

Т.А. Бедная, С.П. Коноваленко

**МОДЕЛИРОВАНИЯ СВОЙСТВ МАТЕРИАЛОВ СЕНСОРОВ ГАЗОВ
НА ОСНОВЕ КОБАЛЬТСОДЕРЖАЩЕГО ПОЛИАКРИЛОНИТРИЛА
С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ РЕГРЕССИОННОГО АНАЛИЗА
И НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ**

Разработан подход моделирования для материалов на основе органических полупроводников их физико-химических и газочувствительных свойств. Для моделирования использовались такие методы как множественная линейная и нелинейная регрессия, нейронные сети. В качестве входного вектора для моделирования свойств металлосодержащего полиакрилонитрила являются параметры технологического процесса формирования материалов: массовая доля легирующего компонента (кобальта) в пленкообразующем растворе, технологические режимы ИК-отжига: температура, время первого и второго этапов. Выходной вектор - функциональные характеристики и физико-химические свойства материалов (удельное сопротивление, коэффициент газочувствительности, стабильность и селективность). Методом ИК-пиролиза синтезированы металл-углеродные системы с металлическими частицами Co на основе полиакрилонитрила. Измерены значения сопротивления в среде детектируемого газа (хлора). Моделирование функциональных характеристик и физико-химических свойств материалов проводилось на основе данных, полученных при исследовании 200 образцов пленок кобальт/полиакрилонитрил. Множественной линейной регрессии оказалась эффективной для прогноза значений удельного сопротивления. Нейронные сети использованы для прогнозирования значений коэффициента газочувствительности, селективности и стабильности пленок кобальтсодержащего полиакрилонитрила. Построена искусственная нейронная сеть в виде многослойного персептрона для прогнозирования коэффициента газочувствительности элементов сенсора газа на основе данных технологических процессов получения материала (массовая доля легирующего компонента (кобальта) в пленкообразующем растворе, технологические режимы ИК-отжига: температура, время первого и второго этапов). Проверена соответствие синтезированной модели: экспериментальным данным: коэффициент корреляции $R=0,82$, среднеквадратичная ошибка $s_r=0,017$. Синтезированные модели в пределах экспериментальной ошибки удовлетворительно описывают собранные данные, что позволяет оптимизировать химический состав и условия термообработки.

Полиакрилонитрил; газочувствительные материалы; металлосодержащие органические полимеры; моделирование; физико-химические свойства; нейронная сеть; сенсор газа.

T.A. Bednaya, S.P. Konovalenko

**MODELING THE PROPERTIES OF GAS SENSOR MATERIALS BASED
ON COBALT-CONTAINING POLYACRYLONITRILE USING REGRESSION
ANALYSIS AND NEURAL NETWORKS**

A modeling approach has been developed for materials based on organic semiconductors and their physicochemical and gas-sensitive properties. For modeling, such methods as multiple linear and non-linear regression, neural networks were used. As an input vector for modeling the properties of metal-containing polyacrylonitrile are the parameters of the technological process of forming materials: the mass fraction of the alloying component (cobalt) in the film-forming solution, technological modes of IR annealing: temperature, time of the first and second stages. Output vector - functional characteristics and physical and chemical properties of materials (resistivity, gas sensitivity coefficient, stability and selectivity). Abstract—Metal-carbon systems with Co metal particles based on polyacrylonitrile have been synthesized by IR pyrolysis. The resistance values were measured in the medium of the detected gas (chlorine). Modeling of the functional characteristics and physicochemical properties of materials was carried out on the basis of data obtained from the study of 200 samples of cobalt/polyacrylonitrile films. Multiple linear regression

proved to be effective for predicting resistivity values. Neural networks are used to predict the gas sensitivity coefficient, selectivity, and stability of cobalt-containing polyacrylonitrile films. An artificial neural network in the form of a multilayer perceptron was built to predict the gas sensitivity coefficient of gas sensor elements based on the data of technological processes for obtaining material (mass fraction of the alloying component (cobalt) in the film-forming solution, technological modes of IR annealing: temperature, time of the first and second stages). Compliance of the synthesized model was checked: with experimental data: correlation coefficient $R=0.82$, root-mean-square error $st=0.017$. The synthesized models satisfactorily describe the collected data within the experimental error, which makes it possible to optimize the chemical composition and heat treatment conditions.

