

Approximation of the tables of the air molar specific heat of the dry air in the range of compression

The paper presents a methods for identifying models approximating two-dimensional Lemmon thermodynamic tables of the molar specific heat of the air in the temperature range 300 to 2000 K and pressures 0.101325 to 20 MPa. Generally for this purpose was used the method of least squares and minimization of the maximum deviations. Considered models are linear combinations of basic functions. There are considered two-dimensional polynomials complete and incomplete higher degrees and combinations of any of basic functions. Also there is analyzed a model based on the approximation of the contour lines for $p = \text{idem}$ and $T = \text{idem}$. This allowed to emerge basis functions corresponding to the nature of the approximated data. The elaborated formulas allow calculation of the specific heat at constant pressure and at constant volume value in the above ranges of pressures and temperatures with errors of no more than 0.083% of the table values.

Key words: specific heat of dry air, table approximation by formula

Aproksymacja tablic molowego ciepła właściwego powietrza suchego dla zakresu sprężania

W referacie przedstawiono metody wyłonienia modeli aproksymujących dwuwymiarowe tablice termodynamiczne Lemmona ciepła właściwego powietrza w zakresie temperatur 300–2000 K i ciśnień 0,101325–20 MPa. Rozpatrzono dwuwymiarowe modele wielomianowe oraz kombinacje liniowe wielomianów i innych funkcji elementarnych, stosując metodę najmniejszych kwadratów oraz minimalizację maksymalnych odchyień. Najskuteczniejszym okazał się model bazujący na aproksymacji warstwicznej dla $p = \text{idem}$ i $T = \text{idem}$ z zastosowaniem członów mających charakter poprawek wirialnych. Opracowane wzory umożliwiają obliczanie wartości molowego ciepła właściwego przy stałym ciśnieniu i stałej objętości w podanych wyżej przedziałach ciśnień i temperatur z błędami nie większymi od 0,083% wartości tablicowej.

Słowa kluczowe: przybliżenie tablic wzorami, ciepło właściwe powietrza suchego

1. Wstęp

Zapis tablic termodynamicznych ciepła właściwego powietrza c_p i c_v za pomocą wzorów znacząco ułatwia obliczenia procesu sprężania i może się przyczynić do zwiększenia ich dokładności. W szczególności w porównaniu z bezpośrednim wykorzystaniem tablic liczbowych ułatwia operacje różniczkowania i całkowania.

W artykule wykorzystano publikowane tablice termodynamiczne powyższych wielkości dla powietrza suchego [1, 2].

Biorąc pod uwagę parametry procesów sprężania współczesnych okrętowych silników tłokowych ograniczono się do zakresu temperatur $T = 300 \div 2000$ K i zakresu ciśnień $p = 0,101325 \div 20$ MPa.

Dane wyjściowe, zawarte w tablicy [1, 2] są już pewnymi aproksymacjami i mają zasadniczo charakter obliczeniowy, gdzie w modelu obliczeniowym oparto się na pewnych danych eksperymentalnych zawierających składowe losowe. W związku z tym błędy (odchylenia) wyników aproksymacji są błędami modelu i zaokrąglenia liczb.

Wartości tablicowe [2] ciepła molowego zostały zaokrąglone do dwóch miejsc po przecinku więc maksymalna wartość bezwzględna błędu zaokrą-

glenia wynosi 0,005 J/mol·K. Ponieważ najmniejsza wartość c_p wynosi 29,15 J/mol·K [2], to maksymalny bezwzględny błąd procentowy prezentacji danych można oszacować na 0,017%. Jednakże autorzy oceniają niedokładność tablic na do 1%.

W pracy przyjęto, że błędy aproksymacji wartości tablicowych ciepła właściwego nie przekroczą $\Delta c_p \leq 0,1\%$ wartości tablicowych, co będzie wystarczające dla celów obliczeniowych.

