MODELAGEM DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS DE FLUIDOS REFIGERANTES HIDROFLUORCARBONO POR MEIO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

Vítor Ravazzi Hidalgo[1], Gabriel Yoshiaki Ottaiano[2], Tiago Dias Martins[1]

[1]Universidade Federal de São Paulo (UNIFESP), Diadema - SP, Brasil
(vitorravazzi@gmail.com)
[2]Universidade Estadual de Campinas, Campinas - SP, Brasil

Resumo: Este trabalho utilizou Redes Neurais Artificiais (RNAs) para prever propriedades termodinâmicas (viscosidade, condutividade térmica, capacidade calorífica e densidade) de cinco fluidos refrigerantes HFC. As RNAs foram treinadas com dados da literatura, e foram consideradas pressão, temperatura, fator acêntrico e massa molar como entradas. O melhor modelo apresentou erros abaixo de 0,1 %, mostrando-se altamente competente e vantajoso para aplicação na indústria de refrigeração.

Palavras-chave: Redes Neurais Artificiais; Propriedades Termodinâmicas; Fluidos Refrigerantes; Modelagem; Refrigeração

INTRODUÇÃO

A Termodinâmica consolidou-se em meados do século XIX, impulsionada pela necessidade de compreender o funcionamento das máquinas a vapor e a relação intrínseca entre trabalho e calor. Sob essa ótica, o calor é definido como energia em trânsito, originada fundamentalmente por gradientes de temperatura entre corpos ou por processos dissipativos. Consequentemente, a transferência de calor atua como um mecanismo de alteração das energias intrínsecas de um sistema, tais como as energias interna, cinética e potencial (Stoecker; Jabardo, 2018) visando algum objetivo específico.

Os processos de refrigeração são empregados para a remoção de calor de equipamentos, com o objetivo de manter a temperatura de seu conteúdo constante. A eficiência desses processos é dependente dos fluidos refrigerantes, que operam em fase única ou mediante mudança de fase, viabilizando sua recirculação no sistema e promovendo o resfriamento (Stoecker; Jabardo, 2018). No âmbito industrial, os processos de refrigeração são indispensáveis para assegurar o pleno funcionamento dos equipamentos, prevenindo gargalos na linha produtiva e, consequentemente, maximizando a produção.

Os sistemas de refrigeração figuram frequentemente nas pautas de convenções climáticas globais, em virtude da utilização de fluidos refrigerantes historicamente associados à depleção da camada de ozônio. Por conseguinte, desde a sua concepção, tais fluidos têm sido objeto de extensas investigações científicas, com o intuito de estabelecer um ponto de equilíbrio ótimo entre a eficiência termodinâmica e a mitigação do impacto ambiental (Ferraz; Gomes, 2008).

Fluidos Refrigerantes

O fluido refrigerante atua como um componente-chave para o funcionamento adequado do sistema de refrigeração. Dessa maneira, a seleção do fluido ideal é determinante para a vida útil tanto do sistema global quanto dos equipamentos a ele associados.

Com o objetivo de incrementar a eficiência e atenuar os impactos ambientais, os sistemas de refrigeração são submetidos a inovações constantes. Destacam-se as transformações ocorridas nas últimas duas décadas, responsáveis pela introdução dos clorofluorcarbonetos (CFCs), substâncias significativamente mais eficientes que seus predecessores. No entanto, constatou-se que a utilização dos CFCs causava danos severos à camada de ozônio, o que motivou sua substituição pelos atuais HFCs ou fluorocarbonos (Stoecker; Jabardo, 2018).

Entre as décadas de 1980 e 1990, convenções climáticas deliberaram pela substituição dos CFCs, dado o seu elevado potencial de destruição da camada de ozônio. Nesse cenário, adotou-se o uso dos fluorocarbonos (HFCs), uma alternativa que, em virtude de seu tempo de residência atmosférica substancialmente menor, não afeta a camada de ozônio (Assunção, 1993). Estes refrigerantes consistem em compostos halogenados, derivados de hidrocarbonetos e isentos de cloro (Cl). Tais compostos tornaram-se altamente atrativos para

aplicações industriais, visto que a combinação de suas propriedades termodinâmicas e ambientais atende aos interesses do setor.

Propriedades Termodinâmicas de Interesse

A modelagem matemática é uma das abordagens primárias para a otimização da eficiência dos processos de refrigeração, englobando fenômenos de transferência de quantidade de movimento e de calor. O equacionamento desses sistemas demanda o conhecimento de diversos parâmetros termo físicos do fluido refrigerante.

A viscosidade (η) de um fluido é definida como a resistência ao escoamento relativo entre suas camadas adjacentes. Tratando-se de uma propriedade termodinâmica, a viscosidade apresenta dependência direta da temperatura: uma mesma substância pode escoar com maior facilidade sob altas temperaturas, tornando-se, contudo, excessivamente espessa em temperaturas reduzidas, o que pode acarretar o mau funcionamento ou até mesmo danos ao sistema (Bertulani, 1999). Consequentemente, a obtenção de equações precisas para a viscosidade é de alta relevância, uma vez que sua variação, decorrente do aquecimento ou resfriamento do sistema, afeta diretamente a capacidade de transferência de calor (Mondal; Field, 2018).

A condutividade térmica (λ) refere-se à capacidade de um sistema de conduzir calor (Bernardino, 2020). Esta propriedade é de extrema relevância para o cálculo dos coeficientes de transferência de calor; quanto mais precisa for a sua predição, menor será a incerteza associada a esses cálculos, resultando na otimização do projeto, do controle e dos custos dos processos de refrigeração. Assim como a viscosidade, a condutividade térmica é fundamental na modelagem de refrigerantes, sendo o parâmetro que determina o coeficiente de troca térmica entre o maquinário e o fluido utilizado (Kim et al., 2020).

