

基于人工智能方法的近临界区 CO₂ 热物性模化与预测

丁 璐, 赵兵涛, 姚佳成, 马嘉欣

(上海理工大学 能源与动力工程学院, 上海 200093)

摘 要: 为更准确预测 CO₂ 在临界点附近区域的热物性, 分别建立了基于 BPNN, SVR 和 GPR 算法的智能模型来预测近临界区 CO₂ 的密度、粘度和导热系数, 并将 3 种模型进行比较。结果表明: 基于 BPNN 的密度 ($R^2 = 0.9465$) 和粘度 ($R^2 = 0.9702$) 预测模型相较于其他智能模型精度更高, 而基于 SVR 的导热系数的模型预测精度更高 ($R^2 = 0.9997$); 所提出的智能模型相较于传统模型中 SW 密度方程 ($R^2 = 0.5966$)、Laesecke 的粘度方程 ($R^2 = 0.8445$) 和 J&H 的导热系数方程 ($R^2 = 0.0218$) 的 R^2 提高了 14.88% ~ 444.5%。

关 键 词: 二氧化碳; 近临界区; 热物性; 智能算法

中图分类号: TK211 文献标识码: A DOI: 10.16146/j.cnki.rndlgc.2022.11.018

[引用本文格式] 丁 璐, 赵兵涛, 姚佳成, 等. 基于人工智能方法的近临界区 CO₂ 热物性模化与预测[J]. 热能动力工程, 2022, 37(11): 139-143. DING Lu, ZHAO Bing-tao, YAO Jia-cheng, et al. Modeling and prediction of thermophysical properties of CO₂ in the region around the critical point using artificial intelligence models[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power, 2022, 37(11): 139-143.

Modeling and Prediction of Thermophysical Properties of CO₂ in the Region around the Critical Point using Artificial Intelligence Models

DING Lu, ZHAO Bing-tao, YAO Jia-cheng, MA Jia-xin

(School of Enrgy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai, China, Post Code: 200093)

Abstract: In order to more accurately predict the thermophysical properties of CO₂ in the region around the critical point, the intelligent models of BPNN, SVR and GPR were developed to predict and compared the density, viscosity and thermal conductivity of CO₂ in the near-critical region, respectively. The results show that the density ($R^2 = 0.9465$) and viscosity ($R^2 = 0.9702$) prediction models based on BPNN are more accurate than other intelligent models, and the thermal conductivity model based on SVR is more accurate ($R^2 = 0.9997$). Compared with the SW density equation ($R^2 = 0.5966$), Laesecke's viscosity equation ($R^2 = 0.8445$) and J&H's thermal conductivity equation ($R^2 = 0.0218$) in the traditional model, the R^2 of the proposed intelligent model is improved by 14.88% to 444.5%.

Key words: carbon dioxide, region around the critical point, thermophysical properties, intelligent model

引 言

超临界二氧化碳 (SCO₂) 以其临界条件易实现 (临界温度 304.13 K、临界压力 7.38 MPa)、能量密

度高、稳定性好及腐蚀性低等优点, 在太阳能发电、核电、火电及制冷循环系统领域中有巨大的应用潜力^[1-2]。SCO₂ 的热物性包括密度、粘度和导热系数等关键参数, 对能效有重要影响。

近年来, CO₂ 热物性得到广泛的实验研究^[3-11]。

收稿日期: 2022-01-06; 修订日期: 2022-03-09

作者简介: 丁 璐 (1997-), 男, 江苏南通人, 上海理工大学硕士研究生。

通讯作者: 赵兵涛 (1976-), 男, 陕西西安人, 上海理工大学教授。

但是,由于临界效应的巨大影响^[12],CO₂在近临界区(300 K≤*T*≤310 K 和 7 MPa≤*p*≤8 MPa)的热力学性质发生剧烈变化,使得其精准预测变得较为困难。

