УДК 621.564.3.

Аппроксимация целевых функций для оптимизации параметров хладоносителя

Канд. хим. наук **В.В. КИРИЛЛОВ**
Санкт-Петербургский государственный университет низкотемпературных и пищевых технологий,
канд. физ.-мат. наук **В.В. ЧАШНИКОВА**
Санкт-Петербургский государственный университет

Using the least-square-method an approximation of viscosity and freezing temperature of water-propylene glycol coolant, containing NaCl, from its composition has been carried out. A possibility of selection of optimum parameters for electrolyte water-propylene glycol coolant is shown.

Ранее нами был предложен подход к выбору хладоносителей (ХН), основанный на учете закономерностей физической химии растворов. Было показано, что невысокую вязкость при низких температурах могут обеспечить водно-пропиленгликолевые (ВПГ) растворы, содержащие электролит. В частности, в интервале температур —15...–25 °C вязкость таких ХН в зависимости от природы электролита, его концентрации и массовой доли пропиленгликоля (ПГ) составляет 6...18 мПа·с [2, 5, 6].

Поскольку всесторонний учет влияния этих факторов в широком диапазоне температур трудно поддается физическому описанию, был осуществлен математико-статистический подход к исследованию водно-пропиленгликолевого хладоносителя, содержащего йодид калия в качестве электролита [3].

Цель настоящей работы – оптимизация вязкости и температуры замерзания электролитного водно-пропиленового хладоносителя на основе хлорида натрия.

Экспериментальным путем получены значения температур замерзания растворов (°C) в зависимости от концентрации NaCl и массовой доли пропиленгликоля (табл.1)

Температуру замерзания $t_з$ можно представить в виде функции двух переменных: x_1 (массовая доля ПГ) и x_2 (концентрация NaCl).

Таблица 1

Зависимость температуры замерзания растворов от концентрации NaCl и массовой доли пропиленгликоля

Концентрация NaCl C, моль/кг	Температура замерзания, °C, при массовой доле пропиленгликоля,%				
	–11,7	–17,4	–20,9	–26	–30
1,6	–12,1	–15,3	–17,2	–21,7	27
2,4	–16,4	–21,1	–22,9	–24,9	–30,8
3	–19,8	–23	–25,4	–27,2	–32,3
3,6	–23,1	–25,7	–28,2	–29,8	–34

Эта функция аппроксимируется полиномом 2-й степени (6 неизвестных коэффициентов) по 20 табличным значениям методом наименьших квадратов:

$$t_{зi} = a_1 x_{1i} + a_2 x_{2i} + a_3 x_{1i} x_{2i} + a_4 x_{1i}^2 + a_5 x_{2i}^2 + a_6,$$

где $i = 1,...,20$ для каждой пары значений x_1, x_2.

Искомый вектор коэффициентов $a = (a_1,...,a_6)^T$ получается по формуле

$$a = B^+ Y,$$

где $Y = (y_1,...,y_{20})^T$ – измеренные значения температуры замерзания.

Элементы i-й строки матрицы B рассчитываются для соответствующей пары x_1, x_2 по формулам:

$$b_{i1} = x_{1i};\ b_{i2} = x_{2i};\ b_{i3} = x_{1i} x_{2i};\ b_{i4} = x_{1i}^2;\ b_{i5} = x_{2i}^2;\ b_{i6} = 1,$$
$$i = 1,...,20.$$

Псевдообратная матрица B^+ размером (6×20) вычисляется следующим образом:

$$B^+ = (B^T B)^{-1} B^T.$$

В случае вырожденности матрицы $B^T B$ псевдообратная матрица вычисляется при помощи сингулярных чисел матрицы B [4].

