

УДК 517.518

Скрипаченко М.П., Корельштейн Л.Б., Гартман Т.Н.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ БИКУБИЧЕСКОЙ ИНТЕРПОЛЯЦИИ ДЛЯ УСКОРЕНИЯ ТЕПЛОВЫХ И ГИДРАВЛИЧЕСКИХ РАСЧЁТОВ РЕАЛЬНЫХ ГАЗОВ И ЖИДКОСТЕЙ

Скрипаченко Мария Павловна, аспирантка 2 курса факультета цифровых технологий и химического инжиниринга; e-mail: marskrip@list.ru

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

Гартман Томаш Николаевич, д.т.н, профессор

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

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

Ключевые слова: термодинамическая библиотека, интерполяция, бикубический сплайн, узлы интерполяции, *spline*, *makima*

USING BICUBIC INTERPOLATION TO OPTIMIZE THE HYDRAULIC AND THERMAL REAL GAS AND LIQUID FLOW ANALYSIS

Skrpachenko Maria Pavlovna, Korelstein Leonid Bentsionovich, Gartman Tomash Nikolaevich.

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

This article proposes to use bicubic spline interpolation while processing of thermodynamic data libraries. The proposed method has been verified on different substances. Estimated data results are consistent with thermodynamic library.

Keywords: thermodynamic library, interpolation, bicubic spline, interpolation nodes, spline, makima

Введение

При проектировании и реконструкции объектов различных отраслей промышленности, для расчета трубопроводов, тепловых и инженерных сетей, объектов в энергетике, нефтепереработке, нефтехимии, необходимо выполнять многочисленные гидравлические и тепловые расчеты, моделирование сложных технологических процессов, расчеты систем аварийного сброса. Данные вычисления выполняются специализированными программами, такими, как программы «Гидросистема», «Предклапан» и др. При подобных расчетах необходимо многократно вычислять термодинамические и транспортные физических свойства (ТФС), а также проводить расчет фазового равновесия (ФР) различных фаз, при меняющихся в процессе расчета параметрах. Существует множество соответствующих программ (термодинамических библиотек) для нахождения теплофизических свойств и фазовых равновесий (ТФС и ФР). Примерами таких программ являются библиотеки «СТАРС» компании НТП Трубопровод, «Simulis Thermodynamics» компании ProSim, GERG-2008, разработанная доктором-инженером профессором В. Вагнером и его коллегами в Институте EMU.

Количество обращений к данным библиотекам в процессе расчета обусловлено сложностью рассчитываемого трубопровода, поставленной задачей, сложностью состава сырья и используемой термодинамической модели. Их число может доходить до нескольких десятков тысяч, следовательно, значительно падает скоростей самих гидравлических и тепловых расчетов, поскольку расчеты ТФС и ФР могут быть весьма вычислительно затратными. В силу этого существует большая необходимость рационализировать данный процесс путем оптимизации количества запросов к библиотекам.

Нами предлагается замена многочисленных запросов на интерполяционные расчеты по небольшому числу заранее полученного набора точек с рассчитанными теплофизическими свойствами.

Данная методология может найти эффективное применение при расчетах изотермического течения жидкости (газа), гидравлического и теплового расчета течения жидкости (газа), изотермического и неизомермического расчета многофазного течения с массообменом между фазами и без него.

По результатам, полученных ранее [1], применение кубической интерполяции при зависимости от одного параметра (например, для однокомпонентного продукта на линии насыщения) оказалось эффективным, так как относительные погрешности были в допустимых пределах.

В данной статье предметом обсуждения будет использование бикубической сплайн-интерполяции для определения ТФС реальных газов и жидкостей в зависимости от температуры и давления. Подобные расчеты применяются также при определении поправок на вязкость для кривых насосов, расчета гидроудара, определения чисел Рейнольдса и Грасгофа, диагностики вскипания и кавитации и др. Пример использования двумерной сплайн-интерполяции в иной, но схожей задаче расчета давления насыщенных паров в зависимости о давления и процентного содержания компонента можно найти в [2]. (См. также [3] относительно использования билинейной интерполяции).

