

用神经网络预测蒸气压和汽化热 Prediction of Steam Pressure and Heat of Vaporization with Neural Network

韦藤幼 黄瑞华
Wei Tengyou Huang Ruihua

(广西大学工业测试实验中心 南宁 530004)
(Industrial Testing Experiment Centre, Guangxi University, Nanning, 530004)

摘要 用前向神经网络,对纯物质的蒸气压和汽化热与温度的函数关系进行预测。通过适当变量变换,在相同网络单元数情况下,大大提高预测精度。对387种物质的预测结果表明:在熔点 to 临界点的温度范围内,蒸气压的平均预测误差为0.084%,汽化热的平均预测误差为0.018%。

关键词 神经网络 预测 蒸气压 汽化热

中图分类号 O 645.3; TP 183

Abstract A feedforward neural network was used to predict functional relationship of temperature with steam pressure and heat of vaporization of the pure material. By varying suitably variables, a high degree of accuracy was received at the network of the same units. Predicted results based on 387 cases showed that the average estimated error of steam pressure and heat of vaporization were respectively 0.084% and 0.018% in the temperature ranging from the melting point to critical point.

Key words neural network, estimation, steam pressure, heat of vaporization

液体的蒸气压和汽化热是热力工程和分离工程中最重要基础数据。虽然这些性质与温度关系为确定性函数关系,但由于其复杂性,目前还没有精确的理论方程,所用的经验预测模型^[1~4]只适用于某个温度或较低的温度范围,误差在0.5%以上。本文利用文献[5]给出的神经网络预测方法,结合蒸气压和汽化热与温度关系的特点,通过适当的变量的变换,大大提高了预测精度。对文献[6]提供的387种物质的温度从熔点到临界点全部蒸气压和汽化热数据进行预测,结果表明,蒸气压和汽化热的平均误差分别为0.084%和0.018%。

1 网络预测模型

对函数 $y = f(x)$, 采用输入层1个单元、中间层 p 个单元和输出层1个单元的三层前向神

经网络来逼近, 根据文献[5]其数学模型为:

中间层第 j 单元的输入量为:

$$s_j = \theta_j + \omega_j x_i, \quad (j = 1, \dots, p),$$

其输出采用 Sigmoid 函数为:

$$b_j = 1/(1 + \exp(-s_j)), \quad (j = 1, \dots, p),$$

输出层的输入和输出分别为:

$$l = r + \sum_{j=1}^n v_j b_j,$$

$$y_i = 1/(1 + \exp(-l)),$$

上面 4 个式中, 分别为中间层的权值及阈值, v_j, r 别为输出层的权值与阈值, 需通过网络训练求出。本文的网络训练采用文献[5]给出的带阻尼的牛顿二阶学习方法。

网络的输入 x_i 及输出 y_i 通过下面两式变换, 以控制 x_i 及 y_i 的取值范围从 0 到 1。

$$x_i = \frac{a_{\max} - a_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} x_i + a_{\min},$$

$$y_i = \frac{a_{\max} - a_{\min}}{y_{\max} - y_{\min}} y_i + a_{\min},$$

上式中, x_{\min}, x_{\max} 和 y_{\min}, y_{\max} 是训练函数 $y = f(x)$ 的 x 和 y 的最小及最大值, a_{\min}, a_{\max} 是 x 及 y 的工作区间范围。

1.1 蒸气压的预测模型

图 1 是乙醇的蒸气压 P 与温度 T 的关系。而图 2 是 P 通过对数变换后, $\ln P$ 与 T 的关系。对比图 1 和图 2 可知, P 变换后, 函数的非线性程度明显下降。

表 1 是采用不同的中间单元数时, P 变换前后的预测结果。可看出, P 经变换后, 预测结果明显改善。

本文对蒸气压的预测采用 3 个中间单元, 使用 $\ln P = f(T)$ 的函数关系。函数的取值范围是最小值 T_{\min} 及 $\ln P_{\min}$ 为手册数据中最低温度点, 最高点为临界点 $(T_c, \ln P_c)$ 。工作区间 $[a_{\min}, a_{\max}]$ 为 $[0.45, 0.6]$ 。

1.2 汽化热的预测模型

图 3 是乙醇汽化热 H 与 T 的关系。温度较低时, H 与 T 关系线性较好, 接近临界点时 H 急降为零。采用图 4 的变换后, 靠近临界点的变化率几乎为线性关系。

表 2 是采用不同中间单元数时, 变换前后的预测结果。可见变换前, 误差较大, 增加中间单元数效果也很小。温度 T 变换后, 预测误差显著减小。

表 1 乙醇蒸气压不同预测模型的平均误差(%)

关系	$P \sim T$	$\ln P \sim T$
1 个单元	39.5	2.77
2 个单元	1.47	0.09
3 个单元	0.26	0.05

表 2 乙醇汽化热不同模型预测的平均误差(%)

关系	$H \sim T$	$H \sim (1 - T/T_c)^{1/2}$
1 个单元	2.07	0.52
2 个单元	0.31	0.16
3 个单元	0.31	0.005

表 3 不同类物质蒸气压及汽化热的预测结果

物质类别	物质数	蒸气压		汽化热	
		平均误差 (%)	最大误差 (%)	平均误差 (%)	最大误差 (%)
烃类	96	0.082	2.56	0.034	2.29
卤代烃	58	0.077	2.45	0.011	1.13
硝基化合物	8	0.009	0.05	0.015	0.48
醇类	28	0.153	2.35	0.021	1.91
醚、醛、酮	37	0.098	1.94	0.010	0.37
有机酸类	23	0.132	1.97	0.019	1.21
酯类	36	0.050	0.92	0.008	0.33
胺、腈、酚	61	0.072	1.83	0.014	1.05
含氧氮硫、杂环	28	0.056	0.95	0.011	0.32
无机气体	12	0.100	1.42	0.011	0.08
合计	387	0.084	2.56	0.018	2.29

