

УДК 621.564.2

Новая комплексная модель теплопроводности гидрофторолефиновых хладагентов, построенная с использованием нейронных сетей с прямой связью и обучением по методу обратного распространения ошибки

**Н. Галем^{1,2}, С. Ханини¹, А. Амране³, М. Хамадаче¹,
М. Лаиди¹, М.В. Насер²**

¹*Университет Медеа, Медеа, Алжир*

²*Университет Блида, Блида, Алжир*

³*Университет Ренна, Национальный центр научных исследований, Ренн, Франция*

E-mail: abdeltif.amrane@univ-rennes1.fr

В представленной работе с помощью искусственной нейронной сети исследуется теплопроводность систем хладагентов из трех различных гидрофторолефинов: R1234yf, R1234ze (E) и R1233zd(E). Всего для обучения и тестирования модели было использовано 4395 точек данных по теплопроводности жидкости и пара при различных температурах (в диапазоне от 241,92 до 344,46 К) и давлениях (в диапазоне от 0,068 до 21,73 МПа). Во входном слое использовалось пять нейронов, в скрытом слое — пятнадцать, в выходном слое — один. На скрытом и выходном слоях сети применялись соответственно алгоритм байесовской регуляризации обратного распространения ошибки, а также логарифмическая сигмоидная передаточная функция и линейная передаточная функция. В качестве входных переменных рассматривались температура, давление, реализованная мощность нагрева, фактор ацентричности и дипольный момент. Оптимальные величины параметров были получены методом поиска весов. Средние абсолютные относительные отклонения и коэффициент корреляции составили соответственно 1,48 и 0,9998. Таким образом, исследование показало, что модель искусственной нейронной сети представляет собой отличную альтернативу другим имеющимся моделям для точной оценки теплопроводности различных систем хладагентов.

Ключевые слова: хладагент, чистая система, теплопроводность, моделирование, искусственная нейронная сеть, многослойный перцептрон, предиктивная модель.

Введение

В настоящее время большое внимание уделяется вопросам энергетики и экологии. К ним относятся в том числе преобразование работы в тепло и, наоборот, тепла в энергию. Известно, что в тепловых циклах эффективность преобразования энергии и экологические характеристики систем существенно зависят от рабочей жидкости. В связи с этим

большое внимание уделяется исследованию новых функциональных жидкостей, а также оценке их воздействия на окружающую среду [1].

Хлорфторуглероды, гидрохлорфторуглероды и их смеси оказывают значительное влияние на окружающую среду. Однако, несмотря на то, что они обладают высоким потенциалом разрушения озонового слоя и вносят довольно существенный вклад в процесс глобального потепления, данные вещества обычно применяются в качестве рабочих жидкостей. С учетом этого важно найти новые заменители используемых в настоящее время рабочих жидкостей. Для борьбы с указанными возможными причинами изменения климата и для удовлетворения практических требований наиболее перспективными веществами для применения в высокотемпературных тепловых насосах и в органическом цикле Ренкина считаются гидрофторолефины (ГФО). Альтернативные рабочие жидкости должны иметь низкую токсичность и воспламеняемость, приемлемый срок службы в атмосфере, нулевой потенциал разрушения озонового слоя и низкий потенциал глобального потепления [2].

В последние годы исследователи уделяют большое внимание изучению теплофизических свойств веществ [3, 4]. В частности, были предложены новые уравнения для прогнозирования их теплопроводности [5, 6]. Знание теплопроводности необходимо при проведении анализа ряда явлений. Однако точность имеющихся доступных данных не всегда оказывается приемлемой. Определение теплофизических свойств веществ как функции температуры и давления требует очень сложной и дорогостоящей измерительной аппаратуры [7].

Согласно закону Фурье, теплопроводность является одним из важнейших теплофизических свойств веществ. Она характеризует способность материала передавать тепло [8, 9]. Теплопроводность жидкостей важна для оптимального проектирования энергетических систем, оценки процессов теплопередачи в них и эффективности работы оборудования. Имеющиеся в литературе экспериментальные данные по теплопроводности различных жидкостей или пара часто являются недостаточно надежными либо вообще отсутствуют, или же они известны лишь для некоторого диапазона температур.

Различные теоретические или полутеоретические модели жидкого и парового состояний, представленные в научной литературе [10], не всегда подходят для прогнозирования теплопроводности. Это связано либо с математической сложностью таких моделей, являющейся следствием их формальной сложности, либо с сильным отклонением предсказываемых этими моделями данных от экспериментальных значений. В результате для практических приложений и инженерных целей часто требуется знание эмпирических или полуэмпирических корреляций [11, 12].

Некоторые авторы использовали в целях прогнозирования и уточнения теплофизических свойств холодильных систем различные уравнения и методы. Большая часть этих попыток предпринималась по отношению к ограниченному количеству указанных систем. Способность разных методов предсказывать теплофизические свойства для различных систем никогда не проверялась. Тем не менее существует ряд теорий, которые дают уравнения для прогнозирования теплопроводности паров и жидкостей.

Из-за отсутствия экспериментальных данных для экологически чистых веществ, таких как ГФО, точные уравнения состояния практически для всех ГФО недоступны. Собственно, известно лишь несколько точных уравнений состояния для нескольких ГФО, например, уравнения состояния для хладагентов R1225ye(Z), R1234yf, R1234ze(E) и R1243zf [13, 14]. Некоторые ГФО были рекомендованы в качестве новых альтернативных экологически безопасных хладагентов. К ним относятся HFO-1234yf, HFO-1234ze(E) и HFO-1243zf [15, 16].

Вначале авторами рассматриваются экспериментальный аспект проблемы (методика измерений) и аспект моделирования полученных данных. В представленной работе изучаются хладагенты R1234yf, R1234ze(E) и R1233zd(E). Существует всего несколько систематических исследований, в которых оценивалась способность теоретических методов прогнозировать теплопроводность веществ, а также их другие теплофизические свойства. Чтобы повлиять на сложившуюся ситуацию, частью исследователей были созданы искусственные нейронные сети (ИНС) для прогнозирования таких свойств веществ, как поверхностное натяжение [17–19], вторые вириальные коэффициенты [20] и, в частности, теплопроводность [21, 22].

