_r^{0.7}}-\frac{0.1553}{T_r^{2.1}}-\frac{0.003901}{T_r^{4.7}} \tag{7}$$

f_1为非极性项（组1至组3）：

$$f_1=0.1818\exp\left(-0.02324T_r\right)-\frac{0.06851}{T_r}-\frac{0.1562}{T_r^4}-\frac{0.0001456}{T_r^9} \tag{8}$$

f_2为极性项（组4至组7），需根据流体分类单独建模。对卤代醚/酮/腈类及其他极性流体：

$$f_2=\frac{-3.158\times10^{-6}\mu_r^2+1.035\times10^{-10}\mu_r^4-1.450\times10^{-15}\mu_r^6}{T_r^6} \tag{9}$$

式中，μ_r为对比偶极矩，定义为

$$\mu_r=\frac{\mu^2p_c}{1.01325T_c^2} \tag{10}$$

式中，μ为偶极矩。对卤代烷烃类：

$$f_2=\frac{-3.486\times10^{-7}\mu_r^2+3.028\times10^{-11}\mu_r^4-1.391\times10^{-15}\mu_r^6}{T_r^6} \tag{11}$$

对胺类：

$$f_2=-\frac{7.694\times10^{-4}\mu_r}{T_r^4} \tag{12}$$

对醇类：

$$f_2=\left(\frac{2.541\times10^{-3}}{T_r^4}-\frac{1.682\times10^{-3}}{T_r^6}\right)\mu_r \tag{13}$$

对氨气：

$$f_2=-\frac{1.734\times10^{-4}\mu_r}{T_r^6} \tag{14}$$

对水（包括重水）：

$$f_2=\left(-\frac{0.001341}{T_r}+\frac{0.003082}{T_r^2}-\frac{0.001654}{T_r^3}-\frac{4.978\times10^{-6}}{T_r^9}\right)\mu_r \tag{15}$$

对于量子流体（组8），需要引入对比德布罗意波长Λ^*来单独修正：

$$B_r=f_0+\Lambda^*\left(-\frac{0.03566}{T_r^{0.37}}+\frac{0.03619}{T_r^{2.7}}\right) \tag{16}$$

第三维里系数模型如下所示：

$$C_r=\frac{Cp_c^2}{(RT_c)^2} \tag{17}$$

$$C_r=C_0+\left(\omega+\frac{\mu_r}{1000}\right)C_d \tag{18}$$

C_0为简单球形项（组0）：

$$C_0=0.04182\exp\left(-0.9310T_r^{0.2}\right)-\frac{0.003148}{T_r}+\frac{0.03023}{T_r^3}-\frac{0.01057}{T_r^6} \tag{19}$$

C_d为极性/偏心修正项（组1至组6）：

$$C_d=-0.2308\exp\left(-3.115T_r^2\right)+\frac{0.3784}{T_r^4} \tag{20}$$

对于缔合流体（组7），采用经验性缩放

$$C_r=\frac{1}{3}\left[C_0+\left(\omega+\frac{\mu_r}{1000}\right)C_d\right] \tag{21}$$

对于量子流体（组8），需要引入对比德布罗意波长Λ^*来单独修正：

$$C_r=C_0+\sqrt{\Lambda^*}\left(486.295\exp\left(-14.15T_r^{0.9}\right)-\frac{0.005379}{T_r^{0.4}}\right) \tag{22}$$

剩余熵s^r定义为相同温度和密度下真实气体熵与理想气体熵之差。本文采用无量纲剩余熵s^+表征气体熵偏离理想气体的程度：

$$s^+=-\frac{s^r(T\rho)}{R}=-\frac{s(T\rho)-s^{id}(T\rho)}{R} \tag{23}$$

式中，s^{id}为理想气体熵，s为真实气体熵。进一步由热力学微分关系得到

$$s^+ = \left(B + T\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}T}\right)\rho + \frac{1}{2}\left(C + T\frac{\mathrm{d}C}{\mathrm{d}T}\right)\rho^2 + o\left(\rho^3\right) \tag{24}$$

由式(24)可知,当气体密度趋于零时,s^+趋于0,因此可利用该变量连续描述气体由零密度极限向有限密度状态的偏离。

2.2 稀薄气体黏度模型

在零密度极限下,气体分子运动主要由孤立两体碰撞控制,多体相互作用可以忽略,此时也被称为稀薄气体。根据Chapman-Enskog理论,纯组分稀薄气体黏度可写为

$$\eta_{\mathrm{CE}}^0 = \frac{5}{16}\sqrt{\frac{mk_{\mathrm{B}}T}{\pi}}\frac{1}{\sigma^2\Omega^{(2,2)*}\left(T/\left(\varepsilon/k_{\mathrm{B}}\right)\right)} \tag{25}$$

式中,m是分子质量,k_{B}为玻尔兹曼常数,σ和ε是势能参数,$\Omega^{(2,2)*}$为对比碰撞积分,综合反映了分子间相互作用对黏度的影响。本文采用Li等[29]基于Boyle参数的碰撞积分模型。Boyle温度定义为第二维里系数B为0时对应的温度

$$B\left(T_{\mathrm{B}}\right) = 0 \tag{26}$$

Boyle体积v_{B}和长度l_{B}定义为

$$v_{\mathrm{B}} = T_{\mathrm{B}}\left(\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}T}\right)_{T=T_{\mathrm{B}}} \tag{27}$$

$$l_{\mathrm{B}} = \left(\frac{v_{\mathrm{B}}}{N_{\mathrm{A}}}\right)^{1/3} \tag{28}$$

用Boyle长度和温度替换特征长度和能量参数代入式(25),有

$$\eta_{\mathrm{CE,B}}^0 = \frac{5}{16}\sqrt{\frac{mk_{\mathrm{B}}T}{\pi}}\frac{1}{{l_{\mathrm{B}}}^2\Omega_{\mathrm{B}}^*\left(T/T_{\mathrm{B}}\right)} \tag{29}$$

对于非缔合、非量子气体(组0至6),采用如下模型

$$\Omega_{\mathrm{B}}^* = \Omega_{\mathrm{spherical}}^*\left(T^*\right) \times \Omega_{\mathrm{nonpolar}}^*\left(T^*,\omega\right) \times \Omega_{\mathrm{polar}}^*\left(T^*,\omega,\delta\right) \tag{30}$$

式中,$\Omega_{\mathrm{spherical}}^*$为球形基准项(组0),$\Omega_{\mathrm{nonpolar}}^*$为非极性修正项(组1至组3),$\Omega_{\mathrm{polar}}^*$为极性修正项(组4至组6);$\delta$为极性强度因子,定义为

$$\delta = \frac{\mu}{\sqrt{4\pi\varepsilon_0 k_{\mathrm{B}}T_{\mathrm{B}}l_{\mathrm{B}}^3}} \tag{31}$$

真空介电常数$\varepsilon_0 = 8.8541878128\times10^{-12}$ F/m,碰撞积分模型如下:

$$\Omega_{\mathrm{spherical}}^*\left(T^*\right) = 0.0166021^{T^*} + \frac{0.698844}{\left(T^*\right)^{0.182428}} \tag{32}$$

$$\Omega_{\mathrm{nonpolar}}^*\left(T^*,\omega\right) = 1 + \left(\omega + 0.00219\right)\times\left[\frac{1.313\times10^{-7}}{\left(\omega T^*\right)^2} - \left(6.84342\times10^{-7}\right)^{\omega T^*}\right] \tag{33}$$

$$\Omega_{\mathrm{polar}}^*\left(T^*,\omega,\delta\right) = 1 + \frac{\delta}{\delta + \varepsilon_{\mathrm{num}}}\frac{\left(0.115967/T^* - \omega^{0.42207}\right)}{\omega} \tag{34}$$

式中,$\varepsilon_{\mathrm{num}}$为引入的机器精度常数,取$10^{-12}$。对于缔合气体(组7),采用如下模型:

$$\Omega_{\mathrm{B}}^* = \Omega_{\mathrm{spherical}}^*\left(T^*\right) \times \Omega_{\mathrm{nonpolar}}^*\left(T^*,\omega\right) \times \Omega_{\mathrm{associating}}^*\left(T^*,\omega,\delta\right) \tag{35}$$

$$\Omega_{\mathrm{associating}}^*\left(T^*,\omega,\delta\right) = 1 + \delta\left[\frac{\delta - 0.3080}{T^*} - \left(\omega + 0.5389\right)\right] \tag{36}$$

对于量子气体(组8),采用如下模型:

$$\Omega_{\mathrm{B}}^* = \Omega_{\mathrm{spherical}}^*\left(T^*\right) \times \Omega_{\mathrm{quantum}}^*\left(T^*,\Lambda^*\right) \tag{37}$$

$$\Omega_{\mathrm{quantum}}^*\left(T^*,\Lambda^*\right) = 1 + \Lambda^* \times \frac{T^*}{\Lambda^* + \varepsilon_{\mathrm{num}}}\left(\frac{0.1107}{\Lambda^* + T^*} + 0.0005778\right) \tag{38}$$

