

УДК 536.2.081.7

## Расчет теплопроводности жидких и парообразных хладагентов для чистых веществ и их бинарных и троичных смесей с помощью искусственной нейронной сети

Н. Галем<sup>1</sup>, С. Ханнини<sup>2</sup>, М.У. Насёр<sup>1</sup>, М. Лэди<sup>2</sup>, А. Амран<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Университет Блиды, Блида, Алжир

<sup>2</sup>Университет Медеа, Медеа, Алжир

<sup>3</sup>Национальная высшая школа химии Ренна, университет Ренна 1, Ренн, Франция

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

Определение теплофизических свойств гидрофторуглеродов, особенно теплопроводности, является важной задачей. В настоящей работе исследуется потенциал модели искусственной нейронной сети для установления теплопроводности гидрофторуглеродов в диапазонах 169,87–533,02 К, 0,047–68,201 МПа и 0,0089 – 0,1984 Вт/(м·К) температур, давлений и теплопроводности соответственно одиннадцати систем, включающих три различные категории, состоящие из пяти чистых систем (R32, R125, R134a, R152a, R143a), четырех бинарных смесей (R32 + R125, R32 + R134a, R125 + R134a, R125 + R143a) и двух троичных смесей (R32 + R125 + R134a, R125 + R134a + R143a). Каждой из них соответствовало 1817, 794 и 616 точек данных. Использование этих 3227 точек данных для жидкости и пара при различных температурах и давлениях позволило обучить, верифицировать и протестировать рассматриваемую модель. Исследование показало, что модели искусственной нейронной сети представляют хорошую альтернативу существующим моделям для оценки с удовлетворительной точностью теплопроводности различных систем хладагентов. Предсказанный с приемлемым уровнем точности с использованием искусственной нейронной сети квадрат коэффициента корреляции теплопроводности составил  $R^2 = 0,998$  при  $RMSE = 0,0035$  и  $AAD = 0,002$  %. Результаты применения модели обученной нейросети к тестовым данным показывают, что метод обладает весьма высокой способностью предсказания.

**Ключевые слова:** хладагент, чистая система, смеси, теплопроводность, искусственная нейронная сеть, прогнозная модель.

### Введение

В последние годы возросла потребность в установлении баланса между потреблением энергии и защитой окружающей среды. Введение новых хладагентов для замены хлорфторуглеродов (ХФУ) и гидрохлорфторуглеродов (ГХФУ) и адаптация новых методов должны обеспечить снижение общего воздействия на окружающую среду. В целях снижения рисков, связанных с нарушением техники безопасности, разрабатывалась другая линия исследований — в направлении использования вторичного цикла охлаждения (косвенное охлаждение). Многие процессы, встречающиеся в промышленности, основываются на теплообмене.

Использование хладагентов вносит вклад в глобальное потепление, а истощение озонового слоя приводит к проблемам экологии. Организация Объединенных Наций подготовила Монреальский протокол, а также его лондонские и копенгагенские поправки [1]. До 80-х годов прошлого столетия основными классами химических веществ, применявшихся в качестве хладагентов в холодильной промышленности, были ХФУ и ГХФУ. Из-за очевидного роста потенциала истощения озонового слоя [2] под действием фреонов (ХФУ) в соответствии с Монреальским протоколом различные отрасли промышленности обратились к ГХФУ в качестве замены фреонов. Хотя ГХФУ имеют более низкий потенциал истощения озонового слоя, чем фреоны, они все же повреждают озоновый слой и поэтому стали темой обсуждения в свете программ по восстановлению озонового слоя на период до 2030 года. В качестве приемлемой альтернативы ХФУ и ГХФУ используются гидрофторуглероды (ГФУ), так как они обладают несколькими выгодными характеристиками, к которым относятся почти нулевой потенциал истощения озонового слоя и низкий потенциал глобального потепления, сходство с ХФУ и ГХФУ по физическим свойствам, короткие времена жизни в атмосфере, низкая способность к воспламенению или ее отсутствие и невысокая цена [3].

В процессе изучения влияния хладагентов на разрушение озонового слоя были разработаны концепции потенциалов истощения озонового слоя [4], которые позволяют определять потенциальную способность химических веществ к разрушению озонового слоя [5–8]. Исследованию потенциала глобального потепления был посвящен ряд публикаций, обзор которых представлен в работе [9].

Многие исследователи направляли свои усилия на измерение теплофизических свойств хладагентов, стремясь найти подходящие замены. Теплопроводность является одним из основных теплофизических свойств. В соответствии с уравнением Фурье, теплопроводность — это способность материала передавать тепло путем его переноса посредством проводимости. Теплопроводность  $K$  (Вт/(м·К)) имеет важное значение для определения теплопередачи, в частности, для хладагентов. Действительно, чем выше теплопроводность жидкости и пара, тем выше коэффициент теплопроводности. В настоящей работе исследуется проблема замены ХФУ и ГХФУ. Впервые рассматриваются технические аспекты экспериментов (измерения) и аспекты моделирования полученных данных. Изучаются смеси (чистые, бинарные и троичные) соединений R32, R125, R134a, R152a и R143a, принадлежащие ГФУ, представляющие значительный интерес для производства кондиционеров и холодильного оборудования.

Разные исследователи использовали различные уравнения и методы для предсказания и воспроизведения термодинамических свойств систем охлаждения. Большая часть этих попыток ограничивалась неполными системами и, насколько известно авторам, систематических работ, посвященных тестированию способности этих методов к предсказанию термодинамических свойств различных категорий систем, в литературе не представлено. Существует ряд теорий, в которых представлены уравнения для предсказания теплопроводности жидкостей. Среди соответствующих уравнений есть учитывающие межмолекулярные расстояния [10], уравнения, основанные на теории группового вклада [11] или молекулярных дескрипторов [12, 13], уравнения, включающие некоторые фиксированные параметры для описания теплопроводности [12, 14]. Рассматривался эмпирический подход, основанный на ограниченном числе фиксированных физических параметров [15], было также предложено новое уравнение для описания теплопроводности соединений R32, R125, R134a и R143a для практического использования, применимое в широком диапазоне температур и давления [16]. Изучались полумпирические подходы для увязывания данных о теплопроводности многокомпонентных жидких смесей [17, 18], предлагался метод оценки теплопроводности и вязкости, аналогичный кубическим уравнениям состояния галогенизированного углеводорода чистых веществ в областях жидкого и парообразного состояния [19, 20], выполнялось моделирование

теплопроводности смесей хладагентов в формате соответствующих трехпараметрических состояний [21]. В литературе представлены обширные исследования по теплопроводности смешанных хладагентов [22–24], которые предлагают корреляцию для расчета теплопроводности и вязкости некоторых альтернативных смесей хладагентов, таких как R507, R404A, R407C, R410A.

В последние годы некоторые исследователи использовали искусственные нейронные сети (ИНС) для того, чтобы найти оптимальные корреляции для прогнозирования свойств теплопроводности [25]. Были получены более точные результаты, чем при использовании традиционного подхода. Для минимизации трудностей экспериментальных измерений, временных затрат и высокой стоимости необходима дальнейшая разработка методов предсказания для оценки фазового поведения систем такого рода. В этой связи целью настоящего исследования стало применение искусственной нейронной сети для предсказания/прогноза теплопроводности чистых жидких и парообразных хладагентов, включающих R32, R125, R134a, R152a, R143a и их бинарные и троичные смеси, при различных температурах и давлениях.

## Методология и моделирование

### Нейронная сеть

Искусственные нейронные сети состоят из некоторого количества взаимодействующих нейронов. Использование ИНС позволяет получать решения разнообразных научных и инженерных задач, в частности, для оценки каких-либо физических и химических свойств [26]. ИНС может работать как модель черного ящика, которая не требует подробной информации о системе или оборудовании. Она может установить соотношение между входными и выходными характеристиками, используя обучающие данные.

ИНС используются во многих инженерных приложениях, например, в системах управления, а также при классификации и моделировании сложных процессов. Подробную информацию об искусственных нейронных сетях можно найти в работах [27, 28]. ИНС — широко используемый численный метод, который позволяет моделировать любой, даже сложный набор данных.

### Выбор параметров сети

Искусственные нейроны в сети упорядочены по слоям. Первому слою передаются входные, а именно экспериментальные данные ( $u_i$ ), каждый следующий слой получает взвешенные выходные данные от предыдущего слоя ( $w_{ij}, u_i$ ) в качестве входных данных. Такая ИНС прямого распространения приводит к передаче информации, когда каждый набор входных данных передается следующему слою, где он и обрабатывается. Данные последнего слоя являются выходными данными [29]. В такой ИНС прямого распространения нейрон в скрытом или выходном слое выполняет две задачи. Во-первых, он суммирует взвешенные входные данные от нескольких связей и значение смещения, затем применяет передаточную функцию к сумме, в соответствии со следующей формулой (для  $j$ -го нейрона скрытого слоя):

$$z_j = f_h \left( \sum_{i=1}^n w_{ji}^l u_i + b_{hj} \right), \quad j = 1, 2, \dots, m; \quad (1)$$

во-вторых, передает полученное значение через выходящие связи нейронам следующего слоя, которые подвергаются тому же процессу, описываемому формулой

$$V_k = f_0 \left( \sum_{j=1}^m w_{kj}^h z_j + b_{0k} \right), \quad k = 1, 2, \dots, i, \quad (2)$$

где  $z_j$  — выходные данные скрытого слоя, передаваемые  $k$ -му нейрону выходного слоя и дающие в результате выходное значение  $V_k$ .

Комбинируя уравнения (1) и (2), получаем соотношение между выходом  $V_k$  и входными данными  $u_i$  нейронной сети:

$$V_k = f_0 \left( \sum_{j=1}^m w_{kj}^h f_h \left( \sum_{i=1}^n w_{ji}^l u_i + b_{hj} \right) + b_{0k} \right), \quad k = 1, 2 \dots, i. \quad (3)$$

Выходные данные вычисляются посредством передаточной функции, называемой также функцией активации. Желательно, чтобы функция активации имела вид ступенчатой функции. Кроме того, поскольку непрерывность и дифференцируемость во всех точках являются необходимыми свойствами современных оптимизационных алгоритмов [29–31], в настоящем исследовании рассматриваются три вида передаточных функций:

— функция гиперболического тангенса

$$f(a) = \frac{e^a - e^{-a}}{e^a + e^{-a}}; \quad (4)$$

— логарифмическая сигмоидная передаточная функция

$$f(a) = \frac{1}{1 + e^{-a}}; \quad (5)$$

— линейная передаточная функция

$$f(a) = a. \quad (6)$$

### Обучение сети

В настоящей работе использовалась ИНС прямого распространения с обучением методом обратного распространения ошибок (ПРОРО), которая является весьма эффективной при представлении нелинейных соотношений между переменными. Алгоритм обратного распространения ошибки (ОРО) наиболее широко используется в ИНС и имеет различные варианты. Были выбраны ПРОРО с обучением по Левенбергу–Марквардту (ОРО) и один скрытый слой, так как этот вариант подходит для моделирования отношений между входными данными и выходной переменной [32].

