

ЭТЮД 1

Свойства рабочих тел и теплоносителей для теплотехнических расчетов

Как мы уже отметили во *введении*, расчет теплотехнических процессов невозможен без знания свойств рабочих тел, задействованных в них. Мы и начнем книгу с этюда, в котором упор будет сделан не на использование готовых программных средств типа WaterSteamPro (об этом пакете разговор будет особый в разных этюдах книги), а на некие не совсем стандартные приемы, связанные с новыми информационными технологиями.

1.1. От баз данных по свойствам веществ к функциям и шаблонам в среде Mathcad

Когда-то давно на интернетовском форуме пакета Mathcad PTC Community (<https://community.ptc.com/t5/PTC-Mathcad/ct-p/PTCMathcad>) автор увидел просьбу одного "далекого индийского незнакомца" помочь вставить в расчет следующую таблицу (табл. 1.1).

Таблица 1.1. Давление, температура и плотность некоего вещества

ρ , bar \ t , °C	-50	0	50	100	150	200	300	400
1	1,563	1,275	1,078	0,932	0,823	0,736	0,607	0,517
50	83,79	65,20	53,96	46,25	40,57	36,18	29,08	25,37
100	175,6	131,4	107,1	91,13	79,66	70,92	58,37	49,71
200	340,3	253,7	205,4	174,3	152,2	135,6	111,8	95,41
300	449,3	350,8	288,6	246,7	216,4	193,4	160,3	137,4

"Далекий индийский незнакомец", который после нашего общения на форуме стал "далеким индийским другом", попросил посетителей форума создать функцию пользователя, которая в качестве аргументов имела бы значения давления в интервале от 1 до 300 бар (см. боковик таблицы) и значения температуры в интервале от

–50 до 400 °С (см. "шапку" таблицы) и возвращала бы значение плотности некоего вещества в килограммах на кубический метр (содержание таблицы).

У автора была под рукой подобная давно созданная Mathcad-программа (функция) для такой задачи, автор ее немного отредактировал и "вывесил" на форуме (рис. 1.1).

Программа настроена на то, что встроенная системная переменная `ORIGIN` равна нулю. Это означает, что нумерация строк и столбцов матриц начинается с нуля.

```

ρ(p, t) := "Интерполяция таблицы сплайнами. ORIGIN = 0"
M ← (
  "p, bar \ t, °C"  -50   0   50  100  150  200  300  400
    1   1.563 1.275 1.078 0.932 0.8226 0.7356 0.6072 0.517
  50   83.79 65.2  53.96 46.25 40.57  36.18  29.8  25.37
  100  175.6 131.4 107.1 91.13 79.66  70.92  58.37 49.71
  200  340.3 253.7 205.4 174.3 152.2  135.6  111.8 95.41
  300  449.3 350.8 288.6 246.7 216.4  193.4  160.3 137.4
)
"Лишение аргументов размерности"
x ← p / bar
y ← t / K - 273.15
X ← submatrix(M, 1, rows(M) - 1, 0, 0)
Y ← (submatrix(M, 0, 0, 1, cols(M) - 1))T
return error("p и/или t вне допустимого") if x < min(X) ∨ x > max(X) ∨ y < min(Y) ∨ y > max(Y)
Z ← submatrix(M, 1, rows(M) - 1, 1, cols(M) - 1)
for i ∈ 0.. cols(Z) - 1
  Zvi ← interp(cspline(X, Z(i)), X, Z(i), x)
  interp(cspline(Y, Zv), Y, Zv, y) ·  $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ 

```

$\rho(250.\text{bar}, 1750^\circ\text{C}) = \blacksquare$
p и/или t вне допустимого

$\rho(10.2\text{ksi}, 175^\circ\text{F}) = \frac{\text{lb}}{\text{ft}^3}$

$\rho(250\text{bar}, 175^\circ\text{C}) = 174.8 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$

$\rho(2.2\text{ksi}, 175^\circ\text{F}) = 9.004 \cdot \frac{\text{lb}}{\text{ft}^3}$

Рис. 1.1. Сплайн-интерполяция табличных данных (Mathcad 15)

В программу, показанную на рис. 1.1, заложен метод двойной сплайн-интерполяции. Что происходит в программе? Во-первых, аргументы функции ρ лишаются своих размерностей $x \leftarrow p/\text{bar}$ и $y \leftarrow t/K - 273.15$. Без этого встроенная функция `cspline` в среде Mathcad 15 не будет работать. В среде Mathcad Prime этот недоста-

ток был исправлен (см. рис. 1.2). Последним оператором программы-функции, показанной на рис. 1.1, к ответу приписывается нужная единица плотности. Это обычная технология работы с эмпирическими формулами (см. *этиод 2*).

Встроенная функция `submatrix` изымает из матрицы **M** боковик (вектор **X**) и "шапку" (вектор **Y**). Строка с оператором `return` контролирует, чтобы аргументы функции ρ оставались в оговоренных рамках давления и температуры. Затем функция `submatrix` формирует матрицу **Z** — содержимое табл. 1.1 без "шапки" и боковика. Далее по столбцам матрицы плотности **Z** сплайн-интерполяцией формируется дополнительная строка (вектор **Zv**) по заданному давлению, отсутствующему в боковике таблицы. Для "промежуточного" случая при $p = 250 \text{ bar}$ этот вектор будет иметь следующие элементы: 403.703, 306.196, 249.182, 211.977, 185.394, 165.393, 136.665 и 116.848 kg/m^3 для значений температуры $-50, 0, 50, 100, 150, 200, 300$ и $400 \text{ }^\circ\text{C}$ соответственно (см. "шапку" табл. 1.1). Потом в программе, показанной на рис. 1.1, по сгенерированному вектору **Zv** и по вектору **Y** опять же сплайн-интерполяцией находится требуемое значение плотности по температуре, отсутствующей в "шапке" таблицы. Сплайн-интерполяция по двум векторам показана в *этиоде 4* на рис. 4.3.

На рис. 1.1 четыремя последними операторами показан вызов созданной функции $\rho(p, t)$ при разных значениях давления (p) и температуры (t) и с различными европейскими и американскими единицами. Функция $\rho(p, t)$ по умолчанию возвращает плотность (ρ) с базовыми единицами SI (килограммы и метры), но пользователь вправе выбрать другие единицы — например фунты и футы. Работа с единицами измерения (не просто с *величинами*, а с *физическими* величинами) — это, повторяем, уникальная особенность Mathcad, существенно облегчающая расчеты и предотвращающая множество ошибок [2], которую мы более подробно опишем в *этиоде 2*.

На рис. 1.2 показана программа двойной сплайн-интерполяции для Mathcad Prime, где стало возможным иметь в матрице различные размерности. Функция, представленная на этом рисунке, не зависит от значения системной переменной `ORIGIN`. В "шапке" и боковике таблицы на рис. 1.2 величины имеют размерность давления и температуры соответственно, но для экономии места единицы содержимого таблицы (плотность) вынесены из нее.