O conceito de capacidade calorífica (C_p) deriva da compreensão do calor como energia em trânsito. Cada substância possui uma capacidade ou afinidade térmica distinta; ou seja, quanto menor for a variação de temperatura de um corpo ao absorver uma determinada quantidade de calor, maior será a sua capacidade calorífica. Isso implica que uma maior quantidade de calor é exigida para elevar a temperatura do corpo (Smith et al., 2000). Este parâmetro é um fator determinante na seleção do refrigerante ideal para uma temperatura de operação específica, demandando fluidos que exijam maior aporte de calor para sofrerem variações térmicas.

A densidade (ρ) de uma substância é definida pela razão entre sua massa e seu volume, relação que permite a determinação do volume de um corpo a partir de sua massa, e vice-versa (Smith et al., 2000). A densidade se constitui como uma grandeza crucial para a predição do comportamento das substâncias, visto que diversas outras propriedades termodinâmicas se correlacionam com ela. Portanto, o conhecimento do comportamento da densidade de um fluido refrigerante é igualmente importante para a sua seleção ideal em uma linha de produção.

As características do comportamento da viscosidade e da condutividade térmica em função da temperatura e pressão são pontos chave para determinar o fluido mais eficiente para fazer parte de um determinado sistema de refrigeração. Como cada fluido possui diferentes interações moleculares, cada um deles possui características próprias que devem ser calculadas com equações específicas.

Modelagem e a Aplicação de Redes Neurais

As Redes Neurais Artificiais (RNAs) constituem uma tentativa de mimetizar determinadas funções do cérebro humano, estruturando-se como uma rede intrincada de neurônios aptos a processar dados de entrada e convertê-los em um formato de saída previamente especificado pelo usuário (Haykin, 2001).

De maneira análoga ao cérebro biológico, as RNAs possuem a capacidade de aprendizado. Um procedimento designado como "aprendizagem", ou treinamento, é executado com o intuito de modelar essa estrutura artificial em conformidade com a aplicação futura específica da rede. Consequentemente, destaca-se como uma das principais vantagens da utilização dessas redes a sua elevada adaptabilidade às mais diversas necessidades (Haykin, 2001).

A arquitetura fundamental de uma rede neural é composta por, no mínimo, três camadas distintas de neurônios: a camada de entrada, a camada intermediária (ou oculta) e a camada de saída. Cada neurônio individual recebe sinais de entrada, os quais são associados a pesos sinápticos e a um viés (bias). Esses parâmetros são utilizados no cálculo do coeficiente de ativação, resultando na geração de um sinal de saída. As saídas provenientes de uma determinada camada de neurônios atuam como entradas para a camada subsequente, configurando assim uma rede complexa e interconectada (Braga et al., 2000).

A Figura 1 ilustra um esquema básico de uma rede neural artificial, elucidando o funcionamento supracitado. Por sua vez, as unidades de processamento da rede (os neurônios), que constituem a unidade morfológica fundamental do sistema, estão representadas na Figura 2.

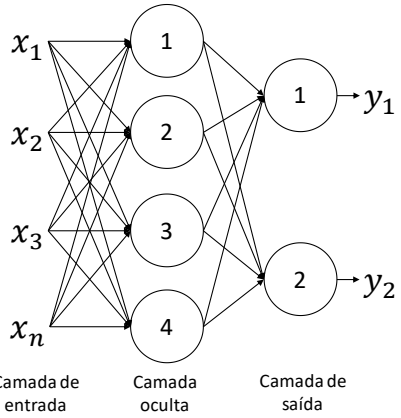

Figura 1- Estrutura básica de uma RNA

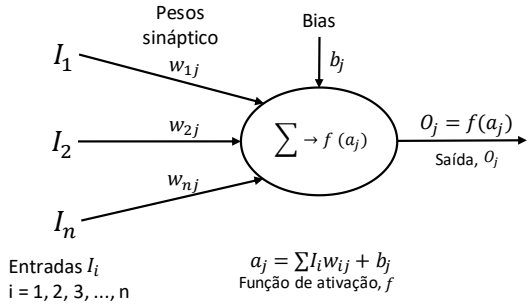

Figura 2 - Esquema de um neurônio artificial

O neurônio é composto de diversas entradas, representadas por I_i, sendo que, cada entrada é associada a um peso (w_{ij}), de acordo com a relevância dessa informação na operação realizada pelo neurônio. Também existe o bias (b_j), um parâmetro associado a cada unidade de processamento que amplia a capacidade de procura do neurônio. Esses valores são utilizados em uma função soma, gerando um coeficiente de ativação (α_j) que, associada à função de transferência (ativação) (f), gera um valor de saída do neurônio (O_j). A Equação (1) mostra como o cálculo da saída de um neurônio artificial é realizado.

$$O_j = f\left(\sum_i w_{ij} x_i + b_j\right) \quad (1)$$

Como mencionado anteriormente, a rede neural deve passar pelo processo de treinamento, para que seja devidamente capacitada a predizer as informações desejadas. Para isso, deve ser oferecido a ela um rol de dados contendo as variáveis entradas e as saídas esperadas, dessa forma serão definidos os pesos e o bias de cada neurônio, permitindo o posterior funcionamento da rede para a finalidade desejada (Braga *et al.*, 2000). A organização dos dados é a primeira etapa para a obtenção de uma rede neural artificial.