Рассматривались бикубические сплайны двух типов:

- Натуральные бикубические сплайны [4]
- Эрмитовы бикубические сплайны, с расчетом производных в узлах модифицированным методом Akima [5]

А priori можно ожидать, что натуральные бикубические сплайны (дающие дважды дифференцируемую гладкую интерполяцию) обеспечивают весьма высокую точность интерполяции для плавно и равномерно меняющихся в области интерполяции свойств (математическая оценка точности бикубических сплайнов исследована в работе [6]). Однако они не являются локальными, и могут порождать осцилляции при интерполяции функций, меняющихся неравномерно в области интерполяции. В этом случае применение локальных бикубических сплайнов, сохраняющих форму (например, модифицированных сплайнов Akima), может иметь преимущества.

Главным критерием интерполяции в задаче расчета набора термодинамических свойств и фазовых равновесий является требуемая относительная погрешность свойств.

Использованные инструменты и результаты

Для моделирования были использованы данные таких термодинамических библиотек, как «СТАРС» и «Simulis Thermodynamics». Исследования по применению двумерной интерполяции проводились на базе индивидуальных веществ: метан, этан, пропан, ацетилен, азот, водород, диоксид углерода, нитробензол в жидкой и газовой фазах (в дальнейшем планируется также провести аналогичные исследования для многокомпонентных смесей – хотя и нет особых оснований ожидать для них иных результатов). Были рассмотрены несколько областей фазовой диаграммы каждого из компонентов, а именно докритическая жидкость, докритический газ и сверхкритическое состояние вещества. Для жидкости при докритическом давлении приведенное давление в среднем для всех веществ изменялось в диапазоне от 0.41 до 0.85, диапазон приведенных температур изменялся от 0.6 до 0.75. Для докритического газ диапазон приведенных давлений изменялся 0.01 до 0.3, диапазон температур – от 0.7 до 0.9. Для сверхкритического состояния вещества приведенное давление изменялось в диапазоне от 1.03 до 1.80, диапазон приведенных температур изменялся от 1.2 до 1.8.

Таблица 1. Относительные погрешности для докритической жидкости для 4 и 10 точек с применением метода «spline» и «makima»

Вещество	Свойство	Относительная погрешность, %			
		Spline 4 точки	Spline 10 точек	Makima 4 точки	Makima 10 точек
Азот	Изобарная теплоемкость	0.108768	0.002571	0.186415	0.015919
Азот	Изохорная теплоемкость	0.001894	0.000230	0.003650	0.000321
Азот	Показатель адиабаты	0.998813	0.754611	0.783002	0.776593
Азот	Теплопроводность	0.166087	0.106901	0.118816	0.095608
Азот	Динамическая вязкость	0.555461	0.626265	0.657662	0.508715
Азот	Плотность	0.017480	0.000406	0.041393	0.002350
Азот	Коэффициент сжимаемости	0.831730	0.682189	0.737222	0.660667
Азот	Скорость звука	0.014461	0.000388	0.039318	0.002023
Азот	Коэффициент Джоуля-Томсона	1.678700	0.715117	3.433717	0.705190
Азот	Коэффициент изобарного расширения	0.556599	0.188369	0.537061	0.156257
Азот	Энтальпия	0.005833	0.000441	0.016088	0.001012
Азот	Энтальпия	0.006790	0.000434	0.015050	0.000962

Для гидравлического и теплового расчета необходимы следующие ТФС: изобарная и изохорная теплоемкости, вязкость, теплопроводность, плотность (либо коэффициент сжимаемости), энтропия, энтальпия, коэффициент Джоуля-Томсона, показатель адиабаты скорость звука, коэффициент изобарного расширения.

Для анализа полученных данных термодинамических библиотек использовался пакет прикладных программ MATLAB. Были использованы два метода: это натуральный сплайн - функция «spline» и функция «makima» - кусочно-бикубической интерполяции Эрмита модифицированным методом Akima. Данные функции получают на входе узлы интерполяции, значения в них и точки, в которых необходимо определить значения свойств с помощью предложенных методов, на выходе имеются интерполяционные данные по промежуточным точкам.