Polyacrylonitrile; gas sensitive materials; metal-containing organic polymers; modeling; physical and chemical properties; neural network; gas sensor.

Введение. Одной из приоритетных задач современного общества специалисты все чаще называют задачу экологической безопасности. Для детектирования токсичных газов в воздухе в последнее время активно используются системы «электронный нос», для создания которых необходимо разработать сенсоры, обладающие заданной селективностью и стабильностью [1–2]. Одним из перспективных направлений в этой области является создание сенсоров на основе органических полупроводников [3–5]. Преимущество таких материалов заключается в отсутствии необходимости нагрева сенсора. К тому же они обладают достаточно высокой чувствительностью и просты в проектировании. Однако довольно трудно определить критерии целенаправленного синтеза материалов для твердотельных сенсоров газов, так как недостаточно изучено влияния технологических параметров формирования материала пленок ПАН на их электрофизические и газочувствительные свойства [6–7]. Разработка технологических основ контролируемого формирования нанокompозитных пленок металлсодержащего ПАН является трудоемким процессом по выявлению нелинейных зависимостей газочувствительных свойств пленок ПАН от задаваемых технологических параметров.

Прогнозирование свойств объектов по структурным данным с использованием нейросетевого подхода успешно применяется в самых разных областях физических исследований. Например, для прогнозирования температуры в резервуаре для хранения жидкостей с использованием солнечной энергии [8] применялась нейросетевая модель в виде многослойного персептрона с обратным распространением ошибки. Построение аналитической модели сложного объекта проблематично, и порой невозможно, а связь и зависимость физико-химических свойств объектов от задаваемых параметров носит сложный и нелинейный характер. Для описания сложных взаимоотношений влияния многочисленных факторов или параметров получения объектов на их физико-химические свойства используют нейросетевой подход, который и рассмотрен в работе.

Основная часть. Для создания сенсора использовался кобальтсодержащий полиакрилонитрил (ПАН) [9]. Для поиска оптимальных параметров технологического процесса формирования сенсора и химического состава обычно определяется экспериментально [10–11].

Разработка математических моделей для определения физико-химических свойств материала и функциональных характеристик сенсоров газов на их основе позволяет уменьшить материальные и временные издержки получения сенсора газа.

В общем виде задачу моделирования свойств материалов сенсоров газов на основе металлсодержащего полиакрилонитрила можно представить в виде выражения 1

$$\begin{cases} f(X) \rightarrow \text{extr} \\ x_{hi} < x_i < x_{bi}, \quad i = \overline{1 \dots n} \end{cases} \quad (1)$$

где X – вектор, включающий параметры технологического режима, $f(X)$ – целевая функция (*extr* – максимум или минимум, в зависимости от задачи), x_{ni}, x_{vi} – граничные значения входного параметра x_i ; n – размерность пространства входных параметров.

Функциональная зависимость может быть представлена уравнениями 2 и 3:

$$f(x) = g(x_1) + g(x_2) + \dots + g(x_n) + g_0. \quad (2)$$

$$f(x) = \sum \prod_n x_i, \quad (3)$$

Формула (2) необходима, если влияние каждого фактора независимо друг от друга (используется метод наименьших квадратов [12–13]); формула (3) используется в случае, если характер зависимости сложен и обусловлен комплексным влиянием параметров (может использоваться нейросетевой подход [14–15]).

При моделировании зависимости свойств объектов от технологических параметров необходимо определить область определения функция, в пределах которой наблюдается свойство объекта (в данном случае, физико-химические свойства металлсодержащего полиакрилонитрила).

На рис. 1 представлен разработанный алгоритм для нахождения математической модели, наиболее точно описывающей физико-химические свойства газочувствительных материалов на основе кобальтсодержащего полиакрилонитрила и функциональные характеристики сенсоров газов.