Искусственные нейросети являются подходящей альтернативой обычному эмпирическому или полуэмпирическому моделированию, основанному на полиномиальной регрессии. Они являются эффективным инструментом для изучения, выявления и обобщения шаблонов данных, поскольку позволяют моделировать нелинейные функции. Также они позволяют справляться со сложными «зашумленными» данными [23]. Нейросетевой подход широко принят как альтернативная технология, способная сводить к минимуму трудности экспериментальных измерений, а также минимизировать их трудоемкость и высокую стоимость. Этот подход позволяет работать над сложными и недостаточно четко определенными задачами [24, 25]. Более того, он дает результаты, много лучшие тех, которые могут быть получены при использовании традиционных методов.

В настоящей работе представлен подход на основе ИНС для прогнозирования теплопроводности нового класса хладагентов. Следует обратить внимание на то обстоятельство, что в нескольких ранее опубликованных работах нейронные сети использовались для прогнозирования теплопроводности определенных семейств химических соединений с целью получения большей точности, нежели та, которая достигается при использовании доступных в литературе уравнений.

Методология и моделирование

История нейронных сетей

В данном разделе приводится краткое описание моделей искусственных нейронных сетей, которые демонстрируют яркие математические примеры соответствующих алгоритмов, в особенности связанных с процессом обучения. Искусственные нейронные сети — это класс вычислительных моделей со структурой, подобной устройству человеческого мозга [22]. Такая модель представляет собой эмуляцию биологической нервной системы. Искусственные нейронные сети отличаются от традиционных подходов к моделированию тем, что они обучаются быстро находить решения, а не программируются для моделирования конкретной проблемы обычным образом [26].

Многослойный перцептрон (МП) — пожалуй, самый известный тип сетей с прямой связью, очень эффективный для представления нелинейных отношений между переменными, подобных используемым в настоящей работе. МП включает в себя три слоя: входной, выходной и промежуточный (скрытый) слой. Нейронные сети обучаются по двум основным типам алгоритмов обучения: с учителем и без учителя. Нейроны входного уровня получают входные данные (E_{ij}) из реального мира, а нейроны каждого последующего уровня получают взвешенные выходные данные (w_{ji}) от нейронов предыдущего слоя в качестве входных данных, что приводит к формированию ИНС с прямой связью, в которой каждый вход данных оказывается прямо связан с последующим

слоем, где они обрабатываются. Выходное значение нейронной сети МП может быть представлено следующим образом:

$$\text{Output} = f \left(\sum_{i=1}^n w_{ij} E_{ij} + b_j \right), \quad (1)$$

здесь b_j — вес смещения для j -го нейрона, n — количество нейронов, имеющих связь с j -ым нейроном, w_{ij} — вес, количественно определяющий величину/интенсивность связи между i -ым нейроном в предыдущем слое и j -ым нейроном в текущем слое, E_{ij} — входные сигналы от i -го к j -му нейрону [27, 28].

Результат вычисляется с помощью некоторой передаточной функции. При этом желательно, чтобы функция активации проявляла поведение ступенчатого типа. Кроме того, поскольку непрерывность и дифференцируемость во всех точках являются обязательными свойствами известных алгоритмов оптимизации, типичные активационные функции, удовлетворяющие этим требованиям, допускают ту или иную интерпретацию [9, 29].

Задание данных и входных величин

С используемым в настоящем исследовании набором данных был проведен ряд экспериментов (именно: нестационарные измерения теплопроводности пара и жидкости и измерения в установившемся режиме с платиновой горячей проволокой) с использованием различных архитектур сети и выполнением оценок разного типа, которые будут описаны ниже. Во всех проведенных экспериментах теплопроводность K являлась оцениваемым параметром и представляла для сети примеры, которые задавались следующими входными характеристиками: температура T (К), давление P (МПа), реализованная мощность нагрева q ($\text{Вт} \cdot \text{м}^{-1}$), фактор ацентричности (ω) и дипольный момент μ (Д). Сбор экспериментальных данных в количестве 4395 точек выполнялся для трех различных хладагентов, перечисленных в табл. 1 и 2 в соответствии с их обозначениями, принятыми Американским обществом инженеров по отоплению, охлаждению и кондиционированию воздуха (ASHRAE). Для устранения эффекта разномасштабности значений параметров было выполнено масштабирование всех данных в диапазоне $[-1, 1]$. Предварительная обработка данных для масштабирования была реализована с использованием функции `mapminmax` и алгоритма, описанного в работах [30, 31]:

$$X_{\text{norm}} = 2 \left(\frac{X_i - X_{\min}}{X_{\max} - X_{\min}} \right) - 1, \quad (2)$$

здесь X_i — входное или выходное значение переменной X , а X_{\min} и X_{\max} — минимальное и максимальное значения этой переменной.

Таблица 1
Хладагенты с физическими константами, исследуемые в представленной работе

Обозначение хладагента по ASHRAE	Название согласно ИЮПАК	Номер CAS	Коэффициент ацентричности	Дипольный момент, Д
R1234yf	2,3,3,3-тетрафторпропен	754-12-1	0,276 [30]	2,48 [30]
R1234ze(E)	транс-1,3,3,3-тетрафторпропен	29118-24-9	0,313 [30]	1,27 [30]
R1233zd(E)	транс-1-хлор-3,3,3-трифторпропен	102687-65-0	0,302 [1]	1,12 [30]

Таблица 2

Использованные в работе опубликованные экспериментальные данные

Хладагент	Температура, К	Давление, МПа	Приложенная мощность нагрева, Вт/м	Теплопроводность, Вт/(м·К)	Источник
R1234yf	241,92–344,46	0,068–21,73	0,022–0,600	0,009–0,092	[32]
R1234ze(E)	203,17–343,48	0,04–23,320	0,019–0,675	0,01–0,1170	[33]
R1233zd(E)	203,56–453,40	0,096–66,62	0,747–0,019	0,011–0,012	[33]

В табл. 2 приведены подробные сведения об экспериментальных данных, которые были собраны из отчетов в литературе по МП. Значения стандартных отклонений, средних значений, а также минимальных и максимальных значений использованной базы данных приведены в табл. 3.