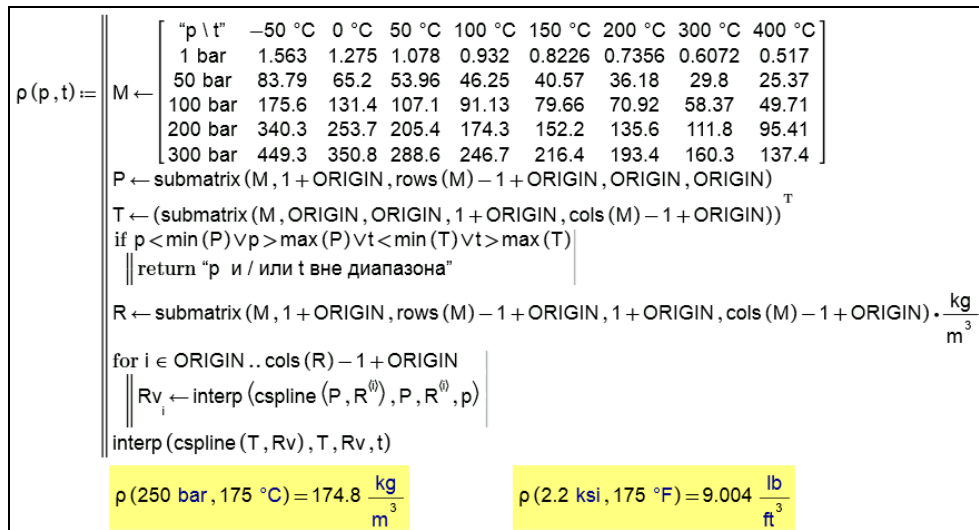


Рис. 1.2. Сплайн-интерполяция табличных данных (Mathcad Prime)

По функции двух аргументов в среде Mathcad несложно построить поверхность (рис. 1.3), на которой видно, что функция $\rho(p, t)$ гладкая, растет при увеличении давления и падает при увеличении температуры.

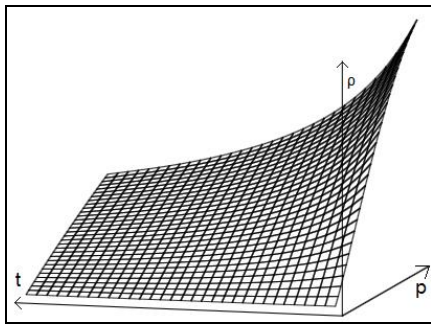


Рис. 1.3. Графическое отображение функции (плотность) двух аргументов — давления и температуры

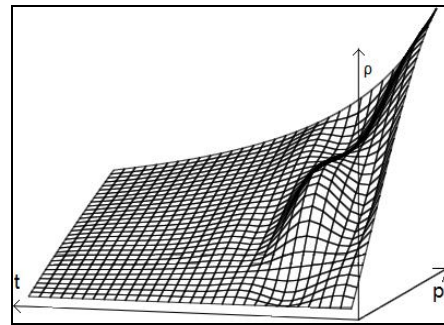


Рис. 1.4. Графическое отображение зависимости с возможной ошибкой исходных данных

Это типичное "теплофизическое поведение" многих веществ (газов) в однофазной области. График функции полезно строить не только для визуального анализа поведения вещества при изменении его параметров, но и для фиксации возможных ошибок и опечаток. Так, если в матрице, показанной на рис. 1.1, случайно или намеренно заменить значение плотности с 107.1 кг/м^3 (оно в табл. 1.1 выделено рамкой) на 170.1 кг/м^3 (это довольно распространенная ошибка при публикации чисел в журналах и книгах и/или при ручном вводе чисел на компьютере либо при сканировании таблиц), то поверхность, показанная на рис. 1.3, изменит свой вид (рис. 1.4). Но здесь не все так просто. Всплеск на графике может быть не просто ошибкой, а... неким аномальным свойством вещества. Так что, видя такую "ошиб-

ку", нужно перед ее исправлением проверить, опечатка ли это, или... научное открытие. К данным, отображенным на рис. 1.4, обычно применяют не интерполяцию (проведение поверхности через точки), а аппроксимацию (сглаживание — проведение поверхности вблизи точек).

Конечно, нужно было бы сразу спросить у "далекого индийского друга", что это за вещество (газ), плотность которого зафиксирована в табл. 1.1, откуда взята эта таблица, известна ли формула (уравнение состояния) этого вещества (газа) и т. д. Но я поступил, как поступил (а поступил я довольно формально): вставил в готовую функцию новую таблицу (матрицу) и послал функцию $\rho(p, t)$, которую "далекий индийский друг" с благодарностью принял и вставил в свой расчет. Этот довольно рядовой эпизод работы на форуме Mathcad¹ поднимает очень важную проблему, которая будет обрисована в этом этюде.

В настоящее время в различных научных и образовательных (академических), а также коммерческих организациях накоплено огромное количество баз данных по свойствам веществ. Эти данные частично опубликованы на бумажных или электронных носителях в виде таблиц (типичный пример — табл. 1.1), графиков, формул (наборов формул и инструкций по их применению) или компьютерных программ. Мы одну такую программу только что описали (см. рис. 1.1 и 1.2). Но, с другой стороны, специалисты, занятые исследованием, проектированием, созданием, эксплуатацией и/или утилизацией различных "процессов, аппаратов и технологий", не всегда могут эффективно воспользоваться этими базами данных. Почему? Во-первых, их нужно где-то найти. Во-вторых, следует убедиться в их надлежащем качестве, в том, что они сертифицированы. В-третьих, и это главное, надо потратить много сил и времени для того, чтобы как-то подсоединить эти базы данных к рабочей программной среде (MS Excel, Mathcad, MATLAB, языки программирования, специализированные программы и т. д.), с помощью которой ведутся прикладные расчеты, осуществляется проектирование или управление технологическими процессами.

Часто можно наблюдать такую картину. Специалист, работающий на компьютере с дорогой и мощной специализированной программой, вынужден обращаться к бумажным справочникам, Интернету или запускать отдельные программы, чтобы узнать и сообщить компьютеру, к примеру, плотность рабочего тела теплоносителя или какого-то конструкционного материала. Да, в некоторые подобные "специализированные программы" заложены ("вшиты") нужные базы данных по свойствам веществ, но, как правило, они довольно примитивны: содержат только константы и не учитывают, например, зависимости свойств от каких-то параметров (скажем, от температуры), не позволяют работать с новыми материалами, имеют ограниченный диапазон применения, да и просто-напросто устарели². Это объясняется желанием фирм-разработчиков удешевить программу. Так поступают, например, производители фотоаппаратов, которые пускают на рынок изделия с очень простыми и деше-

¹ А там есть специальный раздел по свойствам веществ, см. <http://communities.ptc.com/groups/properties-of-substances-for-mathcad>, созданный автором этой книги.

² Одна проектная организация купила когда-то некий программный комплекс, освоила его, успешно работает с ним и не хочет ничего менять: "лучшее — враг хорошего".

выми объективами. Покупатель вскоре это чувствует и вынужден приобрести дополнительно более дорогой объектив. С другой стороны, во многих проектных организациях запрещают "вручную" вводить в специализированные программы внешние данные по свойствам веществ, несмотря на то, что они могут быть намного "свежее" и/или точнее тех, которые "вшиты" в купленную программу. Это делается, в том числе, и из-за опасения, что при ручном вводе может проявиться тривиальная опечатка (сравним рис. 1.3 и 1.4) или перепутаны единицы измерения: нужны, например, джоули, а введены калории, в таблице температурная шкала была по Цельсию (см. табл. 1.1), а компьютер настроен на шкалу Кельвина либо (американская программа) на шкалу Ренкина или Фаренгейта.

В идеале должно происходить так. Если компьютеру нужны какие-то свойства каких-то веществ, то он должен сам автоматически отправить по компьютерной сети на некий "облачный" специализированный и сертифицированный сервер параметры этого вещества, а этот сервер должен вернуть на компьютер пользователя значение этого свойства при заданных параметрах.

Как это реализуется на практике? Приведем конкретный пример. Mathcad-документ с функцией, показанной на рис. 1.1, был размещен на сервере по адресу <http://twt.mpei.ac.ru/ТТНВ/Ro-p-t.xmcdz>. Если в прикладном расчете необходимо иметь значение плотности данного вещества в зависимости от давления и температуры, то пользователю достаточно *вставить* ссылку (рис. 1.5) на нужный Mathcad-документ (он показан на рис. 1.1) и функция $\rho(p, t)$ станет видимой в расчете.