2. Modele bazujące na funkcjach wielomianowych i innych funkcjach elementarnych

W przypadku liniowym zagadnienia najmniejszych kwadratów funkcję aproksymującą można zapisać następującym wzorem:

$$c_{pk} = \sum_{i=1}^k a_i \cdot f_i, \quad (1)$$

gdzie:

a_i – wyznaczone współczynniki (stałe),

f_i – wybrane funkcje elementarne.

Ogląd dynamiki zmian danych tablicowych w przyjętych przedziałach ciśnienia i temperatury

sugeruje, że aproksymacja wielomianami potęgowymi mogłaby wypełnić oczekiwania dokładnościowe aproksymacji przy możliwie małej liczbie członów funkcyjnych funkcji aproksymującej.

Dla $k = 15$ uzyskuje się pełny wielomian aproksymujący czwartego stopnia. W tym przypadku największe odchylenie osiągnęło $\delta_{cp} = 3,5\%$ wartości aproksymowanych. Osiągnięty wynik jest daleki od założonej wartości $0,1\%$.

W celu zapobieżenia dużej liczbie członów aproksymujących funkcji wielomianowej w następnym podejściu zastosowano metodę włączania do równania aproksymującego (1) kolejnych jednomianów, kierując się ich największym wkładem w zmniejszenie sumy kwadratów odchyleń. Wybierając człony spośród wszystkich członów pełnego wielomianu szóstego stopnia dla $k = 15$ największe odchylenie wyniosło $\delta_{cp} = 1,1\%$. Odchylenie zmalało trzykrotnie, lecz jest to nadal wartość jedenaściekrotnie większa od założonej.

W kolejnym podejściu rozszerzono zbiór jednomianów o jednomiany z potęgami ujemnymi i potęgi logarytmów temperatury. Jak w poprzednim przypadku, zastosowano metodę kolejnego włączania do funkcji aproksymującej członów dających najmniejszą sumę kwadratów odchyleń w danym kroku.

W tym przypadku uzyskano zakładaną dokładność dla $k = 13$ (tab. 1).

Tabela 1 Wyniki aproksymacji modelem z wykorzystaniem różnych funkcji elementarnych

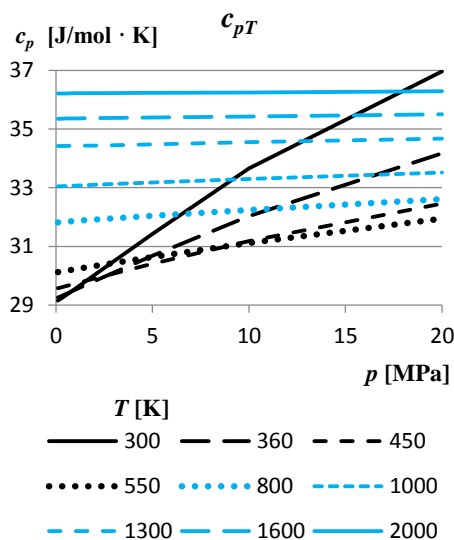
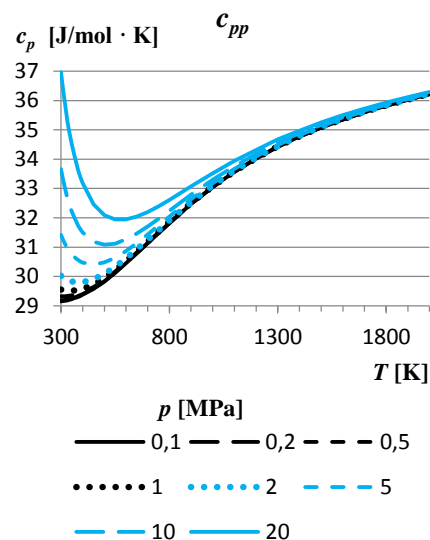
i, k	1	2	3	4
f_i	1	T	pT^{-2}	$\ln^3 T$
$\delta c_{pk}, \%$	-	18	2,6	1,9
i, k	5	6	7	8
f_i	$p^3 T^{-1}$	$\ln^4 T$	T^4	$p^2 T^{-6}$
$\delta c_{pk}, \%$	0,91	0,88	0,77	0,72
i, k	9	10	11	12
f_i	pT^{-5}	T^{-6}	$p^3 T^{-5}$	$p^2 T^{-1}$
$\delta c_{pk}, \%$	0,31	0,19	0,098	0,078
i, k	13	14	15	16
f_i	$\ln^2 T$	T^{-1}	pT^{-6}	$p^3 T^{-3}$
$\delta c_{pk}, \%$	0,10	0,062	0,042	0,034