2.3 纯气体黏度剩余熵标度模型

在剩余熵标度框架中,特定无量纲形式的真实气体黏度可写为剩余熵的单值函数。基于对气化工质的研究结果[31],本文选取同温度下的稀薄气体黏度作为参考黏度,定义无量纲黏度为

$$\eta^* = \eta/\eta^0 \tag{39}$$

从而构建$\ln(\eta^*)$随无量纲剩余熵s^+的变化关系。

在低密度区域,根据Rainwater-Friend理论[32-33],黏度可类比维里展开写为

$$\eta = \eta^0\left(1 + B_\eta\rho + \cdots\right) \tag{40}$$

式中,B_η为黏度第二维里系数。取对数并在低密度区域展开,有

$$\ln\left(\eta/\eta^0\right) \approx \frac{B_\eta}{\left(B + T\frac{\mathrm{d}B}{\mathrm{d}T}\right)}s^+ = B_{\eta,\mathrm{RES}}s^+ \tag{41}$$

因此,本文将气体黏度剩余熵标度模型写为

$$\ln\left(\eta/\eta^0\right) = f\left(T^*\right)s^+ + g\left(s^+\right) \tag{42}$$

式中,$T^*=T/T_{\mathrm{B}}$为Boyle标度下的对比温度,$f(T^*)s^+$表征低密度下的一次项贡献,$g(s^+)$为不含一次项的高阶修正函数。定义目标函数y为

$$y = \ln\left(\eta/\eta^0\right)/s^+ \tag{43}$$

为了拓展模型的通用性,引入临界温度和密度下的无量纲剩余熵s_{c}^+(使用REFPROP 10.0计算)来约化剩余熵尺度:

$$s_{\mathrm{r}}^+ = s^+/s_{\mathrm{c}}^+ \tag{44}$$

临界状态是不同纯流体均具有明确物理定义的特征状态。以s_{c}^+进行归一化,可减弱不同流体剩余熵尺度差异,使多类气体能够采用统一的剩余熵标度关联式进行描述。

为获得兼顾预测精度和表达式简洁性的显式关联式,本文在上述物理约束基础上采用符号回归确定目标函数y的函数结构。符号回归以T^*和s_{r}^+为输入变量,对不同数学运算符组合形成的候选表达

式进行搜索。图2给出了符号回归候选模型的复杂度与拟合误差之间的关系。随着表达式复杂度增加，候选模型的拟合误差总体降低，但进一步增加复杂度所带来的精度改善逐渐减小。本文综合考虑拟合误差、模型复杂度和函数形式的可解释性，从Pareto前沿中选取图2中五角星所示的候选结构。在确定上述函数结构后，保持函数形式不变，对其中参数进行重新拟合，以进一步降低完整模型对实验黏度的预测偏差。经参数优化后得到

$$y = 0.68691 s_\tau^+ - 4.17341\exp(-6.53924^{T^*}) + 1.07500\exp(-\sqrt{T^*}) + 0.09537 \quad (45)$$

式(45)仅包含5个由黏度实验数据确定的拟合参数，本文所研究的88种纯气体共用同一组系数，不针对单一流体引入专属黏度拟合参数。相比之下，传统高精度流体专用黏度关联式通常需要针对不同流体分别确定剩余项的函数形式及相应参数。例如，Lemmon和Jacobsen[34]建立的N_2、Ar和O_2参考黏度模型中，仅剩余黏度部分即分别包含10、11和8个可调参数；在流体建模时，参考关联式还进一步结合Rainwater－Friend初始密度依赖项(9个可调参数)[35-36]或Batschinski－Hildebrand自由体积项(10余个可调参数)[37-38]进行描述。由此可见，本文模型以较少的拟合参数实现了多类气体的统一描述。

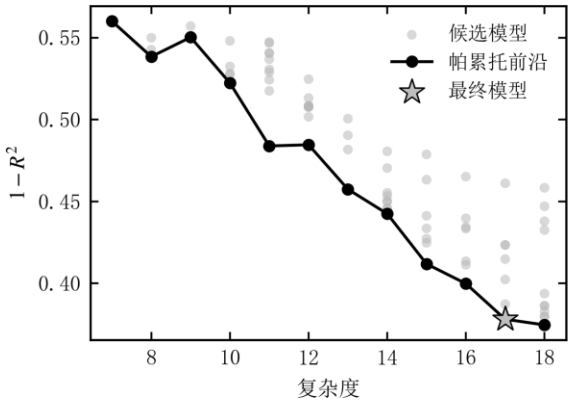

图2　符号回归候选模型的复杂度与拟合误差

Fig. 2　Complexity and fitting error of candidate models obtained by symbolic regression.

为便于说明本文模型的实际计算步骤，图3给出了气体黏度预测流程图。

3　结果与讨论

3.1　纯气体黏度预测结果

为评价本文模型对纯气体黏度的预测能力，将模型计算结果与筛选后的实验数据进行比较，并以REFPROP 10.0计算结果作为参考。对全部流体，本文模型的AARD为1.80%，REFPROP的AARD为1.82%，二者精度接近。需要指出的是，本文对88种纯气体采用完全相同的剩余熵标度关联式，式(45)仅含5个全局回归系数，且不随流体种类增加而增加；相比之下，高精度参考黏度模型通常针对单一流体分别建立，并需要设置相应的剩余黏度关联项及流体专属拟合参数。因此，本文模型在显著降低流体专属参数依赖的情况下仍获得了与参考关联式相当的总体预测精度，体现了其少参数和跨流体统一预测的特点。进一步比较本文模型与REFPROP对于每个流体的计算结果，二者在大多数流体上差异较小。以AARD相差1个百分点作为模型性能差异的比较界限，本文模型优于REFPROP的流体有2种，REFPROP优于本文模型的流体有2种，其余84种流体二者预测精度接近。

不同流体组别的预测结果见表2。对于非极性烃类多原子气体(组2)、极性烃类多原子气体(组4)、弱极性气体(组5)和缔合气体(组7)，本文模型表现较好，AARD分别为1.25%、1.15%、1.02%和1.66%。非极性双原子气体(组1)的AARD为1.73%，也处于较低水平。单原子气体(组0)和非极性多原子气体(组3)的AARD分别为2.12%和2.31%，强极性气体(组6)和量子气体(组8)的AARD分别为2.28%和2.75%。总体来看，各组AARD均低于3%，其中量子气体和部分强极性气体偏差相对较高，说明量子效应和强极性相互作用仍是统一气体黏度模型中较难完全描述的影响因素。

为进一步考察模型对数据量较充足流体的预测稳定性，图4给出了实验点数大于50的纯气体黏度预测相对偏差分布。总体来看，大多数流体的偏差分布集中在零偏差线附近，在不同气体类别中均未出现明显的整体系统性偏高或偏低。对于单原子气体、非极性双原子气体和典型非极性烃类气体，偏差分布较为集中。对于部分强极性气体、卤代烃和量子气体，偏差分布纵向相对更宽，这可能与强极性相互作用、卤素取代导致的分子形状差