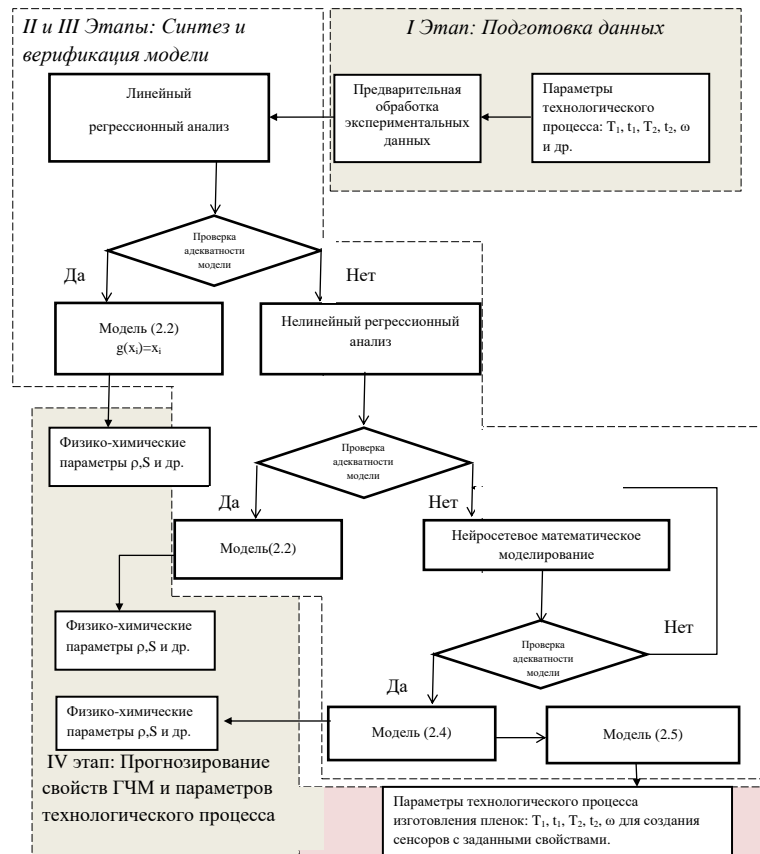


Рис. 1. Обобщенная блок-схема алгоритма для моделирования характеристик сенсоров газа

При оценке качества построенных моделей могут быть использованы как методы, разработанные в рамках статистического подхода [16], так и специфичные для искусственных нейронных сетей методы [17]. Представленные модели могут быть использованы для прогнозирования свойств органических полупроводников различной природы.

Для формирования базы данных с целью дальнейшего моделирования получены пленки кобальтсодержащего полиакрилонитрила. Методика получения материалов, описана в работах [18-19]. Сенсор на основе кобальтсодержащего полиакрилонитрила является сенсором резистивного типа, поэтому измеряемый параметр – сопротивление, величина которого меняется при взаимодействии с детектируемым газом (хлор). Коэффициент газочувствительности рассчитывался по формуле:

$$S = (R_0 - R_g)/R_0, \text{ при } R_0 > R_g,$$

где R_0 – значение сопротивления плёнки в воздухе, R_g – значение сопротивления пленки в среде детектируемого газа (хлора).

Для моделирования физико-химических свойств материалов и функциональных характеристик сенсоров газов в на основе кобальтсодержащего полиакрилонитрила в качестве входных параметров (дескрипторов) выбраны параметры технологического процесса формирования органического полупроводника.

Для моделирования выбраны входные и выходные вектора (параметры). Для всех методов моделирования, используемых в этой работы, выходными параметрами являются технологические параметры создания газочувствительных пленок: массовая доля кобальта (ω), температура и время первого (T_1, t_1) и второго этапов (T_2, t_2) ИК-отжига.

$$X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \\ x_5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega \\ T_1 \\ t_1 \\ T_2 \\ t_2 \end{pmatrix}.$$

Для нахождения функциональных зависимостей удельного сопротивления использовались различные элементарные функции параметров технологического процесса формирования материала. В качестве дескрипторов выбраны: $\omega, \ln T_1, \ln t_1, \ln T_2, \ln t_2$.