Значения коэффициентов $a_1,..., a_6$ вычислены с использованием пакета MATLAB. В итоге получен аппрок-

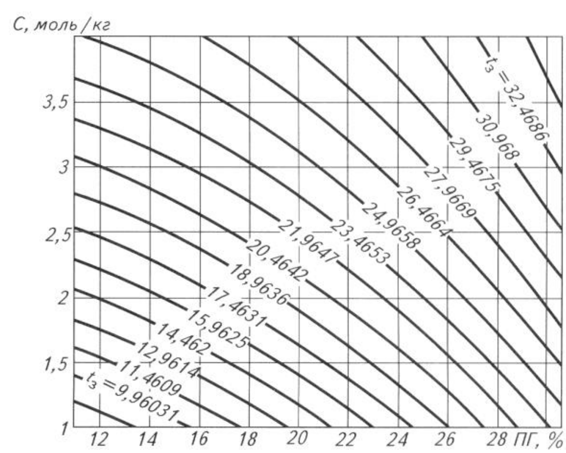

Рис. 1. Зависимость температуры замерзания раствора от массовой доли ПГ и концентрации NaCl

Таблица 2

Зависимость вязкости растворов от концентрации NaCl и массовой доли пропиленгликоля при температуре –15 °С

Концентрация NaCl C, моль/кг	Вязкость η, мПа·с, при массовой доле пропиленгликоля,%				
	11,7	17,4	20,9	26	30
1,6	–	4,57	6,2	10,6	11,7
2,4	4,62	6,23	7,88	11,3	13,7
3	4,8	6,65	7,92	13,9	15,4
3,6	5,19	7,11	8,45	15,5	16,9

симирующий полином

$t_з = 0{,}35x_1 + 10{,}18x_2 - 0{,}115x_1x_2 + 0{,}015x_1^2 - 0{,}588x_2^2 - 7{,}078.$

Для этого полинома на рис. 1 представлен график линий уровня температуры замерзания (в °С ниже нуля).

Вязкость раствора является функцией трех аргументов: $\eta(x_1, x_2, x_3)$, где x_3 – температура раствора. Экспериментально получены значения вязкости растворов (мПа·с) при температуре –15 °С от аргументов x_1, x_2 (табл. 2).

Аппроксимируя эту функцию полиномом 2-й степени, получаем зависимость

$\eta = -0{,}48x_1 - 0{,}44x_2 + 0{,}117x_1x_2 + 0{,}018x_1^2 - 0{,}079x_2^2 + 5{,}7.$

В табл. 3 представлены значения вязкости растворов (мПа·с) при температуре –10 °С.

Соответственно аппроксимируем функцию вязкости при температуре –10 °С:

$\eta = -0{,}198x_1 - 0{,}287x_2 + 0{,}068x_1x_2 - 0{,}01x_1^2 - 0{,}013x_2^2 + 3{,}576.$

На рис. 2, 3 представлены соответствующие графики зависимости вязкости от двух переменных.

Полученные графики дают общую картину поведения функций $t_з$ и η на всем множестве измеренных значений аргументов.

Таблица 3

Зависимость вязкости растворов от концентрации NaCl и массовой доли пропиленгликоля при температуре –10 °С

Концентрация NaCl C, моль/кг	Вязкость η, мПа·с, при массовой доле пропиленгликоля,%				
	11,7	17,4	20,9	26	30
1,6	3,48	4,17	5,44	7,84	9,22
2,4	3,8	5,25	6,28	9,26	10,4
3	4,12	5,41	6,54	10,1	11,3
3,6	4,44	5,88	7,19	11,4	12,3

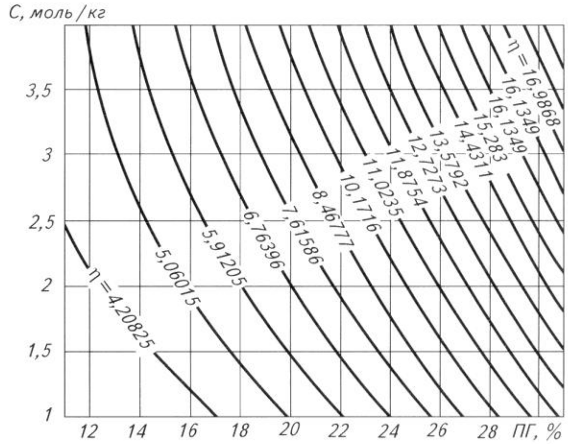

Рис. 2. Зависимость вязкости раствора от массовой доли ПГ и концентрации NaCl при температуре –15 °С