Subsequente à organização dos dados, procede-se às etapas de modelagem. A concepção de uma rede neural artificial requer, inicialmente, a predefinição de sua topologia, o que implica estabelecer o número de camadas ocultas e a quantidade de neurônios alocados em cada uma delas. Em seguida, a estrutura é submetida a um processo de otimização, cujo propósito é a determinação dos pesos sinápticos e vieses (bias) de cada neurônio. É imperativo que, após qualquer modificação estrutural, a rede seja submetida a novos testes de avaliação (Martins, 2018).

Estabelecida a arquitetura básica, a rede neural é submetida à fase de treinamento. Esta etapa consiste na aplicação de algoritmos de otimização para o ajuste iterativo de seus parâmetros, objetivando a convergência dos valores de saída para os resultados esperados. Considerando um parâmetro k (peso ou bias) da rede, o seu valor atualizado na iteração $i+1$ é expresso pela Eq. (2), onde $\Delta k(i)$ representa a variação do parâmetro k entre as iterações i e $i+1$:

$$k(i+1) = k(i) + \Delta k(i) \quad (2)$$

A literatura dispõe de diversos algoritmos para o cálculo iterativo dos parâmetros durante o processo de ajuste, cada qual com especificidades inerentes. Consequentemente, cada método emprega formulações matemáticas distintas para a atualização dos valores, fator que exerce influência direta na obtenção de um modelo neural robusto e confiável.

Os variados algoritmos de aprendizagem propõem metodologias divergentes para o cálculo dos parâmetros, de modo que sua eficácia pode variar em função da topologia da rede adotada. Portanto, um algoritmo de treinamento que otimiza o desempenho de uma determinada arquitetura pode não conduzir a resultados satisfatórios quando aplicado a uma rede distinta.

Um aspecto crítico durante o treinamento é a suscetibilidade da rede ao sobreajuste (vício) em relação ao conjunto de dados fornecido. Para mitigar esse fenômeno, incorpora-se a etapa de validação, a qual emprega um subconjunto de dados distinto daquele utilizado no treinamento. Durante o processo de aprendizagem, os erros associados aos conjuntos de treinamento e de validação são monitorados simultaneamente.

Contudo, pode-se atingir um limiar a partir do qual o erro de validação passa a ascender, enquanto o erro de treinamento mantém sua trajetória descendente. Este comportamento é indicativo de um vício da rede aos dados de treinamento. Na prática, adota-se a interrupção do treinamento neste momento, selecionando-se como o melhor resultado a configuração da rede correspondente ao ponto de mínimo do erro de validação.

Por fim, executa-se a etapa de teste, na qual um terceiro conjunto de dados é avaliado pela rede treinada com o objetivo de atestar a sua eficiência.

Adicionalmente, uma etapa de suma importância é o procedimento denominado pelo grupo de trabalho como processo de simulação, ou validação externa. Esta fase é imprescindível para viabilizar a geração de gráficos que evidenciem a tendência comportamental dos dados modelados.

Apesar de diversas equações fenomenológicas e correlações empíricas terem sido propostas na literatura para o cálculo dessas propriedades, estas ainda apresentam limitações (Sheikh et al. (2002), Wang et al. (2007), Amooey (2017), Gao et al. (2018), Liu et al. (2020)). Destacam-se a precisão restrita e, sobretudo, o elevado custo computacional, fator crítico no contexto de controle de processos, em que os cálculos são executados de forma iterativa e contínua.

Nesse contexto, a aplicação de Redes Neurais Artificiais (RNAs) emerge como uma alternativa promissora para contornar tais desvantagens. Devido à sua elevada capacidade de interpolação, as RNAs são aptas a predizer as características termodinâmicas dos fluidos, em condições operacionais de temperatura e pressão, aliando alta precisão a um reduzido tempo de resposta.

Embora as Redes Neurais Artificiais representem uma abordagem metodológica relativamente recente para a classe de problemas abordada neste estudo, a ferramenta já tem sido aplicada com êxito na predição de parâmetros de fluidos refrigerantes. Dentre os trabalhos inseridos nessa temática, alguns estudos recentes foram compilados e estão expostos na Tabela 1.

Tabela 1 - Resumo dos modelos mais recentes envolvendo aplicação de RNA na predição de propriedades termodinâmicas de fluidos refrigerantes

Fluidos refrigerantes	Variáveis de entrada	Variáveis de saída	Rede mais eficaz	Erro	Referência
R1233zd(E), R1234yf, R1234ze(E), R1234ze(Z), R1224yd(Z), R1336mzz(E), and R1336mzz (Z)	Temperatura reduzida, pressão reduzida e fator acêntrico	Viscosidade dinâmica do líquido	Função de ativação sigmoidal; uma camada oculta com 19 neurônios	0,86%	(Tomassetti *et al.*, 2024)
R125, R134a, R143a, R161, R227ea, R236fa, R245fa, R32, R1234yf, R1234ze(E), R1336mzz(Z)	Pressão reduzida, temperatura reduzida, massa molar e fator acêntrico	Viscosidade, condutividade térmica	Uma camada oculta com 9 (viscosidade) e 8 neurônios (condutividade); Funções de ativação linear e sigmoidal	1,21%	(Wang *et al.*, 2020)
26 substâncias	Número de átomos de carbono na molécula, número de ligações de carbono em locais específicos da molécula	Viscosidade, velocidade do som, capacidade térmica molar, condutividade térmica e entalpia	Uma camada intermediária com quatro neurônios	5,13 % (viscosidade) e 1,41 % (condutividade)	(Rathod *et al.*, 2024)
48 substâncias	Massa molar, pressão, temperatura e grupo estrutural	Densidade	Uma camada intermediária com 20 neurônios	5,0 %	(Li; Baghban, 2024)
HFC-23, HFC-32, HFC-125, HFC-134a, HFC-143a, HFC-152a, HFC-161, HFC-227ea, HFC-236fa, HFC-245fa, HFO-1234yf, HFO-1234ze(E)	Pressao reduzida, 1-temperatura reduzida, fator acêntrico, razão entre pressão crítica do hidrocarboneto correspondente e o fluido refrigerante	Capacidade calorífica residual reduzida	Uma camada oculta com 34 neurônios	0,383%	(Gao *et al.*, 2019)
R1224yd(Z), R1233zd(E), R1234yf, R1234ze(E), R1234ze(Z), R1336mzz(E), R1336mzz(Z)	Temperatura reduzida, pressão crítica, fator acêntrico, massa molar e pressão reduzida	Condutividade térmica	Uma camada intermediária com 19 neurônios	0,389%	(Pierantozzi *et al.*, 2022)