### Тестирование сети

В качестве критериев для измерения эффективности сети использовались коэффициент детерминации ( $R^2$ ) и среднеквадратичная ошибка (RMSE), которые соответственно вычисляются по формулам

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (K_{\text{cal},i} - K_{\text{exp},i})^2}{\sum_{i=1}^N (K_{\text{exp},i})^2}, \quad (7)$$

$$\text{RMSE} = \sqrt{\sum_{i=1}^N (K_{\text{cal},i} - K_{\text{exp},i})^2 / N}, \quad (8)$$

здесь  $N$  — количество данных во множестве независимых данных,  $K_{\text{cal},i}$  — значения, полученные с помощью ИНС,  $K_{\text{exp},i}$  — измеренное значение одной точки данных  $i$  [33, 34].

Точность модели при воспроизведении и прогнозировании теплопроводности хладагентов при различных температурах и давлениях можно рассчитать с помощью статистических параметров [35, 36], а именно: абсолютного среднего отклонения (AAD) и квадрата среднеквадратичного отклонения (MSE), которые определяются ниже.

Квадрат величины среднеквадратичного отклонения вычисляется по формуле

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

среднее абсолютное отклонение записывается как [29]

$$\text{AAD} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |K_{\text{exp},i} - K_{\text{cal},i}|, \quad (10)$$

среднее абсолютное относительное отклонение имеет вид

$$\text{AARD \%} = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{K_{\text{exp},i} - K_{\text{cal},i}}{K_{\text{exp},i}} \right|. \quad (11)$$

### Оптимизация архитектуры сети

Оптимизация архитектуры сети является основной задачей в ИНС. К параметрам, воздействующим на эффективность сети, относятся число нейронов в скрытом слое, число скрытых слоев, передаточная функция и обучающий алгоритм. Можно оптимизировать архитектуру сети, варьируя указанные выше параметры (с использованием метода проб и ошибок), для достижения результатов с хорошей точностью [33, 34].

### Результаты и их обсуждение

В настоящем исследовании рассматривалась совокупность 3227 точек данных о теплопроводности. Собранные экспериментальные точки данных разбивались на три подмножества данных: пять чистых систем (R32, R125, R134a, R152a, R143a), четыре бинарные смеси (R32 + R125, R32 + R134a, R125 + R134a, R125 + R143a) и две троичные смеси (R32 + R125 + R134a, R125 + R134a + R143a) при различных температурах и давлениях. Каждое подмножество содержало соответственно 1817, 794 и 616 точек данных.

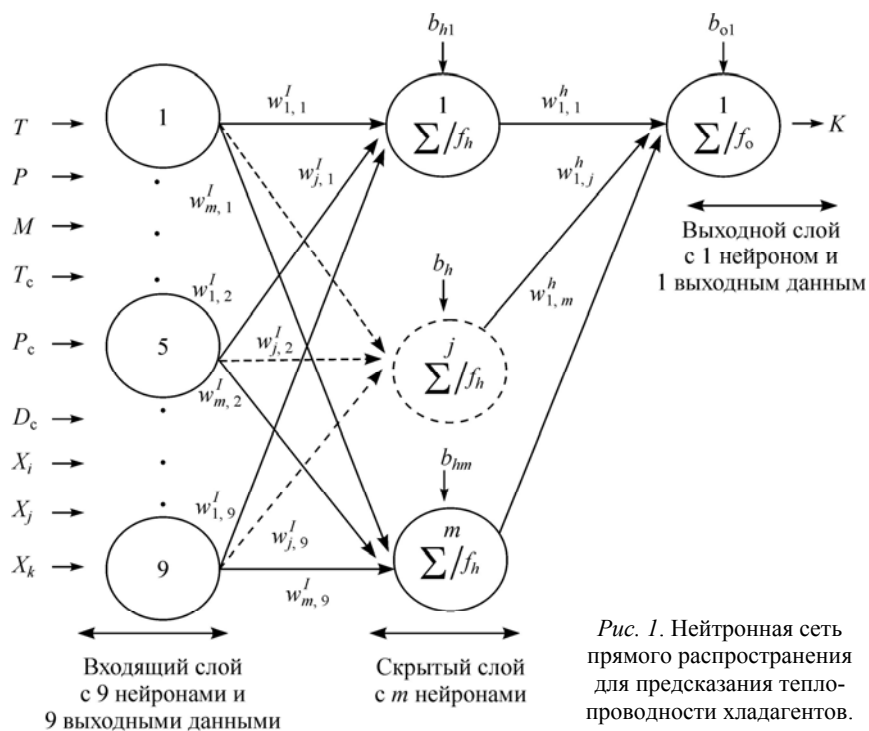
Для разработки модели нейронной сети нужно сначала определить входные и выходные данные. Входные данные включали в себя температуру ( $T$ , К) и давление ( $P$ , МПа), то есть два макроскопических набора данных, характеризующих физические условия системы. Кроме того, входными данными для чистых систем были молекулярный вес ( $M$ , г/моль), критическая температура ( $T_c$ , К), критическое давление ( $P_c$ , МПа), критическая плотность ( $D_c$ , кг/м<sup>3</sup>) и массовая доля жидкости или паровой фазы ( $X$ ), они задавались как свойства псевдокритических смесей для бинарных и троичных систем (9 входных данных), а теплопроводность относилась к выходным данным сети (1 выходное данное). Как видно из рис. 1, сеть имеет простую структуру и легко анализируется математически. В табл. 1 приведены значения физических свойств рассматриваемых соединений со ссылками на соответствующие работы. В настоящем исследовании используются экспериментальные данные открытого доступа для каждой системы — чистой, бинарной, троичной, — подробное описание которых дано соответственно в табл. 2–4.

Имеющиеся в наличии соотношения для расчета можно записать в виде:

$$K = f(T, P, M, T_c, P_c, D_c, X_i, X_j, X_k). \quad (12)$$

### Расчет свойств псевдокритических смесей

С учетом знания свойств величин  $P$ ,  $V$ ,  $T$  для чистых веществ были разработаны различные уравнения состояния. В случае критических смесей получить псевдосвойства можно с применением правила Кейза (1936):



$$T_{pc} = \sum_{i=0}^n X_i \cdot T_{ci}, \quad (13)$$

$$P_{pc} = \sum_{i=0}^n X_i \cdot P_{ci}, \quad (14)$$

$$D_{pc} = \sum_{i=0}^n X_i \cdot D_{ci}, \quad (15)$$

$$M_{pc} = \sum_{i=0}^n X_i \cdot M_{ci}, \quad (16)$$

$$K = f(T, P, M_{pc}, T_{pc}, P_{pc}, D_{pc}, X_j, X_k), \quad (17)$$

здесь для чистого хладагента ( $n = 1$ ),  $X_i = 1$ ,  $X_j = 0$ ,  $X_k = 0$ , для бинарных смесей ( $n = 1, 2$ ),  $X_i + X_j = 1$ ,  $X_k = 0$  и для троичных смесей ( $n = 1, 2, 3$ ),  $X_i + X_j + X_k = 1$ .

**Таблица 1**  
Критические свойства соединений, использованных в настоящей работе

Компонента	Молекулярный вес, г/моль	$T_c$ , К	$P_c$ , МПа	$D_c$ , кг/м <sup>3</sup>	Ссылки на работы
R32	50,020	351,55	5,83000	430,0	[56]
R125	120,02	339,45	3,59000	571,0	[56]
R134a	102,00	374,18	4,05629	508,0	[49]
R152a	66,050	386,44	4,52000	365,0	[44]
R143a	84,040	346,25	3,81100	434,0	[44]
R22*	86,470	369,35	4,99000	513,0	[56]
R124*	136,48	395,65	3,63400	560,0	[44]
R142b*	100,50	410,25	4,24600	459,0	[44]
R152a*	66,050	386,44	4,52000	365,0	[44]

\* — вредные хладагенты (для предсказания).

Таблица 2

Источники и диапазоны данных, использованные  
в настоящей работе для чистых систем

Компонента	$T$ , К	$P$ , МПа	$X_i$	$K$ , Вт/(м·К)	$N$	Ссылки на работы
R134a	293,15–353,15	0,10–2,540	1	0,0123–0,0256	32	[37]
	272,46–400,47	0,1005–8,9437	1	0,1165–0,0948	34	[38]
	202,83–303,05	1,2919–5,1772	1	0,08445–0,1272	28	[39]
	253,25–363,15	0,096–6,097	1	0,01205–0,10605	76	[40]
	203,00–393,00	0,09–68,201	1	0,01036–0,14495	207	[41]
	273,15–363,15	0,10–2,8	1	0,01096–0,02036	38	[42]
	252,97–333,20	1,71–22,43	1	0,0707–0,1113	32	[43]
	169,87–290,06	10,00	1	0,0862–0,1430	19	[44]
	303,00–463,00	0,10	1	0,01376–0,02758	05	[45]
	223,15–323,15	2–25	1	0,07448–0,12087	24	[46]
	213,01–292,88	1,00–21,34	1	0,087297–0,13048	51	[47]
	232,75–323,25	2,00–20,00	1	0,0751–0,1184	23	[48]
	295,85–532,94	0,1,0–50,00	1	0,01276–0,10494	521	[49]
	295,85–354,95	1,379–4,147	1	0,05715–0,08401	102	[50]
R125	172,74–290,02	10,00	1	0,0679–0,1116	16	[44]
	283,15–333,15	0,100–2,010	1	0,01229–0,01777	51	[51]
	253,04–313,46	1,24–16,03	1	0,0578–0,0793	19	[52]
	187,43–413,61	0,18–6,040	1	0,011–0,1075	28	[53]
	254,45–354,35	0,104–7,033	1	0,01212–0,08426	93	[54]
	231,25–324,05	2,00–20,00	1	0,0524–0,0984	24	[55]
	231,25–324,05	2,00–20,00	1	0,0524–0,0984	24	[48]
R32	283,15–333,15	0,10–3,00	1	0,01084–0,02025	51	[51]
	252,67–312,83	3,68–17,63	1	0,1148–0,1704	21	[52]
	223,15–323,15	2,00–20,00	1	0,11035–0,1984	22	[46]
	233,45–334,95	0,098–6,194	1	0,01081–0,17762	55	[54]
	232,55–322,95	2,00–20,00	1	0,1141–0,1927	22	[55]
R152a	263,15–363,15	0,082–6,22	1	0,01215–0,1263	67	[40]
	223,15–323,15	2,1–20,1	1	0,0928–0,145	25	[56]
	303–423	0,1	1	0,01491–0,02592	4	[45]
	189,61–299,33	7,71–8,55	1	0,1076–0,159	11	[57]
	211,69–294,29	0,79–18,5	1	0,10259–0,14752	38	[58]
R143a	293,15–353,15	0,1–3,98	1	0,0126–0,0375	29	[37]
	298–383	0,1	1	0,0123–0,01873	4	[45]
	233,15–323,45	2–20	1	0,0576–0,1121	21	[59]

\* $N$  — количество экспериментальных данных.