Обучение нейронной сети

В настоящей работе для разработки сети с обратным распространением ошибки и прямой связью между нейронами применялся набор инструментов Neural Network Toolbox of MathWorks среды MATLAB. Около 80 % экспериментальных данных использовались для обучения сети, а оставшиеся данные (20 %) применялись для проверки точности предсказанных ею значений. Для получения результатов прогнозирования, основанных на использовании различных структур ИНС, в наборе инструментов нейронной сети MATLAB можно применять различные алгоритмы обучения и функции принадлежности сети. Для выявления взаимосвязей между входными и выходными данными были использованы модели нейронной сети с обратным распространением ошибки (НСОР) Левенберга–Марквардта (ЛМ), масштабированного сопряженного градиента (МСГ), обратного распространения ошибки с байесовской регуляризацией (БР) и сопряженного градиента Полака–Рибьера (СГПР).

На следующем этапе для каждого нейрона с помощью метода проб и ошибок выбиралась передаточная функция. Для нахождения подходящей передаточной функции для данной нейронной сети рассматривались различные передаточные функции, включая гиперболическую касательную сигмоидную, логарифмическую сигмоидную и линейную (Purelin). В качестве указанных выше передаточных функций в скрытом и выходном слоях рассматривались соответственно гиперболическая касательная сигмоидная функция (Tang-sig) и линейная (Purelin).

Таблица 3

Статистика входных и выходных параметров

Категория переменных	Параметры	Условное обозначение	Единица измерения	Стандартное отклонение	Минимальное значение	Среднее значение	Максимальное значение
Входные величины	Температура	T	К	63,20	203,17	328,45	453,4
	Давление	P	МПа	14,75	0,041	9,960	66,62
	Реализованная мощность нагрева	q	Вт/м	0,181	0,019	0,215	0,747
	Фактор ацентричности	ω	–	0,012	0,276	0,300	0,313
	Дипольный момент	μ	Д	0,507	1,120	1,405	2,48
Выходные величины	Теплопроводность	K	Вт/(м·К)	0,036	0,0092	0,058	0,125

Регрессионный анализ и анализ ошибок

Для оценки точности сети и её способности прогнозировать теплопроводность хладагентов использовался регрессионный анализ. Для того чтобы определить, как выходные данные сети коррелируют с экспериментальными данными, полученными с использованием приводимого далее уравнения (3), проводилась оценка коэффициента корреляции R^2 . Ранее отмечалось, что оптимальное количество нейронов в скрытом слое, а также тип алгоритма обучения и передаточной функции являются важными факторами, влияющими на точность и качество работы/производительность сети. В связи с этим для определения качества работы сети был использован анализ ошибок. Для изучения эффективности ИНС могут рассматриваться ошибки разных параметров, с помощью которых может проводиться сравнение фактических значений и прогнозируемых ИНС. Среди них коэффициент детерминации (R^2), среднеквадратическая ошибка (СКО), среднее абсолютное относительное отклонение (САОО, %) и сумма квадратов ошибок (СКВО) [9, 34]. Эти параметры представляют собой наиболее распространенный набор для определения точности сети и вычисляются по следующим соотношениям:

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (K_{\text{exp},i} - K_{\text{pre},i})^2}{\sum_{i=1}^N (K_{\text{exp},i} - \bar{K}_{\text{exp}})^2}, \quad (3)$$

$$\text{СКО} = \sqrt{\sum_{i=1}^N (K_{\text{exp},i} - K_{\text{pre},i})^2 / N}, \quad (4)$$

$$\text{САОО} = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{K_{\text{exp},i} - K_{\text{pre},i}}{K_{\text{exp},i}} \right|, \quad (5)$$

$$\text{СКВО} = \sum_{i=1}^N (K_{\text{exp},i} - K_{\text{pre},i})^2, \quad (6)$$

здесь N — количество экспериментальных данных по теплопроводности, $K_{\text{exp},i}$ и $K_{\text{pre},i}$ — экспериментальное и прогнозируемое сетью значения теплопроводности соответственно, \bar{K}_{exp} — среднее значение экспериментальных данных по теплопроводности.

Результаты и их обсуждение

Оптимальная конфигурация ИНС

Для определения оптимальной структуры НСОП количество нейронов в скрытом слое было увеличено с 7 до 20. Из-за случайности инициализации каждая модель НСОП с разным количеством скрытых нейронов итерировалась с последующим выбором модели, обеспечивающей наименьшие значения СКО. Полученные значения СКО, САОО, СКВО и R^2 для каждой модели сети с различными параметрами приведены в табл. 4. Видно, что наилучшие характеристики НСОП с байесовской регуляризацией распространения ошибки намного превосходили лучшие характеристики, полученные с помощью НСОП и алгоритмов ЛМ, МСГ и СГПР. Значения СКО, САОО (%) и R^2 для оптимальной конфигурации сети составили соответственно 0,0004, 1,48 % и 0,9998.

Таблица 4

Сравнение ошибок прогнозов, полученных с помощью нейронных сетей с различными алгоритмами обучения и с разным количеством нейронов

Алгоритм	СКО	САОО, %	СКВО	R^2	Количество итераций
ЛМ 7	0,0017	4,400	0,013	0,9992	74
МСГ 7	0,0048	12,923	0,099	0,9943	130
БР 7	0,0018	4,8720	0,0136	0,9992	224
СГПР 7	0,0046	12,068	0,093	0,9946	123
ЛМ 11	0,0013	2,437	0,0079	0,9995	272
МСГ 11	0,0041	11,880	0,0740	0,9958	212
БР 11	0,0006	1,7300	0,0011	0,9997	537
СГПР 11	0,0044	12,851	0,0865	0,9950	167
ЛМ 15	0,0010	1,7431	0,0041	0,9997	267
МСГ 15	0,0046	13,686	0,0938	0,9946	95
БР 15	0,0004	1,4860	0,0017	0,9998	727
СГПР 15	0,0039	10,240	0,0658	0,9962	214
ЛМ 19	0,0011	1,6220	0,0052	0,9997	176
МСГ 19	0,0046	12,540	0,0935	0,9946	140
БР 19	0,0006	1,5600	0,0012	0,9997	751
СГПР 19	0,0043	11,756	0,0823	0,9953	142

Параметры и результаты оптимизированной модели ИНС приведены в табл. 5 и на рис. 1, где проведено сравнение между экспериментальными и прогнозируемыми данными, полученными с использованием НСОП для обучения, тестирования и представления всего набора данных соответственно. Видно, что НСОП позволяет достаточно точно прогнозировать теплопроводность чистых хладагентов. Получены полностью согласованные графики по теплопроводности, которые согласуются по векторам $\alpha =$ = наклон, $\beta = y$ (точка пересечения) и $R =$ коэффициент корреляции с почти идеальным приближением: для стадии обучения это соответственно $[\alpha, \beta, R] = [1, 5,9 \cdot 10^{-6}, 0,99994]$; для стадии тестирования — $[\alpha, \beta, R] = [1, 3,5 \cdot 10^{-5}, 0,9998]$ и $[\alpha, \beta, R] = [1, 2,5 \cdot 10^{-6}, 0,9998]$ — при представлении всей базы данных. Приведенные результаты показывают, что предсказанные значения хорошо согласуются с экспериментальными данными.