A partir da análise desta tabela, evidencia-se que as RNAs demonstram um expressivo potencial de ajuste para a determinação das mais diversas propriedades termodinâmicas dos fluidos refrigerantes.

O presente estudo visa propor uma equação baseada em RNAs para a otimização dos processos de refrigeração no âmbito industrial, permitindo que o comportamento termodinâmico dos fluidos operacionais seja determinado com elevada precisão e reduzido tempo computacional. Dessa forma, objetiva-se minimizar o tempo de resposta necessário para eventuais correções no sistema, mitigando a ocorrência de gargalos produtivos, assegurando a maximização da produtividade e promovendo a redução dos custos operacionais.

Para atingir tal finalidade, o objetivo central deste trabalho consistiu em desenvolver, uma formulação matemática unificada para a predição da viscosidade, densidade, condutividade térmica e capacidade calorífica a pressão constante de cinco fluidos refrigerantes da classe dos hidrofluorocarbonetos (HFCs), sendo eles: difluoroetano, trifluoroetano, tetrafluoroetano, pentafluoroetano e hexafluoroetano, restritos à fase líquida. A predição dessas propriedades será modelada em função das variáveis operacionais de temperatura e pressão às quais o fluido é submetido durante o ciclo de refrigeração.

Inserido neste contexto, o trabalho propõe-se, adicionalmente, a investigar a influência dos hiperparâmetros da rede neural sobre o desempenho preditivo. Especificamente, será avaliado o impacto da variação do número de camadas intermediárias, da quantidade de neurônios por camada, dos algoritmos de otimização empregados e das funções de ativação selecionadas, com o intuito de determinar a topologia que resulte no modelo mais robusto e acurado possível.

MATERIAL E MÉTODOS

Os dados experimentais empregados neste projeto foram extraídos da base de dados do *National Institute of Standards and Technology* (NIST). As substâncias selecionadas para análise foram compiladas na Tabela 2, juntamente com as respectivas propriedades termofísicas utilizadas no escopo deste estudo.

Tabela 2 - Propriedades de entrada do modelo

Substância	T_c (K)	P_c (MPa)	MM (g/mol)	Fator Acêntrico
R32	351,6	5,78	52,02	0,2769
R152-A	386,4	4,52	66,05	0,2752
R143-A	345,9	3,76	84,04	0,2615
R134-A	374,2	4,06	102,03	0,3268
R125	339,2	3,62	120,02	0,3052
R116	293,0	3,05	138,01	0,2566

O levantamento de dados resultou na coleta de 3.765 pontos referentes às isotermas e 8.867 pontos referentes às isobáricas, englobando todas as substâncias analisadas. As isotermas foram extraídas em incrementos de 0,1 T_c, restritas ao intervalo de 0,5 T_c a 0,95 T_c. Para cada isoterma, os dados foram amostrados a cada 1 MPa; este conjunto de dados foi destinado à etapa de obtenção (treinamento, teste e validação) do modelo.

Por sua vez, as isobáricas foram coletadas em intervalos de 5 MPa, compreendidos entre a pressão de saturação e o valor máximo de pressão disponível na base de dados. Para cada isobárica, a amostragem ocorreu a cada 1 K; este segundo conjunto de dados foi reservado para a etapa de validação externa do modelo desenvolvido. Para cada ponto experimental coletado, os correspondentes valores de viscosidade, condutividade térmica, densidade e capacidade calorífica foram rigorosamente tabulados.

Os dados empregados na obtenção da rede neural foram sumarizados na Tabela 3, apresentados sob a forma de intervalos que englobam os valores máximos e mínimos de cada variável utilizada.

De posse deste banco de dados estruturado, procedeu-se à aplicação das Redes Neurais Artificiais. Durante este processo, a camada de entrada da rede foi alimentada com os seguintes parâmetros: pressão e temperatura críticas, pressão e

Tabela 3 - Intervalos utilizados para cada substância

Substância	T (K)	P (MPa)	η (m^2/s)	λ (W/m K)	C_p (J/K)	ρ (mol/m^3)
R32	136,4 - 333,7	$8{,}35 \times 10^{-5}$ - 70	70,7 - 1219,3	0,1 - 0,25	76,96 -27472	14784 - 27472
R152-A	154,6 - 367,1	$6{,}41 \times 10^{-5}$ - 60	5,205 - 2001,4	0,0001 - 0,179	97,583 -192,98	9946,5 - 8069
R143-A	165 - 328,6	$1{,}56 \times 10^{-3}$ - 100	72,017 - 1043,2	0,055 - 0,141	100,47 - 198,54	9109,6 - 15846
R134-A	175 - 355,5	$6{,}80 \times 10^{-4}$ - 70	85,895 - 2078,8	0,056 - 0,148	118,99 - 220,7	8916,1 - 15599
R125	175 - 322,2	$3{,}65 \times 10^{-3}$ - 60	91,145 - 1138	0,050 - 0,123	123,14 - 224,09	8419,5 - 14084
R116	175,8 - 278,4	0,0315 - 50	99,3 - 587,4	0,042 - 0,100	123,2 - 223	7807,7 - 12309

temperatura de operação, massa molar e fator acêntrico. Simultaneamente, a camada de saída foi configurada para predizer a viscosidade, a condutividade térmica, a densidade e a capacidade calorífica do respectivo fluido.

