

**МЕТОД ЧИСЛЕННОГО
ИНТЕГРИРОВАНИЯ ОДУ ПЕРВОГО
ПОРЯДКА ДЛЯ КОМПЬЮТЕРНОГО
АНАЛИЗА ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ ДАННЫХ****THE NUMERICAL INTEGRATION
METHOD OF THE FIRST-ORDER ODE
FOR NUMERICAL ANALYSIS
OF THERMOPHYSICAL DATA**

Разработан новый метод численного интегрирования линейных обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) первого порядка для численного анализа экспериментальных данных. Исследованы погрешности интегрирования при различных шагах данных и стабильность результатов при случайных разбросах анализируемых данных. Метод использован в компьютерном анализе теплофизических свойств реальных газов для оценки параметров межмолекулярных взаимодействий.

Ключевые слова: численный анализ, обыкновенное дифференциальное уравнение, ОДУ первого порядка, погрешность численного интегрирования, межмолекулярные взаимодействия.

A new numerical integration method of the first-order linear ordinary differential equations (ODE) is developed for the computer aided analysis of experimental data. The integration errors for different steps of data and stability of results at a random spread of analyzed data are investigated. The method was used in the computer aided analysis of real gases' thermophysical properties to estimate the molecular interaction parameters.

Keywords: numerical analysis, ordinary differential equation, first-order ODE, numerical integration errors, molecular interactions.

Введение

Линейные обыкновенные дифференциальные уравнения (ОДУ) [1] первого порядка описывают широкий класс практически важных явлений и процессов. При компьютерной обработке экспериментальных данных, представленных в виде таблиц и описываемых такими уравнениями, часто возникает необходимость повышения точности интегрирования при большой величине шага представления исходных данных. Поэтому поиск эффективных методов численного интегрирования [2] таких уравнений представляет большую важность для науки и практики. Особенно важно иметь высокую точность численного интегрирования таких уравнений при поиске аналитических аппроксимаций и значений параметров зависимостей [3], описывающих экспериментальные данные, известные в табличном виде.

В молекулярной физике [4] стоит трудная задача выяснения деталей и параметров меж-

молекулярных взаимодействий на основании экспериментальных данных для равновесных теплофизических свойств реальных газов и более плотных флюидов [5; 6]. Межмолекулярные взаимодействия всеобъемлющи: они во многом определяют свойства окружающих нас веществ, влияют на образование облаков на Земле и плотных космических объектов из газопылевых облаков, требуют учета при разработке технологических процессов. В отличие от прочных химических связей, энергия межмолекулярных взаимодействий имеет тот же порядок величины, что и энергия теплового движения. Это затрудняет (а зачастую и препятствует) использование спектроскопических методов для прямого измерения параметров межмолекулярных взаимодействий.

Задача извлечения параметров межмолекулярных взаимодействий из экспериментальных теплофизических данных [7] относится к классу обратных задач математической физики. Обратные задачи, как известно, дают расходящиеся результаты при большом разбросе исходных данных или при неэффективных алгоритмах их

¹ Кандидат физико-математических наук, доцент, профессор НОУ ВПО «Российский новый университет».

решения. Достигнутая в настоящее время точность измерения и компьютерной обработки теплофизических свойств особо чистых реальных газов, жидкостей и сверхкритических флюидов позволяет найти эффективные методы компьютерного анализа теплофизических данных, проливающие свет на природу и параметры межмолекулярных взаимодействий в таких средах [8]. В настоящей работе предложен один из возможных путей уточнения численного решения линейных обыкновенных дифференциальных уравнений, используемых при компьютерном анализе экспериментальных теплофизических данных.

1. Метод дробного решения линейных ОДУ

Табличное задание исходных данных не позволяет варьировать величину шага и использовать для поиска решения ОДУ аналитические методы дробления шага, используемые в методах Рунге – Кутты [2], а случайный разброс исходных данных относительно регулярных зависимостей делает многошаговые методы нестабильными. Поэтому в данной работе мы вынуждены ограничиться одношаговым методом без дробления шага.