Таблица 3

Источники и диапазоны данных, использованные  
в настоящей работе для бинарных систем

Бинарные системы	$T$ , К	$P$ , МПа	$X_i + X_j = 1$	$K$ , Вт/(м·К)	$N$	Ссылки на работы
R32 + R125	283,15–298,15	0,10–1,20	1876–0,8222	0,0117–0,01502	69	[51]
	232,65–323,95	2–20	0,2522–0,7595	0,0639–0,1667	120	[55]
	213–293	2–30	0,249–0,75	0,0814–0,1785	60	[60]
R410A	255,04–409,8	0,101–3,69	0,5 + 0,5 = 1	0,02276–0,00998	50	[61]
R32 + R134a	223,15–323,15	2–25	0,3057–0,7496	0,08165–0,17378	72	[46]
	193,2–316,1	2–30	0,249–0,75	0,0846–0,1953	84	[60]
R125 + R134a	232,75–323,55	2–20	0,191–0,785	0,0597–0,1143	98	[48]
R507A	254,71–372,17	0,101–2,647	0,5 + 0,5 = 1	0,01007–0,02138	34	[61]
	297,95–332,55	1,465–3,775		0,05–0,0637	128	[62]
	312,59–424,24	0,105–1,902		0,01468–0,02528	79	[63]

\* R410A (R32, R125: 50 %, 50 %); R507A (R125, R143a: 50 %, 50 %).

Источники и диапазоны данных, использованные в настоящей работе для троичных систем

Троичные системы	$T$ , К	$P$ , МПа	$X_i + X_j + X_k = 1$	$K$ , Вт/(м·К)	$N$	Ссылки на работы
R32+R125+	193,1–293	2–30	0,19–0,23	0,0797–0,144	44	[64]
+R134a	232,55–324,15	2–20	0,18–0,61	0,0641–0,1505	168	[65]
407C	253,27–389,83	0,101–2,447	0,23+0,25+0,52 = 1	0,00968–0,02012	38	[61]
407C	303,9–424,25	0,1055–2,038	0,23+0,25+0,52 = 1	0,0133–0,02454	97	[66]
404A	252,8–393,09	0,101–2,763	0,44+0,04+0,52 = 1	0,0099–0,02234	46	[61]
	233,55–322,95	2–20	0,44+0,04+0,52 = 1	0,0563–0,1056	24	[59]
	311,32–428,94	0,13–1,841	0,44+0,04+0,52 = 1	0,02584–0,01451	91	[67]
	297,85–332,65	1,277–3,818	0,44+0,04+0,52 = 1	0,05073–0,06532	108	[70]

\* 407C (R32, R125, R134a: 23 %, 25 %, 52 %); 404A (R125, R134, R143: 44 %, 4 %, 52 %).

### Процедура моделирования теплопроводности с помощью нейронной сети

Моделирование с помощью ИНС состоит из следующих четырех шагов: (а) получение экспериментальных или теоретических данных; (б) обучение сети с использованием значений, полученных экспериментально или теоретически; (в) тестирование сети с применением данных, которые не использовались для обучения; (г) выявление наилучшей архитектуры сети на основе значений статистической эффективности [33, 34].

Фаза сбора экспериментальных данных должна быть как можно более полной. С учетом этого была разработана процедура, состоящая из нескольких фаз:

- разбиение базы данных (БД) на три части: БД чистых систем, БД бинарных систем, БД троичных систем;
- фаза предварительной обработки и анализа данных;
- разбиение данных на три подмножества: подмножества обучения, верификации и тестирования;
- фаза выбора параметров нейронной сети (нейронная сеть (ПРОРО), количества нейронов в скрытом слое, функции активации в скрытом слое (tansig), функции активации в выходном слое (tangsig));
- сохранение параметров оптимальной ИНС.

В таблице 5 приведена структура оптимизированной модели ИНС для чистых, бинарных, троичных и глобальных систем. Tansig — сигмоидная передаточная функция, применяемая в скрытом и выходном слоях для всех систем. В таблице приведены значения  $R^2$  и среднеквадратичной ошибки обученных систем (RMSE) для различного количества нейронов в скрытых слоях. Наилучшая конфигурация дает минимальную среднеквадратичную ошибку и соответствующее значение величины  $R^2$ . Параметры (весовые значения и смещения) наилучшей выбранной модели ИНФ для каждой системы — чистой, бинарной, троичной, глобальной — представлены соответственно в табл. 6–9, где  $w^l$  — связь между входом и скрытым слоем,  $w^h$  — связь между скрытым слоем и выходом,  $b_{hj}$  и  $b_{ok}$  — смещения соответственно скрытого и выходного слоев.

В табл. 10 показана линия регрессии уравнения модели сети во время обучения, проверки и прогнозирования множеств чистых, бинарных, троичных и глобальных систем. Величины RMSE, MSE, AAD, AARD и SSE представлены в табл. 11. Видно, что имеется заметная корреляция между экспериментальными и спрогнозированными значениями. Для каждого графика метод ИНС обеспечивает хорошие результаты



Таблица 5

Таблица значений определения коэффициента,  $R^2$  и RMSE при различных передаточных функциях с оптимальным количеством нейронов в каждом случае

Тип сети		Входной слой, кол-во нейронов	Скрытый слой, функция активации	Выходной слой, функция активации	Параметры	
					$R^2$	RMSE
Чистые системы	ПРОРО	13	Logsig	Tansig	0,99312	0,0039
		16	Logsig	Purelin	0,99411	0,0033
		<b>13</b>	<b>Tansig</b>	<b>Tansig</b>	<b>0,99615</b>	<b>0,0027</b>
		19	Tansig	Purelin	0,98434	0,0054
		25	Purelin	Tansig	0,75703	0,0200
Бинарные системы	ПРОРО	16	Logsig	Tansig	0,9971	0,0037
		15	Logsig	Purelin	0,9956	0,0045
		<b>13</b>	<b>Tansig</b>	<b>Tansig</b>	<b>0,9980</b>	<b>0,0030</b>
		19	Tansig	Purelin	0,9911	0,0064
		25	Purelin	Tansig	0,9909	0,0065
Тройчные системы	ПРОРО	15	Logsig	Tansig	0,9934	0,0046
		16	Logsig	Purelin	0,9928	0,0048
		<b>12</b>	<b>Tansig</b>	<b>Tansig</b>	<b>0,9983</b>	<b>0,0023</b>
		19	Tansig	Purelin	0,9933	0,0046
		25	Purelin	Tansig	0,9080	0,0157
Глобальная система (RN1)	ПРОРО	09	Tansig	Tansig	0,9925	0,0063
		16	Logsig	Tansig	0,9941	0,0057
		15	Logsig	Purelin	0,9825	0,0081
		<b>13</b>	<b>Tansig</b>	<b>Tansig</b>	<b>0,99667</b>	<b>0,0036</b>
		19	Tansig	Purelin	0,99279	0,0052
25	Purelin	Tansig	0,81528	0,0251		

Таблица 6

Веса и смещения оптимальной архитектуры ИНС (чистые системы)

Входные данные — скрытый слой						Выходной слой		
Веса ( $w_j^l$ ), кг/м <sup>3</sup>						Смещение $b_{hj}$	Веса ( $w_j^h$ )	Смещение $b_{ok}$
$T$ , К	$P$ , МПа	$M_{pc}$ , г/моль	$T_{pc}$ , К	$P_{pc}$ , МПа	$D_{pc}$ , кг/м <sup>3</sup>			
4,1835	-26,0332	3,548	-0,73562	1,9594	-2,3406	-24,0384	8,1261	-1,078
3,1419	3,6054	-0,36381	-1,9651	-2,152	-4,9293	5,0308	-2,9587	
1,0815	-1,6325	0,4712	-0,27291	-0,90651	-1,3208	-2,0767	-0,78916	
-1,0815	0,8861	1,4178	1,1202	-1,3863	0,31068	0,21321	-1,852	
4,186	-27,8174	3,0948	-0,53317	1,8773	0,31068	-25,6167	-12,7112	
0,018849	-10,7969	-2,5628	-4,3041	4,3532	-5,1926	-3,7738	3,0238	
-2,758	-3,7144	-0,13042	-0,16113	-3,4486	-3,4213	-3,7011	-1,4468	
3,643	3,5253	1,06	1,6562	-1,7157	3,1487	-0,10328	1,4675	
0,20958	21,8944	7,2547	7,4236	-5,9335	7,6625	9,693	9,5999	
0,67147	-0,19387	1,7556	0,184331	0,37153	-0,39813	0,68139	-2,7786	
-3,7149	1,3188	-2,8947	-1,3753	-4,3276	-6,2882	-4,335	3,7792	
-4,7261	33,3708	9,3397	11,3213	10,045	11,4176	10,549	-4,4501	
1,7355	-0,72955	-0,66524	-0,53499	-1,8261	-1,2245	2,8832	1,4051	

с высокими коэффициентами корреляции ( $R_{exp}^2$ ,  $R_{cal}^2$ ). Сравнение выходных данных и рассчитанных значений теплопроводности различных охлаждающих систем ( $R_{pure}^2 = 0,997$ ,  $R_{binary}^2 = 0,998$ ,  $R_{ternary}^2 = 0,998$ ,  $R_{global}^2 = 0,997$ ) показывает, что смещения близки к единице, и значения, отсекаемые на координатной оси, близки к нулю, что подтверждает согласованность между экспериментальными и предсказанными значениями (рис. 2).