近年来,SCO₂热物性参数的模化相继发展。至今 CO₂的热物性的关联式已有广泛研究,但在体现便捷性的同时往往不能满足精度的要求。其中,代表性的物性计算模型^[13-16]虽然在近临界区外都能保证较高精度,但在近临界区依然存在较大误差。例如,SW 密度方程^[13]在气相、液相和超临界区的误差小于 2%,但是在近临界区误差高达 9.65%;基于剩余理论的方程^[14]在预测粘度时也有 5.39%的平均误差;以 Jarrahan 等人^[15]为代表的半经验导热系数模型误差达到 23.49%。因此,发展新的方法以实现其精准预测十分必要。

人工智能(Artificial Intelligence, AI)模型和算法近年在 CO₂热动力学和传输物性预测方面获得应用,相比于传统的数学模型具有更优越的精确性能^[17-21]。但是,尚存在以下问题:(1)多数研究仅聚焦于其中一种热物理参数,使用同类型 AI 模型同时表征密度、粘度和导热系数的报道较少;(2)在模化过程中,划分数据集时多用随机划分的方式,导致预测模型随机性很大;(3)部分智能算法本身也存在易陷入局部的缺陷,导致网络结构参数难以达到最优化,泛化性能受到限制。

本文基于 AI 方法,分别进行密度、粘度和导热系数的精准预测。首先,建立基于不同类型的 AI 模型;其次,比较其预测精度;然后与传统的回归模型就泛化性能进行分析与评价,并建立了映射曲面关系图。

1 模型与方法

1.1 人工智能算法及原理

BPNN,SVR 和 GPR 3 种 AI 算法经常被用于数据拟合、回归问题,其运行原理为:反向传播神经网络(Back Propagation Neural Network, BPNN)运用误差反向传播的方式修正权值和阈值。BPNN 由输入层、隐含层和输出层构成,当隐含层神经元个数足够时,一个 3 层结构可以以任意精度逼近一个参数有限的不连续函数^[22]。当有 *i* 个输入 *j* 个隐含层神经元和 *k* 个输出时,隐含层输出为:

$$y_j = f(\sum_i w_{ij}x_i - b_j)$$

(1)

式中:*w_{ij}*—输入层与隐含层的连接权值;*x_i*—输入变量;*b_j*—隐含层阈值;*f*—隐含层激活函数。

支持向量机(Support Vector Regression, SVR)是一种能够用于求解分类和回归等问题的机器学习算法^[23],其回归模型函数为:

$$y = \sum_i w_k K(x, x_i) + b$$

(2)

式中:*w_k*—输入的权值;*K(x, x_i)*—核函数;*b*—超平面的位移量。

高斯过程回归(Gaussian Process Regression, GPR)具有严格的统计学习理论基础,在处理高维数、小样本和非线性等复杂的回归问题时表现出良好的适应性^[24]。GPR 对观测数据进行训练,可以推导模型输入与输出之间的关系,并且其性质由均值函数和协方差函数确定,通常可表示为:

$$y \sim gp(m(x), k(x, x'))$$

(3)

式中:*m(x)*—均值函数;*k(x, x')*—协方差函数。

1.2 数据来源与处理方法

数据来源于文献[3-11]中近临界区 CO₂密度、粘度和导热系数实验数据,如表 1 所示。

表 1 近临界区 CO₂热物性数据来源

Tab. 1 Data sources of CO₂ thermophysical properties in the near-critical region

热物性	样本数目	温度 <i>T</i> /K	压力 <i>p</i> /MPa	范围	范围文献
密度 $\rho/\text{g} \cdot \text{cm}^{-3}$	145	300 ~ 308.15	7 ~ 7.9997	0.2190 ~ 0.7532	[3-6],[9],[11]
粘度 $\mu/\mu\text{Pa} \cdot \text{s}$	151	300 ~ 310	7 ~ 8	19.4800 ~ 59.5000	[6-8]
导热系数 $\lambda/\text{mW} \cdot (\text{m} \cdot \text{K})^{-1}$	105	300 ~ 310	7 ~ 8	33.2800 ~ 163	[7],[10-11]

运用 Kennard-Stone^[25] 算法将每份数据按照 85%:15% 的比例划分为训练集和测试集以保证特征数据被有效学习。同时,使用归一化方法将原始数据映射到 $[-1,1]$ 区间内,以避免数据量级差异的影响。模型输出值最终经过反归一化转换成实际值。