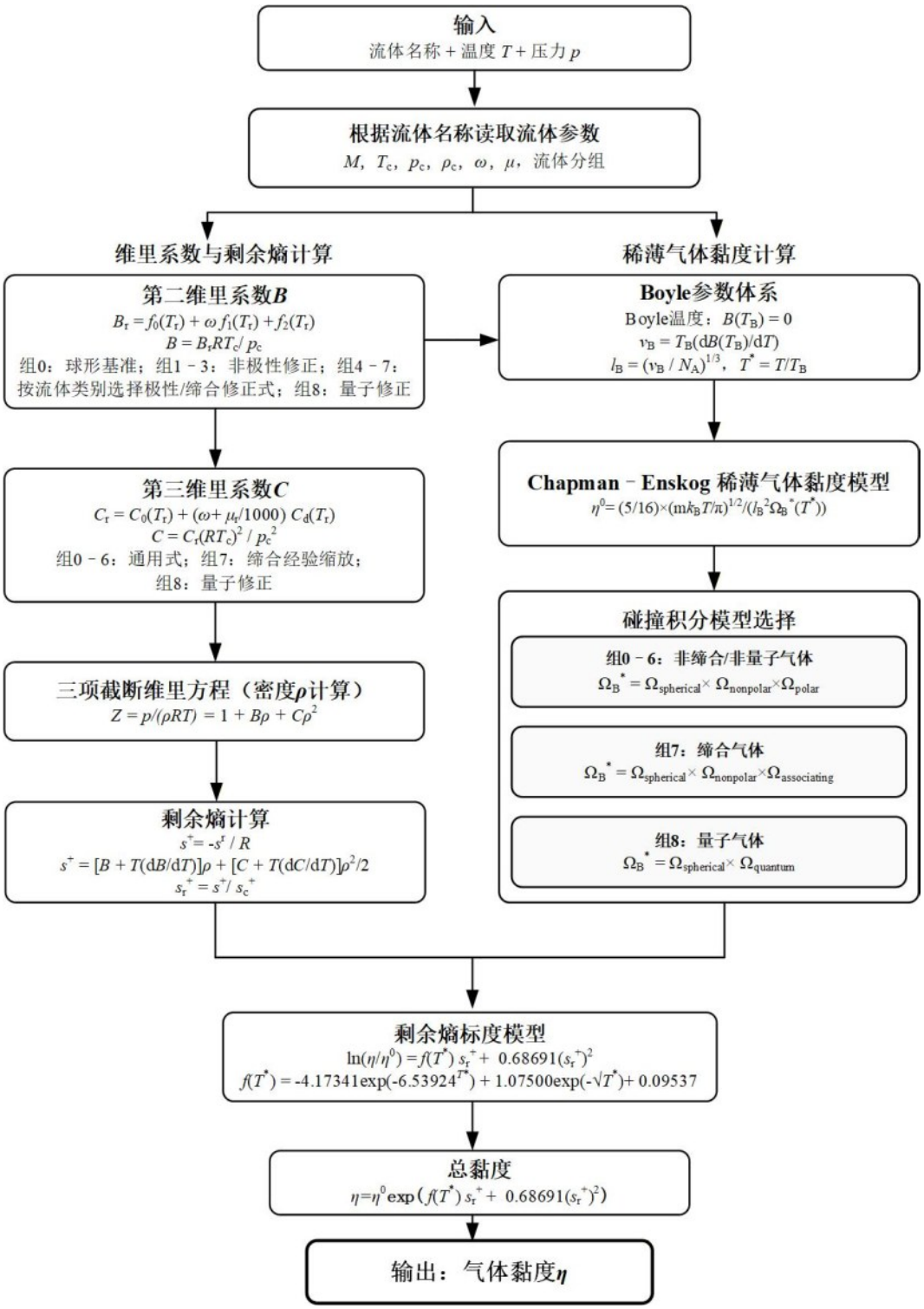

图3 气体黏度预测流程图

Fig. 3 Flowchart of gas-viscosity prediction.

异、量子效应以及部分实验数据分散性有关。

从具体流体看，本文模型对多种常见气体具有较高精度。例如，CO、O_2、N_2O、CO_2、丙烷、乙烷、R22、R134a等气体的AARD均不超过1%。其中，乙烷包含711个实验点，AARD为0.77%；丙烷包含593个实验点，AARD为0.64%；CO_2包含138个实验点，AARD为0.64%。这些流体覆盖了非极性烃类、多原子气体、弱极性气体和强极性气体等不同分子类型，说明本文模型不仅对单一类别有效，而且具有跨流体推广能力。

表2 不同气体组别的气体黏度预测偏差

Table 2 Prediction deviations of pure-gas viscosity for different gas groups

组序号	本工作		REFPROP 10.0	
	ARD/%	AARD/%	ARD/%	AARD/%
0	−1.60	2.12	−1.31	2.02
1	0.06	1.73	0.85	2.45
2	−0.06	1.25	0.00	1.10
3	−1.43	2.31	−1.60	2.37
4	−0.28	1.15	−0.56	1.18
5	0.37	1.02	0.26	1.16
6	0.86	2.28	0.27	2.14
7	0.79	1.66	0.06	1.29
8	−0.47	2.75	−0.54	2.77
全部	−0.29	1.80	−0.40	1.82

共有13种流体的AARD超过4%，主要包括部分制冷剂以及长链或支链烃类。其中，R41、R1336mzz(Z)、R21和壬烷的AARD分别为14.55%、12.03%、11.48%和10.87%。这些高偏差流体中有相当一部分实验数据量较少，例如R41和壬烷分别仅有2个和3个数据点，十六烷、1,3-丁二烯和R1336mzz(Z)也分别只有4个、5个和7个数据点。在实验点数较少的情况下，单个异常点或不同来源数据之间的不一致性会对流体AARD产生较大影响。与此同时，部分流体的REFPROP偏差也相对较高，说明实验数据分散性可能是偏差增大的原因之一；但复杂分子结构和特殊相互作用未被当前分类修正充分描述，也可能造成模型偏差。

从温度区间看，本文模型在高对比温度的气相区与REFPROP精度相当，并在部分区间略有优势。在$T_r \geqslant 1.5$的数据点上，本文模型的AARD为1.45%，REFPROP的AARD为1.51%；其中$1.5 \leqslant T_r < 2.0$区间的差异相对更明显，本文模型和REFPROP的AARD分别为1.77%和1.94%，体现模型对高温气体的良好外推预测能力。

3.2 典型气体偏差分布分析

为进一步分析本文模型在不同类型气体中的适用性，图5给出了9种典型纯气体在对比温度和压力坐标下的黏度预测相对偏差分布。所选流体覆盖单原子气体、非极性双原子气体、非极性烃类多原子气体、非极性多原子气体、卤代烃制冷剂、缔合气体和量子气体等主要类别。图中点的颜色表示相对偏差RD，黑色实线表示饱和线，黑色五角星表示临界点。

对于Ar、O_2、乙烷、CO_2和丙烷等结构相对简单或常见的气体，本文模型表现出较好的预测能力。其中O_2、乙烷、CO_2和丙烷的AARD分别为0.38%、0.77%、0.64%和0.64%，大部分偏差点集中在零偏差附近，未表现出随对比温度或对比压力增大而持续偏离的明显趋势。Ar的AARD为1.72%，整体仍处于较低水平。R13和R134a的AARD分别为1.04%和0.90%，说明模型对典型卤代烃制冷剂仍具有较好的预测能力，但局部高压区域仍可能出现一定偏差。NH_3的AARD为2.07%，相较普通非极性气体偏差有所增大。H_2是量子气体的代表，其AARD为3.00%，偏差相对较高，说明低温量子效应仍是统一气体黏度模型中较难完全描述的因素。

3.3 模型的物理意义与适用范围

本文模型的核心思想是将气体黏度分解为稀薄气体黏度和由剩余熵标度和Rainwater-Friend理论共同决定的修正项。稀薄气体黏度描述零密度极限下由两体碰撞决定的动量输运能力；修正项则利用截断维里方程计算的剩余熵，表征分子多体作用增强所引起的黏度变化。在零密度极限下，气体分子间距离较大，多体相互作用可以忽略，真实气体黏度应自然退化为稀薄气体黏度。当气体趋于零密度时，对比无量纲剩余熵趋于0，指数项趋于1，模型自然满足$\lim_{\rho \to 0} \eta = \eta^0$。这一性质保证了模型在低密度区域具有正确的物理边界。为定量分析模型中不同组成项对总黏度的贡献，将式(45)中仅与温度有关的部分记为$f(T^*)$，则最终黏度模型可以写为$\eta = \eta^0 \exp(C_1 + C_2)$，其中$C_1 = f(T^*)s_r^+$为温度相关的一阶剩余熵项，$C_2 = 0.68691(s_r^+)^2$为有限密度高阶修正项。进一步将总黏度严格分解为$\eta = \eta^0 + \Delta\eta^1 + \Delta\eta^2$，其中$\Delta\eta^1 = \eta^0[\exp(C_1) - 1]$，$\Delta\eta^2 = \eta^0 \exp(C_1)[\exp(C_2) - 1]$。本文模型中的一阶项$\Delta\eta^1$可以理解为低密度区域中剩余黏度增长的主导贡献。由于黏度第二维里系数和剩余熵的一阶密度系数均与温度有关，单纯采用剩余熵的单变量函数难以完全描述不同温度下的低密度斜率差异。模型中的高阶项$\Delta\eta^2$用于表示有限密度下的高阶剩余熵修正。随着气体密度增大，分子间相互作用和多体碰撞效应逐渐增强，高阶项可以补偿中等密度气相区域中的非线性黏度增量。