Sabendo-se que não há como prever a configuração ideal de uma RNA, foram treinadas diversas redes, sendo elas divididas em 1 e 2 camadas ocultas. Diversas estruturas de RNAs foram geradas variando-se o número de neurônios na(s) camada(s) oculta(s) entre 5 e 40 neurônios.

Para o treinamento, foram considerados diferentes métodos de otimização, sendo eles: gradiente conjugado backpropagation (*trainscg*), Levenberg-Marquadt (*trainlm*), Powell-Beale (*traincgb*), e Levenberg-Marquardt com regularização bayesiana (*trainbr*). Junto disso, foram aplicadas, alternadamente, as funções de ativação sigmoidal (*logsig*) e tangente hiperbólica (*tansig*) nas camadas ocultas, bem como as funções tansig e linear (*purelin*) na camada de saída.

Para a obtenção da RNA, que compreendeu as etapas de treinamento, teste e validação, os dados utilizados foram aqueles coletados na forma de isotermas. Este grupo foi separado em três conjuntos distintos na proporção de 70%, 15% e 15% para as etapas de treinamento, teste e validação, respectivamente. Na etapa de treinamento, buscou-se minimizar o Erro Quadrático Médio (MSE), que foi escolhida como função objetivo (Eq. 3).

$$F_{obj} = \frac{1}{n}\left(\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{2}\left(h_{i,iexp} - h_{i,irede}\right)^2\right) \quad (3)$$

Cada configuração de rede neural obtida foi treinada 5 vezes, aumentando a variedade de redes geradas e facilitando para encontrar a melhor para a aplicação proposta. Após isso, uma etapa de simulação foi realizada com valores novos, aqueles coletados na forma de isobáricas, para verificar a eficácia do modelo. Pelo fato de a RNA apresentar quatro variáveis de saída, a análise e escolha das redes neurais foi baseada na média dos erros percentuais médios (ERRO) da etapa de simulação (Eqs. (4) e (5)):

$$EPM(\%) = 100x\sum_{i=1}^{N}\left|\frac{y_{exp}-y_{RNA}}{y_{exp}}\right| \quad (4)$$

$$ERRO = \frac{\sum_{i=1}^{4} EPM_i}{4} \quad (5)$$

Além da análise dos erros, foram geradas tabelas dinâmicas para analisar as variáveis das redes e como estas influenciaram na obtenção da melhor rede. Foram feitas planilhas que indicam a quantidade de redes, em um determinado intervalo de erro médio, que possuem a característica analisada.

Ao final da análise então foi possível selecionar a melhor rede de acordo com o erro médio calculado, e seus resultados foram também compilados para gerar gráficos visando comparar os valores calculados com os experimentais.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Durante a fase inicial de desenvolvimento das Redes Neurais Artificiais (RNAs), procedeu-se ao treinamento de arquiteturas contendo apenas uma camada oculta. Mediante a variação dos algoritmos de treinamento, das funções de ativação e do número de neurônios, obteve-se um total de 10.426 redes distintas. Entretanto, o menor valor médio de erro de simulação alcançado por essas configurações foi considerado excessivamente elevado, atingindo patamares de aproximadamente 600%. Dada a imprecisão insuficiente para a aplicação almejada, a presente seção de resultados concentrar-se-á exclusivamente nas redes compostas por duas camadas ocultas, as quais demonstraram um desempenho substancialmente superior.

As RNAs de duas camadas ocultas foram desenvolvidas sob as variações dos mesmos hiperparâmetros supracitados, resultando em um montante de 33.526 redes distintas. A análise estatística desses modelos viabilizou o rastreamento das configurações mais eficazes, evidenciando uma convergência para erros satisfatórios à medida que a arquitetura se aproximava da rede ótima (aquela com o menor erro médio).

Os algoritmos *traincgb* e *traincg* não foram suficientemente satisfatórios na geração de redes com baixos erros, já que para essas RNAs todos os erros médios observados foram acima de 1 %. Contudo, os algoritmos, *trainbr* e *trainlm* obtiveram um desempenho altamente satisfatório, apresentando diversas estruturas de RNAs com erros abaixo de 0,1 %. Os resultados dessa tabela reforçam resultados anteriores observados na literatura especializada.

Influência do Número de Neurônios e Funções de Ativação

As Figuras 3 e 4 ilustram a distribuição quantitativa das RNAs em faixas de erro médio percentual, correlacionadas ao número de neurônios presentes na primeira e na segunda camada oculta, respectivamente. A avaliação dessa distribuição evidencia que as topologias de melhor desempenho possuíam entre 15 e 35 neurônios na primeira camada oculta, e entre 13 e 25 neurônios na segunda. Este comportamento condiz com resultados observados na literatura, dado que a relação entre as variáveis de entrada e saída não é tão simples, como visto em Melo *et al.* (2020), Ottaiano et al. (2021) e Leles e Martins (2022).