При помощи метода наименьших квадратов установлена зависимость между удельным сопротивлением и параметром технологических режимов:

$$\ln \rho = -3,96 \ln T_1 - 0,32 \ln t_1 - 34 \ln T_2 - 1,67 \ln t_2 - 2,59 \omega + 251.$$

Статистическая обработка данных (коэффициент корреляции $r=0,93$, коэффициент детерминации $r^2=0,87$, критерий Фишера $F=170$, объясненная дисперсия $\sigma=0,86$) указывает на высокое соответствие между моделью и описываемой ею реальной системой.

Для демонстрации сходимости результатов эксперимента с моделью составлено уравнение, связывающее расчетное и экспериментальные значениями удельных сопротивлений (рис. 1):

$$\ln \rho_{\text{расчёт}} = 0,84 \ln \rho_{\text{эксперимент}} + 2,6.$$

На рис. 2 представлена зависимость между расчетными и экспериментальными данными.

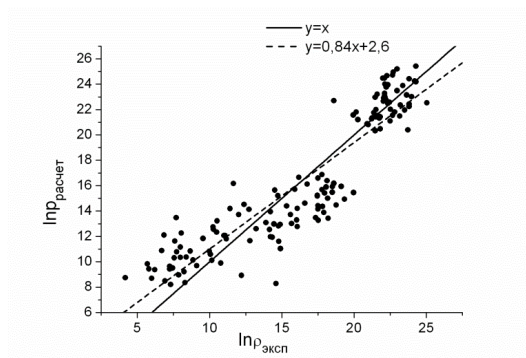


Рис. 2. Корреляция логарифма удельного сопротивления расчетного и экспериментального значений

Для построения моделей коэффициента газочувствительности S от параметров технологического процесса использование регрессионного анализа не дало требуемого результата. Поэтому использован нейросетевой анализ, позволяющий прогнозировать необходимые свойства, но не устанавливающий физического смысла.

Для прогнозирования коэффициента газочувствительности (под воздействием хлора) использовалась нейронная сеть в виде многослойного персептрона. Лучшую работоспособность показала сеть с двумя скрытыми слоями: в первом слое 8 нейронов, во втором – 5. Для обучения сети выбирали тот метод, который показал максимальную эффективность. Среди рассматриваемых методов были метод обратного распространения [20], быстрого распространения, Квази-Ньютона [21], дельта-дельта-с-чертой, сопряженных градиентов [22], Левенберга-Маркар [23]. В итоге, по результатам теоретического исследования, выбран метод обратного распределения ошибки.

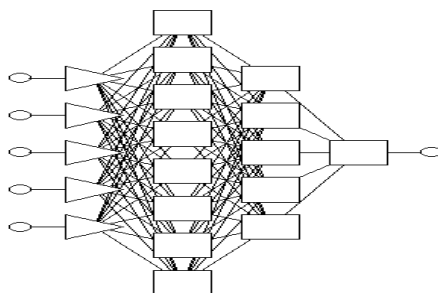


Рис. 3. Схема архитектуры сети для прогнозирования коэффициента газочувствительности S_{O_2} -содержащих пленок ПАН

В табл. 1 приведены данные статистической обработки полученной нейронной сети.

Таблица 1

Статистическая обработка данных нейросетевой модели моделей

Среднеквадратическое отклонение	Ошибка обучения	Контрольная ошибка	Тестовая ошибка	Коэффициент корреляции
0,017	0,14	0,18	0,18	0,82

Получено уравнение, связывающее экспериментальные и расчетные значения коэффициента газочувствительности (рис. 4):

$$S_{\text{расч}} = 0,834S_{\text{эксп}} + 0,101$$

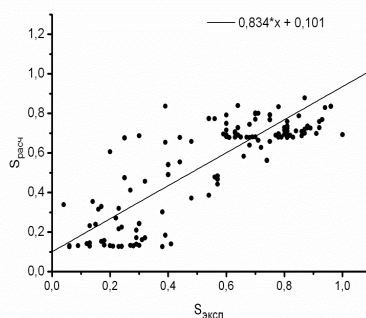


Рис. 4. Корреляция значений коэффициента газочувствительности *Co/ПАН* расчетных и экспериментальных

Полученные модели позволяют оптимизировать химический состав низкотемпературных сенсоров газа и условия их термообработки, так как удовлетворительно описывают собранные данные в пределах экспериментальной ошибки.