如图6所示，以N_2为例，在气相范围内，稀薄气体黏度η^0始终是总黏度的主导部分。T_r=0.8时，在

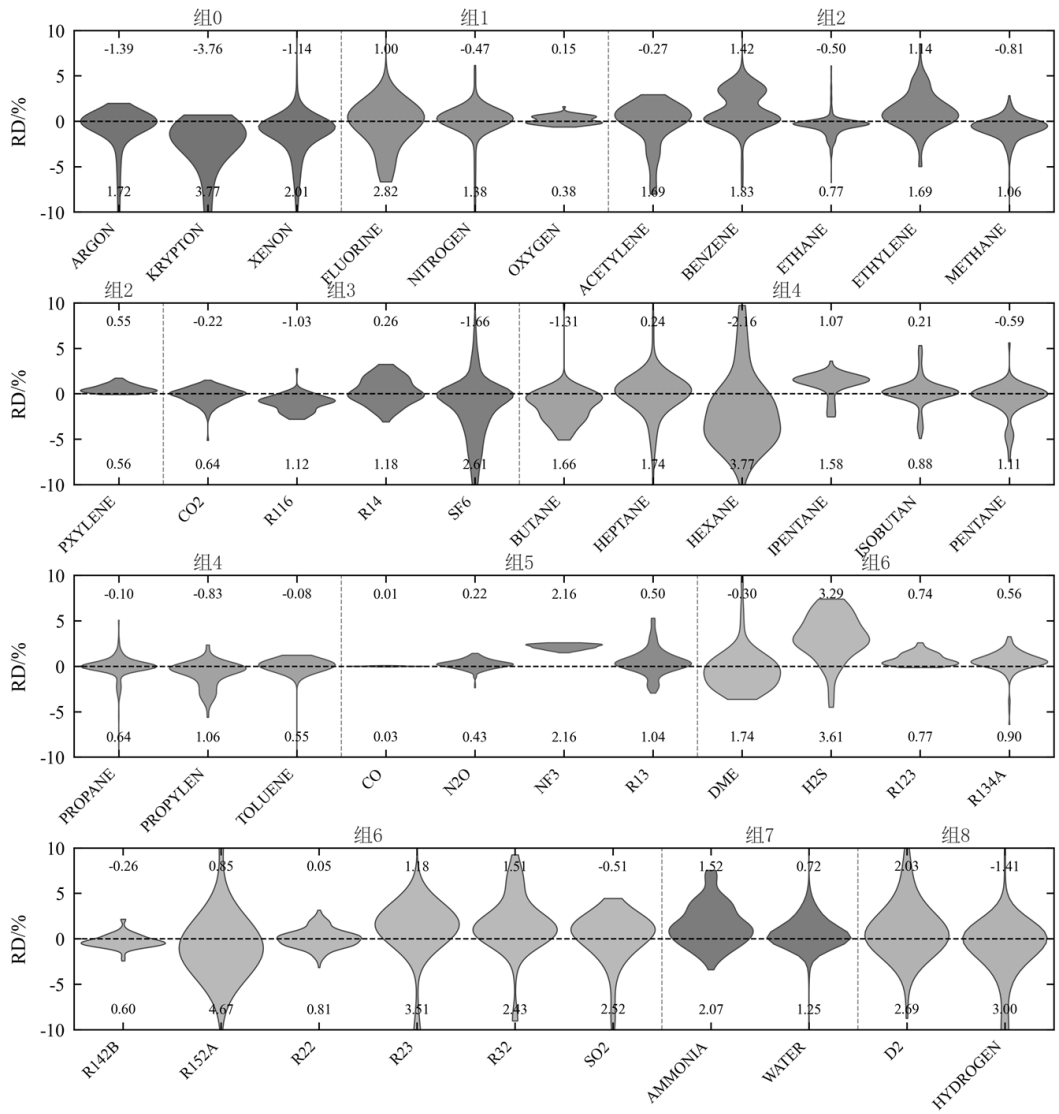

图4 实验点数大于50的气体黏度预测相对偏差分布(图中流体名称采用REFPROP中的计算名,虚线表示零偏差线,小提琴图表示不同流体相对偏差 RD 的分布形态;每个流体上方和下方数字分别表示 ARD 和 AARD)

Fig. 4 Distribution of relative deviations of gas viscosity predictions for fluids with more than 50 experimental data points (The dashed line indicates the zero-deviation line, and the violin plots show the distribution of relative deviations (RD) for different fluids. The numbers above and below each fluid denote the ARD and AARD, respectively)

饱和压力(p_r=0.24)附近,η_0对总黏度的贡献约为98.1%,一阶项和高阶项的贡献分别约为0.1%和1.8%。当温度升高至T_r=1.2时,气体可以达到更高的对比压力,有限密度效应显著增强。在临界压力(p_r=1)附近,η_0的贡献降低至90.2%,而一阶项和高阶项的贡献分别增至5.7%和4.1%。当温度进一步升高至T_r=2.0时,即使压力达到临界压力,总黏度仍主要由稀薄气体项控制。在高温气相区域,气体非理想性减弱,剩余熵较小,有限密度引起的非线性修正不再显著。

本文模型的剩余熵由三项截断维里方程计算,其适用范围主要受维里方程精度限制。根据数据筛选和模型评价结果,建议模型用于远离饱和线和临界区、对比密度ρ_r<0.3的气相区域。对于高密度、近饱和和近临界状态,截断维里方程难以准确描述密度和剩余熵,本文模型也未考虑临界区的特殊输运行为,不建议用于上述区域的高精度计算。

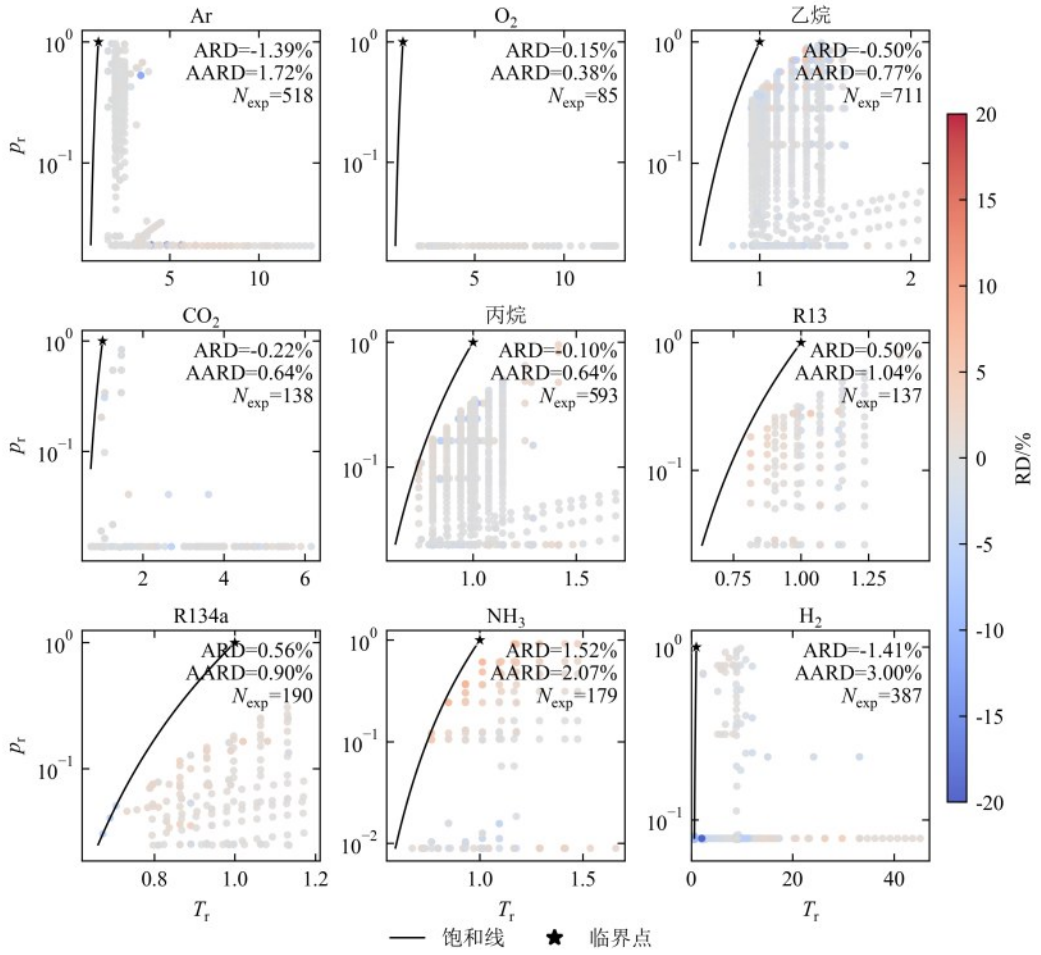

图5　典型气体黏度预测偏差分布

Fig. 5　Distribution of relative deviations of viscosity predictions for representative pure gases

4　结 论

本文建立了一种基于剩余熵标度的纯气体黏度预测模型，将Boyle标度稀薄气体黏度、三项截断维里方程、Rainwater－Friend理论和剩余熵标度方法统一于同一建模框架。主要结论如下。

（1）通用维里系数模型为黏度预测提供了统一的热力学性质基础。第二维里系数用于获得Boyle温度和Boyle长度，并结合碰撞积分模型计算稀薄气体黏度，从而确定气体黏度的零密度极限；第二、第三维里系数同时用于构建三项截断维里方程，由温度和压力求解气体密度并计算剩余熵。

（2）根据Rainwater－Friend理论，零密度极限附近的对数无量纲黏度与剩余熵近似呈线性关系，但其斜率随温度变化。基于这一渐近特征，模型采用温度关联函数描述一阶剩余熵贡献，并引入高阶剩余熵项表征密度升高后分子多体相互作用引起的非线性增量。符号回归获得的关联式形式简洁，同时保留了各组成项的物理意义。

（3）利用覆盖88种纯气体的10478个实验数据点对模型进行了评价。结果表明，本文模型总体平均绝对相对偏差为1.80%，与REFPROP 10.0基本相当，能够较好描述单原子、双原子以及典型多原子气体黏度随温度和压力的变化，对不同类型流体表现出较稳定的统一描述能力。