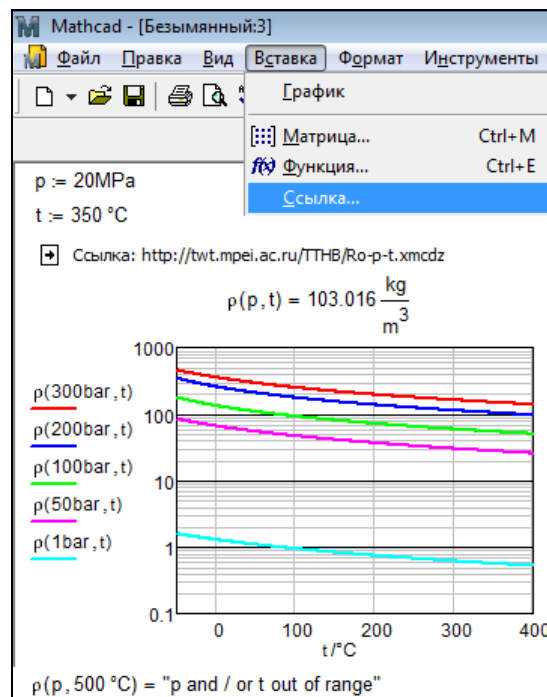


Рис. 1.5. Работаящая ссылка на внешний Mathcad-документ

На рис. 1.5 после операторов ввода данных по p и t стоит оператор ссылки на файл с именем Ro-p-t.xmcdz, хранящий "облачную" функцию $\rho(p, t)$. Эта функция затем вызвана при $p = 20$ МПа и $t = 350$ °С и дополнительно визуализирована семейством изобар. При $t = 500$ °С (а такая температура находится вне диапазона, охваченного табл. 1.1) функция $\rho(p, t)$ вернула текст — сообщение об ошибке³.

На расчетном сервере, который создан совместными усилиями специалистов Московского энергетического института (www.mpei.ru), Объединенного института высоких температур РАН (www.jiht.ru) и ООО "Триеру" (www.trie.ru)⁴, собрано большое количество подобных "облачных" функций, число которых непрерывно увеличивается. Эти функции создаются по разным мотивам и разными путями.

Во-первых, если автор видит в какой-либо книге или в Интернете таблицу, подобную табл. 1.1, то он поручает своим студентам "оживить" ее с помощью, например, программ, показанных на рис. 1.1 или 1.2. Достаточно только вставить в программу новую матрицу и сделать некоторые иные незначительные изменения. Если же в книге или Интернете даны формулы, по которым рассчитываются свойства веществ, то это существенно упрощает работу. Нами также разработана технология перевода *графиков* в "облачные" функции. Все эти приемы описаны в справочнике [3], который выпущен по гранту РФФИ пятым дополнительным томом справочной серии [4].

Во-вторых, такие "облачные" функции создаются по заказу пользователей Mathcad, работающих в области тепловой, атомной и промышленной энергетики. Так, например, были созданы и размещены на сервере функции по теплофизическим свойствам этанола для расчета паротурбинных циклов на органических рабочих телах (Organic Rankine cycle, ORC), по расчету холодильных установок [5] и др. Сам расчет цикла ORC размещен на сайте [http://twt.mpei.ac.ru/MCS/Worksheets/PTU/](http://twt.mpei.ac.ru/MCS/Worksheets/PTU/Rankin-Ethanole.xmcd)

Rankin-Ethanole.xmcd. По заказу были также созданы функции по свойствам двуокиси углерода CO₂. Это вещество при сверхкритических параметрах используется в компактных турбоустановках, утилизирующих сбросное тепло. На сайте <http://twt.mpei.ac.ru/MCS/Worksheets/PTU/CO2-cycle.xmcd> приведен пример онлайн-расчета такого цикла.

Основная часть "облачных" функций, размещенных на сервере МЭИ—ОИВТ—"Триеру", связана, естественно, со свойствами рабочих тел и теплоносителей энергетики. Эти функции описаны в справочнике [6], а технология их использования в расчетах — в статьях [7, 8]. Такие функции, связанные с водой и водяным паром (а это основное рабочее тело тепловой и атомной энергетики), базируются на формуляциях, утвержденных Международной ассоциацией по свойствам воды и водяного пара (IAPWS, см. www.iapws.org; автор этой книги в ней активно работает). Эти формуляции основаны не на табличных данных, а на формулах. Так, например,

³ К этому ограничению мы еще вернемся в разд. 1.4 "Экстраполяция".

⁴ На этот сервер можно зайти, если в поисковой машине Google сделать запрос по ключу "Расчеты в Интернете". При этом ссылка на этот сервер будет находиться на первых (высших) позициях. Такие же примерно результаты дают и другие поисковые машины Интернета. Это свидетельствует о том, что данный расчетный сервер МЭИ, ОИВТ РАН и ООО "Триеру" очень востребован. Надеемся, что после выхода в свет этой книги сервер станет еще более популярен.

давление и температура насыщения воды в интервале от тройной до критической точки связаны неявным квадратным уравнением (см. рис. 12.8 в *этюде 12*). Но на практике очень часто расчет по формулам заменяют интерполяцией по отдельным точкам. Поэтому-то мы данному вопросу уделяем особое внимание. Так поступают не только для расчета свойств на линии насыщения (функции одного аргумента), но и для отдельных однофазных областей — областей недогретой жидкости или перегретого пара (функции двух аргументов). Отказ от расчета по формулам и переход к работе с таблицами можно считать шагом назад в историческом процессе создания баз данных по свойствам веществ. На заре этого процесса такие базы данных публиковались в виде таблиц и/или графиков (визуализация таблиц), по которым инженеры и ученые, не имеющие в те времена наших современных вычислительных средств, считали, "водя пальцем" по таблице⁵ или по графику⁶. По таблице или графику "считать" без компьютера или калькулятора намного быстрее, чем по формулам. Потеря точности здесь была не так важна, тем более компьютер или калькулятор дают зачастую излишнюю точность. С появлением электронных вычислительных средств постепенно стали отходить от таблиц и графиков и переходить к формулам, а затем и к компьютерным программам, где эти формулы запрограммированы. Процесс же создания формуляции по еще не исследованному или вновь синтезированному веществу ведется сейчас так⁷: создается так называемая скелетная таблица свойств вещества путем проведения экспериментальных замеров различными *физическими* методами на экспериментальных стендах, а потом по этим дискретным табличным данным различными *математическими* методами генерируется одна общая функция или набор функции для различных областей с правилами их применения и с указанием погрешностей для использования в первую очередь в компьютерных программах — это и называется формуляциями. Но при этом по-прежнему часто публикуются только таблицы без их математической обработки. Имея под рукой мощные и удобные средства интерполяции — подобные встроенным в Mathcad (пример на рис. 1.1), можно отказаться от создания сложных уравнений состояния, охватывающих широкий диапазон параметров вещества, и ограничиться работой с таблицами в нужной для конкретных расчетов области. Интерполяцией заменяют работу с уравнениями состояния и по другой причине. При создании, например, тренажеров для персонала тепловых и атомных электростанций нужно знать параметры рабочих тел энергоблоков — воды и водяного пара, воздуха, топлива, продуктов сгорания и др. При этом необходимо, чтобы расчет свойств этих субстанций велся очень быстро даже за счет существенной потери точности. Дело в том, что эти расчеты должны вестись в онлайн-режиме, иначе пропадет весь смысл такого тренажера, т. к. расчет должен поспевать за реальными переходными процессами в энергоблоках. Интерполяция по точкам в ряде

⁵ Были даже специальные механические устройства типа логарифмической линейки, по которым можно было вести линейную интерполяцию по точкам таблицы или просто определять свойства веществ (например, массу авиационного топлива по его объему и температуре).

⁶ Так и сейчас нередко ведут расчеты: проводят на большой диаграмме состояния воды и водяного пара (*h*-*s*-диаграмме, например) различные изолинии, ставят на них точки, измеряют расстояния между ними.