Заключение. В представленной работе проведено исследование свойств кобальтсодержащего ПАН как основы сенсора хлора. Предложена методика поиска моделей для описания физико-химических свойств и функциональных характеристик сенсора газа. Получена регрессионная модель, связывающая удельное сопротивление сенсорного элемента и параметры технологического режима формирования материала. Сформированы нейронные сети для прогнозирования значений коэффициента газочувствительности полученных материалов. Проведенные исследования подтверждают перспективность и целесообразности применения разработанного алгоритма для моделирования свойств материалов от параметров технологических режимов их формирования.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Hu W., Wan L., Jian Y., Ren C., Jin K., Su X., Bai X., Haick H., Yao M., Wu W. Electronic Noses: From Advanced Materials to Sensors Aided with Data Processing // *Advanced Materials Technologies*. – 2019. – Vol. 4 (2). – P. 1800488.
2. Narkhede P., Walambe R., Mandaokar S., Chandel P., Kotecha K., Ghinea G. Gas detection and identification using multimodal artificial intelligence based sensor fusion // *Applied System Innovation*. – 2021. – Vol. 4 (1), No. 3. – P. 1-14.
3. Дулов А.А., Слинкин А.А. Органические полупроводники. – М.: Наука, 1970. – 128 с.
4. Dultsev F.N., Fioroni M.T., Blackburn J.M., Abell C., Ostanin V.P., Klenerman D. Direct and quantitative detection of bacteriophage by «hearing» surface detachment using a quartz crystal microbalance // *Anal. Chem.* – 2001. – Vol. 73. – P. 3935-3939.
5. Zhang X., Yang D., Yang Z., Guo X., Liu B., Ren X., Liu S. Improved PEDOT:PSS/c-Si hybrid solar cell using inverted structure and effective passivation // *Scientific Reports*. – 2016. – Vol. 6. – P. 1-8.
6. Tao F., Bernasek S.L. Functionalization of Semiconductor Surfaces. – Hoboken: John Wiley & Sons, 2012. – 434 p.
7. Calio A., Cassinese A., Casalino M., Rea I., Barra M., Chiarella F., De Stefano L. Hybrid organic – inorganic porous semiconductor transducer for multiparameters sensing // *Interface*. – 2015. – Vol. 12. – P. 20141268.
8. Géczy-Vig P., Farkas I. Neural network modelling of thermal stratification in a solar DHW storage // *Solar Energy*. – 2010. – Vol. 84. – P. 801-806.