（4）模型主要适用于远离临界点和饱和线的中低密度气相区域，推荐使用范围为对比密度小于0.3。对于高密度、近饱和、近临界区域，预测结果应谨慎使用。

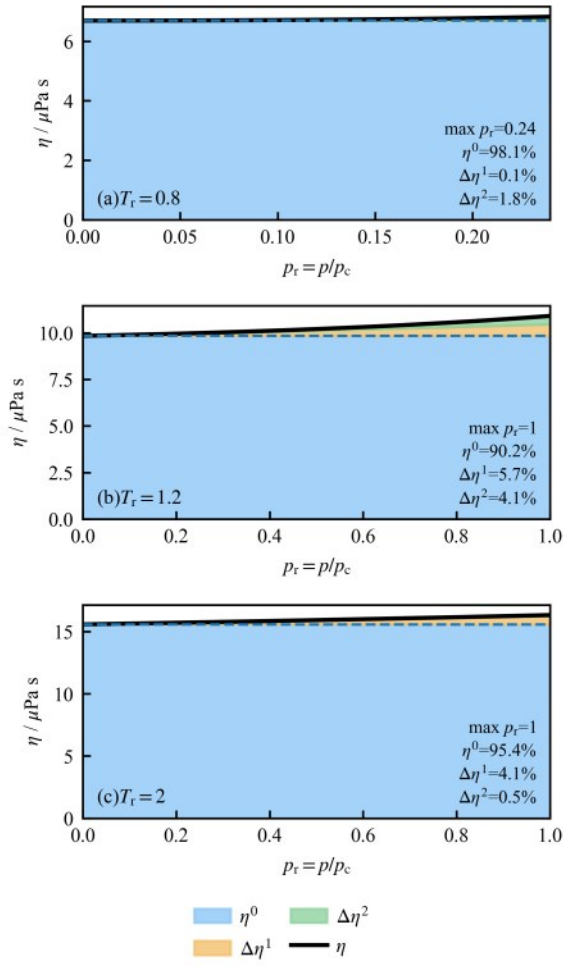

图6 不同对比温度(a)T_r=0.8、(b)T_r=1.2、(c)T_r=2下N_2黏度组成项随对比压力的变化

Fig. 6 Variation of viscosity contributions with reduced pressure at different reduced temperatures (a)T_r=0.8, (b)T_r=1.2, (c)T_r= 2 of nitrogen

附表1 气体参数表

Table S1 Gas property parameters.

计算名	流体名	M (g·mol^{-1})	T_c (K)	p_c (MPa)	ρ_c (kg·m^{-3})	ω	μ (Debye)	分组	Λ^*	T_B	l_B (m)	δ	s_c^+
13BUTADIENE	1,3-丁二烯	54.0904	425.135	4.3053	245.0297	0.192	0	2	0	987.6772	6.45E-10	0	1.282782
1BUTENE	1-丁烯	56.1063	419.29	4.0051	237.8908	0.192	0.339	4	0	974.0987	6.58E-10	0.054794	1.25857
1BUTYNE	1-丁炔	54.0904	432	4.1416	251.5205	0.28	0.81	4	0	947.2986	6.80E-10	0.126355	1.514094
1PENTENE	1-戊烯	70.1329	465.74	3.598	241.9585	0.233	0.51	4	0	1052.348	7.18E-10	0.069614	1.436346
22DIMETHYLBUTANE	2,2-二甲基丁烷	86.1754	490	3.138	239.5675	0.23	0	2	0	1109.356	7.63E-10	0	1.247906
23DIMETHYLBUTANE	2,3-二甲基丁烷	86.1754	500.6	3.161	241.291	0.247	0	2	0	1120.826	7.72E-10	0	1.338199
3METHYLPENTANE	3-甲基戊烷	86.1754	506	3.1845	239.5675	0.268	0	2	0	1117.861	7.79E-10	0	1.324844
ACETONE	丙酮	58.0791	508.1	4.6924	272.972	0.3071	2.88	6	0	1097.655	6.97E-10	0.402099	1.667098
ACETYLENE	乙炔	26.0373	308.3	5.9882	229.9092	0.178	0	2	0	723.3465	5.16E-10	0	1.328535
AMMONIA	氨	17.0305	405.56	11.3634	233.25	0.256	1.47	7	0	903.6897	4.72E-10	0.406007	1.640651
ARGON	氩气	39.948	150.687	4.863	535.5988	-0.00219	0	0	0	409.4894	4.03E-10	0	0.98698

续表

计算名	流体名	M (g·mol^{-1})	T_c (K)	p_c (MPa)	ρ_c (kg·m^{-3})	ω	μ (Debye)	分组	Λ^*	T_B	l_B (m)	δ	s_c^+
BENZENE	苯	78.1118	562.02	4.90728	304.7143	0.211	0	2	0	1288.721	6.83E−10	0	1.443907
BUTANE	正丁烷	58.1222	425.125	3.796	228	0.201	0.05	4	0	981.5102	6.75E−10	0.007742	1.413402
C11	正十一烷	156.3083	638.8	1.9904	236.7914	0.539	0	2	0	1223.071	1.08E−09	0	1.983193
C12	正十二烷	170.3348	658.1	1.817	226.5453	0.574	0	2	0	1241.086	1.14E−09	0	1.818272
C16	正十六烷	226.441	722.1	1.47985	226.441	0.749	0	2	0	1273.736	1.33E−09	0	2.397682
C1CC6	甲基环己烷	98.1861	572.2	3.47	267.0661	0.234	0	2	0	1292.042	7.78E−10	0	1.133558
C22	正二十二烷	310.601	792.2	1.174	224.5645	0.978	0	2	0	1303.756	1.58E−09	0	2.760293
C2BUTENE	顺−2−丁烯	56.1063	435.75	4.2255	238.1152	0.202	0.3	4	0	1005.349	6.57E−10	0.047804	1.154663
C3CC6	正丙基环己烷	126.2392	630.8	2.86	260.0528	0.326	0	2	0	1345.602	8.88E−10	0	1.407418
C4F10	全氟丁烷	238.027	386.326	2.3224	627.6772	0.372	0	3	0	803.0137	8.21E−10	0	1.686799
C5F12	全氟戊烷	288.034	421	2.063	625.0338	0.436	0	3	0	846.2007	8.99E−10	0	1.889601
C6F14	全氟己烷	338.042	448	1.7416	616.9266	0.497	0	3	0	874.264	9.92E−10	0	1.914134
CF_3I	三氟碘甲烷	195.9104	396.44	3.953	868.0006	0.176	0.92	5	0	931.4755	6.44E−10	0.156875	1.475786
CHLORINE	氯气	70.906	416.865	7.6424	571.5024	0.07	0	1	0	1062.944	5.03E−10	0	1.275248
CHLOROBENZENE	氯苯	112.557	632.35	4.5206	364.6847	0.2532	1.69	6	0	1410.19	7.42E−10	0.189462	1.359081
CO	一氧化碳	28.0101	132.86	3.494	303.9096	0.0497	0.1	5	0	344.6478	4.42E−10	0.049362	0.914347
CO_2	二氧化碳	44.0098	304.128	7.3773	467.5997	0.22394	0	3	0	714.4889	4.71E−10	0	1.444092
COS	羰基硫	60.0751	378.77	6.37	445.1565	0.0978	0.7152	5	0	944.1623	5.24E−10	0.165208	1.242009
CYCLOBUTENE	环丁烯	54.0904	448	5.1495	279.6476	0.163	0.136	4	0	1062.521	6.11E−10	0.023499	1.345118
CYCLOHEX	环己烷	84.1595	553.6	4.0805	271.3302	0.2096	0.3	4	0	1270.623	7.22E−10	0.036906	1.311529
CYCLOPEN	环戊烷	70.1329	511.72	4.5828	274.921	0.202	0	2	0	1180.624	6.75E−10	0	1.410973
CYCLOPRO	环丙烷	42.081	398.3	5.5797	258.4994	0.1305	0	2	0	967.7816	5.65E−10	0	1.3747
D_2	氘气	4.0282	38.34	1.6796	69.4059	−0.136	0	8	1.223	114.122	3.53E−10	0	0.747316
D_2O	重水	20.0275	643.847	21.6618	356	0.364	1.9	7	0	1514.054	3.05E−10	0.497327	1.926879
DECANE	正癸烷	142.2817	617.7	2.103	233.342	0.4884	0.07	4	0	1210.295	3.51E−10	0.005155	2.211099
DEE	乙醚	74.1216	466.7	3.7202	263.9989	0.29	1.151	6	0	1017.169	3.32E−10	0.157098	1.866657
DMC	碳酸二甲酯	90.0779	557	4.9088	360.3116	0.346	0.899	5	0	1174.661	3.41E−10	0.116419	1.675052
DME	二甲醚	46.0684	400.378	5.33685	273.6465	0.196	1.301	6	0	927.8435	3.42E−10	0.253747	1.406319
EBENZENE	乙苯	106.165	617.12	3.6224	291	0.305	0.6	4	0	1332.805	8.08E−10	0.060888	1.540812
EGLYCOL	乙二醇	62.0678	719	10.5087	364.9589	0.619	2.41	7	0	1226.851	6.28E−10	0.371698	1.829059
ETHANE	乙烷	30.069	305.322	4.8722	206.18	0.0995	0	2	0	760.017	5.33E−10	0	1.203013
ETHANOL	乙醇	46.0684	514.71	6.268	273.1858	0.646	1.6909	7	0	903.2969	6.92E−10	0.263072	2.61709
ETHYLENE	乙烯	28.0538	282.35	5.0418	214.2466	0.0866	0	2	0	710.1755	5.11E−10	0	1.215629
ETHYLENEOXIDE	环氧乙烷	44.0526	468.92	3.7047	315.8569	0.21	1.89	6	0	1076.335	7.06E−10	0.261276	1.621723
FLUORINE	氟气	37.9968	144.414	5.1724	592.8642	0.0449	0	1	0	376.1751	3.98E−10	0	0.822759
H2S	硫化氢	34.0809	373.1	9	347.2842	0.1005	0.97	6	0	928.2172	4.65E−10	0.270046	1.247613
HCL	氯化氢	36.4609	324.68	8.3135	432.7914	0.129	1.079	6	0	789.8379	4.61E−10	0.329606	1.279133
HELIUM	氦气	4.0026	5.195	0.22832	69.58	−0.3836	0	8	2.67	23.195	3.11E−10	0	0.29833
HEPTANE	正庚烷	100.202	540.2	2.73573	233.4707	0.349	0.07	4	0	1137.277	8.63E−10	0.006973	1.693147
HEXANE	正己烷	86.1754	507.82	3.0441	233.1905	0.3	0.07	4	0	1100.037	8.01E−10	0.007924	1.558097
HYDROGEN	氢	2.0159	33.145	1.2964	31.2623	−0.219	0	8	1.729	108.285	3.42E−10	0	0.594405
IBUTENE	异丁烯	56.1063	418.09	4.0098	233.9634	0.193	0.5	4	0	970.6364	6.57E−10	0.081075	1.173692
IHEXANE	异己烷	86.1754	497.7	3.04	233.9661	0.2797	0	2	0	1091.54	7.90E−10	0	1.377756
IOCTANE	异辛烷	114.2285	544	2.572	242.1645	0.303	0	2	0	1176.291	8.68E−10	0	1.613283
IPENTANE	异戊烷	72.1488	460.35	3.378	235.9987	0.2274	0.11	4	0	1044.026	7.28E−10	0.01474	1.35894