В общем виде ОДУ первого порядка с переменными коэффициентами записывают в виде: $y'(x) = F(x, y)$ с начальным значением y_1 при x_1 . Линейное ОДУ имеет вид:

$$y'(x) = f(x)y(x) + g(x). \quad (1)$$

Линейность функции $F(x, y)$ по y позволяет найти значение y_{i+1} в явном виде, что невозможно при общем виде этой функции. Численное выражение для i -го шага интегрирования уравнения (1) по методу трапеции [2] с шагом $\Delta x_i = h$ можно представить в виде:

$$y_{i+1} - y_i = h (f_i y_i + f_{i+1} y_{i+1} + g_i + g_{i+1})/2. \quad (2)$$

Объединяя члены с y_{i+1} и y_i , получаем явное выражение для численного интегрирования линейного ОДУ в виде дроби:

$$y_{i+1} = [y_i (1 + hf_i/2) + h (g_i + g_{i+1})/2] : (1 - hf_{i+1}/2). \quad (3)$$

Это выражение замечательно тем, что шаг представления данных h входит не только в числитель, но и в знаменатель. Запись численного решения в виде дроби с шагом интегрирования, стоящим в знаменателе, возможна только для линейных ОДУ, но такое сужение области применения дробного решения не снижает важности нового подхода к численному интегрированию. Этот подход можно обобщить и на системы ли-

нейных ОДУ. Уравнение (3) позволяет провести аналогию с выражением для коэффициента усиления усилителя с отрицательной обратной связью, которая повышает стабильность работы усилителя. Далее будет показано, что и дробное решение обладает повышенной стабильностью.

Если известна достаточно точная аналитическая аппроксимация для функции $g(x)$, то в выражении (3) вместо формулы трапеции $h (g_i + g_{i+1})/2$ для интегрирования функции $g(x)$ можно использовать формулу Симпсона: $h (g_i + 4g(x_i + h/2) + g_{i+1})/6$.

2. Оценка погрешностей нового метода

2.1. Зависимость погрешности от величины шага интегрирования

Для демонстрации высокой точности численного интегрирования по новому методу произведем оценки погрешности для конкретных уравнений.

Пример 1: $f(x_i) = x_i^2$; $g(x_i) = \exp(x_i)$; $y_1 = 1$ при $x_1 = 0$.

Исследование относительной погрешности численного интегрирования в точке $x = 1$ от величины шага представления данных h дает квадратичную зависимость $\Delta y/y_0$ от h , рис. 1. Точное значение $y_0(x_i)$ находим как предел $y_h(x_i)$ при h , стремящемся к нулю.

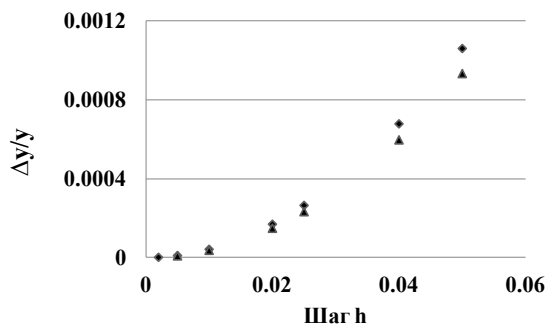


Рис. 1. Квадратичная зависимость относительной погрешности численного интегрирования для примера 1 при использовании формулы трапеции для интегрирования свободного члена (ромбы) и формулы Симпсона (треугольники)

Видно, что относительная погрешность невелика даже при большой величине шага.