9. *Ефимов М.Н., Васильев А.А., Муратов Д.Г., Земцов Л.М., Карначева Г.П.* Металл-углеродные нанокompозиты C/Co на основе активированного пиролизованного полиакрилонитрила и частиц кобальта // Журнал физической химии. – 2017. – Т. 91, № 9. – С. 1559-1564.
10. *Запороцкова И.В., Какорина О.А., Кожитов Л.В. [и др.]*. Металлополимерные нанокompозиты на основе пиролизованного полиакрилонитрила с металлическими включениями Fe-Ni-Co // Известия высших учебных заведений. Физика. – 2020. – Т. 63, № 11. – С. 68-74.
11. *Kostina J., Chernikova E., Bondarenko G., Poteryaeva Z., Cherevan A., Efimov M., Duflot V., Dubova E.* Influence of synthesis conditions of polyacrylonitrile on their structure and thermal behavior // *Materials, Methods & Technologies*. – 2012. – Vol. 6. – Part 1. – P. 273-289.
12. *Кобзарь А.И.* Прикладная математическая статистика. Для инженеров и научных работников. – М.: Физматлит, 2006. – 816 с.
13. *Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.В.* Вычислительные методы. – СПб., 2014. – 672 с.
14. *Хайкин С.* Нейронные сети: полный курс. – М.: Издательский дом Вильямс, 2008. – 1103 с.
15. *Voccaletti S., Latora V., Moreno Y., Chavez M., Hwang D.-U.* Complex networks: Structure and dynamics // *Physics Reports*. – 2006. – Vol. 424 (4-5). – P. 175-308.
16. *Moriasi D.N., Arnold J.G., Van Liew M.W., Bingner R.L., Harmel R.D., Veith T.L.* Model evaluation guidelines for systematic quantification of accuracy in watershed simulations // *Transactions of the ASABE*. – 2007. – Vol. 50, No. 3. – P. 885-900.
17. *Dreiseil S., Ohno-Machado L.* Logistic regression and artificial neural network classification models: A methodology review // *Journal of Biomedical Informatics*. – 2002. – Vol. 35 (5-6). – P. 352-359.
18. *Бедная Т.А., Коноваленко С.П., Семенистая Т.В., Петров В.В., Королев А.Н.* Изготовление газочувствительных элементов сенсора диоксид азота и хлора на основе кобальтсодержащего полиакрилонитрила // Известия высших учебных заведений. Электроника. – 2012. – № 4 (96). – С. 66-71.
19. *Коноваленко С.П., Бедная Т.А., Семенистая Т.В., Петров В.В., Мареева Е.В.* Разработка технологии получения непогретных сенсоров газа на основе полиакрилонитрила для гибридных сенсорных систем // Инженерный вестник Дона. – 2012. – № 4 (Ч. 2). – Режим доступа: ivdon.ru/magazine/archive/n4p2y2012/1356/ (26.11.2022).
20. *Werbos P.J.* Backpropagation Through Time: What It Does and How to Do It // *Proceedings of the IEEE*. – 1990. – Vol. 78, No. 10. – P. 1550-1560.
21. *Settono R., Kwong Hui, L.C.* Use of a Quasi-Newton Method in a Feedforward Neural Network Construction Algorithm // *IEEE Transactions on Neural Networks*. – 1995. – Vol. 6, No. 1. – P. 273-277.
22. *Charalambous C.* Conjugate gradient algorithm for efficient training of artificial neural networks IEE Proceedings // *Devices and Systems Part*. – 1992. – Vol. 139 (3). – P. 301-310.
23. *Raja M.A.Z., Shoaib M., Hussain S., Nisar K.S., Islam S.* Computational intelligence of Levenberg-Marquardt backpropagation neural networks to study thermal radiation and Hall effects on boundary layer flow past a stretching sheet // *International Communications in Heat and Mass Transfer*. – 2022. – 130, art. No. 105799.

REFERENCES

1. *Hu W., Wan L., Jian Y., Ren C., Jin K., Su X., Bai X., Haick H., Yao M., Wu W.* Electronic Noses: From Advanced Materials to Sensors Aided with Data Processing, *Advanced Materials Technologies*, 2019, Vol. 4 (2), pp. 1800488.
2. *Narkhede P., Walambe R., Mandaokar S., Chandel P., Kotecha K., Ghinea G.* Gas detection and identification using multimodal artificial intelligence based sensor fusion, *Applied System Innovation*, 2021, Vol. 4 (1), No. 3, pp. 1-14.
3. *Dulov A.A., Slinkin A.A.* Organicheskie poluprovodniki [Organic semiconductors]. Moscow: Nauka, 1970, 128 p.
4. *Dultsev F.N., Fioroni M.T., Blackburn J.M., Abell C., Ostanin V.P., Klenerman D.* Direct and quantitative detection of bacteriophage by «hearing» surface detachment using a quartz crystal microbalance, *Anal. Chem.*, 2001, Vol. 73, pp. 3935-3939.

