**2. Апроксимація теплофізичних характеристик технічно важливих газів**

**2.1. Отримання теплофізичних характеристик**

В наш час у зв’язку з інтенсивним використанням технічно важливих газів у багатьох областях сучасної науки, техніки і технології, зокрема в енергетиці, геології, хімічній технології, газовій промисловості тощо, значно зростає потреба в більш точному визначенні їх параметрів і характеристик. Отримання надійних довідкових даних про теплофізичні властивості стиснутих газів при високих температурах пов’язано із значними труднощами. Це пояснюється тим, що існуючі експериментальні дані отримані в обмеженому температурному інтервалі з верхньою границею, яка не перевищує 800-1000К. Ця обставина не дозволяє використовувати традиційні методи для розрахунку параметрів при високих температурах, бо такі методи полягають в побудові емпіричних рівнянь за результатами експериментальних даних і розрахунку по ним дискретних значень параметрів і характеристик, оскільки ці рівняння непридатні для отримання даних за межами експериментально досліджуваної області [28,29].

Для усунення вказаних недоліків були створені методи отримання рівнянь, які відображають властивості реальних газів і які є придатні для екстраполяційних розрахунків теплофізичних властивостей. Для цих розрахунків доцільно застосовувати теоретично обґрунтовані рівняння, які дозволяють розраховувати будь-які теплофізичні властивості газів, якщо відомо закон міжмолекулярної взаємодії, і які містять мінімальну кількість невідомих констант – параметрів модельного потенціалу.

Таким рівнянням для газів є віріальне рівняння стану, віріальні коефіцієнти якого можуть бути розраховані на основі прийнятих функцій міжмолекулярної взаємодії, а параметри потенціалу визначаються із експериментальних значень густини. Ці рівняння дуже громіздкі і розв’язуються чисельно з використанням обчислювальної техніки. Багато коефіцієнтів виражаються через кратні інтеграли, які також не можуть бути обчислені аналітично, а тому обчислюються за допомогою квадратурних формул на комп’ютерах [1,17,37]. В результаті обчислень отримують дискретні значення певних характеристик газів (густина, фактор стискуваності, ізохорна та ізобарна теплоємності, швидкість звуку, теплопровідність, в’язкість тощо), при певних значеннях тиску і температури, що змінюються з доволі великим кроком. Для обчислення характеристик газів у проміжних точках потрібно затратити багато часу і зусиль. Тому доцільно апроксимувати отримані дані, наприклад, за мінімаксним критерієм або методом найменших квадратів і, маючи готові аналітичні вирази, обчислювати потрібні характеристики газів у проміжних точках з достатньо великою точністю [22,24,33].

Далі в таблиці 1 наведено залежності щільності *ρ*, ізохорної і ізобарної теплоємностей водню H від зміни тиску при температурі Т=500К. У таблиці 2 наведено значення щільності, фактора стискуваності , швидкості звуку , в’язкості *μ* та теплопровідості [λ](https://en.wiktionary.org/wiki/%CE%BB) кисню при температурі Т=500К і зміні тиску *p*.

Таблиця 1. Характеристики водню при Т=500К.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | **ρ** |  |  |  |  |
| 0.1 | 0.048 | 1.0004 | 72.293 | 10.389 | 14.514 |
| 1.0 | 0.483 | 1.0040 | 62.794 | 10.389 | 14.518 |
| 2.0 | 0.962 | 1.0080 | 59.933 | 10.389 | 14.522 |
| 3.0 | 1.438 | 1.0120 | 58.259 | 10.388 | 14.526 |
| 4.0 | 1.909 | 1.0160 | 57.070 | 10.388 | 14.530 |
| 5.0 | 2.377 | 1.0200 | 56.147 | 10.388 | 14.534 |
| 6.0 | 2.841 | 1.0240 | 55.393 | 10.388 | 14.538 |
| 8.0 | 3.759 | 1.0320 | 54.203 | 10.388 | 14.546 |
| 10.0 | 4.663 | 1.0400 | 53.278 | 10.388 | 14.554 |
| 12.0 | 5.553 | 1.0480 | 52.522 | 10.388 | 14.561 |
| 16.0 | 7.293 | 1.0639 | 51.327 | 10.388 | 14.574 |
| 20.0 | 8.982 | 1.0797 | 50.399 | 10.389 | 14.587 |
| 25.0 | 11.026 | 1.0995 | 49.470 | 10.390 | 14.601 |
| 30.0 | 12.998 | 1.1192 | 48.709 | 10.391 | 14.614 |
| 35.0 | 14.903 | 1.1389 | 48.065 | 10.393 | 14.626 |
| 40.0 | 16.745 | 1.1584 | 47.506 | 10.396 | 14.636 |
| 45.0 | 18.526 | 1.1779 | 47.013 | 10.399 | 14.646 |
| 50.0 | 20.251 | 1.1973 | 46.571 | 10.402 | 14.655 |
| 60.0 | 23.542 | 1.2359 | 45.805 | 10.409 | 14.671 |
| 70.0 | 26.640 | 1.2742 | 45.157 | 10.417 | 14.685 |
| 80.0 | 29.564 | 1.3122 | 44.594 | 10.425 | 14.697 |

Таблиця 2. Характеристики кисню при Т=500К.

