

АППРОКСИМАЦИЯ ТАБЛИЧНЫХ ДАННЫХ СВОЙСТВ ТЕПЛОНОСИТЕЛЯ ПРИ ЧИСЛЕННОМ МОДЕЛИРОВАНИИ ГИДРОДИНАМИКИ И ТЕПЛОМАССОБМЕНА В ТЕПЛОНАПРЯЖЕННЫХ ТРАКТАХ С ПЕРЕМЕННОЙ МАССОЙ ОХЛАДИТЕЛЯ

С целью получения аналитических формул, с удовлетворительной точностью аппроксимирующих табличные зависимости теплофизических свойств теплоносителей во всем рабочем диапазоне параметров, разработана методика аппроксимации аналитическими формулами табличных зависимостей от нескольких переменных. Методика позволяет преобразовывать исходные данные перед аппроксимацией с целью перехода к новым единицам измерения или к безразмерным величинам, использования более простой аппроксимирующей функции и в итоге сокращения объема вычислений при обращении к функции и ускорения сходимости алгоритма. Аппроксимирующая функция также может выбираться из написанных ранее и зарегистрированных функций или специально пишется для обрабатываемого набора данных. Для этого используется целый ряд predetermined и зарегистрированных в виде отдельных программных блоков функций преобразования исходных данных. При использовании табличных данных из различных источников предложен механизм стыковки данных для получения гладкого сопряжения. На основе методики разработан программный инструмент, с помощью которого получены аналитические формулы для теплофизических свойств некоторых теплоносителей. Приведены аппроксимирующие зависимости для некоторых свойств теплоносителя N_2O_4 .

З метою отримання аналітичних формул, з задовільною точністю апроксимуючих табличні залежності теплофізичних властивостей теплоносіїв у всьому робочому діапазоні параметрів, розроблено методику апроксимації аналітичними формулами табличних залежностей від декількох змінних. Методика дозволяє перетворювати вхідні дані перед апроксимацією з метою переходу до нових одиниць вимірювання або до безрозмірних величин, використання більш простих апроксимуючих функцій і в підсумку скорочення обсягу обчислень при зверненні до функції і прискорення збіжності алгоритму. Апроксимуюча функція також може вибиратися з написаних раніше і зареєстрованих функцій або спеціально пишеться для набору даних, що обробляється. Для цього використовуються цілий ряд зумовлених та зареєстрованих у вигляді окремих програмних блоків функцій перетворення вхідних даних. При використанні табличних даних з різних джерел запропоновано механізм стикування даних для отримання гладкого сполучення. На основі методики розроблено програмний інструмент, за допомогою якого отримано аналітичні формули для теплофізичних властивостей деяких теплоносіїв. Наведено апроксимуючі залежності для деяких властивостей теплоносія N_2O_4 .

To derive the analytical formulas approximating the table dependencies of thermal- physical properties of heat carriers in all operating range of parameters with an adequate accuracy, the technique of approximation of the table dependencies by the analytic formulas from several variables is developed. The technique may be applied to transform initial data before approximation in new units of measurement or non- dimensional quantities, to use a simpler approximating function, to reduce the amount of computations referring to the function and to promote the algorithm convergence. The approximating function can be also selected from the previously written and registered functions or is specially written for the data set to be processed. For this purpose a number of predetermined and registered functions of initial data transformations in the form of separate program blocks are employed. A mechanism for matching the data for a smooth coupling is proposed for using the tabular data from different sources. Based on the method, a software tool for deriving the analytical formulas of the thermal physical properties of certain heat carriers is found. Approximating dependencies for some properties of the N_2O_4 heat carrier are presented.

Постановка задачи. Численное моделирование гидродинамики и тепло- массообмена в теплонапряженных конструкциях предполагает использование большого массива данных, характеризующих теплофизические свойства теплоносителей в рабочем диапазоне температур и давлений. При моделировании течения в теплонапряженных охлаждающих трактах с переменной массой охладителя необходимо иметь данные о свойствах теплоносителя в разных агрегатных состояниях и на линии насыщения. Задание исходных данных существенно влияет на результат численных исследований, поэтому достоверность и объем этих данных приобретают исключительную важность.