5. Zhang X., Yang D., Yang Z., Guo X., Liu B., Ren X., Liu S. Improved PEDOT:PSS/c-Si hybrid solar cell using inverted structure and effective passivation, *Scientific Reports*, 2016, Vol. 6, pp. 1-8.
6. Tao F., Bernasek S.L. *Functionalization of Semiconductor Surfaces*. Hoboken: John Wiley & Sons, 2012, 434 p.
7. Calio A., Cassinese A., Casalino M., Rea I., Barra M., Chiarella F., De Stefano L. Hybrid organic – inorganic porous semiconductor transducer for multiparameters sensing, *Interface*, 2015, Vol. 12, pp. 20141268.
8. Géczy-Víg P., Farkas I. Neural network modelling of thermal stratification in a solar DHW storage, *Solar Energy*, 2010, Vol. 84, pp. 801-806.
9. Efimov M.N., Vasil'ev A.A., Muratov D.G., Zemtsov L.M., Karpacheva G.P. Metall-uglerodnye nanokompozity C/Co na osnove aktivirovannogo pirolizovannogo poliakrilonitrila i chastits koba'ta [Metal-carbon C/Co nanocomposites based on activated pyrolyzed polyacrylonitrile and cobalt particles], *Zhurnal fizicheskoy khimii* [Journal of Physical Chemistry], 2017, Vol. 91, No. 9, pp. 1559-1564.
10. Zaporotskova I.V., Kakorina O.A., Kozhitov L.V. [i dr.]. Metallopolimernye nanokompozity na osnove pirolizovannogo poliakrilonitrila s metallicheskimi vklyucheniymi Fe-Ni-Co [Metallopolymer nanocomposites based on pyrolyzed polyacrylonitrile with metallic inclusions of Fe-Ni-Co], *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Fizika* [zvestiya of higher educational institutions. Physics], 2020, Vol. 63, No. 11, pp. 68-74.
11. Kostina J., Chernikova E., Bondarenko G., Poteryaeva Z., Cherevan A., Efimov M., Dufлот V., Dubova E. Influence of synthesis conditions of polyacrylonitrile on their structure and thermal behavior, *Materials, Methods & Technologies*, 2012, Vol. 6, Part 1, pp. 273-289.
12. Kobzar' A.I. *Prikladnaya matematicheskaya statistika. Dlya inzhenerov i nauchnykh rabotnikov* [Applied mathematical statistics. For engineers and researchers]. Moscow: Fizmatlit, 2006, 816 p.
13. Amosov A.A., Dubinskiy Yu.A., Kopchenova N.V. *Vychislitel'nyye metody* [Computational methods]. Saint Petersburg, 2014, 672 p.
14. Khaykin S. *Neyronnye seti: polnyy kurs* [Neural networks: a complete course]. Moscow: Izdatel'skiy dom Vil'yams, 2008, 1103 p.
15. Boccaletti S., Latora V., Moreno Y., Chavez M., Hwang D.-U. Complex networks: Structure and dynamics, *Physics Reports*, 2006, Vol. 424 (4-5), pp. 175-308.
16. Moriasi D.N., Arnold J.G., Van Liew M.W., Bingner R.L., Harmel R.D., Veith T.L. Model evaluation guidelines for systematic quantification of accuracy in watershed simulations, *Transactions of the ASABE*, 2007, Vol. 50, No. 3, pp. 885-900.
17. Dreiseitl S., Ohno-Machado L. Logistic regression and artificial neural network classification models: A methodology review, *Journal of Biomedical Informatics*, 2002, Vol. 35 (5-6), pp. 352-359.
18. Bednaya T.A., Konovalenko S.P., Semenistaya T.V., Petrov V.V., Korolev A.N. Izgotovlenie gazochuvstvitel'nykh elementov sensora dioksid azota i khloro na osnove koba'l'tsoderzhashchego poliakrilonitrila [Manufacture of gas-sensitive elements of the nitrogen dioxide and chlorine sensor based on cobalt-containing polyacrylonitrile], *Izvestiya vysshikh uchebnykh zavedeniy. Elektronika* [News of higher educational institutions. Electronics], 2012, No. 4 (96), pp. 66-71.
19. Konovalenko S.P., Bednaya T.A., Semenistaya T.V., Petrov V.V., Maraeva E.V. Razrabotka tekhnologii polucheniya nepodogrevnykh sensorov gaza na osnove poliakrilonitrila dlya gibridnykh sensornykh sistem [Development of technology for obtaining non-heating gas sensors based on polyacrylonitrile for hybrid sensor systems], *Inzhenernyy vestnik Dona* [Engineering Bulletin of the Don], 2012, No. 4 (Part 2). Available at: ivdon.ru/magazine/archive/n4p2y2012/1356/ (accessed 26 November 2022).
20. Werbos P.J. Backpropagation Through Time: What It Does and How to Do It, *Proceedings of the IEEE*, 1990, Vol. 78, No. 10, pp. 1550-1560.
21. Setiono R., Kwong Hui, L.C. Use of a Quasi-Newton Method in a Feedforward Neural Network Construction Algorithm, *IEEE Transactions on Neural Networks*, 1995, Vol. 6, No. 1, pp. 273-277.