续表

计算名	流体名	M ($g\cdot mol^{-1}$)	T_c (K)	p_c (MPa)	ρ_c ($kg\cdot m^{-3}$)	ω	μ (Debye)	分组	Λ^*	T_B	l_B (m)	δ	s_c^+
ISOBUTAN	异丁烷	58.1222	407.81	3.629	225.5	0.184	0.132	4	0	952.7612	6.71E−10	0.020923	1.382142
KRYPTON	氪气	83.798	209.48	5.525	909.2083	−0.00089	0	0	0	568.5714	4.31E−10	0	0.925463
MEA	单乙醇胺	61.0831	671.4	8.125	329.2379	0.573	2.3699	7	0	1291.385	7.06E−10	0.298942	1.983559
METHANE	甲烷	16.0428	190.564	4.5992	162.6579	0.01142	0	2	0	511.3914	4.47E−10	0	1.025329
METHANOL	甲醇	32.0422	512.6	8.1035	275.5626	0.5625	1.7	7	0	918.3994	6.11E−10	0.316087	2.484517
MM	六甲基二硅氧烷	162.3768	518.7	1.93113	268.4089	0.418	0.801	5	0	1052.175	9.79E−10	0.068569	1.787527
MXYLENE	间二甲苯	106.165	616.89	3.5346	282.9297	0.326	0.3	4	0	1315.93	8.21E−10	0.029922	1.609414
N_2O	一氧化二氮	44.0128	309.52	7.245	452.0115	0.162	0.1608	5	0	734.6225	4.82E−10	0.047712	1.316267
NEON	氖气	20.179	44.4	2.66163	486.3139	−0.0355	0	8	0.593	119.516	3.17E−10	0	0.915606
NEOPENTN	新戊烷	72.1488	433.74	3.196	235.9265	0.1961	0	2	0	1004.798	7.18E−10	0	1.267846
NF_3	三氟化氮	71.019	234	4.4607	562.4705	0.126	0.235	5	0	570.5286	5.08E−10	0.073024	1.141074
NITROGEN	氮气	28.0135	126.192	3.3958	313.3	0.0372	0	1	0	330.9233	4.36E−10	0	1.068754
NONANE	正壬烷	128.2551	594.55	2.281	232.1417	0.4433	0.07	4	0	1190.671	9.78E−10	0.005644	1.748748
NOVEC649	全氟己酮	316.0444	441.81	1.869	606.8052	0.471	0.43	5	0	872.8639	9.56E−10	0.041926	1.817611
OCTANE	正辛烷	114.2285	568.74	2.48359	231.9991	0.398	0.07	4	0	1165.775	9.22E−10	0.00623	1.757696
ORTHOHYD	正氢	2.0159	33.22	1.31065	31.1362	−0.218	0	8	1.729	119.9276	3.41E−10	0	0.66586
OXYGEN	氧气	31.9988	154.581	5.043	436.1436	0.0222	0	1	0	410.8004	4.06E−10	0	1.076749
OXYLENE	邻二甲苯	106.165	630.259	3.7375	284.9999	0.312	0.63	4	0	1355.529	8.07E−10	0.063472	1.609045
PARAHYD	仲氢	2.0159	32.938	1.2858	31.3227	−0.219	0	8	1.729	118.9096	3.42E−10	0	0.608515
PENTANE	正戊烷	72.1488	469.7	3.3675	231.5976	0.251	0.07	4	0	1048.934	7.41E−10	0.009124	1.457745
PROPADIENE	丙二烯	40.0639	398	5.2156	236.3768	0.115	0.2	4	0	978.6769	5.73E−10	0.039619	1.145036
PROPANE	丙烷	44.0956	369.89	4.2512	220.4781	0.1521	0.084	4	0	884.3032	6.08E−10	0.016016	1.335058
PROPYLEN	丙烯	42.0797	364.211	4.555	229.6291	0.146	0.366	4	0	874.6774	5.90E−10	0.073471	1.307482
PROPYLENEOXIDE	环氧丙烷	58.0791	488.11	5.4366	299.398	0.249	2	6	0	1092.261	6.40E−10	0.318242	1.401773
PROPYNE	丙炔	40.0639	402.38	5.626	244.9224	0.204	0.781	4	0	927.1257	5.82E−10	0.155412	1.298928
PXYLENE	对二甲苯	106.165	616.168	3.5315	286	0.324	0	2	0	1315.919	8.20E−10	0	1.571092
R11	R11	137.368	471.11	4.40764	553.9999	0.18875	0.45	5	0	1096.977	6.61E−10	0.067965	1.329429
R1123	R1123	82.0246	331.73	4.5426	492.1473	0.261	1.4	6	0	736.1449	5.99E−10	0.299281	1.434665
R113	R113	187.375	487.21	3.3922	560	0.25253	0.803	5	0	1086.971	7.48E−10	0.101233	1.387532
R114	R114	170.921	418.83	3.257	579.9691	0.2523	0.658	5	0	934.5517	7.21E−10	0.09456	1.186116
R115	R115	154.4664	353.1	3.129	614.7763	0.248	0.52	5	0	790.0686	6.89E−10	0.086975	1.419529
R116	R116	138.0118	293.03	3.048	613.3245	0.2566	0	3	0	652.0527	6.56E−10	0	1.555327
R12	R12	120.913	385.12	4.1361	565	0.17948	0.51	5	0	902.6351	6.29E−10	0.09149	1.300891
R1216	R1216	150.0225	358.9	3.14953	583.4076	0.333	1.088	6	0	762.5116	7.14E−10	0.175745	1.69777
R1224YDZ	R1224yd(Z)	148.4867	428.69	3.337	527.1278	0.322	1.47	6	0	916.6192	7.40E−10	0.205202	1.491346
R123	R123	152.931	456.831	3.6618	550.0036	0.28192	1.356	6	0	1000.549	7.22E−10	0.188002	1.582618
R1233ZDE	R1233zd(E)	130.4962	439.6	3.6237	480.226	0.3025	1.12	6	0	950.839	7.21E−10	0.159684	1.604284
R1234YF	R1234yf	114.0416	367.85	3.3822	475.5534	0.276	2.48	6	0	808.9034	6.89E−10	0.410607	1.519515
R1234ZEE	R1234ze(E)	114.0416	382.513	3.6349	489.2385	0.313	1.27	6	0	822.2194	6.90E−10	0.207845	1.69543
R1234ZEZ	R1234ze(Z)	114.0416	423.27	3.5306	456.1664	0.327	2.9	6	0	902.9774	7.25E−10	0.420446	1.548137
R124	R124	136.4762	395.425	3.6243	560	0.2881	1.469	6	0	862.7938	6.92E−10	0.233708	1.536914
R1243ZF	R1243zf	96.0511	376.93	3.5179	413.0199	0.2604	2.43	6	0	836.9415	6.81E−10	0.402148	1.534918
R125	R125	120.0214	339.173	3.6177	573.5823	0.3052	1.563	6	0	732.4701	6.62E−10	0.28835	1.520008
R13	R13	104.459	302	3.879	582.8812	0.1723	0.51	5	0	711.4582	5.91E−10	0.11319	1.320007
R1336MZZZ	R1336mzz(Z)	164.056	444.5	2.903	499.3865	0.386	2.92	6	0	917.111	8.03E−10	0.360476	1.619057