1.3 参数设置

各模型的关键参数设置如表 2 所示。对于 BPNN,隐含层神经元个数为 $2n+1$, n 是输入变量个数。

表 2 模型设置
Tab.2 Model parameter settings

模型	设置
BPNN	贝叶斯正则化,神经元个数为 5
SVR	核函数为 RBF
GPR	核函数为平方指数核

1.4 评价指标

采用均方误差 (Mean Square Error, MSE) 和决定系数 R^2 来评价模型的精度。

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \tag{4}$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \tag{5}$$

2 结果与分析

2.1 3 种模型预测精度比较

图 1 为基于 BPNN,SVR 和 GPR 模型的近临界区 CO₂物性预测散点图。

BPNN 对密度和粘度的预测精度最高:密度模型的训练集和测试集的决定系数 R^2 分别为0.993 2 和 0.946 5,粘度的训练集和测试集的决定系数 R^2 分别为 0.993 9 和 0.970 2。是 SVR 模型对导热系数的预测效果最好,其训练集和测试集 R^2 分别为 0.999 8 和 0.999 7。

2.2 与其它回归模型的比较

图 2 为在相同的测试集下,AI 模型与传统模型^[13-15]的预测精度散点图。在近临界区,相较于传统模型中用于密度计算的 SW 方程^[13]、用于粘度计算的 Laesecke 方程^[14]及计算导热系数的 J&H 方

程^[15],AI 模型的预测值与实际值的吻合度都明显提高。基于 BPNN 模型的密度和粘度的测试集 R^2 分别从 0.596 6 和 0.844 5 提高到 0.946 5 和 0.970 2,提高了 58.68% 和14.88%。基于 SVR 的导热系数模型的 R^2 从0.021 8上升到 0.999 7,提高了4 444.50%。同时,基于智能算法的物性预测模型的 MSE 均显著降低,预测精度明显提升。输入任意温度和压力值,可以通过该模型得到对应的热物性。