На рис. 2 показана тенденция изменений СКО при разном количестве нейронов в скрытом слое для НСОП с алгоритмом ЛМ. Как можно видеть, сеть с 15 нейронами в скрытом слое обеспечивала наименьшее значение СКО при представлении всего набора данных, рассматриваемых в совокупности, поэтому СКО можно считать оптимальным параметром для НСОП. Кроме того, отсюда следует, что увеличение числа скрытых нейронов не приводит к заметному улучшению результатов. На рис. 3 приведена кривая качества работы сети, полученная при ее обучении. Этот параметр был измерен в терминах СКО при рассмотрении сходимости результатов к наилучшему возможному

Таблица 5

Структура оптимизированной модели ИНС

Тип сети	Алгоритм обучения	Входной слой	Скрытый слой		Выходной слой	
		Количество нейронов	Количество нейронов	Функция активации	Количество нейронов	Функция активации
Сеть с прямой связью с обратным распространением ошибки	Байесово регулирование с обратным распространением (trainbr)	05	15	Tansig	1	Purelin

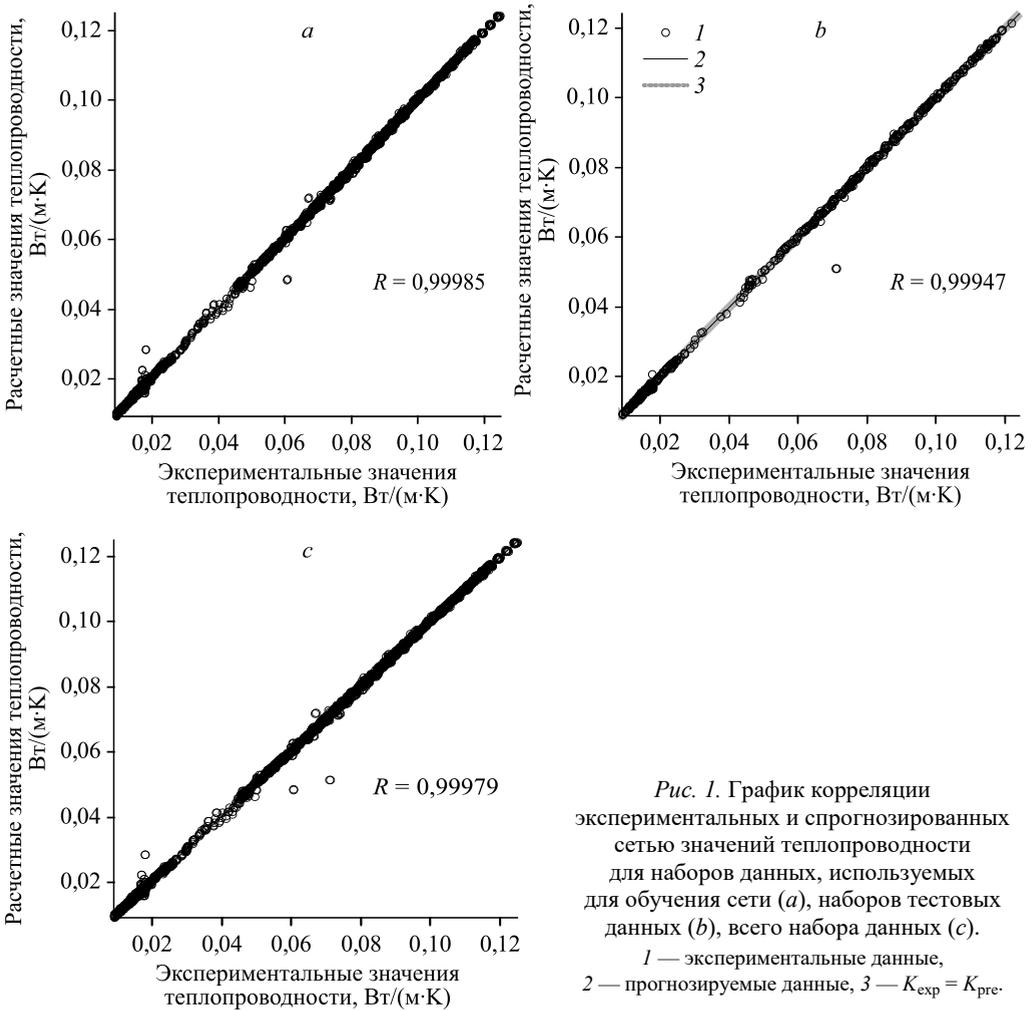
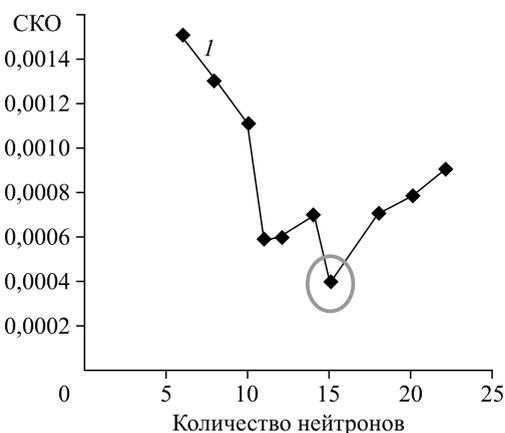


Рис. 1. График корреляции экспериментальных и спрогнозированных сетью значений теплопроводности для наборов данных, используемых для обучения сети (а), наборов тестовых данных (б), всего набора данных (с).
1 — экспериментальные данные, 2 — прогнозируемые данные, 3 — $K_{\text{exp}} = K_{\text{pre}}$.

значению (при постоянном падении). Выяснилось, что после 727 итераций качество определения искомой величины не улучшалось, оставаясь на уровне $6,77 \cdot 10^{-7}$, что указывает на явление переобучения сети.