⁷ Сейчас нередко поступают в обратном порядке: задают свойства веществ и по ним его синтезируют.

случаев ведется намного быстрее, чем счет по громоздким формулам, которые в ряде случаев представляют собой некий многочлен очень высокой степени, требующий длительного расчета.

Проблему функций по свойствам веществ, основывающихся на ранее созданных базах данных, можно обрисовать одной старой "вычислительной" ситуацией. Когда появились механические, а затем и электронные устройства, облегчающие и ускоряющие счет, исключаящие из них ошибки (логарифмическая линейка, арифмометр, простейший калькулятор и др.), то на них можно было выполнить только четыре элементарные арифметические действия — сложение, вычитание, умножение и деление. Если же в расчете нужно было вычислить, к примеру, квадратный корень или синус угла, то приходилось отрываться от счетного устройства и прибегать к справочным таблицам⁸: искать там нужные строки и столбцы, проводить при необходимости интерполяцию, учитывать, в чем измеряется угол — в градусах или радианах — и т. д. Все это существенно затрудняло и замедляло расчеты, повышало риск ошибок в них.

Сейчас такая ситуация часто повторяется при расчетах, включающих информацию по свойствам веществ. Да, эти расчеты ведутся, как правило, на компьютерах, но часто приходится отрываться от компьютера и заглядывать в справочник (бумажный или электронный), чтобы уточнить свойство какого-либо вещества, фигурирующего в расчете. Все это "существенно затрудняет и замедляет расчеты, повышает риск ошибок в них".

Проблема синуса и других элементарных и специальных функций (функций Бесселя, например) в электронных калькуляторах была решена путем встраивания таких функций в эти устройства. К современным математическим программам и языкам программирования можно подгружать пакеты расширений, включающие в себя не только дополнительные специальные функции (те же функции Бесселя), но и средства для решения специализированных задач: обработка сигналов и изображений, решение уравнений, статистическая обработка данных и т. д.

Встроить в современные счетные устройства *все* функции по *всем* свойствам *всех* веществ, конечно, нереально и нерационально. Нужно дать возможность делать видимыми только те функции, которые нужны в данный момент. Эта информационная технология нами опробована не только на пакете Mathcad, но и в других расчетных системах и описана в данной книге.

А теперь обрисуем некоторые нюансы этой работы.

⁸ Читатели старшего поколения сразу же вспомнят знаменитые таблицы Брадиса. Они, кстати, отсканированы и опубликованы в Интернете. Люди, склонные к ностальгии, могут ими воспользоваться. Есть в Интернете и виртуальные логарифмические линейки см. <http://communities.ptc.com/message/198472>.

1.2. Исходные данные нестандартной конфигурации

Программа, показанная на рис. 1.1, довольно простая вследствие того, что исходная прямоугольная матрица полностью заполнена. Если бы матрица была квадратной, то это бы еще упростило работу. Сплайн-интерполяция по квадратной матрице в среде Mathcad ведется парой операторов без привлечения инструментов программирования, показанных на рис. 1.1. Если же нужно охватить интерполяцией широкий диапазон параметров какого-то вещества, включающий твердую, жидкую и газообразную фазы, то соответствующая таблица свойств вещества (его плотности, например) будет "рассечена" линиями фазовых переходов. Такие таблицы, как правило, публикуются в различных справочниках по свойствам веществ, например [6]. В таких таблицах линия фазового перехода отмечена скачком значений свойства вещества от жидкости к пару. Кроме того, подобные таблицы нередко бывают заполнены только частично.

Нами разработана [9] эффективная технология интерполяции такого типа данных через разбивку их на отдельные области (частично заполненные матрицы), границы которых отображаются парами векторов (кривые, фиксирующие фазовые переходы), отдельными уравнениями и др. Подобная работа ведется и в Германии [10].

На рис. 1.6 показан пример частично заполненной матрицы. Слева — исходная матрица, справа — матрица с добавленными в нее для "гладкости" фиктивными значениями (они заключены в скобки). Эти дополнительные точки матрицы генерируются экстраполяцией значений реальных точек. Имея заполненную матрицу, несложно провести по ней интерполяцию, например, по алгоритму, показанному на рис. 1.1. Затем при вызове созданной таким образом функции двух аргументов нужно убедиться, что значения давления и температуры не выходят за рамки допустимых значений. Данные, отображенные на рис. 1.6, — это фрагмент таблицы плотности газового конденсата Астраханского месторождения (см. <http://twi.mpei.ac.ru/ТТНВ/2/GasCondensat.html>). Отсутствующие элементы матрицы (см. левую таблицу на рис. 1.6) или значения, обрамленные скобками, — это область начала кипения данного газового конденсата.

"t, K \ p, МПа"	0.1	1	3	5	"t, K \ p, МПа"	0.1	1	3	5
380	737.51	738.50	740.65	742.75	380	737.51	738.50	740.65	742.75
390	"."	730.87	733.75	735.38	390	(728.66)	730.87	733.75	735.38
400	"."	723.16	725.59	727.95	400	(722.04)	723.16	725.59	727.95
410	"."	715.39	717.97	720.48	410	(714.21)	715.39	717.97	720.48
420	"."	707.53	710.28	712.95	420	(706.27)	707.53	710.28	712.95
430	"."	699.58	702.52	705.35	430	(698.22)	699.58	702.52	705.35
440	"."	691.54	694.68	697.69	440	(690.08)	691.54	694.68	697.69
450	"."	683.38	686.74	689.96	450	(681.82)	683.38	686.74	689.96
460	"."	675.11	678.71	682.15	460	(673.43)	675.11	678.71	682.15
470	"."	666.71	670.57	674.25	470	(664.91)	666.71	670.57	674.25
480	"."	658.16	662.32	666.26	480	(656.21)	658.16	662.32	666.26
490	"."	649.44	653.93	658.16	490	(647.32)	649.44	653.93	658.16
500	"."	640.55	645.40	649.95	500	(638.26)	640.55	645.40	649.95
510	"."	"."	636.70	641.61	510	(628.96)	(631.44)	636.70	641.61
520	"."	"."	627.83	633.13	520	(619.41)	(622.12)	627.83	633.13
530	"."	"."	618.74	624.48	530	(609.56)	(612.52)	618.74	624.48
540	"."	"."	609.43	615.66	540	(599.37)	(602.63)	609.43	615.66
550	"."	"."	599.85	606.64	550	(588.78)	(592.39)	599.85	606.64

Рис. 1.6. Не полностью заполненная матрица (слева) и матрица с фиктивными числами (справа)

В незаполненные ячейки таблицы можно поместить системную переменную NaN (Not a Number — не число) — см. рис. 1.7. В этом случае интерполяцию сплайнами проводить нельзя, но можно вести *линейную интерполяцию* с помощью встроенной в Mathcad функции `linterp`. Линейная интерполяция имеет то преимущество перед интерполяцией сплайнами, что при линейной интерполяции не наблюдается осцилляции (рис. 1.8).

На рис. 21.5 в *этюде 21* показано, как можно обработать точки таблицы по теплопроводности материалов, захватывая не весь допустимый диапазон температур ("нельзя объять необъятное"), а некий рабочий диапазон, для которого необходимо получить нужную температурную зависимость — линейную, например.