Таблица 7

**Весы и наклоны оптимальной архитектуры ИНС (бинарные системы).  
Связи между входными данными и скрытым слоем**

Весы ( $w_j^i$ )								Смещение
$T, K$	$P, MPa$	$M_{pc}, \Gamma/моль$	$T_{pc}, K$	$P_{pc}, MPa$	$D_{pc}, \text{кг/м}^3$	$X_i$	$X_j$	$b_{hj}$
-1,1368	0,35087	0,061351	-0,092349	0,19155	0,015487	0,9552	0,93462	1,9505
-0,52848	-0,27209	-0,34413	1,5926	-1,8845	-2,2342	-0,89647	0,091077	0,72922
-9,2944	15,2025	-1,3931	-5,7894	-0,69764	-3,0922	-1,2185	0,63763	10,2253
0,74509	-0,046277	-2,1833	1,0658	1,6071	-1,7698	2,1854	-0,63659	-2,6666
-5,463	1,3739	0,35375	-3,044	-0,13265	3,0506	-0,70419	1,0513	0,063846
9,2908	-15,1812	0,67375	5,4099	0,5982	3,5809	0,51316	-0,9871	-9,9995
0,5417	-0,049875	-1,4994	1,3517	2,4231	-1,1869	2,38	-1,1708	-2,6427
-0,52533	-0,28921	1,232	2,1296	-1,0579	-2,9281	-0,47692	0,60561	0,72659
-5,2406	1,3486	1,0374	-3,6427	-1,5027	0,75957	-1,1621	0,60392	-0,0015349
-0,22325	-0,55471	-0,67886	-3,2055	0,02742	-0,096161	1,0705	1,0084	-2,6841
-0,69205	0,062437	-0,88158	0,7745	0,60294	1,371	-0,51057	-0,9332	-1,8227
3,4761	21,2807	0,9883	1,1499	-0,0055736	-0,49002	0,76189	0,62307	21,9264
3,4725	12,7136	0,97232	1,2258	0,24431	-0,20199	0,64987	0,51264	14,4721
Связи между скрытым слоем и выходными данными								
Нейрон	1	2	3	4	5	6	7	8
Весы ( $w_j^h$ )	2,1988	2,5544	-3,6827	1,0359	0,43907	-3,6939	-1,1012	-2,4532
Нейрон	9	10	11	12	13	Смещение ( $b_{ok}$ )		
Весы ( $w_j^h$ )	-0,44522	-0,52743	3,8007	8,5022	-8,5843	0,80292		

Таблица 8

**Весы и наклоны оптимальной архитектуры ИНС (троячные системы).  
Связи между входными данными и скрытым слоем**

Весы ( $w_j^i$ )									Смещение
$T, K$	$P, MPa$	$M_{pc}, \Gamma/моль$	$T_{pc}, K$	$P_{pc}, MPa$	$D_{pc}, \text{кг/м}^3$	$X_i$	$X_j$	$X_k$	$b_{hj}$
-6,7739	31,4165	3,2577	0,39732	1,036	-2,527	-3,2365	-4,0231	-2,7244	25,5898
-0,29425	-0,9485	-0,21473	0,21213	1,2451	-0,7214	0,11886	-0,74649	-2,0618	3,0249
-2,47	0,18387	0,75536	1,8232	0,99324	-0,27279	0,11747	1,3872	-0,52704	-1,2649
6,7677	-0,902	0,55508	-0,22995	-0,18338	1,1255	-0,24203	-0,49338	0,82683	-1,0511
12,3596	-35,956	-3,9554	-1,2256	-0,82614	2,2185	3,2681	5,1516	3,3689	-28,9329
-8,6059	30,2842	3,1171	0,62656	0,4441	-3,11	-3,9329	-4,3703	-3,1823	24,2517
5,3871	-0,45338	0,17102	0,88106	1,5367	0,51125	-0,22673	0,45733	-0,37837	0,89032
-4,024	0,6629	-0,072903	0,8168	1,6132	0,075941	-0,90256	0,61739	-0,52554	0,30976
-0,55489	0,97025	0,81368	-1,2384	-1,1274	0,27533	-0,68395	2,6689	-0,7989	-0,52271
-1,9379	0,18981	-0,039593	-0,46625	-1,1118	-0,55954	1,1551	0,28289	0,45203	-1,8192
-0,93241	0,1198	-1,3877	-0,25618	-0,12932	0,32091	0,38547	0,91658	-0,77965	-2,7939
-1,7399	0,08754	0,91754	0,57086	-0,14689	0,19638	0,45431	-0,51917	-0,50043	-0,42572
Связи между скрытым слоем и выходными данными									
Нейрон	1	2	3	4	5	6	7		
Весы ( $w_j^h$ )	5,5039	0,16279	2,6773	0,11532	-5,1089	-9,9932	0,33928		
Нейрон	8	9	10	11	12	Смещение ( $b_{ok}$ )			
Весы ( $w_j^h$ )	0,45079	0,36474	3,0944	-1,4005	-2,6727	1,1341			

Таблица 9

Параметры (веса и смещения) ИНС глобальных систем  
(чистые системы+бинарные системы+троичные системы).  
Связи между входными данными и скрытым слоем

Веса ( $w_j^i$ )									Смещение
$T, K$	$P, MPa$	$M_{pc}, \text{г/моль}$	$T_{pc}, K$	$P_{pc}, MPa$	$D_{pc}, \text{кг/м}^3$	$X_i$	$X_j$	$X_k$	$b_{hj}$
6,957	-12,2166	2,9853	-1,3155	2,0151	-2,1339	3,3188	2,9528	2,015	-9,5758
1,4863	0,65639	-3,5468	-3,212	-0,67515	-5,9821	5,0425	-6,9349	3,4699	-3,1199
10,335	-81,7504	6,0135	-1,6097	4,2269	-3,718	17,1393	16,9112	12,3423	-63,1976
11,5506	-19,1889	1,0367	-2,2234	-4,1378	-10,7707	0,96966	6,8634	4,6281	-15,8314
-5,1279	1,2623	7,8443	5,3259	-5,9467	5,445	-8,7607	11,7747	-4,9305	-1,0918
1,4196	0,70906	-5,2684	-3,4587	-1,2712	-5,6834	6,5972	-7,3254	4,5641	-3,5073
-10,6208	23,0268	-10,2401	2,4067	-6,6956	6,7064	-4,5555	-4,6063	-3,5096	14,769
1,1016	-1,1453	-9,782	0,29611	-5,9066	6,0638	0,4596	0,41237	0,30055	-1,9767
10,1973	-21,9597	9,7397	-2,2774	6,3447	-6,3376	4,2893	4,3408	3,3243	-14,2148
-0,81496	0,045279	-1,263	0,050917	-0,43153	0,67735	-0,233	-0,21751	-0,17218	-2,5694
-5,9358	41,3513	-5,2625	1,0139	-2,699	3,4824	-8,3715	-8,3472	-6,1807	31,8419
-5,8418	41,3729	-4,9489	0,9846	-2,5971	3,2643	7,8934	-7,8601	-5,8206	32,3549
-7,2882	13,0275	-2,485	3,8655	-2,1155	8,6409	0,18179	-2,7696	-1,5401	10,0868
Связи между скрытым слоем и выходными данными									
Нейрон	1	2	3	4	5	6	7		
Веса ( $w_j^h$ )	0,5244	-1,9121	-2,2127	0,4186	-0,034145	1,8947			-5,637
Нейрон	8	9	10	11	12	13	Смещение ( $b_{ok}$ )		
Веса ( $w_j^h$ )	0,21922	-6,1822	11,9478	7,0574	-9,0366	0,49239			11,0953

Таблица 10

Векторы линейной регрессии (линейное уравнение:  $\gamma^{\text{cal}} = \alpha\gamma^{\text{exp}} + \beta$  при  $\alpha =$  смещение  $\beta =$  у отсечения,  
 $R^2$  — коэффициент корреляции)

Системы	$N$	Фазы	$\alpha$	$\beta$	$R^2$
Чистые системы	1817	Фаза обучения	1,000	0,00120	0,99667
		Фаза верификации	1,000	0,00120	0,99539
		Фаза тестирования	0,990	0,00030	0,9944
		Суммарно	1,000	0,00096	0,99615
Бинарные системы	794	Фаза обучения	1,000	0,00120	0,99810
		Фаза верификации	1,000	0,00094	0,99790
		Фаза тестирования	1,000	0,00130	0,99780
		Суммарно	1,000	-0,00120	0,99800
Троичные системы	616	Фаза обучения	1,000	0,0001100	0,99810
		Фаза верификации	1,000	0,0001700	0,99910
		Фаза тестирования	1,000	0,0002900	0,99880
		Суммарно	1,000	0,0000064	0,99830
Глобальные системы (RN1)	3227	Фаза обучения	1,000	0,00054	0,99668
		Фаза верификации	1,000	0,00067	0,99641
		Фаза тестирования	1,000	0,00071	0,99690
		Суммарно	1,000	0,00058	0,99667

Таблица 11

Значения различных ошибок в настоящем исследовании

Системы	RMSE	MSE	AAD	AARD, %	SSE	$R^2_{cal}$
Чистые системы	0,0027	0,0000	0,0024	07,6812	0,0244	0,9977
Бинарные системы	0,0030	0,0000	0,0020	07,4144	0,0074	0,9988
Троичные системы	0,0023	0,0000	0,0013	04,8599	0,0033	0,9989
Глобальная система (RN1)	0,0036	0,0000	0,0023	08,1295	0,0411	0,9980

### Метод редукции

В данном разделе рассматриваются анализ и преобразование входных и целевых переменных, которые имеют различные физические единицы измерения с разными диапазонами значений, для того, чтобы минимизировать число входных параметров (от девяти до семи) и улучшить скорость обучения. В настоящем исследовании этот метод используется для расчета минимума и максимума каждой векторной переменной и масштабирования данных относительно верхних пределов. Кроме того, значения полученных выходных данных из нейронной сети преобразуются перед их представлением.