Intervalo Erro Médio (%)	Nº neurônios na 1ª camada											
	3	5	7	10	11	12	15	16	20	25	30	35
0,0-0,1	0	0	0	0	0	0	3	9	30	58	76	120
0,1-0,2	0	0	0	21	31	61	120	137	199	195	211	184
0,2-0,3	0	1	23	63	82	96	99	103	83	72	66	56
0,3-0,4	0	25	75	104	99	93	81	64	50	36	25	29
0,4-0,5	7	57	84	86	83	67	48	37	33	20	12	10
0,5-0,6	14	71	87	61	41	48	28	36	19	8	8	5
0,6-0,7	31	61	45	31	37	26	20	17	12	14	11	4
0,7-0,8	22	58	26	30	26	17	13	10	10	6	16	12
0,8-0,9	29	27	24	15	19	11	12	11	7	6	13	11
0,9-1,0	20	22	12	11	9	6	11	11	7	11	5	3

Figura 3 - Contagem do número de RNAs por faixa de erro e número de neurônios na primeira camada oculta

Intervalo Erro Médio (%)	Nº neurônios na 2ª camada						
	5	10	13	15	18	20	25
0,0-0,1	0	6	21	44	58	66	101
0,1-0,2	5	91	146	174	238	224	281
0,2-0,3	12	83	108	131	110	149	151
0,3-0,4	27	94	117	108	114	115	106
0,4-0,5	30	72	92	105	99	81	65
0,5-0,6	28	84	81	76	66	55	36
0,6-0,7	37	75	50	44	40	37	26
0,7-0,8	59	48	37	38	27	24	13
0,8-0,9	51	51	22	20	14	16	11
0,9-1,0	50	22	17	12	7	9	11

Figura 4 - Contagem do número de RNAs por faixa de erro e número de neurônios na segunda camada oculta

Adicionalmente, observa-se que apenas as RNAs contendo mais de 15 neurônios na primeira camada oculta alcançaram erros médios inferiores a 0,1%. Para a segunda camada oculta, foi necessário um mínimo de 10 neurônios para atingir o mesmo patamar de precisão. A partir desse número de neurônios, houve uma maior incidência de redes com valores de erro altamente satisfatórios (abaixo de 0,1 %) para a aplicação almejada.

Os últimos hiperparâmetros investigados compreenderam as funções de ativação da camada de saída, bem como as combinações dessas funções entre a primeira e a segunda camada oculta. Os dados referentes a esta análise encontram-se dispostos nas Figura 5.

No que tange às funções de ativação das camadas ocultas, a organização dos dados permitiu a visualização de todas as combinações possíveis e a identificação da mais adequada. Constatou-se uma ligeira superioridade das redes que empregaram a função *tansig* na primeira camada oculta, apresentando mais redes com menos de 0,1 % de erro percentual médio, sendo capaz de gerar um número de RNAs um pouco maior de redes com erros satisfatórios.

Intervalo Erro Médio (%)	1ª Camada	Logsig		Tansig	
	2ª Camada	Logsig	Tansig	Logsig	Tansig
0,0-0,1		91	64	82	59
0,1-0,2		277	265	302	315
0,2-0,3		200	200	176	168
0,3-0,4		168	183	178	152
0,4-0,5		148	133	131	132
0,5-0,6		88	111	103	124
0,6-0,7		83	80	73	73
0,7-0,8		53	71	60	62
0,8-0,9		47	48	41	49
0,9-1,0		35	29	35	29

Figura 5 - Contagem do número de RNAs por faixa de erro e combinação entre funções de ativação na camada oculta e de saída.

Seleção e Validação do Melhor Modelo

Por fim, os dados referentes às melhores configurações obtidas foram compilados na Tabela 4, em ordem crescente de média dos erros médios de cada variável de saída na etapa de validação externa.

Tabela 4 - Compilado das melhores redes obtidas (algoritmo de otimização: trainbr, F(transf.) saída: purelin)

#Neurônios na camada oculta	Funão de ativação nas camadas ocultas	Erro (%)
35-18	Tansig-Logsig	0,0554
25-25	Tansig-Logsig	0,0603
30-20	Tansig-Logsig	0,0621
25-25	Logsig-Logsig	0,0623
35-25	Tansig-Logsig	0,0624
35-18	Logsig-Tansig	0,0633
30-18	Tansig-Logsig	0,0634
35-13	Tansig-Logsig	0,0638
35-20	Logsig-Logsig	0,0644
35-15	Tansig-Logsig	0,0645

Dentre as arquiteturas compiladas, a configuração com estrutura 35-18 foi selecionada como a mais adequada. Esta estrutura apresentou 35 neurônios na primeira camada oculta e 18 na segunda, adotando a sequência de funções de ativação *tansig-logsig-purelin*. Tal configuração corrobora as tendências previamente observadas nas Figuras 3, 4 e 5. Adicionalmente, um forte indicativo da qualidade preditiva da rede selecionada consiste no valor do erro médio percentual associado a cada variável na camada de saída, cujos dados foram sumarizados na Tabela 5.

Tabela 5 - Erro Médio percentual das variáveis de saída

Variáveis	**Erro médio percentual (%)**
η	0,1020
λ	0,0332
ρ	0,0494
C_p	0,0371

Com o intuito de demonstrar a eficácia do modelo, elaboraram-se gráficos com os valores das variáveis de saída experimentais e aqueles simulados pela RNA em diferentes condições de pressão. Os gráficos expostos nas Figuras 6 a 9 representam, respectivamente, os perfis de densidade, capacidade calorífica, viscosidade e condutividade térmica dos fluidos R32 (1 bar), R134 (47 bar) e R143 (100 bar).