续表

计算名	流体名	M (g·mol^{-1})	T_c (K)	p_c (MPa)	ρ_c (kg·m^{-3})	ω	μ (Debye)	分组	Λ^*	T_B	l_B (m)	δ	s_c^+
R134A	R134a	102.032	374.21	4.05928	511.9	0.32684	2.058	6	0	797.974	6.64E−10	0.36241	1.736798
R14	R14	88.0046	227.51	3.75	625.7	0.1785	0	3	0	533.6038	5.45E−10	0	1.030667
R141B	R141b	116.9496	477.5	4.212	458.5595	0.2195	2.014	6	0	1088.695	6.83E−10	0.291073	1.452108
R142B	R142b	100.495	410.26	4.055	445.9969	0.2321	2.14	6	0	927.6116	6.61E−10	0.35204	1.489361
R143A	R143a	84.041	345.857	3.761	431.0001	0.2615	2.34	6	0	767.7601	6.48E−10	0.435714	1.418355
R150	R150	98.9592	561.6	5.22612	428.4933	0.268	1.44	6	0	1240.712	6.83E−10	0.194706	1.384155
R152A	R152a	66.051	386.411	4.51675	367.9998	0.27521	2.262	6	0	850.1487	6.36E−10	0.412071	1.580628
R161	R161	48.0595	375.25	5.046	302.0011	0.22	1.9397	6	0	855.3738	5.94E−10	0.390275	1.517779
R21	R21	102.9227	451.48	5.1812	526	0.2061	1.37	6	0	1038.737	6.22E−10	0.233059	1.176294
R218	R218	188.0193	345.02	2.64	627.9846	0.3172	0	3	0	739.7785	7.43E−10	0	1.536832
R22	R22	86.468	369.295	4.99	523.8422	0.22082	1.458	6	0	841.2452	5.93E−10	0.296455	1.482374
R227EA	R227ea	170.0289	374.9	2.925	594.2509	0.357	1.456	6	0	785.7643	7.49E−10	0.215624	1.592979
R23	R23	70.0139	299.293	4.832	526.5042	0.263	1.649	6	0	663.466	5.68E−10	0.402523	1.579929
R236EA	R236ea	152.0384	412.44	3.42	565	0.369	1.129	6	0	858.7129	7.37E−10	0.163833	1.951711
R236FA	R236fa	152.0384	398.07	3.2	551.2912	0.377	1.982	6	0	825.2305	7.47E−10	0.287608	2.019941
R245CA	R245ca	134.0479	447.57	3.9407	525.4679	0.355	1.74	6	0	939.1389	7.19E−10	0.250651	1.711974
R245FA	R245fa	134.0479	427.01	3.651	519.4358	0.3783	1.549	6	0	884.5704	7.32E−10	0.223767	1.861421
R32	R32	52.024	351.255	5.782	424	0.2769	1.978	6	0	772.5707	5.68E−10	0.447375	1.488616
R365MFC	R365mfc	148.0745	460	3.266	473.8385	0.377	3.807	6	0	958.6759	7.85E−10	0.476094	1.611102
R40	R40	50.4875	416.3	6.6899	363.219	0.15	1.871	6	0	996.9295	5.44E−10	0.397683	1.011912
R41	R41	34.0329	317.28	5.897	316.5062	0.2004	1.851	6	0	734.055	5.30E−10	0.476514	1.260662
RC318	RC318	200.04	388.38	2.7775	620	0.3553	0	3	0	814.7673	7.71E−10	0	1.532568
RE143A	RE143a	100.0398	377.921	3.635	464.9991	0.289	2.48	6	0	825.3715	6.83E−10	0.411652	1.317237
RE245CB2	RE245cb2	150.0473	406.813	2.8864	499.5076	0.354	2.785	6	0	855.3804	7.74E−10	0.376294	1.554786
RE245FA2	RE245fa2	150.0473	444.88	3.433	515.0012	0.387	1.631	6	0	917.5439	7.60E−10	0.218622	1.633902
RE347MCC	RE347mcc	200.0548	437.7	2.4782	528.1448	0.403	3.13	6	0	896.2612	8.49E−10	0.359536	1.706417
SF_6	六氟化硫	146.0554	318.723	3.75498	742.2975	0.218	0	3	0	727.3865	6.20E−10	0	1.464888
SO_2	二氧化硫	64.0638	430.64	7.8866	517.5074	0.256	1.6	6	0	959.5502	5.44E−10	0.346735	1.544717
T2BUTENE	反-2-丁烯	56.1063	428.61	4.0273	236.3759	0.21	0	2	0	983.4778	6.66E−10	0	1.553644
TOLUENE	甲苯	92.1384	591.75	4.1263	291.9867	0.2657	0.36	4	0	1309.194	7.52E−10	0.041074	1.465295
VINYLCHLORIDE	氯乙烯	62.4982	424.964	5.5903	351.24	0.161	1.451	6	0	1009.385	5.84E−10	0.275495	1.242833
WATER	水	18.0153	647.096	22.064	322	0.3443	1.855	7	0	1537.06	4.09E−10	0.48744	1.925969
XENON	氙气	131.293	289.733	5.842	1102.861	0.00363	0	0	0	783.1014	4.73E−10	0	1.005423

符 号 说 明

B——第二密度维里系数，m^3·mol^{-1}

B_η——黏度第二维里系数，m^3·mol^{-1}

$B_{\eta,\mathrm{RES}}$——黏度与剩余熵一阶关系系数

B_r——对比第二维里系数

C——第三密度维里系数，m^6·mol^{-2}

C_0——第三维里系数模型的球形流体基准项

C_d——第三维里系数模型的偏心及极性修正项

C_r——对比第三维里系数

f_0——第二维里系数模型的球形流体基准项

f_1——第二维里系数模型的非极性修正项

f_2——第二维里系数模型的极性修正项

g——有限密度下的高阶剩余熵修正函数

k_B——玻尔兹曼常数，J·K^{-1}

l_B——Boyle长度，m

m——单个气体分子的质量，kg

M——摩尔质量，g·mol^{-1}

N——参与偏差统计的数据点数

N_A——阿伏伽德罗常数，mol^{-1}

p——压力，Pa

p_c——临界压力，Pa

p_r——对比压力，$p_r=p/p_c$
R——摩尔气体常数，J·mol^{-1}·K^{-1}
s——真实气体摩尔熵，J·mol^{-1}·K^{-1}
s^{id}——相同温度和密度下的理想气体摩尔熵，J·mol^{-1}·K^{-1}
s^r——摩尔剩余熵，$s^r=s-s^{id}$，J·mol^{-1}·K^{-1}
s^+——无量纲剩余熵，$s^+=-s^r/R$
s_c^+——临界温度和临界密度下的无量纲剩余熵
s_r^+——归一化无量纲剩余熵，$s_r^+=s^+/s_c^+$
T——热力学温度，K
T_B——Boyle温度，K
T_c——临界温度，K
T_r——对比温度，$T_r=T/T$c
T^*——Boyle标度对比温度，$T^*=T/T_B$
v^B——Boyle体积，m^3·mol^{-1}
y——符号回归的目标函数
Z——压缩因子
δ——极性强度因子
ε——分子间势能参数，J
ε_0——真空介电常数，F·m^{-1}
ε_{num}——机器精度常数
η——黏度，Pa·s
η^0——零密度极限下的稀薄气体黏度，Pa·s
η^0_{CE}——由Chapman–Enskog理论计算的稀薄气体黏度，Pa·s
$\eta^0_{CE,B}$——采用Boyle参数标度计算的稀薄气体黏度，Pa·s
η^*——无量纲黏度，$\eta^*=\eta/\eta^0$
Λ^*——对比德布罗意波长
μ——分子偶极矩，D
μ_r——约化偶极矩
ρ——摩尔密度，mol·m^{-3}
ρ_c——临界密度，kg·m^{-3}
ρ_r——对比密度，$\rho_r=\rho/\rho_c$
σ——特征长度，m
ω——偏心因子
$\Omega^{(2,2)*}$——对比碰撞积分
Ω^*_B——Boyle参数标度的对比碰撞积分
$\Omega^*_{spherical}$——球形流体基准碰撞积分
$\Omega^*_{nonpolar}$——非极性修正项
Ω^*_{polar}——极性修正项
$\Omega^*_{associating}$——缔合作用修正项
$\Omega^*_{quantum}$——量子效应修正项

下角标

B——Boyle或玻尔兹曼
c——临界状态
cal——模型计算值
CE——Chapman–Enskog理论计算值
exp——实验值
r——约化量
spherical——球形流体基准项
nonpolar——非极性修正项
polar——极性修正项
associating——缔合作用修正项
quantum——量子效应修正项

上角标

id——理想气体状态
0——稀薄气体状态
r——剩余性质
*——无量纲量或标度量

参考文献

[1] Millat J, Dymond J H, de Castro C A N. Transport Properties of Fluids: Their Correlation, Prediction and Estimation[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1996.