На рис. 4 приведено сравнение экспериментальных данных (1) с результатами прогнозирования теплопроводности (2). Сравнение показывает приемлемое соответствие



между опубликованными в литературе экспериментальными данными и результатами прогнозирования с помощью разработанной нейронной модели, что свидетельствует о ее надежности и устойчивости. Кроме того, на рис. 5 показана невязка прогнозируемых значений тепловых данных по отношению к экспериментальным значениям для настоящей модели. Большинство рассчитанных невязок

Рис. 2. Изменение значения СКО (1) в сетях с разным количеством скрытых нейронов.

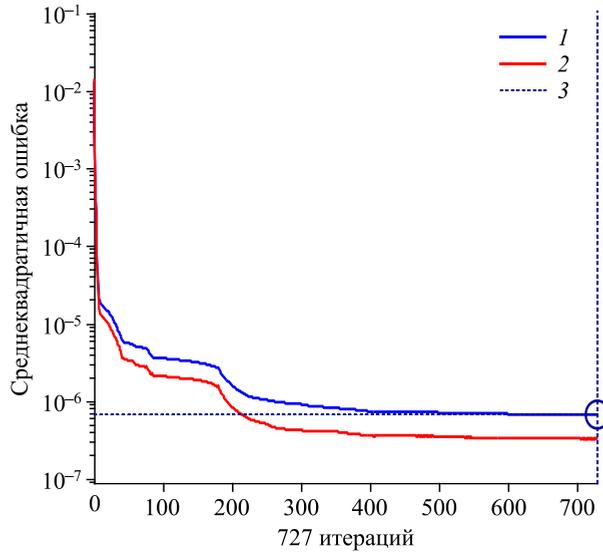


Рис. 3. Изменение ошибки при лучшей производительности нейронной сети.
1 и 2 — кривые, полученные при обучении и тестировании сети соответственно, 3 — лучшее значение.

распределены с отклонением по обе стороны от нулевой линии, демонстрируя значительную корреляцию с процентной ошибкой невязки, колеблющейся в диапазоне $\pm 0,002$. Следовательно, при разработке настоящей модели не возникло никакой значительной систематической ошибки.

Реализованная нейронная сеть, способная точно прогнозировать теплопроводность чистых хладагентов, может применяться с использованием функции активации (f_H), значений весов и смещений, приведенных в табл. 6. Здесь w_i^j — матрица весов связи нейронов

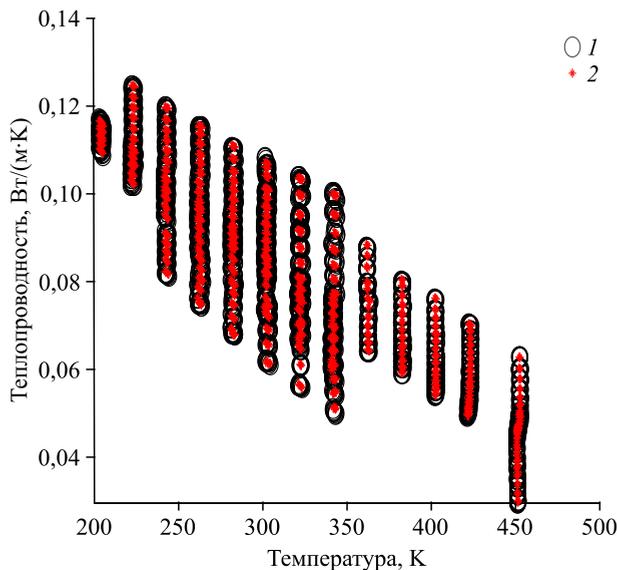


Рис. 4. Сравнение экспериментальных и расчетных значений теплопроводности в зависимости от температуры.
1 — результаты эксперимента, 2 — расчетные данные.

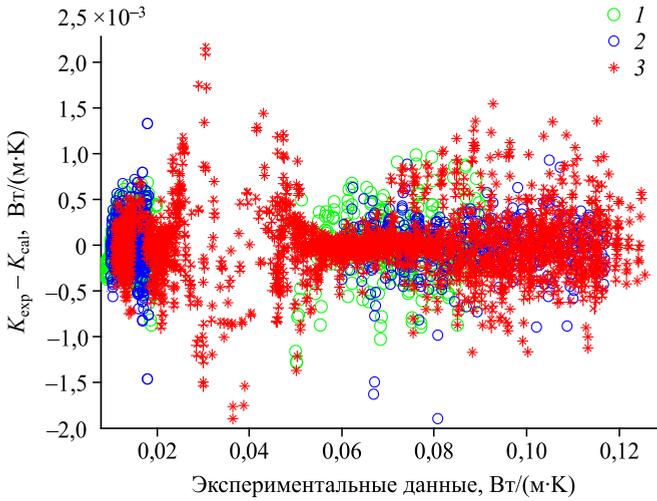


Рис. 5. График значений невязок теплопроводности по модели МП-ИНС.

Данные для гидрофторолефинов R1234yf (1), R1234ze (E) (2) и R1234zd (E) (3).

входного и скрытого слоев, w_j^H — матрица весов связи нейронов скрытого и выходного слоев, b_j^H — смещение для скрытых нейронов и b_{OK} — смещение для выходного нейрона. Теплопроводность допускает простой пересчет с использованием этих весов и смещений. Её можно выразить с помощью математической модели, которая включает все входные данные (E_i). Представим сначала формулу для мгновенных выходных данных (Z_j) скрытого слоя:

$$Z_j = f_H \left[\sum_{i=1}^5 w_{ji}^I E_i + b_j^H \right] = \frac{\exp \left(\sum_{i=1}^5 w_{ji}^I E_i + b_j^H \right) - \exp \left(- \sum_{i=1}^5 w_{ji}^I E_i + b_j^H \right)}{\exp \left(\sum_{i=1}^5 w_{ji}^I E_i + b_j^H \right) + \exp \left(- \sum_{i=1}^5 w_{ji}^I E_i + b_j^H \right)}, j = 1, 2, \dots, 15, (7)$$