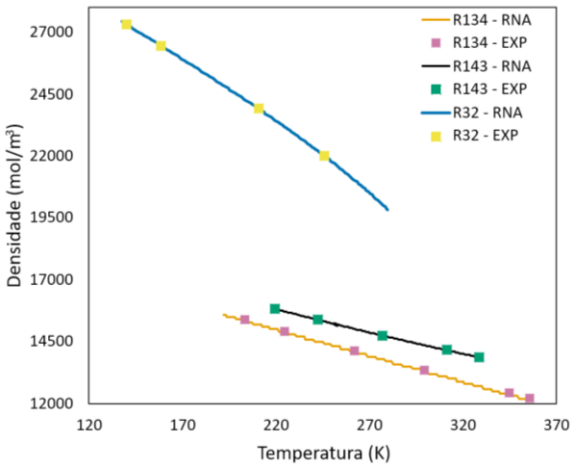

Figura 6 - Perfil de densidade em relação a temperatura para os fluidos R134, R143 e R32

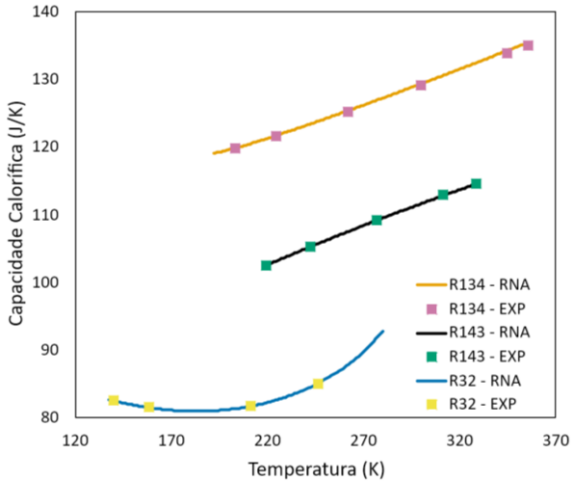

Figura 7 - Perfil de capacidade calorífica em relação a temperatura para os fluidos R134, R143 e R32

Observando-se as Figuras 6-9, observa-se que os valores experimentais foram adequadamente preditos pelo modelo. Constata-se que a rede neural demonstrou alta capacidade de interpolação, traçando um perfil satisfatório que abrange a maior parte dos pontos experimentais com desvios baixos. Esta característica é fundamental para garantir a adaptabilidade da rede a diferentes processos industriais e assegurar a utilidade de suas predições.

Ao confrontar os resultados desta pesquisa com aqueles sumarizados na Tabela 1, comprova-se que a RNA obtida neste trabalho apresentou o mesmo patamar de precisão. Ademais, os desvios encontrados mostraram-se mais satisfatórios do que a maioria dos valores reportados na Tabela 1.

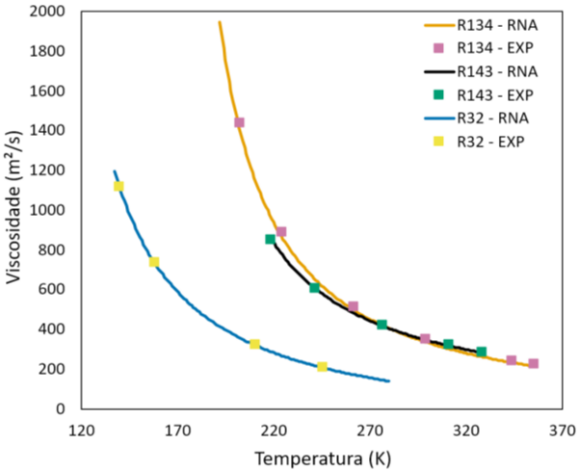

Figura 8 - Perfil de viscosidade em relação a temperatura para os fluidos R134, R143 e R32

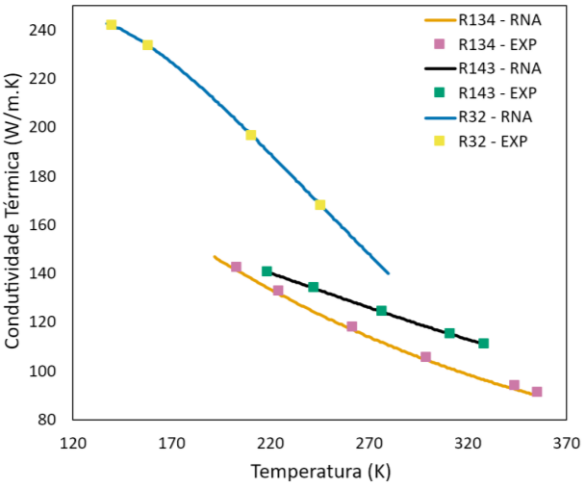

Figura 9 - Perfil de condutividade térmica em relação a temperatura para os fluidos R134, R143 e R32

CONCLUSÃO

O presente estudo dedicou-se ao aprimoramento da eficiência na modelagem matemática de propriedades termo físicas de fluidos refrigerantes em condições operacionais usando RNAs. O escopo do trabalho compreendeu o treinamento de 33.526 arquiteturas neurais distintas. Como resultado, observou-se uma variância significativa no desempenho entre as diferentes topologias, sendo que foi uma observada uma tendência de maior eficiência conforme se aumentava o número de camadas e de neurônios do

modelo, bem como quando se apresentava funções de ativação não-lineares nas camadas ocultas.

A arquitetura que apresentou o menor média dos erros percentuais médios de cada variável na fase de validação externa foi eleita como o modelo ótimo, registrando um erro relativo global de 0,05543%. Tal RNA 35 e 18 neurônios, mas camadas ocultas, sendo esse número compatível em aplicações prévias.