Przybliżenie c_{p13} i następne mogą być wystarczające do niektórych celów obliczeniowych. Wątpliwości może budzić struktura tych modeli. Mogą one być nieadekwatne w sensie fizycznym pomimo adekwatności statystycznej. Nieadekwatność fizyczna modelu w zagadnieniach obliczeniowych może przejawiać się, np. przy próbach generowania pochodnych funkcji c_p . W przypadku całkowania znacznie wzrosła złożoność wzorów z uwagi na występujące potęgi logarytmów.

3. Aproksymacja warstwiczna tablicy c_p

3.1. Warstwic tablicy c_p

Tablica c_p [2] jest tablicą dwuwymiarową. Analizując tablicę warstwico można wyróżnić przebiegi c_{pT} dla $T = \text{const}$ i c_{pp} dla $p = \text{const}$ (rys. 1).



Rys. 1. Warstwic c_p : c_{pp} – dla $p = \text{const}$, c_{pT} – dla $T = \text{const}$

Już wizualna analiza warstw c_{pT} (rys. 1) pozwala domniemać, że do ich aproksymacji celowe jest zastosowanie wielomianów potęgowych. Widać jest, że warstwa c_{p300} najbardziej odchyła się od prostej. Kierując się maleniem sum kwadratów odchyleń $S_{c_{p300k}}$ przyjęto wielomian 3 stopnia jako wystarczająco dobrze aproksymujący warstwice c_{pT} .

W przypadku niektórych warstw c_{pT} zwiększenie stopnia wielomianu powyżej 3 powoduje znaczą-

cy spadek sumy kwadratów w kolejnym kroku, lecz odchylenie standardowe wzrasta z uwagi na malejącą liczbę stopni swobody. Każda warstwa $\{c_{pT}\}$ liczy tylko 8 punktów i stosowanie wielomianów z $k > 3$ powoduje przenikanie zakłóceń.

W wyniku aproksymacji przebiegów c_{pT} otrzymano cztery zbiory wartości współczynników $\{a_j\}, \{b_j\}, \{c_j\}, \{d_j\}, j = 1 \div 31$, będących funkcjami zmiennej $t = T/100$, wprowadzonej dla wygody obliczeniowej.

Jeżeli aproksymować powyższe zbiory funkcjami $f_a(t), f_b(t), f_c(t), f_d(t)$ wzór przybliżający tablicę c_p przyjmie postać:

$$c_{pw} = f_a + pf_b + p^2 f_c + p^3 f_d. \quad (2)$$

Analizując modele termodynamiczne dla gazów, należy zauważyć, że równanie stanu dla gazu rzeczywistego tworzy się wprowadzając do równania gazu doskonałego poprawki wirialne. Kierując się powyższym można przewidywać, że wzór przybliżający może zawierać funkcje bazowe postaci:

$$f_i = t^{n_i}; \quad i = 1 \div k; \quad n_i = 1 - i. \quad (3)$$

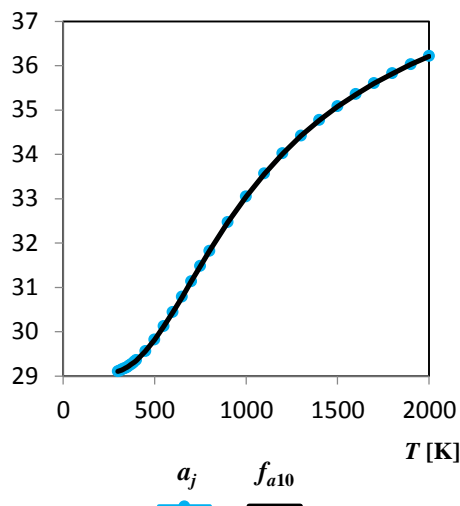
Funkcje aproksymujące warstwy mają postać:

$$f_{jk} = \sum_{i=1}^k J_i f_i; \quad J\{a; b; c; d\}. \quad (4)$$

To przypuszczenie zostało potwierdzone w wyniku przeprowadzonych analiz.

