

УДК 517.518

Скрипаченко М.П., Корельштейн Л.Б.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КУБИЧЕСКОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ДЛЯ УСКОРЕНИЯ ТЕПЛОВЫХ И ГИДРАВЛИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ

Скрипаченко Мария Павловна, аспирантка 1 курса факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; e-mail: mariskrip@list.ru

Корельштейн Леонид Бенционович, к.ф.-м.н, доцент

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия.

В данной статье предлагается использовать кубическую сплайн-интерполяцию при обработке данных термодинамических библиотек. Проведена проверка данного метода на нефтяной фракции. Полученные результаты хорошо аппроксимируют данные из термодинамической библиотеки.

Ключевые слова: термодинамическая библиотека, интерполяция, кубический сплайн, узлы интерполирования, метод прогонки.

USING CUBIC INTERPOLATION TO OPTIMIZE THE DYNAMIC CALCULATION PROCESS

Skrpachenko Maria Pavlovna, Korelstein Leonid Bentsionovich.

D. Mendeleev University of Chemical Technology of Russia, Moscow, Russia.

This article proposes to use cubic spline interpolation in the processing of thermodynamic data libraries. The proposed method has been verified on oil fraction and ethanol. Estimated data results are consistent with thermodynamic library.

Keywords: thermodynamic library, interpolation, cubic spline, interpolation nodes, tridiagonal matrix algorithm.

Введение

Существует множество программ, выполняющих гидравлические и тепловые расчеты для проектирования объектов различных отраслей промышленности. При этом для трубопроводов и оборудования химических предприятий необходимо выполнять расчет фазового равновесия (ФР) сложных смесей, а также теплофизических и транспортных физических свойств (ТФС) жидкой и газовой фаз, при постоянно меняющихся термодинамических параметрах. Такой расчет выполняется путем вызова соответствующих термодинамических библиотек (например, библиотеки «СТАРС» компании НТП Трубопровод, «Simulis Thermodynamics» компании ProSim, разработанной сотрудниками МЭИ библиотеки «WaterSteamPro» и др.) Чем сложнее трубопровод и решаемая задача, тем больше требуется запросов к термодинамическим библиотекам. Их число начинает исчисляться сотнями, тысячами и даже десятками тысяч, причем с ростом сложности состава продукта и используемой термодинамической модели растет и время одиночного расчета ТФС и ФР. Это приводит к значительному замедлению скорости гидравлических и тепловых расчетов и делает затруднительным решение задач оптимизации на основе таких расчетов. Поэтому существует большая потребность в уменьшении количества запросов программ к термодинамическим библиотекам.

Для этого предлагается заменить большинство обращений к библиотекам на использование

результатов интерполяции по небольшому числу заранее или динамически насчитываемых точек. Настоящая статья представляет собой первый шаг в этом направлении.

Предметом настоящего исследования является возможность применения для решения описанной выше задачи одномерной кубической сплайн интерполяции. Этот способ имеет широкое применение в силу нескольких причин [1]:

- интерполяционная кривая проходит через исходные точки
- интерполирующая функция по крайней мере дважды непрерывно дифференцируема
- поскольку сплайн является кусочной функцией, его модификация требует перестроения только части составляющих его многочленов

Основная часть

Для разработки математических моделей использованы данные термодинамической библиотеки «СТАРС». В данной статье рассмотрены результаты применения метода кубической сплайн интерполяции для зависимости ТФС от температуры. В качестве примера взято два вещества: первое - нефтяная фракция с начальной температурой кипения 240°C, температура конца кипения 350°C и относительной плотностью 0,84, второе вещество - этиловый спирт с температурой в тройной точке 159К и критической температурой 514К. В таблице 1 представлены данные по кинематической вязкости нефтяной фракции в зависимости от температуры для 5 точек.

Таблица 1. Данные по кинематической вязкости в зависимости от температуры для нефтяной фракции

Температура (°C)	x_i	480	720	960	1200	1400
Кинематическая вязкость 10^6 (м ² /с)	y_i	2,1168	3,3325	3,9813	3,2772	9,5199

Для начала зададим вид кубического полинома:

$$\varphi_i(x) = a_i + b_i * (x - x_{i-1}) + c_i * (x - x_{i-1})^2 + d_i * (x - x_{i-1})^3$$

где a_i, b_i, c_i, d_i -коэффициенты сплайна на i -ом участке $[x_{i-1}, x_i]$.

В работах [2-4] подробно описан вывод формул для нахождения коэффициентов сплайна.