Diante dos resultados obtidos, conclui-se que a RNA desenvolvida possui plena viabilidade para aplicação direta em processos produtivos industriais de forma altamente satisfatória. A sua implementação é capaz de minimizar substancialmente as incertezas associadas à modelagem matemática das propriedades dos fluidos refrigerantes, além da possibilidade de reduzir o tempo computacional de resposta.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), Brasil. Processo nº 2024/10447-7 e da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

REFERÊNCIAS

Amooey, A. A. A New Equation for the Thermal Conductivity of Liquid Refrigerants Over Wide Temperature and Pressure Ranges. J Eng Phys Thermophy 90, 392–396 (2017).

ASSUNÇÃO, João Vicente de. Viabilidade e importância da redução da emissão de clorofluorcarbonos (CFCS) por reciclagem e controle no uso. 1993. Tese (Doutorado em Saúde Ambiental) - Faculdade de Saúde Pública, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1993. doi:10.11606/T.6.2016.tde-19072016-173236. Acesso em: 2026-05-08.

Bernardino, J. H. S. Análise das propiedades termofísicas de fluidos secundários para refrigeração. 2020. 28 p. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Mecânica) - Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal-RN, 2020.

Bertulani, C. Viscosidade, turbulência e tensão superficial, 1999. Disponível em: https://www.if.ufrj.br/~bertu/fis2/hidrodinamica/viscosidade.html. Acesso em: 01/05/2026.

Braga, Antonio de Pádua et al. **Redes neurais artificiais: teoria e aplicações**. Rio de Janeiro: LTC. 2000.

Ferraz, F.; Gomes, M. O histórico da refrigeração, fluidos refrigerantes, ozônio/processo de formação/destruição, sistemas de refrigeração, componentes se um sistema de refrigeração. Apostila. Centro Federal de Educação Tecnológica da Bahia, Santo Amaro-BA, 2008.

Gao, et al. A corresponding state equation for the prediction of isobaric heat capacity of liquid HFC and HFO refrigerants. Fluid Phase Equilibria, v. 456, p. 1-6. 2018.

Gao, et al. An artificial neural network for the residual isobaric heat capacity of liquid HFC and HFO refrigerants. International Journal of Refrigeration, v. 98, p. 381-387, 2019.

Haykin, S. Redes neurais: princípios e prática. Bookman Editora, Porto Alegre, 2001.

Kim, D., et al. Thermal conductivity measurements of refrigerant mixtures containing hydrofluorocarbons (HFC-32, HFC-125, HFC-134a), hydrofluoroolefins (HFO-1234yf), and carbon dioxide (CO2). The Journal of Chemical Thermodynamics, v. 151, p. 106248, 2020.

Leles, M. G.; Martins, T. D. Correlação baseada em redes neurais artificiais para cálculo da condutividade térmica da água em fase líquida. (Org.: Adilson Tadeu Basquerote Silva; Érica de Melo Azevedo; Roger Goulart Mello). Editora e-Publicar, Rio de Janeiro, 2022.

Li, Huaguang; Baghban, Alireza. Insights into the prediction of the liquid density of refrigerant systems by artificial intelligent approaches. Scientific Reports, v. 14, p. 2343, 2024.

Liu, Y., et al. sobaric heat capacity prediction for HC, HFC, HFO and HCFO refrigerants in liquid phase. International Journal of Refrigeration, v. 118, p. 41-49, 2020.

Martins, T. D. Predição da recorrência de tromboembolismo venoso via redes neurais artificiais. Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 2018.

Melo, E. B.; Oliveira, E. T.; Martins, T. D. A neural network correlation for molar density and specific heat of water: Predictions at pressures up to 100 MPa. Fluid Phase Equilibria, v. 506, p. 112411, 2020.

Mondal, S.; Field, R. W. Theoretical analysis of the viscosity correction factor for heat transfer in pipe flow. Chemical Engineering Science, v. 187, p. 27-32, 2018.

Ottaiano, Gabriel Y.; Da Cruz, Isabela N. S.; Da Cruz, Higor S.; Martins, Tiago D. Estimation of vaporization properties of pure substances using artificial neural networks. Chemical Engineering Science, v. 231, p. 116324, 2021.

Pierantozzi, Mariano; Tomassetti, Sebastiano; Di Nicola, Giovanni. Modeling liquid thermal conductivity of low-GWP refrigerants using neural networks. Applied Sciences, v. 13, p. 260, 2022.

RATHOD, Kiran et al. Predicting thermophysical properties of alkanes and refrigerants using machine learning algorithms. Fluid Phase Equilibria, v. 578, p. 114016, 2024.

SHEIKH, S., et al. Equation of State and Pressure−Volume−Temperature Properties of Refrigerants Based on Speed of Sound Data. Industrial and Engineering Chemistry Research, v. 41, p. 3274-3281, 2002.

SMITH, J. M., et al. Introdução à termodinâmica da engenharia química. LTC, Rio de Janeiro, 2000.

STOECKER, W. F.; JABARDO, J. M. S. Refrigeração industrial. Editora Blucher, São Paulo, 2018.

TOMASSETTI, Sebastiano et al. Dynamic viscosity of low GWP refrigerants in the liquid phase: An empirical equation and an artificial neural network. International Journal of Refrigeration, v. 164, p. 95-104, 2024.

WANG, X., et al. Viscosity modeling of several HFC refrigerants using the friction theory. Fluid Phase Equilibria, v. 262, p. 251-263, 2007.

WANG, Xuehui et al. Prediction on the viscosity and thermal conductivity of hfc/hfo refrigerants with artificial neural network models. International Journal of Refrigeration, v. 119, p. 316-325, 2020.