Исходные данные для таблиц можно брать не только из справочников и Интернета, но и из других программ. Так, данные по свойствам этанола для расчета упомянутого выше паротурбинного цикла на органическом рабочем теле (ORC) и некото-

```

ρNaCl(t, ω) := "Density of NaCl aqueous solution as function of temperature and mass ratio"
               "Density of NaCl aqueous solution at t=20°C from one separate table"

(x ←  $\frac{t}{K} - 273.15$  y ← 100·ω)

return "t or/and mass ratio is out of the range" if x > 20 ∨ x < -15
return "t or/and mass ratio is out of the range" if y > 25 ∨ y < 10
return "t or/and mass ratio is out of the range" if x < -5 ∧ y < 15
return "t or/and mass ratio is out of the range" if x < -10 ∧ y < 19
return "t or/and mass ratio is out of the range" if x < -10 ∧ y > 24

M ← 

| "t, °C / ω, %" | 10   | 11   | 12   | 13   | 14   | 15   | 16   | 17   | 18   | 19   | 20   | 21   | 22   | 23   | 24   | 25   |
|----------------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| 20             | 1071 | 1078 | 1086 | 1093 | 1101 | 1109 | 1116 | 1124 | 1132 | 1140 | 1148 | 1156 | 1164 | 1172 | 1180 | 1189 |
| 15             | 1075 | 1082 | 1089 | 1098 | 1103 | 1111 | 1119 | 1127 | 1134 | 1141 | 1151 | 1160 | 1168 | 1174 | 1184 | 1193 |
| 0              | 1078 | 1086 | 1093 | 1101 | 1108 | 1116 | 1124 | 1133 | 1141 | 1147 | 1158 | 1165 | 1174 | 1181 | 1191 | 1199 |
| -5             | 1079 | 1089 | 1095 | 1102 | 1110 | 1117 | 1125 | 1134 | 1142 | 1148 | 1160 | 1168 | 1176 | 1183 | 1194 | 1202 |
| -10            | NaN  | NaN  | NaN  | NaN  | NaN  | 1119 | 1125 | 1135 | 1144 | 1149 | 1162 | 1169 | 1178 | 1185 | 1196 | 1204 |
| -15            | NaN  | NaN  | NaN  | NaN  | NaN  | NaN  | NaN  | NaN  | NaN  | 1151 | 1163 | 1171 | 1180 | 1187 | 1198 | NaN  |



X ← reverse(submatrix(M, 1 + ORIGIN, 6 + ORIGIN, ORIGIN, ORIGIN))
Y ← submatrix(M, ORIGIN, ORIGIN, 1 + ORIGIN, 16 + ORIGIN)T
Z ← submatrix(M, ORIGIN + 1, ORIGIN + 6, 1 + ORIGIN, 16 + ORIGIN)
for i ∈ ORIGIN..cols(Z) - 1 + ORIGIN
  Zvi ← linterp(X, reverse(Z(i)), x)
linterp(Y, Zv, y) ·  $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ 

```

Рис. 1.7. Не полностью заполненная матрица со значениями NaN и с линейной интерполяцией (линия начала и конца программы показана ломанной для экономии места)

рых хладагентов (см. *этюд 19*) были взяты из программы RefProp [11]. Эту программу можно через механизм DLL (Dynamic Link Library) напрямую подключить к Mathcad. Но эта технология работает не со всеми версиями Mathcad, да и мало кто умеет это делать. Поэтому (альтернативно) можно применить технологию, описанную рис. 1.1 и 1.6. Делается это так. В среде RefProp генерируются нужные векторы или матрицы, которые вставляются в Mathcad-функции, подобные той, что показана на рис. 1.1. Получается функция, которая возвращает нужное свойство вещества с нужными размерностями и имеет размерные аргументы, но работает не с уравнениями состояния, скрытыми в программе RefProp, а с табулированными данными, которые можно просмотреть и в случае необходимости отредактировать. На рис. 1.9 отображен процесс генерации в среде RefProp матрицы с двумя столбцами, хранящими температуру и давление этанола на линии насыщения. В таблице (она слева на рис. 1.9) достаточно выделить нужный фрагмент, скопировать его и вставить в Mathcad-документ (правая часть рис. 1.9), в котором числа преобразовались в строки (цепочки символов, заключенные в кавычки, в которых нужно будет глобальной заменой убрать запятые и поставить точки, а потом Mathcad-функцией `str2num` перевести в числа). Другой способ прямого получения чисел в Mathcad-

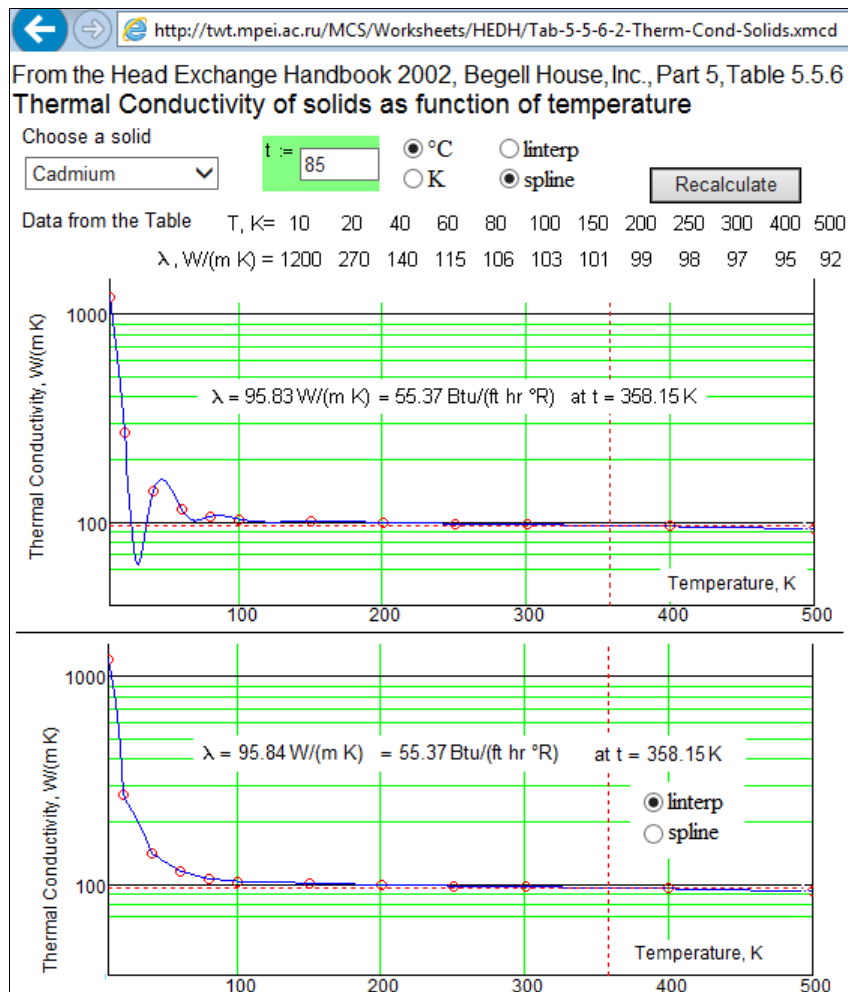


Рис. 1.8. Сравнение интерполяции сплайном и линейной интерполяции: осцилляция

документе из программ типа RefProp — перенос данных в таблицу Excel, которую нужно будет внедрить в Mathcad-расчет. Таблицы исходных данных, подобные той, которая показана слева на рис. 1.9, часто можно встретить и в Интернете. Их несложно перенести в Mathcad-документ приемами, описанными выше. Тут основная "возня" будет вокруг проблемы "точка или запятая как десятичный разделитель". Создание же функции по таблице с двумя столбцами не составляет особого труда.

Сетку значений свойств вещества в таблице, подготовленной к интерполяции, можно делать более частой для повышения точности расчетов или более редкой для уменьшения объема занимаемой памяти компьютера и для повышения скорости счета. Кстати, о памяти компьютера. Раньше она была одним из главных лимитирующих факторов работы с компьютером. Из-за этого отказывались от интерполяции, требующей хранения в оперативной памяти компьютера больших массивов данных, и переходили к работе по уравнениям состояния. Сейчас это ограничение практически снято.