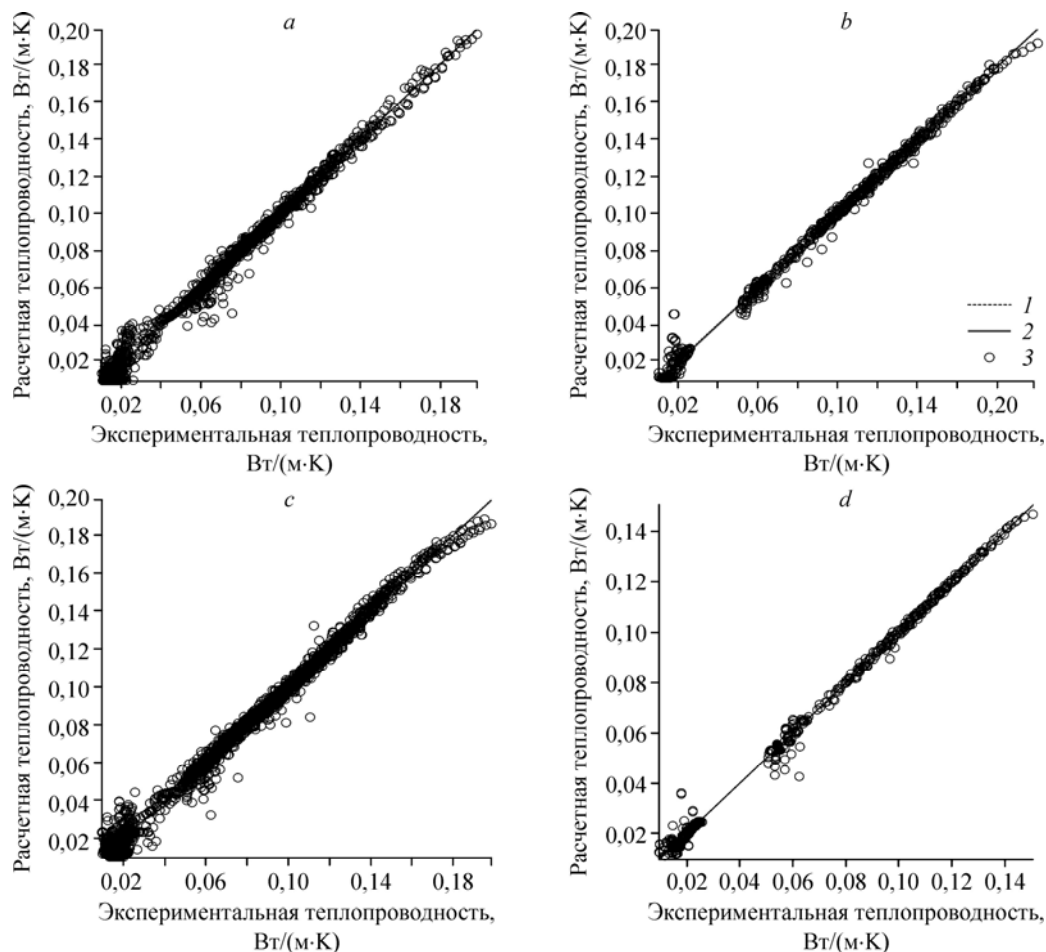


Рис. 2. Сравнение экспериментальных и расчетных значений для всего набора данных: чистые системы (a), бинарные системы (b), троичные системы (c), глобальные системы (d).

1 —  $K_{cal} = K_{exp}$ , 2 — наилучшая линейная аппроксимация:  $K_{cal} = K_{exp} + 0,00096$  (a),  
 $K_{cal} = K_{exp} + (-0,0012)$  (b),  $K_{cal} = K_{exp} + 0,00058$  (c),  $K_{cal} = K_{exp} + 0,0000064$  (d),  
 3 — экспериментальные данные;  $R^2 = 0,996$  (a), 0,998 (b), 0,997 (c), 0,998 (d).

Таблица 12

Векторы линейной регрессии и сравнение ошибок при использовании моделей RN1, RN2, RN3

Модели	$\alpha$	$\beta$	$R_{\text{exp}}^2$	RMSE	MSE	AAD	AARD, %	SSE	$R_{\text{cal}}^2$
RN1	01,000	0,00058	0,99667	0,0036	0,0000	0,0023	08,1295	0,0411	0,9980
RN2	01,000	0,00082	0,99805	0,0027	0,0000	0,0018	05,2531	0,0237	0,9988
<b>RN3</b>	<b>01,000</b>	<b>0,00330</b>	<b>0,99683</b>	<b>0,0035</b>	<b>0,0000</b>	<b>0,0023</b>	<b>07,7516</b>	<b>0,0393</b>	<b>0,9981</b>

Для редукции данных рассматриваются следующие уравнения:

$$G_r = \frac{G - G_{\min}}{G_{\max} - G_{\min}}, \quad (18)$$

$$X_i = X_i + 1, \quad (19)$$

$$T_r = T/T_c, \quad (20)$$

$$P_r = P/P_c. \quad (21)$$

Для преобразования данных, полученных с помощью ИНС, к вещественным значениям применяются соотношения

$$G = G_r (G_{\max} - G_{\min}) + G_{\min}, \quad (22)$$

$$K = f(T_r, P_r, M_r, D_r, X_i, X_j, X_k), \quad (23)$$

где  $G$  — исходное значение величины,  $G_r$  — соответствующая приведенная переменная; min, max — соответственно минимальное и максимальное значение каждого вектора.

Согласованность результатов верификации, найденные коэффициенты  $R_{\text{exp}}^2$  и  $R_{\text{cal}}^2$  и значения различных ошибок (RMSE, MSE, AAD, AARD и SSE) представлены в табл. 12. Эффективность разработанных моделей ИНС (RN2, RN3) сравнивалась с эффективностью разработанных ранее моделей ИНС (RN1) для того, чтобы оценить теплопроводность для исходных (реальных) и для редуцированных данных. Все три модели обеспечили высокие значения коэффициента корреляции  $R^2$ , как это видно на рис. 3.

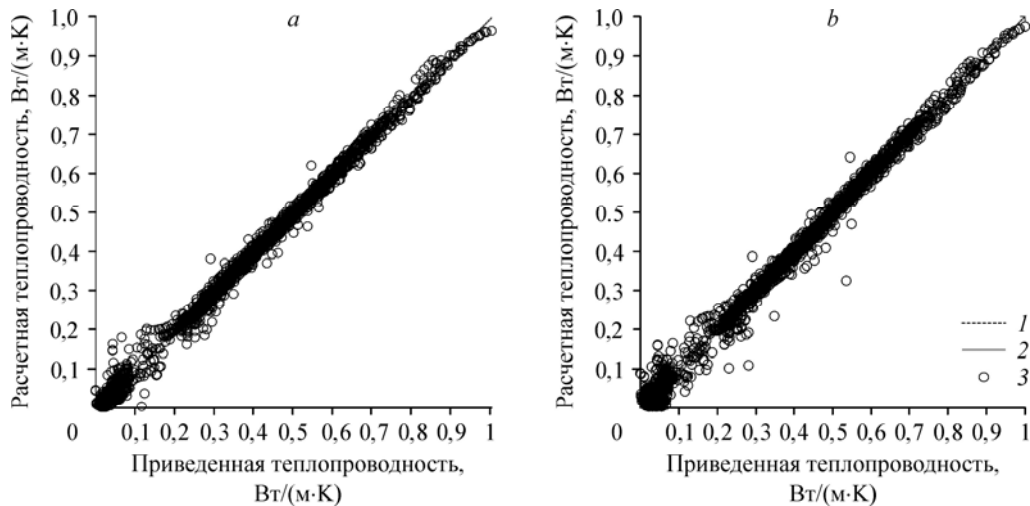


Рис. 3. Сравнение приведенных и расчетных значений для всего множества данных глобальной системы.

$a$ : RN2 (количество нейронов = 17),  $b$ : RN3 (количество нейронов = 13);

1 —  $K_{\text{cal}} = K_{\text{exp}}$ , 2 — наилучшая линейная аппроксимация  $K_{\text{cal}} = K_{\text{exp}} + (-0,00082)$  ( $a$ ),  $K_{\text{cal}} = K_{\text{exp}} + (-0,0033)$  ( $b$ ),

3 — экспериментальные данные;  $R^2 = 0,998$  ( $a$ ),  $0,997$  ( $b$ ).

Эффективность моделей RN1 и RN3 оказалась сопоставима, в то же время модель RN2 обеспечивала лучшую аппроксимацию экспериментальных данных, чем модели RN1, RN3.

### Прогноз с помощью искусственной нейронной сети

Собранные новые экспериментальные данные, а именно, 660 точек данных по вредным хладагентам покрывали диапазон теплопроводности 0,0106–0,15 Вт/(м·К), температурный диапазон 164,77–463 К и диапазон давлений 0,059–69,58 МПа. Эти собранные данные были распределены следующим образом: 363 точек данных для трех чистых систем (R22, R124, R142b), 240 точек данных для двух бинарных систем (R22+R142b, R22+R152a) и 57 точек данных для одной троичной системы (R142b+R124+R22). В этой части диапазон параметров экспериментальных данных и количество точек данных сопровождаются соответствующими ссылками в табл. 13–15 для различных (чистых, бинарных, троичных) систем.

Предсказание другой базы данных (БД2) по вредным хладагентам при отсутствии данных по вредным хладагентам, использующих БД1, даны на рис. 4. Из него следует, что новый подход (RN3) улучшил прогноз теплопроводности; при этом были получены

Таблица 13

Источники и диапазоны новой базы данных для чистых систем

Чистые системы	$T$ , К	$P$ , МПа	$X_i = 1$	$K$ , Вт/(м·К)	$N$	Ссылки на работы
R22	298,15–393,15	0,1–5,76	1	0,0106–0,0682	130	[69]
	252,48–333,32	0,1–26,58	1	0,0667–0,1141	37	[43]
	223,15–323,15	2,1–20,1	1	0,0713–0,1262	50	[57]
	303–463	0,1	1	0,01089–0,02064	05	[45]
	208,56–289,6	0,9	1	0,0875–0,1222	16	[58]
R142b	293,15–353,15	0,1–1,35	1	0,0109–0,0165	21	[37]
	302,201–304,346	1,6425–69,5827	1	0,08064–0,11163	32	[39]
	223,15–323,15	2,1–20,1	1	0,0734–0,1183	25	[57]
	298–418	0,1	1	0,01249–0,0214	05	[45]
	210,4–289,55	4,31–7,59	1	0,0872–0,1164	07	[58]
R124	252,4–333,1	0,62–18,67	1	0,0584–0,0909	35	[52]

Таблица 14

Источники и диапазоны новой базы данных для бинарных систем

Бинарные системы	$T$ (К)	$P$ (МПа)	$X_i + X_j = 1$	$K$ , Вт/(м·К)	$N$	Ссылки на работы
R22 + R142b	223,15–323,15	2,1–20,1	0,2796–0,729	0,01664–0,1207	75	[57]
	164,77–295,76	2,7–8,14	0,377–0,765	0,0854–0,1422	16	[58]
R22 + R152a	223,15–323,15	2,1–20,1	0,2488–0,7505	0,0759–0,1391	75	[57]
R22 + R152a	176,6–297,45	2,44–8,02	0,269–0,765	0,0916–0,1512	13	[58]
R415	308,22–415,55	0,12–1,684	0,5+0,5 = 1	0,0139–0,0225	61	[701]

\*R415 (R22, R152a: 50 %, 50 %).