[2] Hirschfelder J O, Curtiss C F, Bird R B. The Molecular Theory of Gases and Liquids[M]. Corr. print. with notes added. New York: John Wiley & Sons, 1964.

[3] Chapman S, Cowling T G. The Mathematical Theory of Non-Uniform Gases: An Account of the Kinetic Theory of Viscosity, Thermal Conduction and Diffusion in Gases[M]. Reprinted 3rd. Cambridge: Cambridge University Press, 1990.

[4] Lemmon E W, Bell I H, Huber M L, et al. NIST Standard Reference Database 23: Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties-REFPROP, Version 10.0[DB]. Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology, 2018.

[5] Huber M L, Lemmon E W, Bell I H, et al. The NIST REFPROP database for highly accurate properties of industrially important fluids[J].Ind. Eng. Chem. Res., 2022, **61**(42): 15449-15472.

[6] Klein S A, McLinden M O, Laesecke A. An improved extended corresponding states method for estimation of viscosity of pure refrigerants and mixtures[J]. Int. J. Refrig., 1997, **20**(3): 208-217.

[7] Xiang H W. The Corresponding-States Principle and Its Practice: Thermodynamic, Transport and Surface Properties of Fluids[M]. Amsterdam: Elsevier, 2005.

[8] 马沛生, 江碧云, 张建侯. 气体常压粘度数据的评定和对温度的关联[J]. 化工学报, 1981, **32**(3): 193-205.
Ma P S, Jiang B Y, Zhang J H. Critical assessment of viscosity and its correlation with temperature for gaseous substances under normal pressure[J]. CIESC Journal, 1981, **32**(3): 193-205.

[9] 王利生, 郭天民. 基于Patel-Teja状态方程的统一粘度模型(Ⅱ)应用于油气藏流体粘度的预测[J]. 化工学报, 1993, **44**(6): 685-691.
Wang L S, Guo T M. A unified viscosity model based on Patel-Teja equation of state(II)application in predicting viscosities of reservoir fluid[J]. Journal of Chemical Industry and Engineering (China), 1993, **44**(6): 685-691.

[10] 刘志刚, 陈玉石, 孙晓岩, 等. 估算低压纯气体黏度方法的评价及改进[J]. 高校化学工程学报, 2016, **30**(5): 992-998.
Liu Z G, Chen Y S, Sun X Y, et al. Evaluation and method improvement of viscosity estimation of low-pressure pure gases[J]. J. Chem. Eng. Chinese Univ., 2016, **30**(5): 992-998.

[11] 王巍, 赵朔, 王晓放, 等. 基于二元回归法准确快速预测天然气纯组分黏度[J]. 北京化工大学学报(自然科学版), 2017, **44**(2): 13-19.
Wang W, Zhao S, Wang X F, et al. Accurate and fast prediction of the viscosity of natural gas components based on the binary regression analysis method[J]. J. Beijing Univ. Chem. Technol. (Nat. Sci. Ed.), 2017, **44**(2): 13-19.

[12] Rosenfeld Y. Relation between the transport coefficients and the internal entropy of simple systems[J]. Phys. Rev. A, 1977, **15**(6): 2545-2549.

[13] Rosenfeld Y. A quasi-universal scaling law for atomic transport in simple fluids[J]. J. Phys.: Condens. Matter., 1999, **11**(28): 5415-5427.

[14] Novak L. Self-diffusion coefficient and viscosity in fluids[J]. Int. J. Chem. React. Eng., 2011, **9**(1): A63

[15] Novak L T. Fluid viscosity-residual entropy correlation[J]. Int. J. Chem. React. Eng., 2011, **9**(1):A107.

[16] Novak L T. Predictive corresponding-states viscosity model for the entire fluid region: *n*-alkanes[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2013, **52**(20): 6841-6847.

[17] Novak L T. Predicting natural gas viscosity with a mixture viscosity model for the entire fluid region[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2013, **52**(45): 16014-16018.

[18] Novak L T. Predicting fluid viscosity of nonassociating molecules [J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2015, **54**(21): 5830-5835.

[19] Mairhofer J. A residual entropy scaling approach for viscosity based on the GERG-2008 equation of state[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2021, **60**(6): 2652-2662.

[20] Yang X X, Xiao X, May E F, et al. Entropy scaling of viscosity: III: application to refrigerants and their mixtures[J]. J. Chem. Eng. Data, 2021, **66**(3): 1385-1398.

[21] Dehlouz A, Privat R, Galliero G, et al. Revisiting the entropy-scaling concept for shear-viscosity estimation from cubic and SAFT equations of state: application to pure fluids in gas, liquid and supercritical states[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2021, **60**(34): 12719-12739.

[22] Yang X X, Xiao X, Thol M, et al. Linking viscosity to equations of state using residual entropy scaling theory[J]. Int. J. Thermophys., 2022, **43**(12): 183.

[23] Martinek V, Bell I, Herzog R, et al. Entropy scaling of viscosity IV — Application to 124 industrially important fluids[J]. J. Chem. Eng. Data, 2025, **70**(2): 727-742.

[24] 刘航滔, 杨富方, 张凯, 等. 惰性气体黏度的剩余熵标度模型[J]. 工程热物理学报, 2021, **42**(1): 1-8.
Liu H T, Yang F F, Zhang K, et al. Residual entropy scaling model for the viscosity of noble gases[J]. J. Eng. Thermophys., 2021, **42**(1): 1-8.

[25] Xu L, Duan Y Y, Liu H T, et al. Empirical correlations for second virial coefficients of nonpolar and polar fluids covering a wide temperature range[J]. Fluid Phase Equilibr., 2021, **539**: 113032.

[26] Xu L, Liu H T, Yang Z, et al. Empirical correlations for second virial coefficients of associated and quantum fluids covering a wide temperature range[J]. Fluid Phase Equilibr., 2021, **547**: 113133.

[27] Xu L, Li Z, Yang Z, et al. Empirical correlations for the third virial coefficients of nonpolar, polar and quantum fluids in a wide temperature range[J]. Fluid Phase Equilibr., 2022, **559**: 113477.

[28] Xu L, Peng S Z, Yang Z, et al. A new method to calculate and predict thermodynamic properties of nonpolar, polar and quantum fluids at high temperatures[J]. J. Chem. Thermodyn., 2024, **199**: 107361.

[29] Li Z, Duan Y Y, Yang X X. Physics-constrained symbolic regression of collision integrals for dilute-gas viscosity[J]. Int. J. Thermophys., 2026, **47**(8): 136.

[30] Frenkel M, Chirico R D, Diky V, et al. ThermoData engine (TDE): software implementation of the dynamic data evaluation concept[J]. J. Chem. Inf. Model., 2005, **45**(4): 816-838.

[31] 李卓, 杨震, 段远源. 基于剩余熵标度的气化工质黏度模型[J]. 计量学报, 2025,**46**(4): 491-498.
Li Z, Yang Z, Duan Y Y. Viscosity modeling for gasification working fluids based on residual entropy scaling[J]. Acta Metrologica Sinica, 2025, **46**(4): 491-498.

[32] Rainwater J C, Friend D G. Second viscosity and thermal-conductivity virial coefficients of gases: Extension to low reduced temperature[J]. Phys. Rev. A, General Physics, 1987, **36**(8): 4062-4066.

[33] Friend D G, Rainwater J C. Transport properties of a moderately dense gas[J]. Chem. Phys. Lett., 1984, **107**(6): 590-594.

[34] Lemmon E W, Jacobsen R T. Viscosity and thermal conductivity equations for nitrogen, oxygen, argon, and air[J]. Int. J. Thermophys., 2004, **25**(1): 21-69.

[35] Laesecke A, Muzny C D. Reference correlation for the viscosity of carbon dioxide[J]. J. Chem. Eng. Data, 2017, **46**(1): 013107.

[36] Vogel E, Küchenmeister C, Bich E, et al. Reference correlation of the viscosity of propane[J]. J. Chem. Eng. Data, 1998, **27**(5): 947-970.

[37] Huber M L, Laesecke A. Correlation for the viscosity of pentafluoroethane (R125) from the triple point to 500 K at pressures up to 60 MPa[J]. Ind. Eng. Chem. Res., 2006, **45**(12): 4447-4453.

[38] Vogel E, Küchenmeister C, Bich E. Viscosity correlation for isobutane over wide ranges of the fluid Region1[J]. Int. J. Thermophys., 2000, **21**(2): 343-356.