本文对汽化热的预测采用3个中间单元,使用 $H \sim [1 - T/T_c]^{1/2}$ 函数关系, H 及 $[1 - T/T_c]^{1/2}$ 的最小值均为0(即临界点, $T = T_c, H = 0$), 最大值由手册数据确定。工作区间 $[a_{\min}, a_{\max}]$ 为 $[0.3, 0.6]$ 。

2 结果及讨论

表3是对文献[6]给出的387种物质蒸气压及汽化热的预测结果。对蒸气压的预测, 醇与有机酸的相对平均误差超过0.1%, 高于其它种类物质, 这是由于醇及酸的分子极性较强, 引起 P 与 T 的关系的非线性程度增加。最大误差为2.56%, 从表4的乙醇预测结果可看出, 最大误差出现在蒸气压单位用毫米汞柱及大气压表示的交接处。由于低压(手册常用毫米汞柱表示)及高压(手册常用大气压表示)的蒸气压测定常采用不同实验装置, 0.2%的最大偏差由于实验测定引起可能性很大。

表4 乙醇不同温度下的文献值与预测值比较

温度 (°C)	文献值	预测值	相对误差 (%)
0	11.9160 (mmHg)	11.921 (mmHg)	-0.043
10	23.5350	23.517	0.075
20	44.0320	44.021	0.025
30	78.5299	78.563	-0.043
40	134.210	134.284	-0.055
50	220.789	220.781	0.004
60	351.030	350.797	0.067
70	541.200	541.362	-0.030
80	811.520	812.095	-0.071
90	1186.60	1183.227	0.284
100	2.207 (大气压)	2.211 (大气压)	-0.200
110	3.069	3.073	-0.120
120	4.185	4.186	-0.024
130	5.603	5.601	0.028
140	7.378	7.374	0.054
150	9.570	9.563	0.069
160	12.24	12.231	0.049
170	15.46	15.454	0.036
180	19.30	19.297	0.016
190	23.83	23.838	-0.032
200	29.14	29.156	-0.053
210	35.31	35.332	-0.063
220	42.43	42.451	-0.049
230	50.59	50.597	-0.013
240	59.91	59.855	0.092

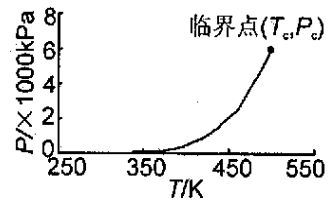


图1 乙醇的 $P \sim T$ 关系

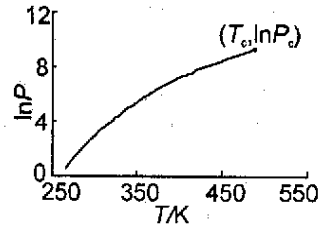


图2 乙醇的 $\ln P \sim T$ 关系

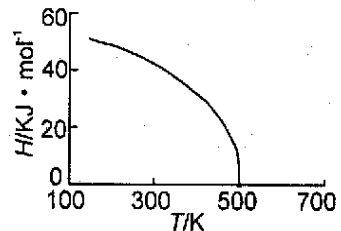


图3 乙醇的 $H \sim T$ 关系

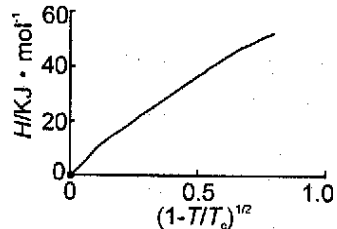


图4 乙醇的 $H \sim (1 - T/T_c)^{1/2}$ 关系

对汽化热的预测结果表明，所有物质的预测误差都非常小，相对平均误差为 0.018%，这不但表明文献[6]的数据规律性很好，精度很高，而且也证明了，用 3 个中间单元及 $H \sim [1 - T/T_c]^{1/2}$ 的关系的神经网络模型的精确性，预测结果可完全代替手册数据。

通常对没有确定性函数关系的神经网络拟合，还应考察模型的预报能力。但对确定性有界函数的逼近，只要用于拟合的数据精度高、点数多及分布合理，其预测精度和拟合精度是一致的。本文采用的文献[6]数据其精度很高、分布均匀、点数较多，因此本文的预测结果是可考的。

3 结语

本文采用的预测蒸气压和汽化热的神经网络模型逼近真实函数关系很好，预测结果误差很小，能满足绝大多数科学及工程对蒸气压及汽化热的预测需求。对确定性函数的逼近，通过适当的输入或输出变量变换，降低函数的非线性程度，可大提高神经网络的预测精度。

参考文献

- 1 马沛生等. 石油化工基础数据手册 (续篇). 北京: 化学工业出版社, 1993.
- 2 阙丹锋, 麻德贤. 用人工神经网络定量预测化工基础物性. 北京化工学院学报, 1993, 3 (20): 107.
- 3 张向东, 赵立群, 张国义. 人工神经网络预测有机物基础物性. 化工学报, 1995, 1 (46): 67.
- 4 陈海松, 王福安, 宋建池等. 纯物质汽化热的人工神经网络算法. 高等化学工程学报, 1998, 4 (12): 375.
- 5 韦藤幼, 黄瑞华. 用神经网络预测饱和液体的密度. 广西科学, 2000, 7 (3): 201~202, 205.
- 6 卢焕章等. 石油化工基本数据手册. 北京: 化学工业出版社, 1984.

(责任编辑: 黎贞崇)