Для поиска оптимального количества точек были взяты данные по 4 и 10 узлам интерполяции для каждого из параметров, давления и температуры. На данном этапе исследования нами анализировалась равномерная сетка по логарифмам приведенных давления и температуры. На выходе получалась сетка из 9 и 81 прямоугольников. В каждом из них бралось еще по 4 точки для расчета относительной погрешности. Максимальная относительная погрешность интерполяции оценивалась как

$$\delta(p) = \max\left(\frac{|P(\text{исх.}) - P(\text{инт.})|}{|P(\text{инт.})|}\right) * 100\%,$$

где $P(\text{исх.})$ – вектор исходных данных, рассчитанных термодинамической библиотекой.

$P(\text{инт.})$ – вектор параметров, рассчитанных посредством интерполяции.

Рассмотрим данные по относительным погрешностям, полученные после интерполяции на примере азота в области докритической жидкости, представленных в таблице 1, докритического газа (таблица 2), сверхкритического газа (таблица 3).

Таблица 2. Относительные погрешности для докритического газа для 4 и 10 точек с применением метода «spline» и «makima»

		Относительная погрешность, %			
Вещество	Свойство	Spline 4 точки	Spline 10 точек	Makima 4 точки	Makima 10 точек
Азот	Изобарная теплоемкость	263.93	1.91	3.62	0.39
Азот	Изохорная теплоемкость	4.12	0.16	0.21	0.03
Азот	Показатель адиабаты	274.34	2.01	3.70	0.40
Азот	Теплопроводность	0.40	0.43	0.38	0.35
Азот	Динамическая вязкость	30.52	4.98	1.69	0.93
Азот	Кинематическая вязкость	509.82	146.28	1579.37	575.94
Азот	Плотность	5985.70	154.77	191.84	16.25
Азот	Коэффициент сжимаемости	41.36	1.28	1.54	0.24
Азот	Скорость звука	16.17	0.70	0.87	0.14
Азот	Коэффициент Джоуля-Томсона	40.98	1.30	1.83	0.21
Азот	Коэффициент изобарного расширения	822.99	8.74	8.23	1.00

Проведя статистический анализ относительных погрешностей в ситуации с жидкостью, пришли к выводу, что для некоторых свойств целесообразнее использовать метод «makima», например, для теплопроводности, скорости звука, динамической и кинематической вязкостей и т.д. Это говорит о более точном подходе данного метода по сравнению с методом «spline» для жидкостей. Для сверхкритического газа, напротив, метод «spline» оказался более точным, чем «makima». Более интересный случай получился у докритического газа, максимальные погрешности в некоторых случаях оказались очень значительными. Поэтому пришлось прибегнуть к интерполяции не величины не самого свойства, а его логарифма, что позволило значительно уменьшить погрешность расчётов (таблица 4). Как видим, плотность газа предпочтительно рассчитывать

через коэффициент сжимаемости, который интерполируется с гораздо большей точностью.

Также для более наглядного представления были построены графики всех свойств. С помощью графиков проводился анализ значительного изменения свойств, это было связано с приближением к критической точке. Тем самым регулировались диапазоны приведенных параметров, так как данная область требует особого внимания. Некоторые свойства сильно изменялись в зависимости от независимых переменных. На рисунках представлены график зависимости кинематической вязкости в докритическом газе на примере водорода (Рис. 1) и график зависимости коэффициента Джоуля-Томсона нитробензола в докритической жидкости (Рис. 2) в зависимости от натурального логарифма приведенных давлений-температур.