Теплофизические свойства веществ чаще всего представлены в виде табличных зависимостей от одного (температура или давление) или двух (темпе-

© Е. Л. Токарева, 2013

ратура и давление) параметров. Основные задачи заключаются в подборе аналитических зависимостей, способных описывать табличные данные с удовлетворительной точностью, и определении параметров этих аппроксимирующих зависимостей.

При создании многофункциональных программ численного расчета большое значение приобретает возможность интегрирования программных средств в общий пакет программ, поэтому разработка программ обработки и представления информации о свойствах теплоносителей является одним из основных направлений при разработке методического и программного обеспечения для численного расчета.

Решение задачи. В пакете программ численного моделирования гидродинамики и теплообмена в теплонапряженных охлаждающих трактах с переменной массой охладителя для описания свойств веществ используются аналитические зависимости. Такой подход способствует сжатию и, там где необходимо, сглаживанию данных. Он также позволяет применять аналитическое дифференцирование. Используемые аналитические аппроксимационные формулы могут быть общего или специального вида. Для подбора аппроксимирующих табличные данные формул и определения их коэффициентов используется специально разработанный программный инструмент.

В основе методики аппроксимации лежит метод Пауэлла сопряженных направлений без вычисления производных [1]. При расчете коэффициентов аппроксимирующих формул можно использовать одну из следующих норм невязки аппроксимации:

– квадратичную

$$f_1 = \sum_{i=0}^{N-1} [y_i - F(x_i, p)]^2 + f_p,$$

где $y_i, i = 0, \dots, N-1$ – значения аппроксимируемой величины, $F(x_i, p)$ – значение аппроксимирующей функции с i -м вектором независимых переменных x_i и текущим вектором параметров p , f_p – штраф, который может вычисляться при первом обращении к функции F с обновленным вектором p с целью неявного задания некоторых условий;

– квадратичную взвешенную норму невязки

$$f_1 = \sum_{i=0}^{N-1} w_i [y_i - F(x_i, p)]^2 + f_p$$

с весами $w_i, i = 0, \dots, N-1$;

– квадратичную норму относительной невязки аппроксимации

$$f_1 = \sum_{i=0}^{N-1} \left[\frac{y_i - F(x_i, p)}{y_i^*} \right]^2 + f_p,$$

где $y_i^* = \max\{|y_i|, \varepsilon_y\}$, ε_y – допуск на минимальное абсолютное значение y ;

– взвешенную квадратичную норму относительной невязки аппроксимации

$$f_1 = \sum_{i=0}^{N-1} w_i \left[\frac{y_i - F(x_i, p)}{y_i^*} \right]^2 + f_p;$$

– абсолютную норму невязки аппроксимации

$$f_1 = \sum_{i=0}^{N-1} |y_i - F(x_i, p)| + f_p,$$

соответствующую методу наименьших модулей;

– абсолютную норму относительной невязки аппроксимации

$$f_1 = \sum_{i=0}^{N-1} \left| \frac{y_i - F(x_i, p)}{y_i^*} \right| + f_p.$$

Изменение нормы невязки в процессе расчета коэффициентов аппроксимирующих формул в некоторых случаях приводит к улучшению аппроксимации и увеличению скорости сходимости алгоритма.

Методика получения аналитических зависимостей для табличных данных позволяет преобразовывать исходные данные перед аппроксимацией с целью перехода к новым единицам измерения или к безразмерным величинам, использования более простой аппроксимирующей функции и в итоге сокращения объема вычислений при обращении к функции и ускорения сходимости алгоритма. Для этого используется целый ряд предопределенных и зарегистрированных в виде отдельных программных блоков функций преобразования исходных данных. В таблице 1 приведены некоторые из основных процедур преобразования исходных данных.