Таблица 15

Источники и диапазоны новой базы данных для троичных систем

Троичные системы	$T$ , К	$P$ , МПа	$X_i + X_j + X_k = 1$	$K$ , Вт/(м·К)	$N$	Ссылки на работу
R409	305,67–427,13	0,0591–1,364	0,15+0,25+0,6 = 1	0,0118–0,0196	5 7	[71]

\*R409 (R142b, R124, R22: 15 %, 25 %, 60 %).

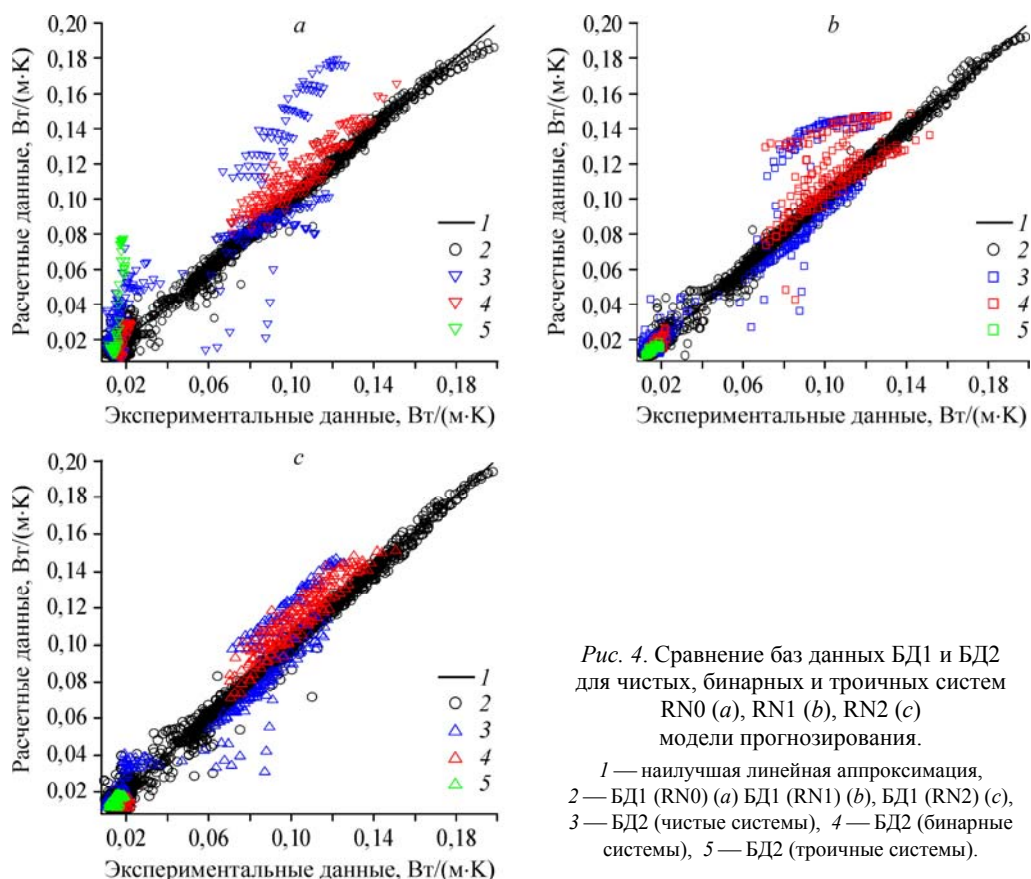


Рис. 4. Сравнение баз данных БД1 и БД2 для чистых, бинарных и троичных систем RN0 (a), RN1 (b), RN2 (c) модели прогнозирования.

1 — наилучшая линейная аппроксимация, 2 — БД1 (RN0) (a) БД1 (RN1) (b), БД1 (RN2) (c), 3 — БД2 (чистые системы), 4 — БД2 (бинарные системы), 5 — БД2 (троичные системы).

следующие значения RMSE, MSE, AAD, AARD, SSE,  $R^2$  соответственно: 0,0123, 0,0002, 0,0094 %, 17,92 %, 0,10 и 0,974 (табл. 16). Эти результаты продемонстрировали хорошую способность прогнозирования модели ИНС. В общем случае невязка, за исключением нескольких экспериментальных точек (см. рис. 5), не превосходила значений от  $-0,025$  до  $0,04$  для базы данных БД2 и  $\pm 0,02$  для базы данных БД1. Данные по вредным хладагентам изображены на рис. 6 различными цветами для всех (чистой, бинарной и троичной)

Таблица 16  
Сравнение различных результатов, полученных по каждой из моделей предсказания (RN1, RN2, RN3) с использованием новой базы данных БД2

Модель	Системы	N	RSME	MSE	AAD	AARD %	SSE	$R^2_{cal}$
RN1	Чистая	363	0,0284	0,0008	0,0212	48,7426	0,2925	0,8446
	Бинарная	240	0,0116	0,0002	0,0094	21,046	0,0486	0,9754
	Троичная	57	0,0304	0,0009	0,0202	115,911	0,0525	-2,7634
	<b>Суммарно</b>	<b>660</b>	<b>0,0244</b>	<b>0,0006</b>	<b>0,0169</b>	<b>44,7115</b>	<b>0,3936</b>	<b>0,8982</b>
RN2	Чистая	363	0,0218	0,0005	0,0147	23,0868	0,1723	0,9084
	Бинарная	240	0,0167	0,0004	0,0121	23,2145	0,1017	0,9484
	Троичная	57	0,0021	0,0000	0,0017	10,8684	0,0002	0,9827
	<b>Суммарно</b>	<b>660</b>	<b>0,0204</b>	<b>0,0004</b>	<b>0,0126</b>	<b>22,0780</b>	<b>0,2743</b>	<b>0,9291</b>
RN3	Чистая	363	0,0140	0,0002	0,0108	21,1563	0,0710	0,9623
	Бинарная	240	0,0090	0,0001	0,0092	14,6979	0,0292	0,9853
	Троичная	57	0,0020	0,0000	0,0017	10,8850	0,0002	0,9832
	<b>Суммарно</b>	<b>660</b>	<b>0,0123</b>	<b>0,0002</b>	<b>0,0094</b>	<b>17,9208</b>	<b>0,1004</b>	<b>0,9742</b>

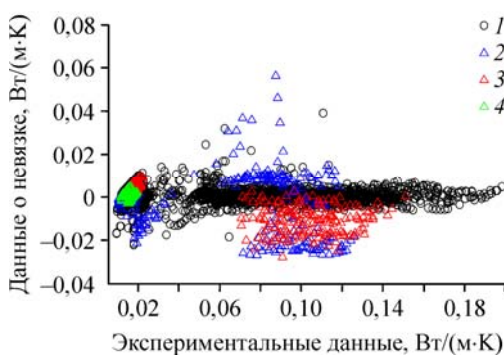


Рис. 5. Невязки для расчетных значений теплопроводности из модели ИНС по отношению к их экспериментальным значениям для БД2 (невязка =  $K_{\text{exp}} - K_{\text{cal}}$ ).  
 1 — БД1 (RN3), 2 — БД2 (чистые системы),  
 3 — БД2 (бинарные системы),  
 4 — БД2 (троичные системы).

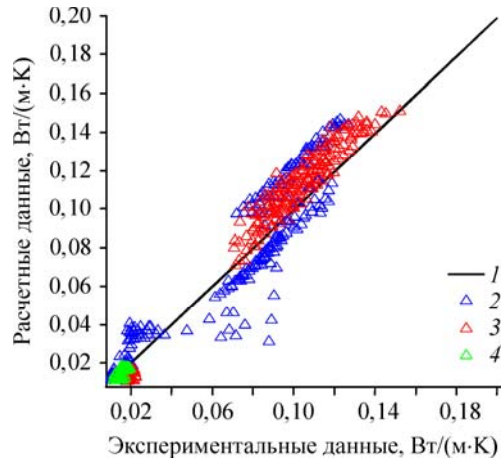


Рис. 6. Расчет с использованием новой базы данных БД2.  
 $R^2 = 0,953$ ; 1 — наилучшая линейная аппроксимация, обозначения 2–4 см. на рис. 5.

систем, что показывает корректное значение величины  $R^2$ , равное 0,95. Это подтверждает, что метод обладает превосходной способностью предсказания. На рис. 7 представлено предсказание БД2 посредством БД1 в диапазоне 0,01–0,03 Вт/(м·К).

Все точки экспериментальных данных (БД1+БД2), а именно, 3887 точек, были разбиты на три различных подмножества данных: восемь чистых систем (R32, R125, R134a, R152a, R143a, R22, R124, R142b), шесть бинарных смесей (R32+R125, R32+R134a, R125+R134a, R125+R143a, R22+R142b, R22+R152a) и три троичные системы (R32+R125+R134a, R125+R134a+R143a, R142b+R124+R22), что составляло 2180, 1034, 673 точек данных соответственно. Рисунки 8, 9 и табл. 17 показывают заметную корреляцию с ошибкой в диапазоне  $\pm 0,02\%$ , высокое значение  $R^2$ , равное 0,998, довольно

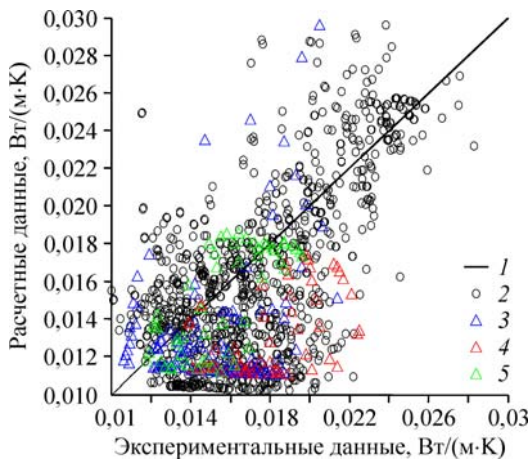


Рис. 7. Предсказание с помощью БД2 и реальной базы данных БД1 в диапазоне [0,01; 0,03].  
 Обозначения 1, 3–5 см. на рис. 4, 2 — БД1 (RN3).

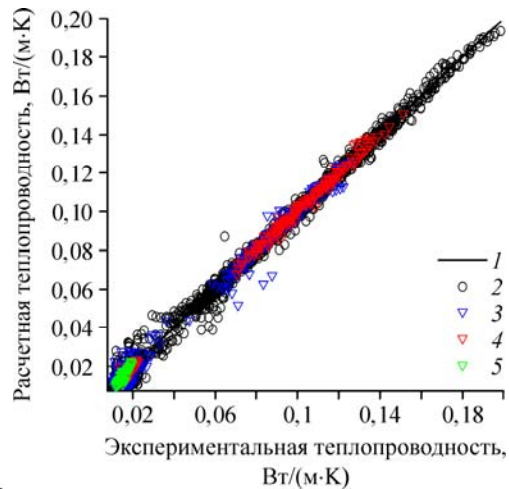


Рис. 8. Регрессионный анализ для оптимальной модели: сравнение теплопроводности, полученной на выходе модели, и целевой теплопроводности (RN4).  
 Обозначения 1, 3–5 см. на рис. 4, 2 — БД1.