Таблица 3. Относительные погрешности для сверхкритической области для 4 и 10 точек с применением метода «spline» и «makima»

		Относительная погрешность, %			
Вещество	Свойство	Spline 4 точки	Spline 10 точек	Makima 4 точки	Makima 10 точек
Азот	Изобарная теплоемкость	2.364164	0.154807	3.753168	0.456720
Азот	Изохорная теплоемкость	0.134695	0.007087	0.264054	0.027585
Азот	Показатель адиабаты	2.053888	0.133959	3.281315	0.395628
Азот	Теплопроводность	0.508370	0.441109	0.471263	0.437936
Азот	Динамическая вязкость	0.698000	0.701838	0.697924	0.688952
Азот	Кинематическая вязкость	0.970739	0.761721	1.657330	0.674063
Азот	Плотность	1.119571	0.062364	2.110297	0.221463
Азот	Коэффициент сжимаемости	0.302509	0.014174	0.709185	0.070266
Азот	Скорость звука	0.448576	0.032451	0.642556	0.085057
Азот	Коэффициент Джоуля-Томсона	1.763643	0.090050	3.160668	0.445265
Азот	Коэффициент изобарного расширения	3.691471	0.872209	5.914960	0.876726
Азот	Энтродия	0.179690	0.009721	0.377172	0.037790
Азот	Энтальпия	0.261088	0.014127	0.575214	0.055038

Таблица 4. Относительные погрешности для докритического газа для 4 и 10 точек с применением метода «spline» и «makima» логарифмированных исходных данных

		Относительная погрешность, %			
Вещество	Свойство	Spline 4 точки	Spline 10 точек	Makima 4 точки	Makima 10 точек
Азот	Изобарная теплоемкость	1.329733	0.071578	2.425644	0.265368
Азот	Изохорная теплоемкость	0.118981	0.006277	0.241045	0.025041
Азот	Показатель адиабаты	1.234460	0.066826	2.220782	0.245977
Азот	Теплопроводность	0.497684	0.440482	0.472372	0.438673
Азот	Динамическая вязкость	0.690822	0.699936	0.815392	0.692387
Азот	Кинематическая вязкость	0.824554	0.750164	1.528955	0.673944
Азот	Плотность	0.532061	0.028671	1.099516	0.116723
Азот	Коэффициент сжимаемости	0.528958	0.028517	1.046938	0.115606
Азот	Скорость звука	0.483555	0.033244	0.696153	0.087192
Азот	Коэффициент изобарного расширения	1.289950	0.843235	2.545779	0.819477
Азот	Изотермический коэффициент сжимаемости	1.571707	0.724012	1.498893	0.680902

На рис. 3 показан график зависимости коэффициента изобарного расширения пропана от натурального логарифма приведенных давлений-температур в сверхкритическом состоянии.

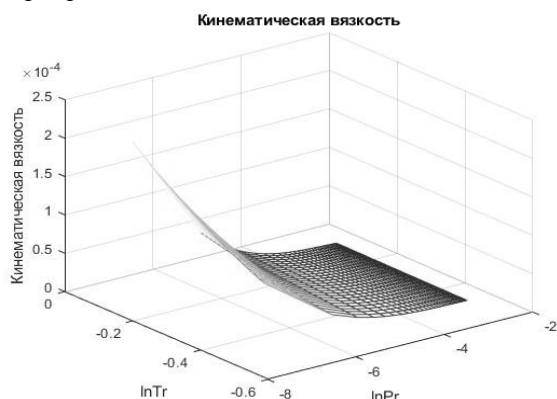


Рис. 1. График зависимости кинематической вязкости водорода от ($\ln Pr$; $\ln Tr$) в докритическом газе

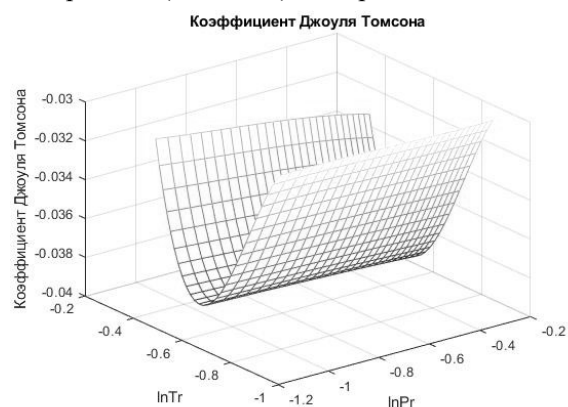


Рис. 2. График зависимости коэффициента Джоуля-Томсона нитробензола от ($\ln Pr$; $\ln Tr$) в докритической жидкости.