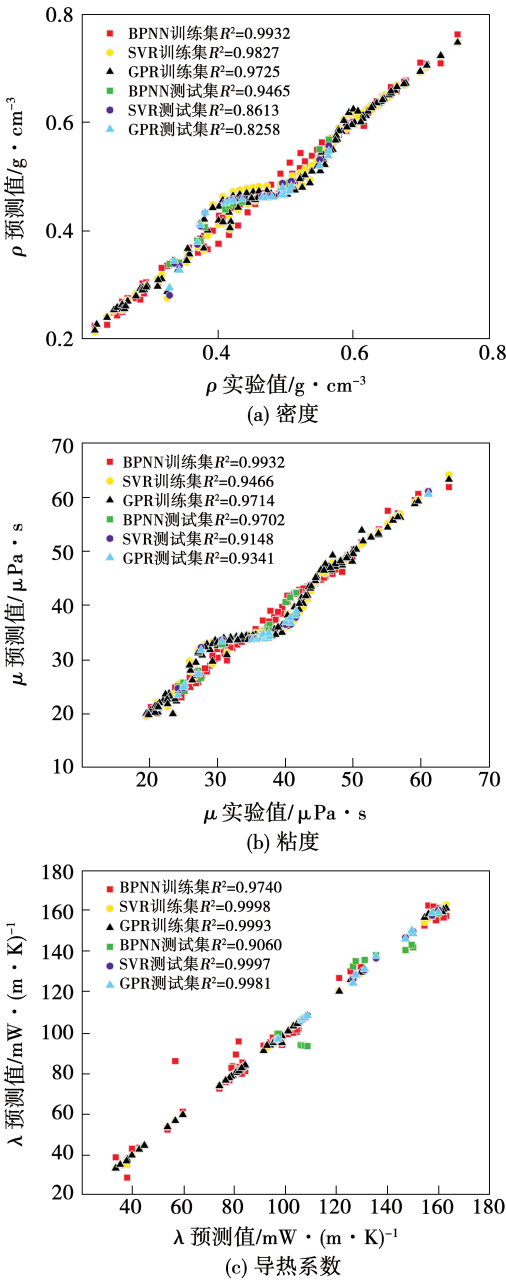


图 1 各模型预测精度散点图
Fig.1 Model prediction scatter plot

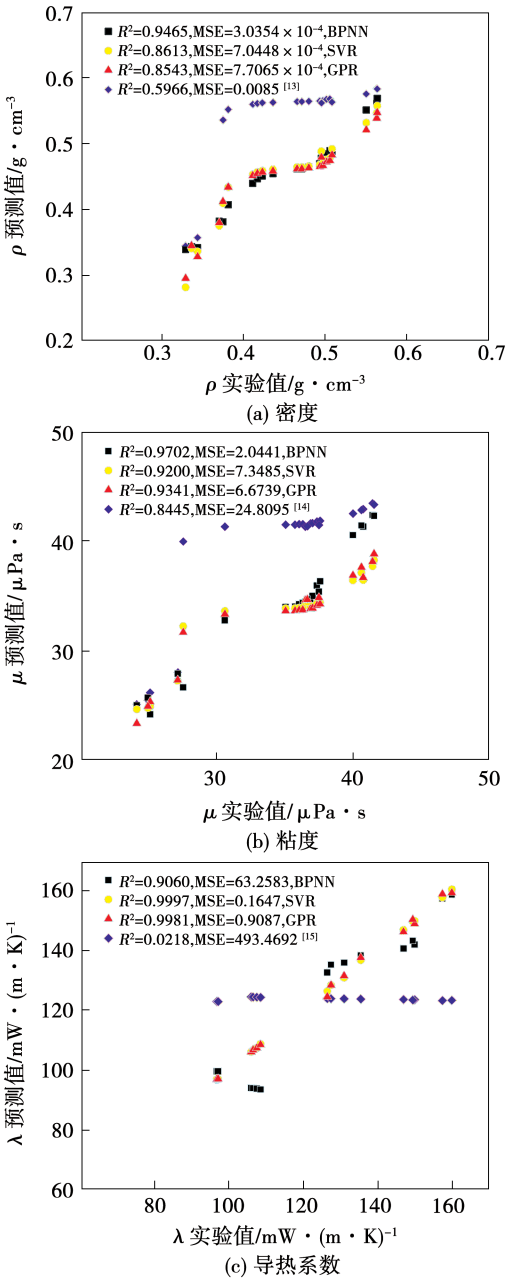


图 2 各模型预测精度对比

Fig.2 Model prediction accuracy comparison

2.3 连续化预测曲面图

图 3 为近临界区给定温度压力,基于 AI 算法的 CO₂ 的密度、粘度和导热系数预测模型中精度最高的曲面图。其中,图 3(a)和图 3(b)为 BPNN 模型,图 3(c)为 SVR 模型。虽然近临界区 CO₂ 的热物性是复杂突变的,但是给定任意温度和压力,这些参数均可根据图 3 来精确确定,从而为 CO₂ 工质在近临界区附近热物性的理论计算提供相对精确的途径。