2: ethanol: V/L sat. T=260, to 510, K

	Temperature (K)	Pressure (MPa)
1	260,00	0,00061048
2	265,00	0,00089527
3	270,00	0,0012928
4	275,00	0,0018399
5	280,00	0,0025823
6	285,00	0,0035770
7	290,00	0,0048932
8	295,00	0,0066146
9	300,00	0,0088408
10	305,00	0,011690
11	310,00	0,015298
12	315,00	0,019826
13	320,00	0,025456
14	325,00	0,032394
15	330,00	0,040875
16	335,00	0,051162
17	340,00	0,063544
18	345,00	0,078343

M :=

"Temperature" "(K)"	"Pressure" "(MPa)"
"260,00"	"0,00061048"
"265,00"	"0,00089527"
"270,00"	"0,0012928"
"275,00"	"0,0018399"
"280,00"	"0,0025823"
"285,00"	"0,0035770"
"290,00"	"0,0048932"
"295,00"	"0,0066146"
"300,00"	"0,0088408"
"305,00"	"0,011690"
"310,00"	"0,015298"
"315,00"	"0,019826"
"320,00"	"0,025456"
"325,00"	"0,032394"
"330,00"	"0,040875"
"335,00"	"0,051162"
"340,00"	"0,063544"

Рис. 1.9. Копирование данных из программы RefProp

1.3. Создание обратных функций

Если зависимость одного параметра от другого однозначная, то можно сразу создать две функции — прямую и обратную.

Встроенные в Mathcad средства решения уравнений и поиска нулей функций позволяют легко и быстро создавать *обратные* функции по свойствам веществ с более сложной (не однозначной) зависимостью, а также по зависимостям трех и более параметров. Вернемся к нашей задаче о плотности вещества в зависимости от давления и температуры (см. рис. 1.1). В конкретных расчетах часто приходится решать обратные задачи — находить давление по плотности и температуре или температуру по плотности и давлению. Если уравнение состояния известно, то в такой ситуации можно попытаться аналитически решить его и найти обратные функции — модифицированные (дополнительные) уравнения состояния. Но можно поступить и по-другому (рис. 1.10).

В среде Mathcad есть встроенная функция `root`, возвращающая нуль другой, анализируемой функции методом половинного деления (см. п. 1 на рис. 1.10) или методом секущих (см. там же п. 2). В первом случае для численного решения задачи нужно указать диапазон возможных значений искомого параметра, т. е. температуры, если иметь в виду п. 1 на рис. 1.10, а во втором — начальное приближение к искомому параметру — к давлению (см. п. 2 на рис. 1.10).

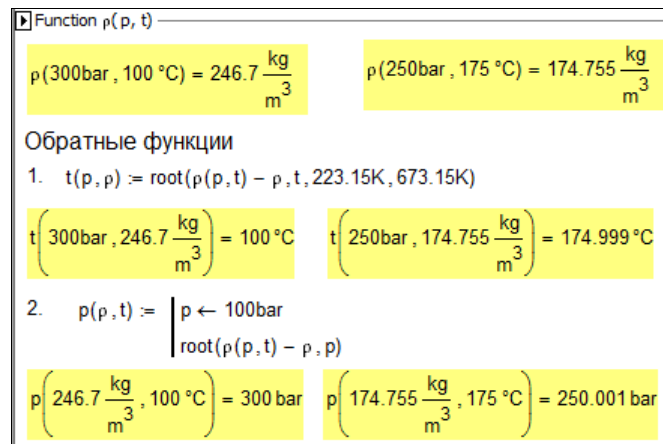


Рис. 1.10. Создание обратных функций

Наша функция, создание которой отображено на рис. 1.1, непрерывная и монотонная по каждому из параметров в выбранной области. При работе с более сложными функциями состояния веществ следует понимать, что для таких функций либо совсем не существует обратных, либо обратных функций несколько (причем все они имеют одну и ту же область определения, но различные области значений). В этом случае при заданных параметрах потребуются точно знать, какую обратную функцию мы будем искать. В создаваемой обратной функции необходимо будет предусмотреть дополнительный аргумент — начальное приближение к нужному решению. Если же теоретически доказано, что в исследуемой области обратная функция определена единственным образом, то при любом начальном приближении или даже вовсе без него мы получим один и тот же результат. Для существования и однозначности построения обратной функции одной переменной достаточно ее (функции) строгая монотонность. В общем случае поиск обратной функции является сложной математической задачей. Приведем конкретный пример. Если попытаться определить давление воды и/или водяного пара по температуре и удельной энтальпии, то можно оказаться либо в однофазной области (вода под давлением), либо в двухфазной (влажный пар). Эта ситуация описана в *этой* 5, где строится кривая сжатия воды в Th -диаграмме.

Иногда полезно в качестве первого приближения при расчете значений по обратной функции использовать случайное число в оговоренном диапазоне. На рис. 1.11 показано построение в среде Mathcad семейства показателей изоэнтропы (χ — отношение изобарной теплоемкости к изохорной теплоемкости) водяного пара для значений χ : 1.26, 1.27 и т. д. до 1.4. Функция wsp_{PTK} строится на основе функции wsp_{KPT} , входящей в пакет WaterSteamPro (см. www.wsp.ru). Функция wsp_{PTK} возвращает разные значения в зависимости от первого приближения. Генератор случайных чисел помог нам построить требуемое семейство кривых, хотя по сути это не кривые, а новые семейства точек с разрывами в тех местах, где пакет Mathcad не смог найти решения функцией root .

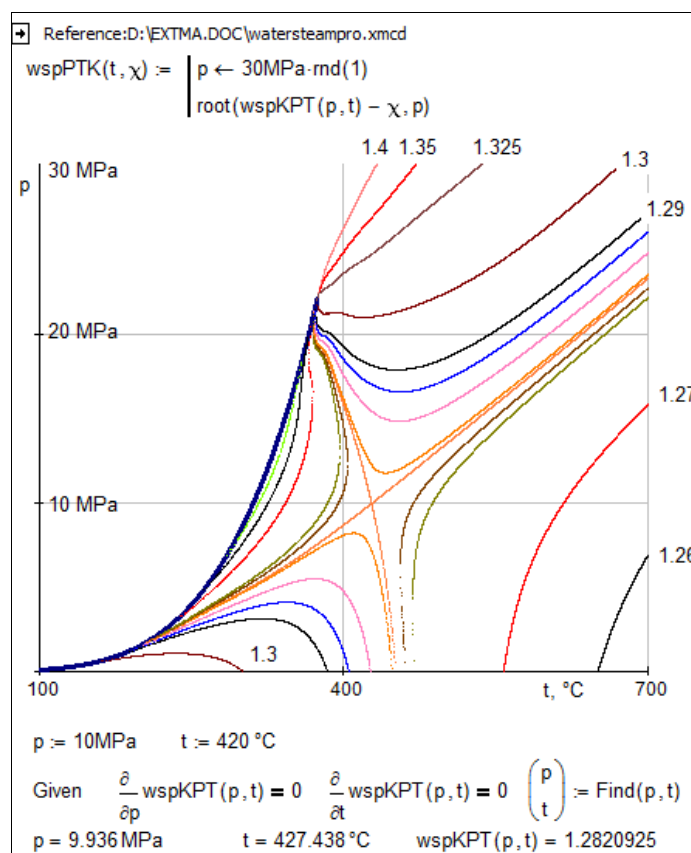


Рис. 1.11. Построение семейства показателей изоэнтропы

На рис. 1.11 так же, как и на рис. 1.10, для создания обратной функции используется встроенная в Mathcad функция `root`. Но в качестве первого приближения задаются случайные значения давления в интервале от 0 до 30 МПа. Это обеспечивает встроенная в Mathcad функция `rnd`, возвращающая случайное число в интервале от нуля до значения своего аргумента. На рис. 1.11 также блоком `Given-Find` найдены значения давления и температуры, при которых частные производные функции `wspKPT` равны нулю. В математике эта точка называется седлом.