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | **ρ** |  |  |  | [**λ**](https://en.wiktionary.org/wiki/%CE%BB) |
| 0.1 | 0.77 | 1.0002 | 421.1 | 303.5 | 41.0 |
| 1.0 | 7.68 | 1.0018 | 422.5 | 304.3 | 41.2 |
| 2.0 | 15.34 | 1.0037 | 424.1 | 305.3 | 41.4 |
| 3.0 | 22.96 | 1.0057 | 425.8 | 306.3 | 41.6 |
| 4.0 | 30.55 | 1.0078 | 427.5 | 307.4 | 41.8 |
| 5.0 | 38.11 | 1.0099 | 429.3 | 308.4 | 42.1 |
| 6.0 | 45.63 | 1.0122 | 431.1 | 309.6 | 42.3 |
| 8.0 | 60.55 | 1.0169 | 434.8 | 311.9 | 42.8 |
| 10.0 | 75.31 | 1.0221 | 438.7 | 314.4 | 43.2 |
| 12.0 | 89.89 | 1.0275 | 442.8 | 316.9 | 43.7 |
| 16.0 | 118.49 | 1.0394 | 451.5 | 322.4 | 44.8 |
| 20.0 | 146.26 | 1.0525 | 460.8 | 328.3 | 45.8 |
| 25.0 | 179.75 | 1.0706 | 473.1 | 336.0 | 47.2 |
| 30.0 | 211.80 | 1.0903 | 486.2 | 344.2 | 48.6 |
| 35.0 | 242.39 | 1.1115 | 499.3 | 352.7 | 50.0 |
| 40.0 | 271.53 | 1.1339 | 513.8 | 361.3 | 51.4 |
| 45.0 | 299.25 | 1.1575 | 528.2 | 370.1 | 52.8 |
| 50.0 | 325.60 | 1.1820 | 542.8 | 378.9 | 54.2 |

**2.2. Метод найменших квадратів**

Нехай в результатi вимiрювань деякої фізичної залежності, яка описується функцiєю  в точках  отримаємо дискретні значення  [1,17,37]. За цими дискретними (табличними) даними потрібно побудувати аналiтичну формулу

 (1)

яка залежить вiд  параметрiв , причому функцiя  має "досить добре" наближати функцiю  на всьому промiжку . Вигляд функцiї  i кiлькiсть параметрiв у деяких випадках вiдомi на основi додаткових мiркувань. У iнших випадках параметри і вигляд функцiї  визначаються за графiком, побудованим за значеннями  так, щоб залежнiсть (1) була досить простою i добре вiдображала величини, отримані в результаті вимірювань.

По виміряних значеннях будуємо систему рівнянь

 (2)

Якщо вона має єдиний розв’язок, то його знаходять з будь-яких *m* рiвнянь системи (2). Однак, у загальному випадку  є отримані з деякою похибкою i точний вигляд залежностi  невiдомий. Тому система (2) зазвичай є несумiсною. Знайдемо параметри  так, щоб у деякому розумiннi всi рiвняння системи (2) задовольнялися з найменшою похибкою, тобто, щоб параметри  мiнiмiзували функцiю



Такий метод розв’язування системи (2) називають методом найменших квадратiв. Якщо функцiя  досягає абсолютного мiнiмуму в областi змiни параметрiв , то, розв’язуючи систему



знаходимо точки, в яких може бути екстремум. Вибравши той розв’язок, який належить областi змiни параметрiв  i в якому функцiя  має абсолютний мiнiмум, знаходимо незалежнi значення параметрів .

Якщо  лiнiйно залежить вiд параметрiв , тобто



то система (2) набуває вигляду

 (3)

Розв’язуємо систему (3) токим чином, щоб визначити невiдомi, якi мiнiмiзують суму квадратiв нев’язок, тобто суму вигляду



Для виконання умови мiнiмуму величини , яка є функцiєю вiд параметрів , розв’язуємо систему лiнiйних алгебраїчних рiвнянь



яку для зручності представляємо у вигляді

 (4)

Розв’язок системи лiнiйних алгебраїчних рiвнянь (4) з  невiдомими вважаємо наближеним розв’язком системи (2) за методом найменших квадратів. Найчастіше в якості  вибирають функції . Систему лінійних алгебраїчних рівнянь (4) розв’язують методом Гауса або методом Гауса з вибором головного елемента [1,37].

**2.3. Порівняння результатів наближення**

Було проведено мінімаксне наближення та наближення методом найменших квадратів експериментально отриманих залежностей: щільності кисню *ρ* від тиску *p* при температурі . Результати наведено у таблицях 3 і 4.

Таблиця 3. Мінімаксне наближення.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Степінь многочлена | Вигляд многочлена | Максимальна похибка |
| 1 |  | 8,4452 |
| 2 |  | 0.3173 |
| 3 |  | 0.1185 |
| 4 |  | 0.0075 |

Таблиця 4. Метод найменших квадратів.

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Степінь многочлена | Вигляд многочлена | Максимальна похибка |
| 1 |  | 12.0199 |
| 2 |  | 0.4187 |
| 3 |  | 0.1328 |
| 4 |  | 0.0114 |

Графіки наближуваних даних і многочленів побудованих за мінімаксним критерієм і метод найменших квадратів, наведено у додатку 2. Порівнюючи інформацію із таблиць 3 і 4 видно, що мінімаксне наближення є кращим ніж наближення за методом найменших квадратів, бо дає менші похибки для многочленів однакового степеня. Також перевага мінімаксного наближення над методом найменших квадратів має місце і для аналітично заданих функцій (див. додаток 2).