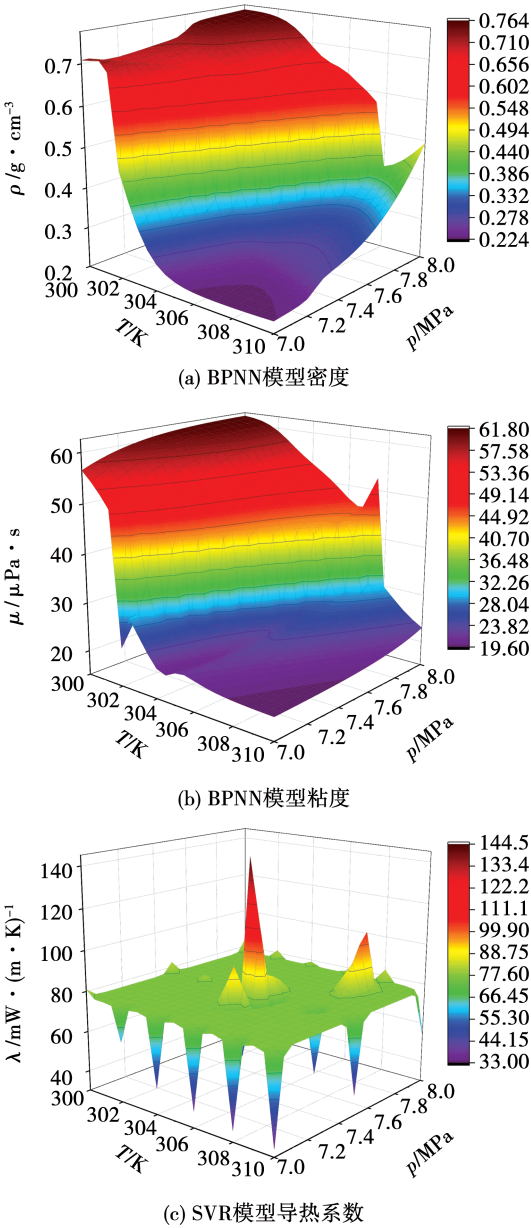


图 3 近临界区物性三维曲面图

Fig.3 Three-dimensional surface graph of thermophysical properties in the region around the critical point

3 结 论

基于 K-S 算法进行数据划分,建立了基于人工智能方法 BPNN,SVR 和 GPR 的近临界区 CO₂ 热物性预测模型,分析表明:

(1) 相较于其他模型,BPNN 的密度和粘度预测模型精度更高,密度模型的训练集和测试集 R^2 分别为 0.993 2 和 0.946 5,粘度模型的 R^2 分别为 0.993 9 和 0.970 2。SVR 模型对导热系数的预测精度更高,其 R^2 分别为 0.999 8 和 0.999 7。

(2) BPNN 密度和粘度模型与传统模型中 SW 密

度方程和 Laesecke 的粘度方程进行比较, R^2 分别提高了 58.65% 和 14.88%。SVR 导热系数模型与文献 [15] 的导热系数方程进行比较, R^2 提高了 4 444.50%。

(3) 根据智能模型获得三维连续曲面图,可用于准确估计近临界区任意温度和压力下的密度、粘度和热导系数。

参考文献:

[1] 姚佳成,赵兵涛,杨其国,等. SCO₂ 布雷顿循环发电系统与性能的综合分析比较[J]. 热能动力工程,2021,36(10):162–170.
YAO Jia-cheng,ZHAO Bing-tao,YANG Qi-guo,et al. Comprehensive analysis and comparison of supercritical carbon dioxide Brayton cycle power generation system and performance[J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power, 2021, 36 (10): 162–170.

[2] 赵兵涛,杨其国,李宇峰,等. 千兆瓦级超临界 CO₂ 透平结构设计及性能分析[J]. 热能动力工程,2021,36(1):33–37.
ZHAO Bing-tao,YANG Qi-guo,LI Yu-feng,et al. Design and performances of gigawatt-level supercritical carbon dioxide turbine [J]. Journal of Engineering for Thermal Energy and Power,2021, 36(1):33–37.

[3] KENDEY G C. Pressure volume temperature relations in CO₂ at elevated temperatures and pressures[J]. American Journal of Science,1954,252(4):225–241.

[4] ZHANG Xi-feng,ZHANG Xiao-gang,HAN Bu-xing,et al. Determination of constant volume heat capacity of mixed supercritical fluids and study on the intermolecular interaction[J]. The Journal of Supercritical Fluids,2002,24(3):193–201.

[5] KODAMA D,SUGIYAMA K,ONO T,et al. Volumetric properties of carbon dioxide + isopropyl ethanoate mixtures at 308.15 and 313.15 K[J]. The Journal of Supercritical Fluids,2008,47(2):128–134.

[6] IWASAKI H,TAKAHASHI M. Viscosity of carbon dioxide and ethane[J]. Journal of Physical and Chemical Reference Data,1981, 74(3):1930–1943.

[7] VESOVIC V,WAKEHAM W A,OLCHOWY G A,et al. The transport properties of carbon dioxide[J]. Journal of Physical and Chemical Reference Data,1990,19(3):763–808.