2.2. Оценка чувствительности метода к случайным отклонениям коэффициентов уравнения от регулярных зависимостей

Для примера 1 введем случайный разброс значений $g(x_i)$ в форме:

$$g(x_i) = \exp(x_i) + k_n (\text{СЛЧИС}() - 0,5). \quad (4)$$

Здесь k_n – размах случайных отклонений

значений $g(x_i)$ от регулярной зависимости, а $(СЛЧИС() - 0,5)$ – функция равномерно распределенного шума с нулевым средним значением. Случайный разброс исходных данных может быть следствием как экспериментальных ошибок, так и ошибок округления числовых значений в справочниках. Стабильность метода интегрирования, определяемая как чувствительность к случайному разбросу исходных данных, можно оценить по величине относительного отклонения зашумленных значений $y_n(x_i)$ при размахе k_n от соответствующего значения $y_0(x_i)$ при нулевом размахе. Рис. 2 демонстрирует малость относительных отклонений $(y_n - y_0)/y_0$ по новому методу в сравнении с методом Хьюна [2].

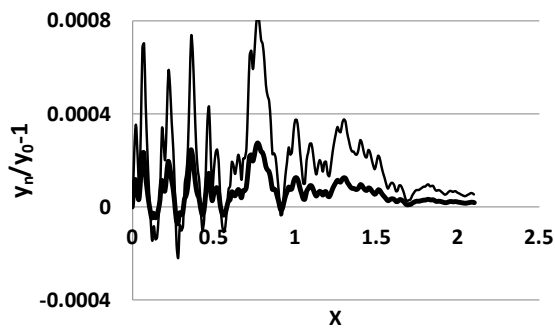


Рис. 2. Относительная погрешность нового метода (жирная линия) и метода Хьюна (тонкая линия) для одной из реализаций случайного разброса значений $g(x_i)$ от регулярной зависимости в примере 1 при размахе разброса $k_n = 0,1$

Из рис. 2 видно, что новый метод обеспечивает уменьшение случайного разброса результата решения ОДУ примерно в 4 раза по сравнению с методом Хьюна.

3. Применение нового метода для анализа экспериментальных теплофизических свойств реальных газов

Реальные газы широко используются в современных технологических процессах и в научных исследованиях. В отличие от идеальных газов, они содержат группы молекул, объединенных силами межмолекулярного притяжения в кластеры. Эти кластеры существенно влияют на теплофизические свойства реальных газов. И наоборот, знание теплофизических свойств реальных газов позволяет оценить параметры межмолекулярных взаимодействий и понять структурные особенности доминирующих типов кластеров [7–9]. Ключом к выяснению структуры и концентрации кластеров является плотность фракции мономеров (несвязанных в кластеры молекул) [10]. Автором показано [10],

что по известной изотермической зависимости плотности реального газа D от давления P можно найти плотность фракции мономеров D_m с помощью линейного ОДУ первого порядка:

$$dD_m/dP = D_m/(RTD). \quad (5)$$

Здесь R – универсальная газовая постоянная, а T – температура газа.

В справочниках [5] и электронных таблицах [6] теплофизических свойств чистых реальных газов можно найти табличные зависимости $D_i(P, T)$ с шагом значений для давления, равным h_p . Численное интегрирование уравнения (5) по новому методу дает:

$$D_{m(i+1)} = D_{m(i)}(1 + h_p/(2RTD_{(i)})) : (1 - h_p/(2RTD_{(i+1)})). \quad (6)$$

Начальное условие для интегрирования уравнения (6) при малых значениях D_1 и P_1 можно взять в виде: $D_{m1} = 2P_1/RT - D_1$.

На рис. 3 показан результат вычисления плотности фракции мономеров D_m в широко используемом газе пропане в сравнении с общей плотностью газа D при температуре 360К. Для вычисления D_m использовано 1400 значений давления с шагом, возрастающим через каждые 200 шагов последовательно от 0,001 до 0,1 бар. Видно, что с ростом давления доля мономеров в плотности газа снижается до одной трети. Остальные две трети приходятся на кластеры нанометровых размеров.