Таблица 1 – Основные процедуры преобразования исходных данных

Процедура	Преобразование
div_args	$x_i = x_i / p_i^*, i = 0, \dots, n_p$
sh_div_aval	$x_0 = \frac{x_0 + p_0^*}{p_1^*}; y = \frac{y + p_2^*}{p_3^*}$
NLR4	$x_0 = \frac{x_0 - p_0^*}{p_1^*}; y = \ln \left(\frac{y - p_2^*}{p_3^*} \right) / \ln x_0$
sh_a_facval	$x_0 = x_0 + p_0^*; y = y \cdot p_1^*$
dln_a_d_v	$x_0 = \ln(x_0 / p_0^*); y = y / p_1^*$
dln_av	$x_0 = \ln(x_0 / p_0^*); y = \ln(y / p_1^*)$
div_a_ln_v	$x_0 = x_0 / p_0^*, y = \ln y$
norm_a_ln_v	$x_0 = 1 - x_0 / p_0^*, y = \ln y$
div_a_mult_av	$x_0 = x_0 / p_0^*, y = y \cdot x_0$

В отдельных случаях имеет смысл писать более сложные процедуры преобразования исходных данных, чем приведенные в табл. 1. В качестве примера можно привести процедуру, использованную для преобразования данных о

температуре, давлении и удельном объеме теплоносителя в относительную температуру $\bar{T} = T / T_{кр}$, относительное давление $\bar{p} = p / p_{кр}$ и относительное отклонение газовой постоянной от ее величины на линии насыщения при том же давлении.

Аппроксимирующая функция также может выбираться из написанных ранее и зарегистрированных функций или специально пишется для обрабатываемого набора данных. В число предопределенных функций входит ряд широко используемых для аппроксимации данных зависимостей. Несколько из основных аппроксимирующих функций общего назначения приведены в таблице 2, где приняты обозначения: $x_i, i = 0, \dots, n_p - 1$ – независимые переменные (аргументы); $p_j, j = 0, \dots, n_p - 1$ – неизвестные параметры; $p_k^*, k = 0, \dots, n_p^* - 1$ – фиксированные параметры.

Таблица 2 – Основные аппроксимирующие функции общего назначения

Процедура-	Описание или формула
poly	$\sum_{j=0}^{n_p-1} p_j x_0^j$
polypoly	$\sum_{i=0}^{n_0-1} x_0^i \sum_{j=0}^{p_0^*-1} p_j x_1^j, n_0 = n_p / p_0^*$
shiftedpoly	$\sum_{j=0}^{n_p-2} p_j (x_0 - p_{n_p-1})^j$
evenpoly	$\sum_{j=0}^{n_p-1} p_j x_0^{2j}$
shiftevenpoly	$\sum_{j=0}^{n_p-2} p_j (x_0 - p_{n_p-1})^{2j}$
oddpoly	$p_0 + \sum_{j=1}^{n_p-1} p_j x_0^{2j-1}$
shiftedoddpoly	$p_0 + \sum_{j=1}^{n_p-2} p_j (x_0 - p_{n_p-1})^{2j-1}$
shiftedoddpower	$p_0 + (x - p_4) [p_1 + p_2 (x - p_4)^{p_3}]$
ratfun	$\frac{\sum_{i=0}^{n_p-p_0^*-1} p_i x_0^i}{\sum_{j=0}^{p_0^*-1} p_j x_0^j}$
polypower	$p_0 x_0^P, P = \sum_{j=1}^{n_p-1} p_j x_0^{j-1}$
sqrtpoly	$\sqrt{\left \sum_{j=0}^{n_p-1} p_j x_0^j \right }$
expoly	$\exp \left(\sum_{j=0}^{n_p-1} p_j x_0^j \right)$
combo	$\sum_{i=0}^{p_0^*-1} p_i x_0^i + \exp \left(\sum_{j=0}^{n_p-p_0^*-1} p_j x_0^j \right)$

При решении задачи определения термогазодинамических параметров переменной массы теплоносителя в канале теплонапряженной конструкции для получения аналитических зависимостей табличных данных свойств теп-