У рис. 1.11 интересная история. Один преподаватель МЭИ пообещал студентам, что он поставит на экзамене шестерку (не пятерку и не пятерку с плюсом, а именно шестерку) тому, кто построит с помощью Mathcad данное семейство кривых. Преподаватель был на 100% уверен, что это можно сделать только с помощью более мощных программ. Студенты сами не смогли это сделать и обратились к автору данной книги за помощью. Задача была решена, но шестерку на экзамене студенты не получили, т. к. признались в посторонней помощи.

Тема создания обратных функций будет продолжена в *этиоде 11*.

1.4. Экстраполяция

С проблемой создания обратных функций тесно связана проблема *экстраполяции*. И вот почему.

В программу, показанную на рис. 1.1, вставлен оператор, пресекающий вычисления, если исходные данные не попадают в оговоренный диапазон значений давления и/или температуры. Это, с одной стороны, хорошо, а с другой — плохо. Хорошо потому, что это отсекает вероятные огрехи пользователя, который может по ошибке или намеренно ввести неверные данные и получить неверный ответ — результат экстраполяции, а не интерполяции. Но, с другой стороны, такое ограничение может мешать процедуре вычисления обратных функций (*см. выше*). Дело в том, что при реализации численных алгоритмов поиска нуля функции можно выходить за оговоренные пределы функции при промежуточных итерациях, получая при этом вполне корректный ответ. В связи с этим в "облачные" функции по свойствам веществ можно ввести дополнительный аргумент, разрешающий или исключающий экстраполяцию. Этот прием проиллюстрирован последующими четырьмя рисунками.

На рис. 1.12 показана таблица, "выуженная" из Интернета по ключевым словам "Плотность раствора NaCl". (Кстати, на рис. 1.12 в заголовке таблицы стоит ссылка

Зависимость плотности растворов хлористого натрия различной концентрации от температуры [34]

Содержание соли, %	ρ (в кг/м^3) при температуре, °C				
	15	0	-5	-10	-15
10	1075	1078	1079	—	—
11	1082	1086	1087	—	—
12	1089	1093	1095	—	—
13	1098	1101	1102	—	—
14	1103	1108	1110	—	—
15	1111	1116	1117	1119	—
16	1119	1124	1125	1125	—
17	1127	1133	1134	1135	—
18	1134	1141	1142	1144	—
19	1141	1147	1148	1149	1151
20	1151	1158	1160	1162	1163
21	1160	1165	1168	1169	1171
22	1168	1174	1176	1178	1180
23	1174	1181	1183	1185	1187
24	1184	1191	1194	1196	1198
25	1193	1199	1202	1204	—

Рис. 1.12. Таблица из Интернета

на литературный источник [34], но этот источник на данном сайте (http://thermalinfo.ru/publ/zhidkosti/voda_i_rastvory/teplofizicheskie_svoystva_vodnykh_rastvorov_khloristogo_natrija_i_kalcija/32-1-0-225) не прописан.)

На рис. 1.13 показана Mathcad-программа, возвращающая интерполяционные значения плотности водного раствора NaCl в зависимости от его температуры и концентрации, вернее, массовой доли (процента). Рисунок 1.12 — это отсканированная таблица бумажной книги, которую нужно перевести в "цифровой" вид — в таблицу Excel или в матрицу Mathcad, что выполняется с помощью специальных программ распознавания текстов. Но если качество исходного "рисунка" таблицы низкое или сама таблица не очень объемная, то такую работу можно сделать "вручную". (В Национальном институте стандартов и технологий, который уже упоминался в этом этюде, летом целая группа студентов парами занимается этой ручной работой. Один студент диктует таблицу, а второй вводит цифры в компьютер. При этом пер-

```

ρNaCl(t, ω, Check) :=  $\left( x \leftarrow \frac{t}{K} - 273.15 \quad y \leftarrow \frac{\omega}{\%} \right)$ 
if Check
  Err ← "t и/или ω вне диапазона"
  return Err if x > 15 ∨ x < -15 ∨ y < 10 ∨ y > 25
  return Err if x < -5 ∧ y < 15
  return Err if x < -10 ∧ y < 19
  return Err if x < -10 ∧ y > 24
M ←  $\left( \begin{array}{c} \text{"ω, \% \ t, °C"} \\ 10 \quad 1075 \quad 1078 \quad 1079 \\ 11 \quad 1082 \quad 1086 \quad 1089 \\ 12 \quad 1089 \quad 1093 \quad 1095 \\ 13 \quad 1098 \quad 1101 \quad 1102 \\ 14 \quad 1103 \quad 1108 \quad 1110 \\ 15 \quad 1111 \quad 1116 \quad 1117 \quad 1119 \\ 16 \quad 1119 \quad 1124 \quad 1125 \quad 1125 \\ 17 \quad 1127 \quad 1133 \quad 1134 \quad 1135 \\ 18 \quad 1134 \quad 1141 \quad 1142 \quad 1144 \\ 19 \quad 1141 \quad 1147 \quad 1148 \quad 1149 \quad 1151 \\ 20 \quad 1151 \quad 1158 \quad 1160 \quad 1162 \quad 1163 \\ 21 \quad 1160 \quad 1165 \quad 1168 \quad 1169 \quad 1171 \\ 22 \quad 1168 \quad 1174 \quad 1176 \quad 1178 \quad 1180 \\ 23 \quad 1174 \quad 1181 \quad 1183 \quad 1185 \quad 1187 \\ 24 \quad 1184 \quad 1191 \quad 1194 \quad 1196 \quad 1198 \\ 25 \quad 1193 \quad 1199 \quad 1202 \quad 1204 \end{array} \right)$ 
X ← reverse(submatrix(M, 0, 0, 1, 5)T)
Y ← submatrix(M, 1, 16, 0, 0)
Z ← submatrix(M, 1, 16, 1, 5)
for i ∈ 0..cols(Z) - 1
  Zvi ← interp(cspline(Y, Z(i)), Y, Z(i), y)
interp(cspline(X, reverse(Zv)), X, reverse(Zv), x) ·  $\frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ 

```

Рис. 1.13. Программа сплайн-интерполяции

вый студент попеременно переключает свой взгляд с бумаги на дисплей для контроля правильности ввода данных таблицы.)

Матрица **M**, показанная на рис. 1.13, не полностью заполнена, т. к. она повторяет данные, записанные в таблице, показанной на рис. 1.12. Но это не совсем так — на "пустых" местах матрицы **M** стоят "фиктивные" числа, прописанные белым по белому. Эта технология работы с нестандартными данными описана в [9] (на рис. 1.6 такие данные прописаны "черным по белому", но заключены в скобки).

В функцию ρ_{NaCl} вставлены операторы, отсекающие неверные исходные данные, если третий аргумент функции *check* имеет значение 1 (не ноль). Это зафиксировано на рис. 1.14.

$$\begin{aligned} \rho_{\text{NaCl}}(10\text{ }^\circ\text{C}, 10.5\%, 1) &= 1080.78 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \\ \rho_{\text{NaCl}}(-15\text{ }^\circ\text{C}, 7\%, 0) &= 507.47 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \\ \rho_{\text{NaCl}}(-15\text{ }^\circ\text{C}, 7\%, 1) &= \text{"t и/или } \omega \text{ вне диапазона"} \end{aligned}$$

Рис. 1.14. Вызов функции с проверкой и без проверки выхода за оговоренный диапазон

На рис. 1.14 показаны три вызова функции ρ_{NaCl} : "нормальный" вызов, когда аргумент функции находится в допустимых диапазонах температуры и концентрации раствора NaCl, "ложный", когда третий аргумент *check* равен 0 и когда функция ρ_{NaCl} выдает неверное, экстраполяционное значение, и случай отсечения неверного, ложного ответа.