Рис. 9. Невязки расчетных значений теплопроводности, полученных с помощью модели ИНС, и точек экспериментальных данных (RN4).

1 — БД1, обозначения 2–4 см. на рис. 5.

точное предсказание средней абсолютной ошибки отклонения (AARD), составляющей 5,8 %, а также высокую надежность.

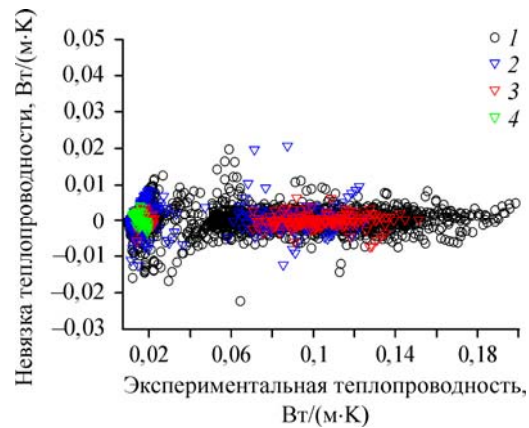


Таблица 17

Статистический анализ ошибки предсказанных результатов (RN4)

Система	$N$	RMSE	MSE	ADD	AARD %	SSE	$R_{cal}^2$
БД1 + БД2	3887	0,0028	0,0000	0,0018	5,78	0,0303	0,9988

### Заключение

В настоящей статье представлена методология для выбора модели ИНС для предсказания теплопроводности. Методология начинается с широкого поиска модели минимальной сложности с оптимальной эффективностью и выбора соответствующих параметров (входных и выходных данных, функций активации, обучающего алгоритма, метода редукции, скрытых слоев).

В представленной работе применена искусственная нейронная сеть для предсказания теплопроводности чистых хладагентов и их бинарных и троичных смесей для 11 жидких и парообразных систем трех различных категорий, содержащих пять чистых систем (R32, R125, R134a, R152a, R143a), четыре бинарные смеси (R32 + R125, R32 + R134a, R125 + R134a, R125 + R143a) и две троичные смеси (R32 + R125 + R134a, R125 + R134a + R143a). В исследовании использовались 3227 точек данных, включающих температуру, давление, молекулярный вес, критическую температуру, критическое давление, критическую плотность и массовую долю жидкой и паровой фаз хладагентов. Для вычисления теплопроводности применялся алгоритм обратного распространения ошибки с обучением по Левенбергу–Марквардту. Авторами предпринята попытка повышения эффективности подходящей для этой цели модели RN1 с использованием метода редукции, чтобы получить новую модель RN3. Наилучшая полученная модель сети характеризуется лучшей кривой соответствия и высоким значением величины  $R^2$ , равным 0,997. Кроме того, статистический анализ показал, что модель RN3 обеспечивает вполне удовлетворительные оценки для чистых, бинарных и троичных систем хладагентов, а также для глобальной системы и продемонстрировала свою надежность.

Эффективность предложенной модели ИНС проверялась путем ее использования для тестирования множества данных, состоящего из 660 экспериментальных точек по теплопроводности различных систем, включающих чистые, бинарные и троичные смеси хладагентов в широком диапазоне температур и давлений. Результаты применения разработанной модели ИНС указывают на то, что она способна предсказывать теплопроводность с высоким коэффициентом детерминации. Результаты применения модели обученной нейронной сети к тестовым данным показывают, что метод имеет очень

хорошую способность к предсказанию не только диапазонов температур и давлений, но и типов хладагентов. Наконец, сбор всех экспериментальных данных (БД1 и БД2) для RN4 дал высокое значение  $R^2$ , равное 0,998, и низкую среднюю абсолютную ошибку относительного отклонения (5,8 %).

### Список обозначений

AAD — абсолютное среднее отклонение,	$R^2$ — коэффициент определения эмпирической константы, входящей в уравнение для регрессии,
AARD — среднее абсолютное относительное отклонение,	RMSE — среднеквадратичная ошибка,
$M$ — молекулярная масса, г·моль <sup>-1</sup> ,	SSE — сумма возведенных в квадрат ошибок,
$M_c$ — критическая молекулярная масса, г·моль <sup>-1</sup> ,	$T$ — температура, К,
MSE — средняя квадратная ошибка,	$T_c$ — критическая температура, К,
$N$ — количество точек данных,	$w$ — веса,
$P$ — давление, МПа,	$D$ — плотность, кг/м <sup>3</sup> ,
$P_c$ — критическое давление, МПа,	$D_c$ — критическая плотность, кг/м <sup>3</sup> ,
	$X$ — массовая доля жидкой или паровой фазы.

### Индексы

cal — расчетный,	$n$ — компонента,
exp — экспериментальный,	max — максимум,
	min — минимум.

### Греческие буквы

$\alpha$ — смещение линейного уравнения регрессии,	$K$ — теплопроводность, Вт/(м·К).
--	-----------------------------------

### Список литературы

1. **World Meteorological Organization.** Montreal protocol on substances that deplete the ozone layer report // WMO Bull. 1988. Vol. 37. P. 94–97.
2. **Ramsdell J.W., Colice G.L., Ekholm B.P., Klinger N.M.** Cumulative dose response study comparing HFA-134a albuterol sulfate and conventional CFC albuterol in patients with asthma // Ann. Allergy Asthma Immunol. 1998. Vol. 81. P. 593–599.
3. **Tsai W.T.** An overview of environmental hazards and exposure risk of hydrofluorocarbons (HFCs) // Chemosphere. 2005. Vol. 61. P. 1539–1547.
4. **World Meteorological Organization (WMO).** Scientific Assessment of Ozone Depletion: 2006, Global Ozone, Research and Monitoring Project. 2007. Report 50. Switzerland, Geneva.
5. **World Meteorological Organization (WMO).** Scientific Assessment of ozone depletion: 2002, Global Ozone, Research and Monitoring Project. 2003. Report 47. Switzerland, Geneva.
6. **Bridgeman C.H., Pyle J.A., Shallcross D.E.J.** A three-dimensional model calculation of the ozone depletion potential of 1-bromopropane (1-C3H7Br) // Geophys. Res. 2000. Vol. 105. P. 426–493, 502.
7. **Olsen S.C., Hannegan B.J., Zhu X., Prather M.J.** Evaluating ozone depletion from very short-lived halocarbons // Geophys. Res. Lett. 2000. Vol. 27. P. 1475–1478.
8. **Wuebbles D.J., Patten K.O., Johnson M.T., Kotamarthi R.J.** The new methodology for ozone depletion potentials of short-lived compounds: n-propyl bromide as an example // Geophys. Res. 2001. Vol. 106. P. 551–571.
9. **Newman P.A., Daniel J.S., Waugh D.W., Nash E.R.** A new formulation of equivalent effective stratospheric chlorine (EESC) // Atmos. Chem. Phys. 2007. Vol. 7. P. 4537–4552.
10. **Bridgman P.W.** Conductivity of liquids under pressure // Proc. Am. Acad. Art Sci. 1923. Vol. 59. P. 141–169.
11. **Sastri S.R.S., Rao K.K.** A new temperature thermal conductivity relationship for predicting saturated liquid thermal conductivity // J. Chem. Eng. 1999. Vol. 74. P. 161–169.
12. **Poling B.E., Prausnitz J.M., O'Connell J.P.** The properties of gases and liquids. 5th edition. New York: McGraw-Hill, 2001. 768 p.
13. **Gharagheizi F., Ilani-Kashkouli P., Sattari M., Mohammadi A.H., Ramjugernath D., Richon D.** Development of a quantitative structure liquid thermal conductivity relationship for pure chemical compounds // Fluid Phase Equilib. 2013. Vol. 355. P. 52–80.
14. **Gharagheizi F., Ilani-Kashkouli P., Sattari M., Mohammadi A.H., Ramjugernath D., Richon D.** Development of a general model for determination of thermal conductivity of liquid chemical compounds at atmospheric pressure // J. AIChE. 2013. Vol. 59. P. 1702–1708.