лоносителей, в подавляющем большинстве случаев потребовалась разработка специализированных функций. В качестве примера одной из полученных специализированных функций приведена функциональная зависимость давления насыщенных паров охладителя N_2O_4 от температуры:

$$\bar{p} = P(\bar{T}) + 0,736510\bar{T}^Q(\bar{T}), \quad (1)$$

где

$$P(\bar{T}) = ((0,186190\bar{T} + 0,0750474)\bar{T} + 0,0193452)\bar{T} + 0,00189253,$$

$$Q(\bar{T}) = (-0,930281\bar{T} + 1,5999)\bar{T} + 3,98639,$$

$$\bar{p} = p / p_{кр},$$

$$\bar{T} = (T - T_{пл}) / (T_{кр} - T_{пл}).$$

Зависимость (1) имеет исключительно важное значение при численном моделировании гидродинамики и теплообмена, поскольку аналитические формулы для свойств теплоносителя и их производных по температуре и давлению используют прямые и обратные производные, полученные из формулы (1). Наличие собственного программного продукта, адаптированного к требованиям и возможностям основного пакета программ, позволили не единожды, в зависимости от получаемых результатов, улучшать аппроксимирующую способность формулы для давления насыщенных паров в критических областях изменения параметров.

Полученная зависимость обеспечивает почти во всем диапазоне рабочих температур от температуры плавления $T_{пл} \sim 261$ К до критической температуры $T_{кр} \sim 431$ К точность порядка 0,2%, за исключением небольшой околокритической области параметров, где точность изменяется от 0,44% при $T = 420$ К до 1,8% при $T_{кр} = 431$ К.

Многопараметрические зависимости свойств веществ, в основном, представлены в виде таблиц по одному из параметров (назовем этот параметр первичным; как правило, это температура) при ряде фиксированных значений остальных, вторичных (например давления). Начальный этап обработки заключается в выборе как можно меньшего числа типов зависимостей от первичного параметра, хорошо аппроксимирующих данные во всех таблицах для данного свойства. Далее находятся коэффициенты аппроксимирующих зависимостей для каждой таблицы. Обычно количество этих коэффициентов, как и число табличных значений вторичного параметра, невелико, и для вычисления искомого свойства наиболее удобной может оказаться процедура, сочетающая функциональную аппроксимацию по первичному параметру с интерполяцией по вторичному.

Подход, который применен в реализованной методике, состоит в исследовании и последующей функциональной аппроксимации зависимости каждого из коэффициентов от вторичных параметров. При этом, поскольку используются функции более общего вида, чем необходимо для каждой из таблиц в отдельности, часто обнаруживается взаимозависимость некоторых коэффициентов, которая хорошо видна при варьировании одного из них в окрестности оптимального значения. Такая взаимозависимость может проявляться лишь в некотором поддиапазоне изменения вторичного параметра и, в принципе, удобна для описания зависимостей коэффициентов от вторичного параметра, поскольку при сглаживании данных в упомянутом поддиапазоне получаются субоптимальные решения, не намного худшие, чем оптимальное.

С учетом вышеизложенного, аппроксимацию коэффициентов надо производить последовательно, уточняя значения оставшихся.

Одним из способов снизить взаимозависимость коэффициентов, а иногда и уменьшить их количество, является применение штрафных функций, которые бы сужали некоторым образом область допустимых решений. В качестве штрафной функции можно использовать, например, взвешенную норму для некоторого набора искомым параметров. Подобная регуляризация приводит к некоторому компромиссу между нормами невязки и решения, а варьированием весового коэффициента иногда можно так изменить зависимость коэффициентов от вторичного параметра, чтобы ее было проще аппроксимировать функционально.

После предварительной поэтапной оценки всех коэффициентов аппроксимационной зависимости некоторое их подмножество иногда полезно вновь освободить и уточнить на всем массиве исходных данных, возможно, расширенным добавлением параметров на границе (линии насыщения).

Выбор метода учета дополнительных данных зависит от ряда факторов, среди которых на первом месте стоит степень согласованности этих данных с основным массивом информации. Если данные взяты из одного источника и основываются на однородных первичных результатах измерений и методах их обработки, наиболее приемлемым представляется их учет или добавлением этих данных к основному массиву (возможно, с увеличенным весом) и уточнением ранее определенных коэффициентов, или включением аппроксимирующей функции для дополнительных данных в построение общей аппроксимирующей функции. Последний вариант предпочтителен тогда, когда удастся найти не очень сложную, но точную аппроксимирующую функцию для дополнительных данных, и, конечно же, он требует точной аппроксимации самой границы, например, зависимости температуры насыщенного пара от давления.