Для нахождения коэффициентов необходимо составить трехдиагональную матрицу, которая имеет ненулевые элементы только на главной и смежных с ней по обе стороны диагонали, и вектор-столбец (определение элементов матрицы и вектора-столбца также представлено в работах [2-4]). Для решения такой системы алгебраических уравнений применяют метод прогонки. Метод прогонки является прямым методом решения СЛАУ с трехдиагональной матрицей и подробно описан в работах [5-7]

Рассчитаем значения сплайнов при каждом значении температуры от 480 до 1400°С. Построим график (Рис. 1) сплайнов и график значений кинематической вязкости от температуры, определенный непосредственно с использованием библиотеки «СТАРС». На графике видно, что кубическая интерполяция с достаточной точностью приближается к расчетной кривой, о чем также говорит относительная погрешность, которая составляет 0,12%. Полученные значения говорят о высоком совпадении данных интерполяции с результатами, возвращаемыми библиотечными функциями, при использовании всего 5 точек интерполяции.

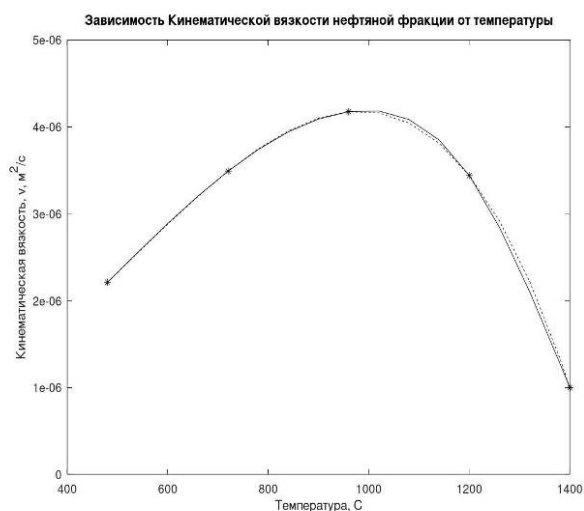


Рис. 1. График зависимости кинематической вязкости нефтяной фракции от температуры * - точки для интерполяции, сплошная линия – кубическая сплайн-интерполяция, пунктирная линия – расчетная кривая)

С целью дальнейшего исследования характера поведения зависимостей рассмотрим давление насыщенных паров. Сплайн-интерполяция была проведена по 5 точкам (температура взята от 0 до 280°С). Коэффициенты сплайна рассчитываются так же, как и в первом случае.

Поскольку характер изменения давления в левой и правой частях температурного интервала

существенно различны, повысить точность интерполяции можно, если вместо прямой зависимости выбрать для интерполяции зависимость логарифма приведенного давления насыщенных паров от температуры. Такая функция интерполируется сплайнами с максимальной относительной погрешностью 0,28% (Рис.2).

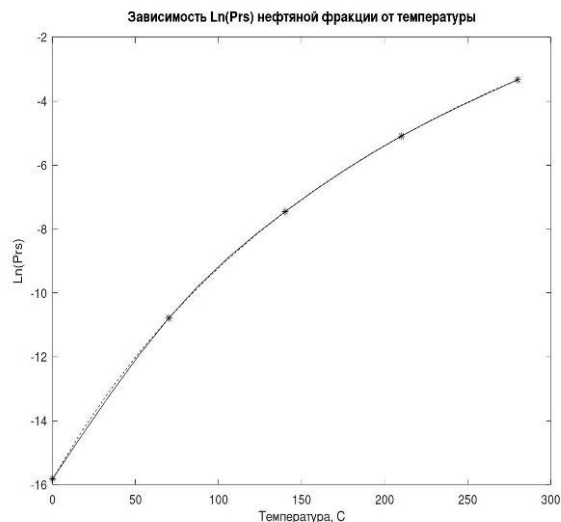


Рис. 2. График зависимости натурального логарифма приведенного давления насыщенных паров нефтяной фракции от температуры * - точки для интерполяции, сплошная линия – кубическая сплайн-интерполяция, пунктирная линия – расчетная кривая)

Важным фактором при выборе вида интерполяции послужил тот факт, что сплайн-интерполяция позволяет учитывать при построении интерполирующей кривой значения первой производной. В настоящей работе для определения производной $d\ln P/dT$ было применено уравнение Клайперона-Клаузиуса для этилового спирта. На графиках (рис. 3, 4) представлены зависимости натурального логарифма приведенного давления насыщенных паров от натурального логарифма приведенной температуры. Для получения интерполирующей кривой (рис. 3) также определялись все коэффициенты каждого сплайна. В случае применения производных не возникает необходимость производить решение СЛАУ, т.к. для всех интервалов коэффициенты полинома определяются по значениям функции и ее производной на концах интервала, что значительно сокращает время определения значений зависимой переменной. Погрешность для интерполяции без применения данных по производным составляет 0,011%, в случае с применением данных по производным погрешность составляет 0,21%. Такая погрешность вполне допустима при определении термодинамических свойств для гидравлических и тепловых расчетов трубопроводов.