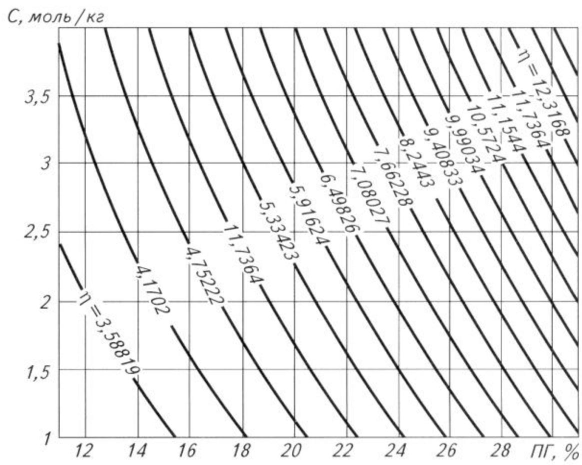

Рис. 3. Зависимость вязкости раствора от массовой доли ПГ и концентрации NaCl при температуре –10 °С

Желательно получить низкую температуру замерзания при небольшом значении вязкости. Эти характеристики находятся в обратной зависимости, поэтому будем искать компромиссный вариант, выбрав определенную линию температуры замерзания и двигаясь по ней до пересечения с минимальным уровнем вязкости. Совмещая графики, можно убедиться, что оптимальное сочетание значений аргументов находится в верхней левой части, т.е. при достаточно низкой концентрации ПГ и достаточно высокой концентрации NaCl. Теперь, аппроксимируя $t_з$ и η только по последним трем строкам и первым трем столбцам таблицы, мы получим более точное приближение искомых функций в этих областях (концентрация NaCl 2,4...3,6 моль/кг, массовая доля ПГ 11,7...20,9 %):

$t_з = 0{,}97x_1 + 4{,}238x_2 - 0{,}144x_1x_2 + 0{,}0026x_1^2 + 0{,}46x_2^2 - 3{,}87;$

η(при -15 °C) $= 0{,}013x_1 - 1{,}567x_2 + 0{,}0044x_1x_2 +$
$+ 0{,}0099x_1^2 + 0{,}34x_2^2 + 4{,}72;$
η(при -10 °C) $= -0{,}093x_1 - 1{,}705x_2 + 0{,}0219x_1x_2 +$
$+ 0{,}00935x_1^2 + 0{,}324x_2^2 + 5{,}28.$

Эта аппроксимация дает сильно искаженную картину поведения искомых функций вне выбранного прямоугольника, зато внутри интересующей нас области получается значительно более точное приближение. Ввиду монотонности поведения функции η при движении по линии уровня функции η можно сделать вывод, что оптимальное сочетание параметров x_1 и x_2 достигается на границе области. Используя результаты аппроксимации, это сочетание можно получить аналитически, задав конкретную температуру замерзания t и $x_2 = x_{2\max} = c$.

Тогда получаем уравнение для x_1:

$a_1x_1 + a_2c + a_3cx_1 + a_4x_1^2 + a_5c^2 + a_6 = t,$

которое приводится к стандартному квадратному уравнению:

$a_4x_1^2 + (a_1 + a_3c)x_1 + (a_2c + a_5c^2 + a_6 - t) = 0.$

Его решение дает оптимальную пару параметров x_1, c.

Пусть, например, при условии температуры замерзания не выше -27 °C требуется определить такую пару аргументов x_1 и x_2, которая обеспечивает минимальную вязкость раствора при температуре -15 °C. Так как «изотерма» -27 °C пересекает верхнюю границу указанной выше области, концентрация NaCl $x_2 = c = 3{,}6$ моль/кг. Подставляя это значение в квадратное уравнение, имеем

$0{,}0026x_1^2 + 0{,}4516x_1 - 9{,}6516 = 0.$

Это уравнение имеет 2 решения:

$x_{11} = 19{,}23$; $x_{12} = -192{,}9.$

Второе решение не входит в допустимую область, а первое хорошо ей соответствует.