Таблица 6

Веса и смещения лучшей конфигурации нейронной сети

Входной скрытый слой					Выходной слой		
Веса (w_j^I)					Смещения	Веса (w_j^H)	Смещения
T	P	q	ω	μ	b_j^H	K	B_{OK}
-1,137	13,787	5,128	-1,663	-1,399	18,377	14,410	-5,66
0,526	0,0133	-0,0086	0,449	0,368	-0,422	8,002	
0,134	0,550	0,293	-1,544	-3,077	1,0986	-0,841	
-7,827	103,60	25,436	-3,694	-2,543	120,01	-19,025	
-8,588	110,02	26,615	-3,933	-2,670	127,47	-18,616	
6,465	-0,107	1,380	5,637	4,242	4,496	0,0103	
-0,422	0,0190	0,0053	-0,428	-0,366	0,339	10,573	
8,179	-106,20	-25,768	3,793	2,590	-122,95	-37,907	
3,768	-51,24	-14,895	33,56	-5,024	-29,007	-0,228	
1,087	-12,477	-4,633	1,671	1,422	-16,612	16,165	
0,153	0,6980	0,287	-2,422	-1,641	-0,682	0,492	
2,400	-22,701	-7,639	13,123	-8,606	-12,717	0,894	
1,338	-13,82	-5,299	1,832	1,555	-16,612	-0,609	
1,925	-28,98	-11,926	0,819	0,458	-37,511	-0,511	
1,012	-2,566	-0,241	0,888	0,739	-5,054	-6,571	

при этом выходное значение сети K записывается в виде:

$$\text{Output} = K = f_0 \left[\sum_{j=1}^{15} w_{1j}^H E_j + b_{OK} \right] = \left[\sum_{j=1}^{15} w_{1j}^H E_j + b_{OK} \right]. \quad (8)$$

Тогда комбинация уравнений (7) и (8) приводит к следующей формуле для теплопроводности с учетом всех значений входных параметров (E_i):

$$K = \left[\sum_{j=1}^{15} w_{1j}^H \frac{\exp \left(\sum_{i=1}^5 w_{ji}^I E_i + b_j^H \right) - \exp \left(- \sum_{i=1}^5 w_{ji}^I E_i + b_j^H \right)}{\exp \left(\sum_{i=1}^5 w_{ji}^I E_i + b_j^H \right) + \exp \left(- \sum_{i=1}^5 w_{ji}^I E_i + b_j^H \right)} + b_{OK} \right]. \quad (9)$$

Корреляционный анализ

Корреляционный анализ — это математический метод, демонстрирующий степень взаимосвязи между двумя переменными в вероятности и статистике. Для измерения степени этой взаимосвязи используются различные математические уравнения корреляции. Коэффициент корреляции произведения, называемый еще коэффициентом корреляции Пирсона или моментом произведения Пирсона, является наиболее широко используемым параметром для оценки линейной корреляции между двумя переменными. Этот коэффициент по отношению к переменным X и Y определяется как

$$\rho_{X,Y} = \frac{\text{COV}(X, Y)}{\sigma_X \sigma_Y}, \quad (10)$$

где COV — ковариация, а σ_X и σ_Y — стандартные отклонения значений переменных X и Y соответственно.

Значение коэффициента корреляции Пирсона варьируется от -1 до $+1$. Значение 0 свидетельствует об отсутствии линейной связи между переменными. Если коэффициент близок к $+1$ или к -1 , то имеет место идеальная линейная корреляция между двумя переменными. В табл. 7 приведена корреляционная матрица выбранных переменных. Для многомерной системы элементы корреляционной матрицы указывают на связь между каждым двумя переменными [35]. Из матрицы видно, что использованная мощность нагрева и давление проявляли самую сильную линейную связь с теплопроводностью, в то время как температура, дипольный момент и фактор ацентричности оказывали лишь небольшое линейное влияние на результаты моделирования.

Таблица 7

Корреляционная матрица переменных

Входные переменные	K	T	P	q	ω	μ
K	1	-0,3051	0,7078	0,8957	0,0866	-0,2157
T	-0,3051	1	-0,1345	-0,3049	0,0354	-0,2525
P	0,7078	-0,1345	1	0,6462	0,0329	-0,2142
q	0,8957	-0,3049	0,6462	1	0,0246	-0,1454
ω	0,0866	0,0354	0,0329	0,0246	1	-0,8756
μ	-0,2157	-0,2525	-0,2142	-0,1454	-0,8756	1

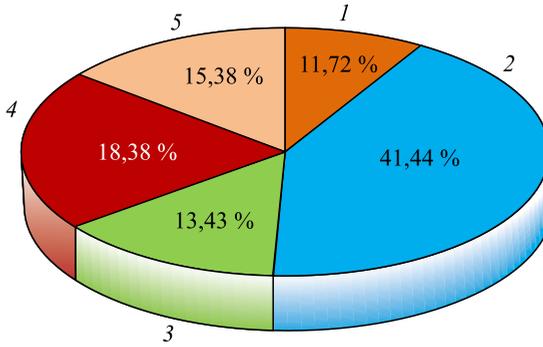


Рис. 6. Относительное влияние входных параметров на результаты, полученные с помощью ИНС.

1 — температура, 2 — давление, 3 — применяемая мощность нагрева, 4 — ацентрический фактор, 5 — дипольный момент.

Анализ чувствительности

Существуют различные методы для выявления влияния каждой входной переменной и ее вклада в выходные данные модели. В представленной работе для измерения относительной важности (RI) входных переменных в ИНС рассматривалась процедура разделения весов связей [36]. Этот метод был впервые представлен в исследовании [37], а позже использован в работе [38]. Детали алгоритма нахождения RI определяются следующим соотношением [39]:

$$RI = \frac{\sum_{j=1}^{n_H} \left[\left(\frac{w_{vj}}{\sum_{K=1}^{nv} w_{Kj}} \right) O_j \right]}{\sum_{i=1}^{nv} \left[\sum_{j=1}^{n_H} \left(\frac{w_{vj}}{\sum_{K=1}^{nv} w_{Kj}} \right) O_j \right]} \cdot 100, \quad (11)$$

здесь nv и n_H — количество нейронов во входном и скрытом слоях, w_j — абсолютное значение весов связи между нейронами входных и скрытых слоев, O_j — абсолютное значение весов связи между скрытым и выходным слоями. Изменение переменных с более высоким значением относительной важности оказывает большее влияние на результаты ИНС, чем изменение переменных с меньшим расчетным значением RI [27, 39].