22. Charalambous C. Conjugate gradient algorithm for efficient training of artificial neural networks IEE Proceedings, *Devices and Systems Part*, 1992, Vol. 139 (3), pp. 301-310.
23. Raja M.A.Z., Shoaib M., Hussain S., Nisar K.S., Islam S. Computational intelligence of Levenberg-Marquardt backpropagation neural networks to study thermal radiation and Hall effects on boundary layer flow past a stretching sheet, *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 2022, 130, art. No. 105799.

Статью рекомендовал к опубликованию д.ф.-м.н., профессор Г.В. Куповых.

Бедная Татьяна Алексеевна – Политехнический институт – филиал ФГБОУ ВО «ДГТУ» в г. Таганроге; e-mail: bednayat@mail.ru, г. Таганрог, Россия; тел.: +79289561532; заместитель директора по учебно-научной работе; к.т.н.

Коноваленко Светлана Петровна – Таганрогский институт им. А.П. Чехова – филиал ФГБОУ ВО «РГЭУ (РИНХ)»; e-mail: svetlana_s12@mail.ru, г. Таганрог, Россия; тел.: +79298200769; кафедра теоретической, общей физики и технологии, зав. кафедрой; к.т.н.; доцент.

Bednaya Tatiana Alekseevna – Don State Technical University; e-mail: bednayat@mail.ru, Taganrog, Russia; phone: +79289561532; deputy director for educational and scientific work, cand. of eng. sc.

Konovalenko Svetlana Petrovna – Rostov State University of Economics; e-mail: svetlana_s12@mail.ru; Taganrog, Russia; phone: +79298200769; the department of theoretical, general physics and technology; head of department; cand. of eng. sc.; associate professor.

УДК 621.315.611

DOI 10.18522/2311-3103-2022-6-30-43

Н.К. Полуянович, М.Н. Дубяго

УПРАВЛЕНИЕ ПРОПУСКНОЙ СПОСОБНОСТЬЮ ЭНЕРГОСЕТИ В ЗАДАЧАХ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ЭЛЕКТРИЧЕСКОЙ НАГРУЗКИ

Рассматривается программно-моделирующий комплекс системы управления энергосетью и её элементами. Актуальность работы обусловлена требованиями действующего законодательства к прогнозированию электропотребления для решения задачи поддержания баланса мощностей между генерирующей стороной и потреблением электрической энергии. Разработанные алгоритмы и методы управления использованы в составе программно-моделирующего комплекса для управления энергосетью и энергетическим оборудованием, наиболее актуально использование в локальных энергосистемах автономных потребителей и микросетях. Для эффективного проведения экспериментальных исследований была разработана методология эксперимента, включающая этап разработки плана-программы эксперимента; выбор средств проведения эксперимента; проведение эксперимента; обработку и анализ экспериментальных данных. Показано, что для построения системы технологического управления региональной сетевой компании возможно использовать техническую и информационную основу иерархической автоматизированной информационно-измерительной системы контроля и учета электроэнергии. Показано, что интеллектуальный счётчик системы интеллектуального учета электроэнергии (ИСУ) находится в непрерывной связи с производителем и потребителем энергии, то есть мониторинг происходит в режиме реального времени. Разработанная нейросетевая модель (НС) модель сводит задачу краткосрочного прогнозирования электропотребления к поиску матрицы свободных коэффициентов посредством обучения на имеющихся статистических данных (активная и реактивная мощность, температура окружающей среды, дата и индекс дня. Получены прогнозные оценки электропотребления модели прогнозирования, некоторых присоединений, энергосистемы величины, потребляемой активной и реактивной мощности имеет допустимый уровень погрешности прогнозирования. Разработана нейросетей для оценки пропускной способности, расчёта и прогнозирования температуры