Итак, оптимальной парой при $t_3 = -27$ °C и при $t = -15$ °C будет концентрация ПГ 19,23 % и концентрация NaCI 3,6 моль/кг.

В данном примере методика дала быстрый и надежный результат, однако мы существенным образом использовали монотонность функций, а это условие в общем случае не всегда выполняется. Кроме того, в процессе оптимизации требуется вмешательство, чтобы изучить графики линий уровня и выбрать одну из четырех границ. Наиболее универсальным в данной ситуации представляется метод множителей Лагранжа [1].

Необходимым условием минимума функции $f(x)$ при ограничениях $g_i(x) \le 0$, $i = 1,...,m$ является $\partial L/\partial x_j = 0$, $j = 1,...,n$, где L – функция Лагранжа:

$L = f(x) + \Sigma_{i=1..m} \lambda_i g_i(x),\ \lambda_i \ge 0.$

Необходимое условие минимума выглядит следующим образом:

$\nabla f + \Sigma_{i=1..m} \lambda_i \nabla g_i = 0,$

где ∇f, ∇g_i – векторы градиентов соответствующих функций, причем $\lambda_i = 0$, если ограничение пассивно (т. е. имеет место строгое неравенство) и $\lambda_i > 0$, если ограничение активно (т.е. имеет место равенство).

При решении задач, подобных рассмотренной, имеет смысл отдельно проверить вариант, когда мы движемся по линии уровня без ограничений, и если необходимые условия минимума не выполняются внутри допустимой области, то искать оптимальную точку на одной из четырех границ, как было описано выше.

Необходимое условие оптимальности – система двух линейных уравнений:

$2(\lambda a_4+b_4)x_1+(\lambda a_3+b_3)x_2= -(\lambda a_1+b_1);$
$(\lambda a_3+b_3)x_1+2(\lambda a_5+b_5)x_2= -(\lambda a_2+b_2).$

Если $4(\lambda a_4+b_4)(\lambda a_5+b_5) - (\lambda a_3+b_3)^2 \neq 0$, то система совместна и имеет решение $x_1(\lambda), x_2(\lambda)$.

Далее проверяем его на принадлежность допустимой области. Если при любом вещественном λ решение не принадлежит допустимой области, то нужно проверить ее границы указанным выше способом.

Выводы.

- Впервые для задачи оптимизации свойств электролитного хладоносителя, содержащего хлорид натрия, использован метод наименьших квадратов для многочлена II степени от нескольких переменных.
- С помощью линий уровней вязкости и температуры замерзания изыскана возможность выбора хладоносителей с низкой температурой замерзания и невысокой вязкостью.

Список литературы

1. *Аоки М.* Введение в методы оптимизации. –М., 1977.
2. *Бараненко А.В., Кириллов В.В.* Разработка хладоносителей на основе электролитных водно-пропиленгликолевых растворов // Холодильная техника. 2007. № 3.
3. *Бараненко А.В., Кириллов В.В., Бочкарев И.Н.* Оптимизация свойств хладоносителей с помощью метода планирования эксперимента //Вестник Международной академии холода. 2007. № 4.
4. *Воеводин В.В.* Линейная алгебра. – М., 1974.
5. *Кириллов В.В.* Теплофизические свойства и коррозионная активность хладоносителей на основе электролитсодержащих водно-пропиленгликолевых растворов // Холодильная техника. 2006. № 12.
6. *Кириллов В.В., Польская Ю.В.* Влияние сольватации на относительную вязкость растворов галогенидов щелочных металлов и аммония в водно-пропиленгликолевом растворителе // Известия СПбГУНиПТ.2006 № 1.