На основе анализа диаграмм энтальпии паров N_2O_4 получены дискретные зависимости для истинной и средней теплоемкостей паров N_2O_4 от давления и температуры. Зависимость истинной теплоемкости паров N_2O_4 от давления и температуры показана на рисунке 1. Зависимость для средней теплоемкости имеет ту же качественную картину.

С помощью описанной методики получены аналитические зависимости для истинной и средней теплоемкостей паров N_2O_4 , удовлетворительно аппроксимирующие данные диаграмм:

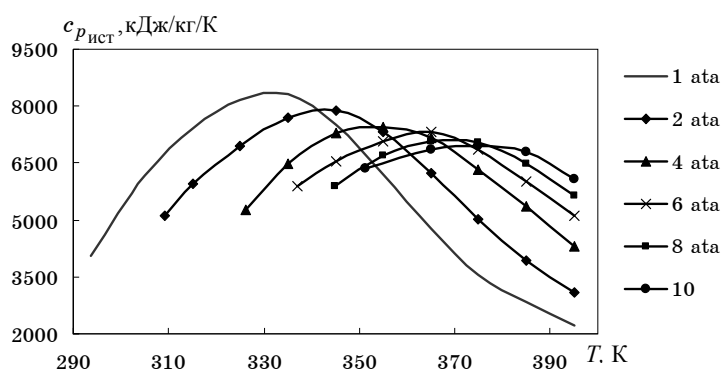


Рис. 1

Данные из разных источников не всегда хорошо согласуются. В случаях нестыковки данных из различных источников производится искусственная состыковка отдельно построенных зависимостей за счет ухудшения аппроксимации в окрестности границы. Отметим, что использование этого приема для хорошо согласующихся данных также вполне приемлемо и не приводит к

$$c_{p_{\text{ист}}} = 4186,8(218,323 + f_1 f_2 f_3) / T_{\text{кр}},$$

$$c_{p_{\text{ср}}} = 4186,8(218,323 + f_1 (f_8 - f_3) / \bar{T}) / T_{\text{кр}}, \quad \bar{T} > 0,$$

$$c_{p_{\text{ср}}} = 4186,8(218,323 + f_1 f_9 f_8) / T_{\text{кр}},$$

$$f_1 = 131,309 - 48,2568 T_s / T_{\text{кр}},$$

$$f_2 = f_4 f_6 / 0,205675,$$

$$f_3 = e^{-f_6 f_5},$$

$$f_4 = 2,60811 + 388,899 e^{-8,92732 T_s / T_{\text{кр}}},$$

$$f_5 = (\bar{T} + f_7) / 0,205675,$$

$$f_6 = f_5^{f_4 - 1},$$

$$f_7 = -0,031379 + 0,194245 T_s / T_{\text{кр}},$$

$$f_8 = e^{-f_5 f_7 / f_4},$$

$$f_9 = (f_7 / 0,205675)^{f_4 - 1} f_4 / 0,205675.$$

заметному снижению качества аппроксимации вблизи границы.

Рассмотрим методику стыковки данных на примере параметра, описанного функцией $f(T, p)$ двух переменных: отнесенных к критическим значениям температуры T и давления p . Пусть известны зависимость $T_s(p)$ температуры от давления на линии насыщения и зависимость параметра от давления насыщенных паров $f_s(p)$ (здесь и далее подразумеваются относительные температура и давление). Для плавного перехода от данных на границе к данным внутри области определения функции $f(T, p)$ можно использовать при $p < 1$ вспомогательную функцию общего вида

$$f^*(T, p) = f(T, p) + [f_s - f(T_s, p)] \varphi(T - T_s),$$

где значения f_s и T_s определены при давлении p , а весовая функция $\varphi(x)$ такая, что $\varphi(0) = 1$ и быстро стремится к нулю с ростом x . В качестве функции φ можно предложить такие зависимости:

$$\varphi(x) = \begin{cases} \left(1 - \frac{x}{T^* - T_s}\right)^m, & T < T^*; \\ 0, & T \geq T^*, \end{cases} \quad \varphi(x) = \exp\left(-\frac{kx}{T^* - T_s}\right), \quad T^* > T_s \quad .$$

Значения параметров T^* , m , k подбираются эмпирически.