15. Di Nicola G., Ciarrocchi E., Pierantozzi M., Stryjek R. A new equation for the thermal conductivity prediction of pure liquid compounds // *J. Therm. Anal. Calorim.* 2014. Vol. 116. P. 135–140.
16. Yata J., Ueda Y., Hori M. Equations for the thermal conductivity of R-32, R-125, R-134a, and R-143a // *Int. J. Thermophys.* 2005. Vol. 26. P. 1423–1435.
17. Shi L., Liu X.J., Wang X., Zhu M.S. Prediction method for liquid thermal conductivity of refrigerant mixtures // *Fluid Phase Equilib.* 2000. Vol. 172. P. 293–306.
18. Focke W.W. Correlating thermal conductivity data for ternary liquid mixtures // *Int. J. Thermophys.* 2008. Vol. 29. P. 1342–1360.
19. He M.G., Liu Z.G., Yin J.M. New equation of state for transport properties: Calculation for the thermal conductivity and the viscosity of halogenated hydrocarbon refrigerants // *Fluid Phase Equilib.* 2002. Vol. 201. P. 309–320.
20. Assael M.J., Dalaouti N.K., Gialou K.E. Measurements of the thermal conductivity of liquid R32, R124, R125, and R141b // *Fluid Phase Equilib.* 2000. Vol. 174. P. 203–211.
21. Scalabrin G., Piazza L., Grigante M., Baruzzo M. Thermal conductivity modeling of refrigerant mixtures in a three-parameter corresponding states format // *Int. J. Thermophys.* 2005. Vol. 26. P. 399–412.
22. Huber M.L., Friend D.G., Ely J.F. Prediction of the thermal conductivity of refrigerants and refrigerant mixtures // *Fluid Phase Equilib.* 1992. Vol. 80. P. 249–261.
23. McLinden M.O., Klein S.A., Perkins R.A. An extended corresponding states model for the thermal conductivity of refrigerants and refrigerant mixtures // *Int. J. Refrigeration.* 2000. Vol. 23. P. 43–63.
24. Sami S.M., Comeau J.D. Study of viscosity and thermal conductivity effects on condensation characteristics of some new alternative refrigerant mixtures // *Int. J. Energy Res.* 2003. Vol. 27. P. 63–77.
25. Islamoglu Y. A new approach for the prediction of the heat transfer rate of the wire-on-tube type heat exchanger use of an artificial neural network model // *Appl. Therm. Eng.* 2003. Vol. 23. P. 243–249.
26. Taskinen J., Yliruusi J. Prediction of physicochemical properties based on neural network modeling // *Adv. Drug. Deliv. Rev.* 2003. Vol. 55. P. 1163–1183.
27. Tsoukalas L.H., Uhrig R.E. *Fuzzy and neural approaches in engineering.* New York: John Wiley and Sons Inc., 1997. 600 p.
28. Kalogirou S.A. Applications of artificial neural networks for energy systems // *Appl. Energy.* 2000. Vol. 67. P. 17–35.
29. Si-Moussa C., Hanini S., Derriche R., Bouhedda M., Bouzidi A. Prediction of high-pressure vapor liquid equilibrium of six binary systems, carbon dioxide with six esters, using an artificial neural network model // *Brazilian J. Chem. Eng.* 2008. Vol. 25. P. 183–199.
30. Rafiq M.Y., Bugmann G., Easterbrook D.J. Neural network design for engineering applications // *Comput. Struct.* 2001. Vol. 79. P. 1541–1552.
31. MathWorks. *Neural network toolbox user's guide.* MATLAB7.0, Release 14, MATLAB Manual, 2004.
32. Witek-Krowiak A., Chojnacka K., Podstawczyk D., Dawiec A., Pokomeda K. Application of response surface methodology and artificial neural network methods in modeling and optimization of biosorption process // *Biore-sour. Technol.* 2014. Vol. 60. P. 150–160.
33. Kalogirou S.A. Artificial intelligence for the modeling and control of combustion processes // *Prog. Energy Combust. Sci.* 2003. Vol. 29. P. 515–566.
34. Mellit A., Kalogirou S.A. Artificial intelligence techniques for photovoltaic applications, a review // *Prog. Energy Combust. Sci.* 2008. Vol. 34. P. 574–632.
35. Haghbakhsh R., Adib H., Keshavarz P., Koolivand M., Keshtkari S. Development of an artificial neural network model for the prediction of hydrocarbon density at high-pressure, high-temperature conditions // *Termochim. Acta.* 2013. Vol. 551. P. 124–130.
36. Amato F., Gonzalez-Hernandez J.L., Havel J. Artificial neural networks combined with experimental design: a “soft” approach for chemical kinetics // *Talanta.* 2012. Vol. 93. P. 72–78.
37. Tanaka Y., Nakata M., Makita T. Thermal conductivity of gaseous HFC-134a, HFC-143a, HCFC-141b, and HCFC-142b // *Int. J. Thermophys.* 1991. Vol. 12. P. 949–963.
38. Lavrenchenko G.K., Ruvinskij G.Ya., Iljushenko S.V., Kanaev V.V. Thermophysical properties of refrigerant R134a // *Int. J. Refrigeration.* 1992. Vol. 15. P. 386–392.
39. Perkins R.A., Laesecke A., Nieto Castro C.A. Polarized transient hot wire thermal conductivity measurements // *Fluid Phase Equilib.* 1992. Vol. 80. P. 275–286.
40. Gross U., Song Y.W., Hahne E. Thermal conductivity of the new refrigerants R134a, R152a, and R123 measured by the transient hot-wire method // *Int. J. Thermophys.* 1992. Vol. 13. P. 957–983.
41. Laesecke A., Perkin R.A., Nieto Castro C.A. Thermal conductivity of R134a // *Fluid Phase Equilib.* 1992. Vol. 80. P. 263–274.
42. Yamamoto R., Matsuo S., Tanaka Y. Thermal conductivity of halogenated ethanes, HFC-134a, HCFC-123, and HCFC-141h // *Int. J. Thermophys.* 1993. Vol. 14. P. 79–90.
43. Assael M.J., Karagiannidis E. Measurements of the thermal conductivity of R22, R123, and R134a in the temperature range 250–340 K at pressures up to 30 MPa // *Int. J. Thermophys.* 1993. Vol. 14. P. 183–197.
44. Tsvetkov O.B., Laptev Yu.A., Asambaev A.G. Thermal conductivity of refrigerants R123, R134a, and R125 at low temperatures // *Int. J. Thermophys.* 1994. Vol. 15. P. 203–214.
45. Hammerschmidt U. Thermal conductivity of a wide range of alternative refrigerants measured with an improved guarded hot-plate apparatus // *Int. J. Thermophys.* 1995. Vol. 16. P. 1203–121.

46. **Ro S.T., Kim J.Y., Kim D.S.** Thermal conductivity of R32 and Its mixture with R134a // *Int. J. Thermophys.* 1995. Vol. 16. P. 1193–1201.
47. **Gurova A.N., Mardolcar U.V., Nieto Castro C.A.** The thermal conductivity of Liquid 1,1,1,2-tetrafluoroethane (HFC 134a) // *Int. J. Thermophys.* 1997. Vol. 18. P. 1077–1087.
48. **Jeong S.U., Kim M.S., Ro S.T.** Liquid thermal conductivity of binary mixtures of pentafluoroethane (R125) and 1,1,1,2-tetrafluoroethane (R134a) // *Int. J. Thermophys.* 1999. Vol. 20. P. 55–62.
49. **Neindre B.Le, Garrabos Y.** Measurements of the thermal conductivity of HFC-134a in the temperature range from 300 to 530 K and at pressures up to 50 MPa // *Int. J. Thermophys.* 1999. Vol. 20. P. 1379–1401.
50. **Багинский А.В., Шипицына А.С.** Теплопроводность и температуропроводность хладагента R134a в жидком состоянии // *Теплофизика и аэромеханика.* 2009. Т. 16, № 2. С. 283–290.
51. **Tanaka Y., Matsuo S., Taya S.** Gaseous thermal conductivity of difluoromethane (HFC-32), pentafluoroethane (HFC-125), and their mixtures // *Int. J. Thermophys.* 1995. Vol. 16. P. 121–131.
52. **Assael M.J., Karagiannidis L.** Measurements of the thermal conductivity of liquid R32, R124, R125, and R141b // *Int. J. Thermophys.* 1995. Vol. 16. P. 851–865.
53. **Tsvetkov O.B., Kletski A.V., Laptev Yu.A., Asambaev A.J., Zausaev I.A.** Thermal conductivity and PVT measurements of Pentafluoroethane (refrigerant HFC-125) // *Int. J. Thermophys.* 1995. Vol. 16. P. 1185–1192.
54. **Ro S.T., Kim M.S., Jeong S.U.** Liquid thermal conductivity of binary mixtures of difluoromethane (R32) and pentafluoroethane (R125) // *Int. J. Thermophys.* 1997. Vol. 18. P. 991–999.
55. **Gross U., Song Y.W.** Thermal conductivities of new refrigerants R125 and R32 measured by the transient hot-wire method // *Int. J. Thermophys.* 1996. Vol. 17. P. 607–619.
56. **Kim S.H., Kim D.S., Kim M.S., Ro S.T.** The thermal conductivity of R22, R142b, R152a, and their mixtures in the liquid State // *Int. J. Thermophys.* 1993. Vol. 14. P. 937–950.
57. **Tsvetkov O.B., Laptev Yu.A., Asambaev A.G.** The thermal conductivity of binary mixtures of liquid R22 with R142b and R152a at low temperatures // *Int. J. Thermophys.* 1996. Vol. 17. P. 597–606.
58. **Gurova A.N., Mardolcar U.V., Nieto Castro C.A.** Thermal conductivity of 1,1-difluoroethane (HFC-152a) // *Int. J. Thermophys.* 1999. Vol. 20. P. 63–72.
59. **Lee S.H., Kim M.S., Ro S.T.** Thermal conductivity of 1,1,1-trifluoroethane (R143a) and R404A in the liquid phase // *J. Chem. Eng.* 2001. Vol. 46. P. 1013–1015.
60. **Gao X., Nagasaka Y., Nagashima A.** Thermal conductivity of binary refrigerant mixtures of HFC-32/125 and HFC-32/134a in the liquid phase // *Int. J. Thermophys.* 1999. Vol. 20. P. 1403–1415.
61. **Geller V.Z., Nemzer B.V., Cheremnykh U.V.** Thermal conductivity of the refrigerant mixtures R404A, R407C, R410A, and R507A // *Int. J. Thermophys.* 2001. Vol. 22. P. 1035–1043.
62. **Багинский А.В., Шипицына А.С.** Теплопроводность хладагента R507 в жидком состоянии // *Теплофизика и аэромеханика.* 2008. Т. 15, № 2. С. 307–311.
63. **Верба О.И.** Теплопроводность хладона 507A в газообразном состоянии // *Теплофизика и аэромеханика.* 2011. Т. 18, № 1. С. 161–165.
64. **Gao X., Nagasaka Y., Nagashima A.** Thermal conductivity of ternary refrigerant mixtures of HFC-32/125/134a in the liquid phase // *Int. J. Thermophys.* 1999. Vol. 20. P. 1417–1424.
65. **Jeong S.U., Kim M.S., Ro S.T.** Liquid thermal conductivity of ternary mixtures of difluoromethane (R32), pentafluoroethane (R125), and 1,1,1,2-tetrafluoroethane (R134a) // *Int. J. Thermophys.* 2000. Vol. 21. P. 319–328.
66. **Верба О.И., Расчектаева Е.П., Станкус С.В.** Экспериментальное исследование теплопроводности хладагента R407C в паровой фазе // *Теплофизика высоких температур.* 2012. Т. 50. С. 218–221.
67. **Верба О.И.** Теплопроводность хладона R 404A // *Теплофизика и аэромеханика.* 2007. Т. 14, № 2. С. 169–173.
68. **Багинский А.В., Шипицына А.С.** Теплопроводность хладагента R404A в жидком состоянии // *Теплофизика и аэромеханика.* 2007. Т. 14. С. 67–70.
69. **Makita T., Tanaka Y., Morimoto Y., Noguchi M., Kubota H.** Thermal conductivity of gaseous fluorocarbon refrigerants R 12, R 13, R 22, and R 23, under pressure // *Int. J. Thermophys.* 1981. Vol. 2. P. 249–268.
70. **Верба О.И., Расчектаева Е.П., Станкус С.В.** Теплопроводность хладагента R-415A в паровой фазе // *Теплофизика и аэромеханика.* 2013. Т. 20, № 4. С. 487–489.
71. **Верба О.И., Расчектаева Е.П., Станкус С.В.** Экспериментальное исследование теплопроводности хладагента R-409A в паровой фазе // *Теплофизика и аэромеханика.* 2011. Т. 18, № 4. С. 689–692.

*Статья поступила в редакцию 26 февраля 2018 г.,  
после доработки — 9 апреля 2018 г.,  
принята к публикации 23 мая 2018 г.*