3.2. Wyznaczenie funkcji f_a

Jak wynika z obserwowanego maleńia sumy kwadratów odchyłeń Sa_k odpowiednią funkcją aproksymującą zbiór $\{a_j\}$ może być funkcja f_{a9} (rys. 2) lub f_{a10} . W końcowych krokach aproksymacji uzyskano następujące sumy kwadratów odchyłeń: $Sa_{10} = 6,6E - 4$; $Sa_{11} = 5,5E - 4$.

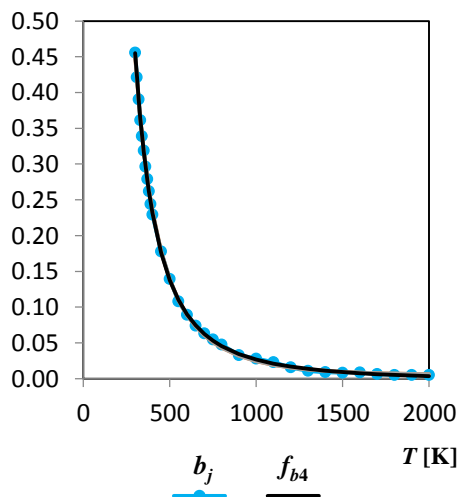


Rys. 2. Porównanie przebiegów współczynników a_j i ich aproksymacji f_{a10}

3.3. Wyznaczenie funkcji f_b

W przypadku zbioru $\{b_j\}$ wystarczające przybliżenie daje funkcja f_{b3} (rys. 3). W ostatnich dwóch krokach aproksymacji uzyskano następujące sumy kwadratów: $Sb_3 = 6,7E - 5$; $Sb_4 = 6,6E - 4$

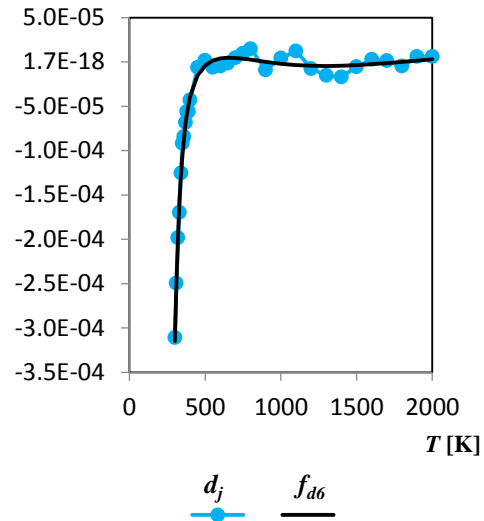
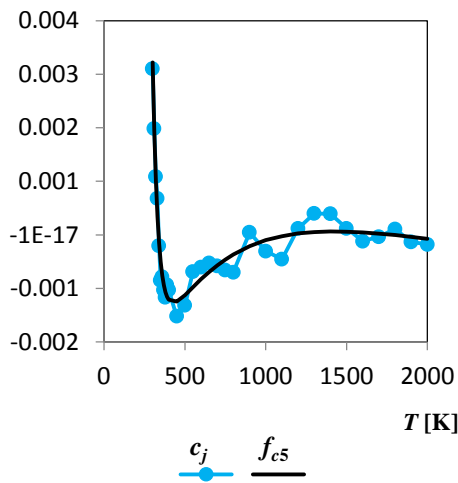
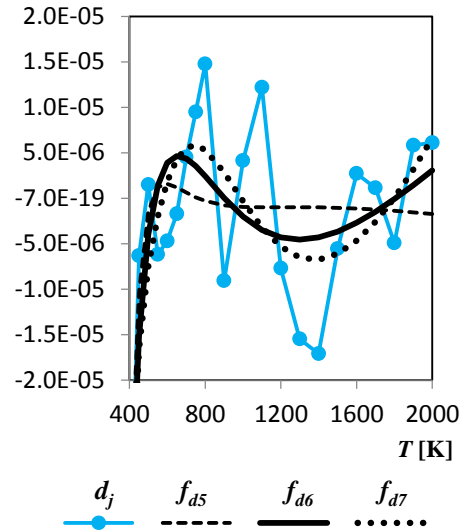
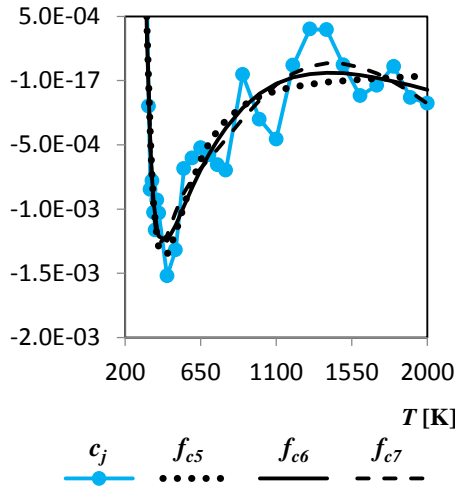
Na rysunku 3 za pomocą łamanych zobrazowano uzyskane wyniki aproksymacji.