[8] GULIK P S V D. Viscosity of carbon dioxide in the liquid phase [J]. Physica,1997,238(1–4):81–112.

[9] PENSADO A S,PÁDUA A A H,COMUÑAS M J P,et al. Viscosity and density measurements for carbon dioxide + pentaerythritol ester lubricant mixtures at low lubricant concentration[J]. The Journal of Supercritical Fluids,2008,44(2):172–185.

[10] MICHELS A,SENGERS J V,GULIK P S V D. The thermal conductivity of carbon dioxide in the critical region II measurements and conclusions[J]. Physica,1962,28(12):1216–1237.

[11] SCALABRIN G,MARCHI P,FINEZZO F,et al. A reference multiparameter thermal conductivity equation for carbon dioxide with an optimized functional form[J]. Journal of Physical and Chemical Reference Data,2006,35(4):1549–1575.

[12] LI Bo,WANG Shun-sen,XU Yao-bo,et al. Study on the off-de-

sign performance of supercritical carbon dioxide power cycle for waste heat recovery of gas turbine[J]. Energy Conversion and Management,2021(233):113890.

[13] SPAN R,WAGNER W. A new equation of state for carbon dioxide covering the fluid region from the triple-point temperature to 1 100 K at pressures up to 800 MPa[J]. Journal of Physical and Chemical Reference Data,1996,25(6):1509–1596.

[14] LAESECKE A,MUZNY C D. Reference correlation for the viscosity of carbon dioxide[J]. Journal of Physical and Chemical Reference Data,2017,46(1):013107.

[15] JARRAHIAN A,HEIDARYAN E. A novel correlation approach to estimate thermal conductivity of pure carbon dioxide in the supercritical region [J]. The Journal of Supercritical Fluids, 2012 (64):39–45.

[16] LEMMON E W,MCLINDEN M O,FRIEND D G. Thermophysical properties of fluid systems in NIST chemistry web book[OL]. https://www.nist.gov/publications/thermophysical-properties-fluids.

[17] 章 聪,江锦波,彭旭东,等. 近临界区 CO₂ 物性预测模型对比与修正[J]. 化工学报,2019,70(8):3058–3070.
ZHANG Cong,JIANG Jin-bo,PENG Xu-dong,et al. Comparison and correction of CO₂ properties model in critical region [J]. Chemical Industry and Engineering Progress, 2019, 70 (8): 3058–3070.

[18] ABDOLBAGHI S, BARATI-HAROONI A, NAJAFI-MARGHMALEKI A. Improving the prediction ability of reference correlation for viscosity of carbon dioxide[J]. Journal of CO₂ Utilization, 2019(31):106–114.

[19] SHAMS R,ESMAILI S,RASHID S,et al. An intelligent modeling approach for prediction of thermal conductivity of CO₂ [J]. Journal of Natural Gas Science and Engineering,2005,27(2):138–150.

[20] TATAR A,BARATI-HAROONI A,NAJAFI-MARGHMALEKI A, et al. Predictive model based on ANFIS for estimation of thermal conductivity of carbon dioxide[J]. Journal of Molecular Liquids, 2016,224(B):1266–1274.

[21] AMAR M N,GHAHFAROKHI A J,ZERAIBI N. Predicting thermal conductivity of carbon dioxide using group of data-driven models[J]. Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers,2020(113):165–177.

[22] WONG W E,QI Y. BP neural network-based effective fault localization[J]. International Journal of Software Engineering and Knowledge Engineering,2009,19(4):573–597.

[23] MALEGORI C,JOSÉ E,MARQUES N,et al. Comparing the analytical performances of Micro-NIR and FT-NIR spectrometers in the evaluation of acerola fruit quality, using PLS and SVM regression algorithms[J]. Talanta,2017(165):112–116.

[24] KORIYAMA T,NOSE T,KOBAYASHI T. Statistical parametric speech synthesis based on Gaussian process regression[J]. IEEE Journal of Selected Topics in Signal Processing,2017,8(2):173–183.

[25] KENNARD R W,STONE L A. Computer aided design of experiments[J]. Technometrics,1969(11):137–147.