Результаты для разных вкладов приведены на рис. 6, где видно, что все выбранные входные параметры влияют на теплопроводность. Однако параметром, оказывающим наиболее сильное влияние на результаты разработанной ИНС, является давление с вкладом 41,5 %.

Выводы

В настоящем исследовании многослойные персептроны (особое семейство искусственных нейронных сетей) были обучены для решения регрессионной задачи, в которой авторы пытались предсказать теплопроводность следующих экологически чистых хладагентов: R1234yf, R1234ze(E) и R1233zd(E). В качестве входных переменных были выбраны температура, давление, используемая мощность нагрева, фактор ацентричности и дипольный момент. Сильная связь между входными и выходными переменными была

продемонстрирована с помощью корреляционного анализа. Выбор методологии был начат с широкого диапазона с тем, чтобы была выбрана модель с минимальной сложностью и оптимальной производительностью для оптимизации параметров сети, включая выбор количества нейронов в скрытом слое и наиболее эффективных передаточных функций скрытого и выходного слоев.

В настоящей работе из открытых источников было собрано в общей сложности 4395 экспериментальных данных. Затем эти данные были использованы для обучения, оценки и поиска оптимальной структуры сети; 80 % из них выступали в качестве обучающих данных, а остальные использовались для тестирования. Набор обучающих данных применялся для обучения сети, а набор тестовых данных — для проверки качества работы/производительности модели сети. Для оценки теплопроводности использовался алгоритм обратного распространения с прямой связью и с обучением по методу байесовской регуляризации распространения ошибки. При этом наилучшая топология сети была получена в виде $(5-15-1)$ с гиперболической сигмоидой в качестве передаточной функцией для скрытого слоя и линейной передаточной функцией для выходного слоя. Кроме того, исследование продемонстрировало способность разработанной нейронной сети прогнозировать характеристики гидрофторолефиновых хладагентов. Так, теплопроводность показала хорошие характеристики ($R = 0,9998$) с меньшими ошибками для СКО = 0,0004 и СКВО = 0,0017, а модель ИНС — наилучшие характеристики с САОО = 1,48 %. Более того, давление оказалось наиболее чувствительным параметром, влияющим на результаты разработанной ИНС, со вкладом 41,5 %.

Результаты работы показали, что ИНС обладает значительными возможностями моделирования при решении задач, в которых корреляция между входными и выходными данными не является линейной. Кроме того, эту модель удобно использовать для прогнозирования теплопроводности смесей, учитывая, насколько просто несколько изменить архитектуру сети, введя новый состав смеси в качестве входного признака.

Список обозначений

САОО — среднее абсолютное относительное отклонение,	СКО — среднеквадратическая ошибка,
ИНС — искусственная нейронная сеть,	МСГ — масштабированный сопряженный градиент,
ХФУ — хлорфторуглероды,	СКВО — сумма квадратов ошибок,
БР — байесовская регуляризация,	N — количество точек данных,
НСОР — нейронная сеть с обратным распространением ошибки,	P — давление, МПа,
ЛМ — Левенберг–Марквардт,	R^2 — коэффициент детерминации,
МП — многослойный перцептрон,	T — температура, К,
	W — значения весовых коэффициентов.

Надстрочные/подстрочные индексы

prе — расчетное значение,	H — скрытый слой,
ехр — экспериментальное значение,	i — входная величина.

Греческие буквы

K — теплопроводность, Вт/(м·К),	μ — дипольный момент, Д,
q — реализованная мощность нагрева, Вт/м,	α — наклон уравнения линейной регрессии,
ω — фактор ацентричности,	β — точка пересечения уравнения линейной регрессии.