Rys. 3. Porównanie przebiegów współczynników b_j i ich aproksymacji f_{b4}

3.4. Wyznaczenie funkcji f_c

W przypadku współczynników $\{c_j\}$ wystarczające przybliżenie daje funkcja f_{c5} (rys. 4) lub f_{c6} . W przypadku funkcji f_{c7} jest zauważalny wpływ nadmiernej wartości potęgi (oscylacje).



Rys. 4. Porównanie przebiegu współczynników c_j i ich wybranych aproksymacji f_{c4} , f_{c5} , f_{c6}

Rys. 5. Porównanie przebiegów współczynników d_j i ich wybranych aproksymacji $f_{d5} \div f_{d7}$

3.5. Wyznaczenie funkcji f_d

W przypadku zbioru $\{d_j\}$ wystarczające przybliżenie daje funkcja f_{d6} , co pokazuje porównanie przebiegów funkcji na rysunku 5.

3.6. Ocena przybliżenia w oparciu o aproksymację warstwicową

W wyniku dokonanych aproksymacji warstwicznych wzór (2) przyjmie postać:

$$c_{pw1} = f_{a11} + pf_{b6} + p^2 f_{c6} + p^3 f_{d6}. \quad (5)$$

Maksymalny bezwzględny błąd procentowy przybliżenia (5) wynosi $\delta_{pw1} = 0,024\%$, lecz wzór ten zawiera aż 29 wyznaczanych współczynników.

Kierując się dostatecznym spełnieniem założenia $\delta_{pw1} \leq 0,1\%$, można w pewnym stopniu zredukować liczbę współczynników do modelu (6):

$$c_{pw2} = f_{a5} + pf_{b3} + p^2 f_{c5} + p^3 f_{d5} \quad (6)$$

Maksymalny błąd przybliżenia (6) wynosi $\delta c_{pw1} = 0,058\%$, a liczba wyznaczanych współczynników 21.

4. Modele zredukowane

Jest celowe wykorzystać informację o postaci funkcji bazowych w modelach warstwicowych do aproksymacji metodą włączania lub eliminacji funkcji bazowych, kierując się kryterium największego wkładu w malenie sumy kwadratów odchyłek w kolejnych krokach aproksymacji oraz spełnieniem warunku dopuszczalnego błędu maksymalnego aproksymacji.