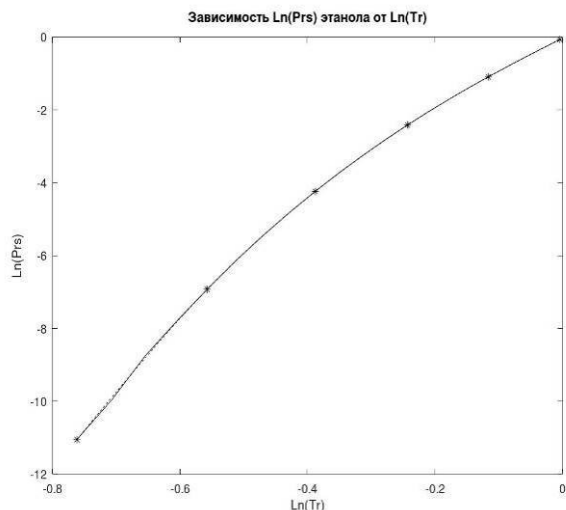


Рис. 3. График зависимости натурального логарифма приведенного давления насыщенного пара этилового спирта от натурального логарифма температуры (* - точки для интерполяции, сплошная линия – кубическая сплайн-интерполяция, пунктирная линия – расчетная кривая)

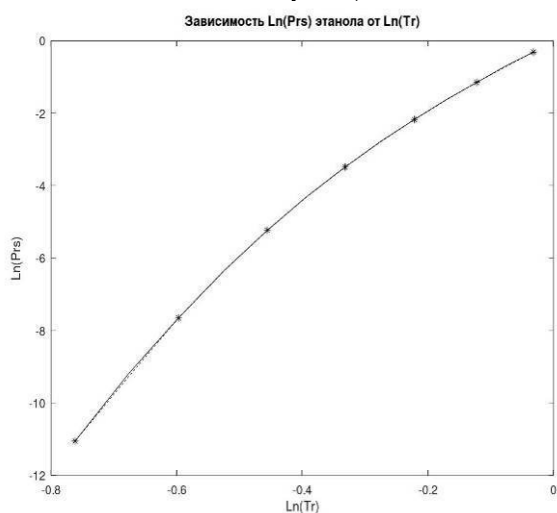


Рис. 4. График зависимости натурального логарифма приведенного давления насыщенного пара этилового спирта от натурального логарифма температуры с применением данных по первой производной (* - точки для интерполяции, сплошная линия – кубическая сплайн-интерполяция, пунктирная линия – расчетная кривая).

Выводы

Численный анализ требуемого числа вызовов в сравнении с затратами на построение сплайнов свидетельствует о целесообразности применения метода сплайн-интерполяции, так как результаты таких расчетов хорошо согласуются с данными термодинамических библиотек и могут быть использованы в инженерной практике. При этом важен правильный выбор термодинамических функций – для успешной интерполяции они должны примерно равномерно меняться на всем рассматриваемом интервале интерполяции.

Список литературы

1. IBIS-модели и их применение в задачах ЭМС / Лемешко Н.В., Кечиев Л.Н., Захарова С.С.-М.: Грифон, 2016. – 192 с.
2. Фокс. А., Пратт М. Вычислительная геометрия. Применение в проектировании и на производстве: Пер. с англ. -М.: Мир, 1982. -304 с., ил.
3. Вержбицкий В.М. Численные методы (математический анализ и обыкновенные дифференциальные уравнения): Учеб. пособие для вузов. -М.: Директ-Медиа, 2013. 400 стр.
4. Larry A. Glasgow, Applied Mathematics for Science and Engineering / Larry A. Glasgow, Department of Chemical Engineering, Kansas, 2014. p.250
5. Пирумов У.Г. Численные методы: учеб. Пособие для студ. вузов / У.Г. Пирумов. 4-е изд., стереотип. – М.: Дрофа, 2007.-221 с.: ил.
6. Chattot J.J. Computational aerodynamics and fluid dynamics: an introduction/ Jean-Jacques Chattot. Includes bibliographic reference and index.
7. Даугавет И.К. Теория приближенных методов. Линейные уравнения. – 2-е изд., перераб. И доп. -СПб.: БХВ-Петербург, 2006. -228 с.: ил.