Список литературы

1. Li S., Yang F., Zhang K., Duan Y., Yang Z. Vapor pressure measurements and correlation for trans-1-chloro-3,3,3-trifluoroprop-1-ene // *J. Chem. Engng Data*. 2019. Vol. 64. P. 2947–2954.
2. UNEP, 2014. Report of the refrigeration, air conditioning and heat pumps. Assessment-Report-2014. <https://manualzz.com/doc/2985884/refrigeration--air-conditioning-and-heat-pumps>.
3. Di Nicola G., Pierantozzi M. Surface tension prediction for refrigerant binary systems // *Int. J. Refrigeration*. 2013. Vol. 36. P. 562–566.
4. Di Nicola G., Coccia G., Pierantozzi M., Falone M. A semi-empirical correlation for the estimation of the second virial coefficients of refrigerant // *Int. J. Refrigeration*. 2016. Vol. 68. P. 242–251.
5. Di Nicola G., Ciarrocchi E., Coccia G., Pierantozzi M. Correlations of thermal conductivity for liquid refrigerants at atmospheric pressure or near saturation // *Int. J. Refrigeration*. 2014. Vol. 45. P. 168–176.
6. Khosharay S., Khosharay K., Di Nicola G., Pierantozzi M. Modelling investigation on the thermal conductivity of pure liquid, vapour, and supercritical refrigerants and their mixtures by using Heyen EOS // *Physics and Chemistry of Liquids*. 2017. P. 1–17.
7. De Monte F. Calculation of thermodynamic properties of R407c and R410a by the Martin–Hou equation of state. Part I. Theoretical development // *Int. J. Refrigeration*. 2002. Vol. 25. P. 306–313.
8. Fourier J.B.J. *Theorie analytique de la chaleur*. Paris: Chez Firmin Didot, père et fils, 1822. 639 p.
9. Галем Н., Ханини С., Насёр М.У., Лэди М., Амран М. Расчет теплопроводности жидких и парообразных хладагентов для чистых веществ и их бинарных и троичных смесей с помощью искусственной нейронной сети // *Теплофизика и аэромеханика*. 2019. Т. 26, № 4. С. 605–624.
10. Carra S. *Fundamentals of chemistry*. 2009. Vol. 2. 516 p.
11. Latini G., Pacetti M. Liquid thermal conductivity, correlations and estimations // *Bull. Int. Inst. Refrigeration*. 1977. Vol. 57. P. 1446–1473.
12. Latini G. An estimation method for the thermal conductivity of the refrigerants in the liquid state // *Int. Refrigeration and Air Conditioning Conf. at Purdue*, 2008. P. 1–7.
13. Fedele L., Di Nicola G., Brown J.S., Colla L., Bobbo S. Saturated pressure measurements of cis-pentafluoroprop-1-ene (R1225ye (Z)) // *Int. J. Refrigeration*. 2016. Vol. 69. P. 243–250.
14. Lai N.A. Thermodynamic properties of HFO-1243zf and their application in study on a refrigeration cycle // *Appl. Therm. Engng*. 2014. Vol. 70. P. 1–6.
15. US-EPA, 2015. Protection of stratospheric ozone: proposed new listings of substitutes // *Federal Register — Rules and Regulations*. U.S. Environmental Protection Agency. 015. P. 42053–42066.
16. US-EPA, 2016. Protection of stratospheric ozone: proposed new listings of substitutes // *Federal Register-Proposed Rules*. U.S. Environmental Protection Agency. P. 22810–22909.
17. Roosta A., Setoodeh P., Jahanmiri A. Artificial neural network modeling of surface tension for pure organic compounds // *Ind. Engng Chem. Research*. 2012. Vol. 51. P. 561–566.
18. Di Nicola G., Pierantozzi M. Surface tension of alcohols: a scaled equation and an artificial neural network // *Fluid Phase Equilibria*. 2015. Vol. 389. P. 16–27.
19. Mulero A., Pierantozzi M., Cachadina I., Di Nicola G. An artificial neural network for the surface tension of alcohols // *Fluid Phase Equilibria*. 2017. Vol. 449. P. 28–40.
20. Oreski S. Comparison of neural network and empirical models for prediction of second virial coefficients for gases // *Procedia Engng*. 2012. Vol. 42. P. 303–312.
21. Najafi A., Hamzehie M.E., Najibi H., Soleimani M., Van Gerven T., Van der Bruggen B., Mazinani S. Thermal conductivity prediction of pure liquids using multi-layer Perceptron neural network // *J. Thermophys. Heat Transfer*. 2015. Vol. 29. P. 197–202.
22. Pierantozzi M., Petrucci G. Modeling thermal conductivity in refrigerants through neural networks // *Fluid Phase Equilibria*. 2018. Vol. 460. P. 36–44.
23. Laidi M., Hanini S., Rezrazi A., Yaiche M.R., El Hadj A.A., Chellali F. Supervised artificial neural network based method for conversion of solar radiation data (case study: Algeria) // *Theoretical. Appl. Climatology*. 2016. Vol. 128. P. 439–445.
24. Kalogirou S.A. Artificial intelligence for the modeling and control of combustion processes: a review // *Progress in Energy Combustion. Sci*. 2003. Vol. 29, Iss. 6. P. 515–566.
25. Sozen A., Arcaklioglu E., Ozalp M. Formulation based on artificial neural network of thermodynamic properties of ozone-friendly refrigerant/absorbent couples // *Applied Thermal Engng* 2005. Vol. 25. P. 1808–1820.
26. Sencan A., IlkeKse I., Selbas R. Prediction of thermophysical properties of mixed refrigerants using artificial neural network // *Energy Conversion Management*. 2011. Vol. 52. P. 958–974.
27. Nabipour M., Keshavarz P. Modeling surface tension of pure refrigerants using feed-forward back-propagation neural networks // *Int. J. Refrigeration*. 2017. Vol. 75. P. 217–227.

28. **Ansaria H.R., Zareia M.J., Sabbaghia B.S., Keshavarz P.** A new comprehensive model for relative viscosity of various nanofluids using feed-forward back-propagation MLP neural networks // *Intern. Communications in Heat and Mass Transfer*. 2018. Vol. 91. P. 58–164.
29. **Sediri M., Hanini S., Laidi M., Turki S.A., Cherifi H., Hamadache M.** Artificial neural networks modeling of dynamic adsorption from aqueous solution Moroccan // *J. Chemistry*. 2017. Vol. 5. P. 236–243.
30. **Yacef R., Mellit A., Belaid S., Sen Z.** New combined models for estimating daily global solar radiation from measured air temperature in semi-arid climates: Application in Ghardaïa, Algeria // *Energy Conversion Management*. 2014. Vol. 79. P. 606–615.
31. **Lemmon E., Huber M., McLinden M.** NIST Standard Reference Database 23: Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties-REFPROP, Version 10.0, National Institute of Standards and Technology, Standard Reference Data Program, Gaithersburg. 2018.
32. **Perkins R.A., Huber M.L.** Measurement and correlation of the thermal conductivity of 2, 3, 3, 3-tetrafluoroprop-1-ene (R1234yf) and trans-1, 3,3,3-tetrafluoropropene (R1234ze(E)) // *J. Chem. Engng Data*. 2011. Vol. 56. P. 4868–4874.
33. **Perkins R.A., Huber M.L.** Measurement and correlation of the thermal conductivity of trans-1-chloro-3,3,3-trifluoropropene (R1233zd(E)) // *J. Chem. Engng Data*. 2017. Vol. 62. P. 2659–2665.
34. **Sediri M., Hanini S., Cherifi H., Laidi M., Turki S.A.** Dynamic adsorption modelling of p-nitrophenol in aqueous solution using artificial neural network // *J. Materials Environ. Sci*. 2017. Vol. 8, Iss. 7. P. 2282–2287.
35. **Lashkarbolooki M., Shafipour Z.S., Hezave A.Z.** Trainable cascade-forward back-propagation network modeling of spearmint oil extraction in a packed bed using SC-CO₂ // *J. Supercritical Fluid*. 2013a. Vol. 73. P. 108–115.
36. **Shabanzadeh P., Yusof R., Shameli K.** Artificial neural network for modeling the size of silver nanoparticles prepared in montmorillonite/starch bionanocomposites // *J. Industrial Engng Chem*. 2015. Vol. 24. P. 42–50.
37. **Garson D.G.** Interpreting neural network connection weights // *Artificial Intelligence*. 1991. Vol. 6. P. 47–51.
38. **Goh A.** Back-propagation neural networks for modeling complex systems // *Engng Applications Artificial Intelligence*. 1995. Vol. 9. P. 143–151.
39. **Vatankhah E., Semnani D., Prabhakaran M.P., Tadayon M., Razavi S., Ramakrishna S.** Artificial neural network for modeling the elastic modulus of electrospun polycaprolactone/gelatin scaffolds // *Acta Biomaterialia*. 2014. Vol. 10. P. 709–721.

*Статья поступила в редакцию 24 декабря 2021 г.,
после доработки — 11 марта 2022 г.,
принята к публикации 22 марта 2022 г.*