Poniżej przytoczono uzyskane modele aproksymujące tablicę c_p z błędami mniejszymi od 0,1% wartości tablicowych tych wielkości w zakresie temperatur 300÷2000 K i w zakresie ciśnień 0,101325÷20 MPa:

$$c_p = 39,541 - 56,76 t^{-1} - 358,2 t^{-2} + 3752,35 t^{-3} - 10968,1 t^{-4} + 10865,7 t^{-5} + p(-0848 t^{-1} + 3,346 t^{-2} + 5,6 t^{-4} + 14,7 t^{-5}) - 0,0053 p^3 t^{-3} \pm 0,081\% \left[\frac{J}{mol} \cdot K \right]. \quad (7)$$

Wykorzystując analogiczne funkcje bazowe dla aproksymacji ciepła właściwego przy stałej

objętości w przyjętych zakresach ciśnień i temperatur otrzymano wzór:

$$c_v = 31,2271 - 56,86 t^{-1} - 355,041 t^{-2} + 3719,3 t^{-3} - 10845,8 t^{-4} + 10717,9 t^{-5} + p(0,0436 t^{-1} + 0,371 t^{-2} + 11 t^{-6}) - 0,013 p^2 t^{-3} + -0,00037 p^4 t^{-6} \pm 0,084\% \left[\frac{J}{mol} \cdot K \right]. \quad (8)$$

Wartości wyliczane ze wzorów (7) i (8) nie różnią się o więcej niż 1% od wartości podanych w tablicach Kallmanna [1] dla tego samego zakresu ciśnień i temperatur. Tablice Lemmona [2] są nowszymi, aczkolwiek ich autorzy określają niedokładność tych tablic na 1% [2].

5. Podsumowanie

Aproksymacja warstwicowa umożliwiła ujawnienie postaci funkcji bazowych dobrze aproksymujących zbiory danych.

Aproksymacja metodą włączania znanych członów funkcyjnych umożliwiła dokonanie redukcji modeli spełniając założenia co do dokładności aproksymacji przy względnie małej liczbie współczynników.

Metoda analizy warstwicowej tabeli dwuwymiarowych może mieć zastosowanie także w procesie budowania modeli aproksymacji tablic innych wielkości termodynamicznych.

Nomenclature/Skróty i oznaczenia

c_p – ciepło właściwe molowe przy stałym ciśnieniu, J/mol·K,

c_v – ciepło właściwe molowe przy stałej objętości, J/mol·K,

p – ciśnienie, MPa

T – temperatura bezwzględna, K

t – zmienna przekształcona: $t = T/100$,

c_{pp} – warstwie c_p przy stałym ciśnieniu,

c_{vT} – warstwie c_p przy stałej temperaturze,

c_{pw} – model warstwicowy tablicy c_p ,

f_a, f_b, f_c, f_d – funkcje aproksymujące współczynniki aproksymacji warstwic c_{vT} wielomianem trzeciego stopnia,

$\delta c_p, \delta c_v$ – maksymalne odchylenia procentowe aproksymacji tablicy, odniesione do najmniejszej wartości tablicowej,

Sf – suma kwadratów odchyłek dla rozpatrywanej aproksymacji.

Bibliography/Literatura

- [1] Kallmann H.K.: Thermodynamic properties of real gas for use in high pressure problems. U.S. Air Force Project Rand. Research Memorandum, 15 May 1950.
- [2] Lemmon E. W., Jacobsen R.T., Penocello S. G., Friend D. G.: Thermodynamic Properties

of Air Mixtures of Nitrogen, Argon and Oxygen From 60 to 2000 K AT Pressures to 2000 MPa. J. Phys. Chem. Ref. Data, Vol. 29, No. 3, 2000.

Mr Polanowski Stanisław, DSc., DEng. – Professor in the Faculty of Mechanical Engineering at Gdynia Maritime University.

Dr hab. inż. Stanisław Polanowski – profesor na Wydziale Mechanicznym Akademii Morskiej w Gdyni.