Более надежный, хотя и дающий менее гладкое сопряжение данных способ – это линейная интерполяция между данными на границе и в некоторой точке внутри области определения описываемого свойства:

$$f^*(T, p) = \begin{cases} f_s + [f(kT_s, p) - f_s] \frac{T - T_s}{(k-1)T_s}, & T < kT_s; \\ f(T, p), & T \geq kT_s. \end{cases}$$

Коэффициент $k > 1$ выбирается из условия лучшей аппроксимации переходной области и может быть функцией давления или T_s .

На рисунке 2 приведены графики дискретных зависимостей газовой постоянной паров N_2O_4 от давления и температуры, а ниже приведены полученные с использованием разработанного инструмента соответствующие аналитические зависимости, хорошо согласующиеся с данными на линии насыщения.

Аппроксимирующая функция имеет вид при $\bar{T} > 0$

$$R = R_s + R_1(\bar{T}) + R_2(\bar{T}),$$

где: $R_1(\bar{T}) = (181,681 - R_s)(1 - e^{-\bar{h}\bar{T}/0,120721})$,

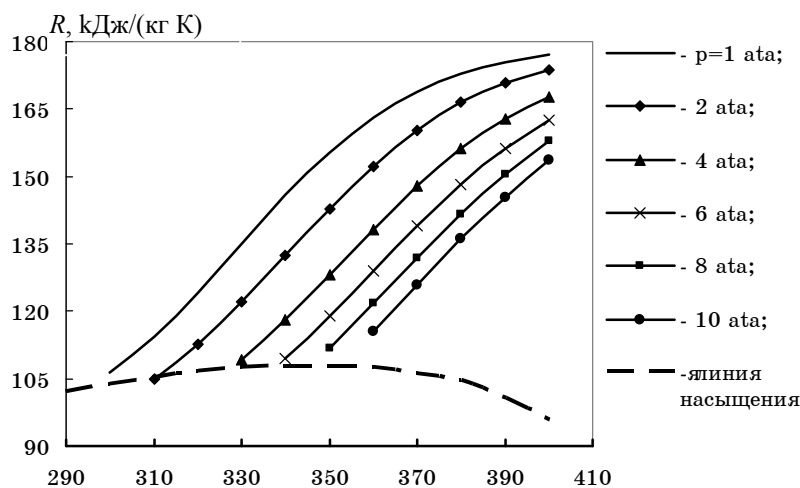


Рис. 2

$$R_2(\bar{T}) = R'_s T_{кр} (e^{-\bar{h}\bar{T}/0,120721} - e^{-10\bar{T}}) / 10,$$

$$f_1 = (\bar{T} / 0,120721)^{f_2 - 1},$$

$$f_2 = 3,50982 - 2,7909 T_s / T_{кр};$$

R_s и R'_s – значения газовой постоянной и ее производной на линии насыщения, соответственно;

$$\bar{T} = (T - T_s) / T_{кр}.$$

Для $\bar{T} < 0$ или $\bar{T} = 0$ принимается $R = R_s$.

Программа аппроксимации свойств теплоносителей предполагает представление как самих аппроксимирующих формул, так и аналитических формул для первых (а в некоторых случаях и для вторых) производных.

Кроме построения графиков, пользовательский интерфейс программы позволяет:

- читать, просматривать, редактировать и записывать файлы исходных данных;
- просматривать списки имеющихся аппроксимирующих функций и процедур, используемых для предварительного преобразования данных;
- запускать процесс решения задачи минимизации;
- просматривать результаты решения в виде текста.

Выводы. В составе пакета программ численного моделирования процессов гидродинамики и тепломассообмена в теплонапряженных охлаждающих трактах с переменной массой охладителя разработан программный инструмент для обработки и представления информации о термодинамических и теплофизических свойствах теплоносителей и материалов. Разработанная методика и ее программная реализация позволяют получать аналитические формулы, с удовлетворительной точностью аппроксимирующие табличные зависимости от нескольких параметров. Разработанный программный инструмент может использоваться автономно при решении подобного рода задач в любой области.

1. Химмельблау Д. Прикладное нелинейное программирование / Д. Химмельблау. – М. : Мир, 1975. – 536 с.

Институт технической механики
НАН Украины и ГКА Украины,
Днепропетровск

Получено 21.06.13,
в окончательном варианте 26.06.13