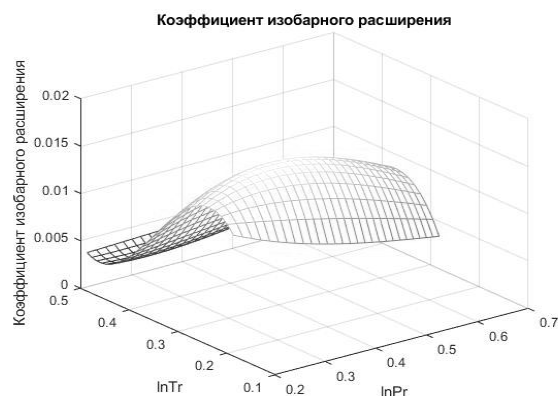


Рис. 3. График зависимости коэффициента изобарного расширения пропана от ($\ln Pr$; $\ln Tr$) в сверхкритическом состоянии

Не смотря на значительные изменения зависимых параметров, их интерполяция имеет приемлемую относительную погрешность. В случае коэффициента Джоуля-Томсона и коэффициента изобарного расширения погрешность составляет 0.33% и 0.67%, а для кинематической вязкости водорода – 11.44%. Если в последнем случае интерполировать логарифм кинематической вязкости, то погрешность падает до 1.5%

Выводы

1. Применение бикубических сплайнов позволяет интерполировать ТФС реальных газов и жидкостей с высокой точностью в широких областях изменения давления и температуры на основе сравнительно небольшого (от нескольких десятков до 100) количества узлов интерполяции. В большинстве случаев натуральные сплайны дают несколько лучшую точность по сравнению с модифицированными сплайнами Akima, однако при приближении к критической точке и других случаях, когда изменение интерполируемой величины сильно

неравномерно, применение последних, а также интерполяция логарифма величины свойства может существенно повысить точность интерполяции.

Авторы выражают благодарность Тимошкину Алексею Ивановичу за ценные советы при планировании исследования и рекомендации при написании программы на языке MatLab.

Список литературы:

1. Скрипаченко М.П., Корельштейн Л.Б. Использование кубической интерполяции для ускорения тепловых и гидравлических расчётов: Успехи в химии и химической технологии: сб. науч. тр. Том XXXIV, № 6 (229). – М.: РХТУ им. Д. И. Менделеева, 2020. – 175 с.

2. István Szalkai, Attila Sebestyén, Biancamaria Della-Vecchia, Tamás Kristóf, László Kótai, and Ferenc Bódi. Comparison of two variable interpolation methods for predicting the vapour pressure of aqueous glycerol solutions. *Hungarian Journal of Industry and Chemistry*, 2015, Vol.43(2), pp.67-71.

3. H. H. Nguyen and M. A. Martin NASA Marshall Space Flight Center Huntsville, AL. An interpolation method for obtaining thermodynamic properties near saturated liquid and saturated vapor lines. Marshall Space Flight Center, 2004.

4. Splines and Pchips. Cleve's Corner: Cleve Moler on Mathematics and Computing Scientific computing, math & more. [Электронный ресурс]. https://blogs.mathworks.com/cleve/2012/07/16/splines-and-pchips/?s_tid=blogs_rc_1 (дата обращения: 20.05.2021).

5. Makima Piecewise Cubic Interpolation. Cleve's Corner: Cleve Moler on Mathematics and Computing Scientific computing, math & more. [Электронный ресурс]. – <https://blogs.mathworks.com/cleve/2019/04/29/makima-piecewise-cubic-interpolation/#d9a97978-0b09-4a1f-a6a5-504d088631d0> (дата обращения: 20.05.2021).

6. C. A. Hall, natural cubic and bicubic spline interpolation. *SIAM J. Numer. Anal.* Vol. 10, No. 6, December 1973, pp. 1055-1060.