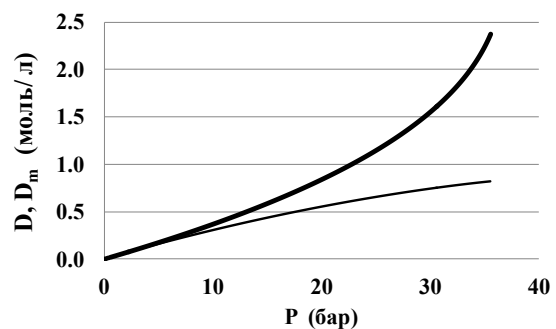


Рис. 3. Плотность фракции мономеров (тонкая линия) в пропане при температуре 360К в сравнении с общей плотностью газа (толстая линия)

Стабильность решения уравнения (6) для пропана при $T = 360К$ видна из рис. 4, где отображены относительные отклонения зашумленных значений D_{mn} от регулярных значений D_{m0} при размахе случайных отклонений D от регулярной зависимости в 1%. Выбрана одна из наилучших реализаций шумовой функции, при которой $\Delta D_m/D_m$ имеет наибольшее значение, тем не менее, не превышающее десятую часть от $\Delta D/D$.

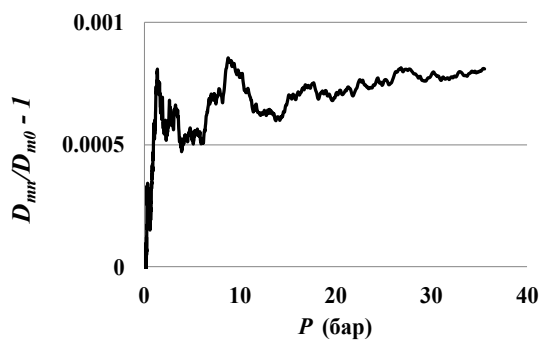


Рис. 4. Относительные отклонения плотности фракции мономеров D_{mf} от регулярных значений D_{m0} при случайных разбросах значений плотности в пределах одного процента от регулярного значения D

Малые относительные отклонения результата от его регулярных значений по сравнению с разбросом исходных данных говорят об эффективности разработанного дробного метода численного интегрирования уравнения (6). Рис. 4 показывает, что максимальный рост разброса результатов численного решения происходит при малых значениях аргумента, что стимулирует дальнейшее совершенствование метода.

Заключение

В результате компьютерного анализа теплофизических данных для ряда чистых реальных газов и более плотных флюидов новый метод численного интегрирования уравнения для плотности фракции мономеров в указанных средах подтвердил свою высокую точность при условии корректного выбора величины шага представления анализируемых данных.

На основании точных теплофизических данных из онлайн-базы данных [6] и вычисленных значений плотности фракции мономеров были найдены концентрации и параметры кластеров с числом молекул до 10 для ряда чистых газов при различных температурах и давлениях [7–9].

Литература

1. Понтрягин Л.С. Обыкновенные дифференциальные уравнения. – М. : Наука, 1983.
2. Вержбицкий В.М. Основы численных методов. – М. : Высшая школа, 2005.
3. Алгоритмы и программы восстановления зависимостей / под ред. В.Н. Вапника. – М. : Наука, 1984.
4. Сивухин Д.В. Общий курс физики. – Т. 2. Термодинамика и молекулярная физика. – М. : Наука, 1990.
5. Варгафтик Н.Б. Справочник по теплофизическим свойствам газов и жидкостей. – М. : Наука, 1972.
6. NIST, Thermophysical Properties of Fluid Systems. – 2013 // <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid>
7. Sedunov B. Equilibrium molecular interactions in pure gases // J. of Thermodynamics. – 2012. – Vol. 2012. – Article ID 859047. – 13 p.
8. Sedunov B. Thermal Analysis of Thermophysical Data for Equilibrium Pure Fluids // J. of Modern Physics. – 2013. – No. 4. – P. 8–15.
9. Седунов Б.И. Структурные особенности малых кластеров воды // Бутлеровские сообщения. – 2011. – Т. 26. – № 12. – С. 20–28.
10. Sedunov B. Monomer fraction in real gases // Int. J. of Thermodynamics. – 2008. – Vol. 11. – No. 1. – P. 1–9.