На рис. 1.15 показан процесс создания обратной функции на базе функции ρ_{NaCl} . Новая функция ω_{NaCl} возвращает значение концентрации раствора NaCl в зависимости от его температуры и плотности (в раствор NaCl опустили термометр и ареометр и хотят узнать его концентрацию). Если в функции ρ_{NaCl} включена проверка исходных данных, но обратная функция не работает.

$$\begin{aligned} \omega_{\text{NaCl}}(t, \rho) &:= \begin{cases} \omega \leftarrow 20\% \\ \text{root}(\rho_{\text{NaCl}}(t, \omega, 1) - \rho, \omega) \end{cases} & \omega_{\text{NaCl}}\left(-10\text{ }^\circ\text{C}, 1185 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) = \blacksquare \\ \omega_{\text{NaCl}}(t, \rho) &:= \begin{cases} \omega \leftarrow 20\% \\ \text{root}(\rho_{\text{NaCl}}(t, \omega, 0) - \rho, \omega) \end{cases} & \omega_{\text{NaCl}}\left(-10\text{ }^\circ\text{C}, 1185 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) = 23\% \end{aligned}$$

Значение должно быть скаляром или матрицей.

Рис. 1.15. Создание обратной функции

Созданную обратную функцию можно дополнить операторами, отсекающими неверные ответы (рис. 1.16). Эта функция определяет концентрацию раствора NaCl в зависимости от его температуры и плотности без ограничений, т. к. третий аргумент функции ρ_{NaCl} равен нулю. Но перед выводом ответа ведется контроль, нахо-

дятся ли значения аргументов функции ω_{NaCl} и значения самой функции в разумном диапазоне. По значению плотности такой контроль ведется частично: проверяется, не выпадает ли значение плотности из диапазона минимального (1075 кг/м^3) и максимального (1204 кг/м^3) значений — см. таблицу на рис. 1.12 и матрицу на рис. 1.13.

The image shows a Mathcad function definition for $\omega_{\text{NaCl}}(t, \rho)$. The function is defined as follows:

```

 $\omega_{\text{NaCl}}(t, \rho) := \omega \leftarrow \text{root}(\rho_{\text{NaCl}}(t, \omega, 0) - \rho, \omega, 10\%, 25\%)$ 
return error("t must be from -15 to 15°C") if  $t > 15^\circ\text{C} \vee t < -15^\circ\text{C}$ 
return error("ω must be from 10 to 25%") if  $\omega < 10\% \vee \omega > 25\%$ 
return error("ρ must be from 1075 to 1204 kg/m³") if  $\rho < 1075 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3} \vee \rho > 1204 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$ 
return  $\omega$ 

```

Below the definition, there are two examples of function calls:

- A successful call: $\omega_{\text{NaCl}}\left(10^\circ\text{C}, 1100 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) = 12.971\%$
- An error call: $\omega_{\text{NaCl}}\left(17^\circ\text{C}, 1100 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) = \blacksquare\%$. Below this call, a yellow error message box displays: "t must be from -15 to 15°C".

Рис. 1.16. Обратная функция с контролем ответа

ПРИМЕЧАНИЕ

Два нюанса можно отметить в функции, показанной на рис. 1.16. Во-первых, функция `root` ищет нуль функции не вблизи точки (20%, как на рис. 1.15), а на интервале от 10 до 25%. Во-вторых, функция, создание которой отображено на рис. 1.16, при ошибочных данных возвращает не текст, а пользовательское сообщение с детализацией сути ошибки.

Кстати, об экстраполяции в среде Mathcad. Функция с корнем в имени `spline` (см. рис. 1.1) может иметь три предлога (префикса) — *l* (эль), *p* и *c*: `lspline`, `pspline` и `cspline`. Эти префиксы означают линейную (*l*), квадратную (параболическую — *p*) и кубическую (*c*) экстраполяцию. Внутри же области табличных данных интерполяция ведется кубическими сплайнами.

1.5. Люди эксперимента и люди на (над) эксперименте (экспериментом)

Одного из авторов этой книги часто упрекают в том, что он "в своей жизни не провел ни одного замера свойств веществ, а занимается только тем, что берет чужие опубликованные экспериментальные данные, обрабатывает их и размещает на своем сервере в виде онлайн-расчетов или "облачных" функций". Иногда этот упрек облачают в более грубую форму. Мол, "стучать по клавишам компьютера — это каждый <тут пропущено одно довольно грубое слово> может, а ты вот попробуй провести эксперимент!" Эти упреки можно продолжить. Человека, проводящего эксперименты на стенде и замеряющего какие-то свойства вещества, можно упрекнуть примерно так: "Проводить эксперименты на готовом стенде — это каждый

<...> может. А ты вот попробуй сам собрать и наладить подобный стенд!" "Собрать и наладить стенд по исследованию свойств веществ, опираясь на известные методы, — это каждый <...> может, а ты вот попробуй придумать и реализовать новый метод изучения этих свойств!" и т. п.

Уже довольно давно и не только на производстве, но и в научной сфере происходит некий процесс разделения труда. Есть научные организации (например, уже упоминавшийся NIST — Национальный институт стандартов и технологий в США), которые наряду с исследованием свойств индивидуальных веществ занимаются сбором со всего мира ранее полученных чужих данных, их обработкой и созданием на их основе бесплатных или коммерческих программных продуктов — баз данных по свойствам веществ. Конкретным примером является уже упоминавшаяся программа RefProp. Тут главное — не выдавать чужие данные за свои и четко прописывать, откуда взяты эти данные. Но это сделать не так-то просто. Почему? В некоем справочнике есть таблица данных по свойствам веществ. И их берут в создаваемую программу и указывают, откуда они взяты. Все, вроде бы, корректно. Но потом оказывается, что в справочнике, на который сослались, сказано, что эта таблица взята из другого справочника, а в этом "другом справочнике" есть новая ссылка на еще один источник и т. д. Иногда кажется, что некую широко распространенную таблицу свойств вещества заполнил сам Создатель вещества.

Автор этой книги, кстати, на заре своей научной карьеры занимался экспериментом, т. е. сам собирал стенд и проводил на нем опыты. Но потом волею судеб был вынужден серьезно заняться вычислительной техникой. Эта работа его увлекла и позволила кое-чего добиться. Когда этот автор слышит слова о том, что "по клавишам компьютера каждый <...> может стучать", то он отвечает (обычно не вслух, а мысленно, про себя) примерно так: "И на готовом лабораторном стенде может каждый <...> работать, а ты вот попробуй создать программу, которая будет иметь успех — и научный, и коммерческий, например, программу RefProp [12], ThermoData Engine [13] или WaterSteamPro [14]". В научном процессе создания баз данных по свойствам веществ и доведения их до компьютеризированных пользователей участвует много различных специалистов. Все работы хороши! Главное, чтобы эта работа выполнялась профессионально и отвечала принципам научной этики. Можно изучать не только природу, но "вторую" природу, в частности программы, созданные людьми.

Естествоиспытатель, желающий познать окружающий мир, не может прямо обратиться к Создателю — к Богу или к Природе (кто как для себя считает), а должен задавать вопросы самому объекту исследования, т. е. должен проводить эксперимент — вносить в объект возмущения и фиксировать реакцию на них.

У программы есть авторы. Их имена далеко не всегда указаны на коробках, дисках и в документации, но они есть. Следовательно, какие-либо эксперименты над программами излишни. Возникающие вопросы нужно адресовать либо документации, либо самим авторам. Но! Если пользователю, к примеру, потребуется уточнить, в градусах или в радианах измеряется аргумент синуса, то он не будет рыться в документации, а просто напишет $x := \sin(30)$ и посмотрит, чему окажется равна переменная x . Подобные эксперименты пользователи ставят ежедневно, обращаясь

к документации только в особо сложных случаях и, как правило, не находя там ответа. Обращение же к Создателю проблематично. На hot-line сидят не авторы, а продавцы программ, что, как понимает читатель, далеко не одно и то же. Консультант фирмы, скорее всего, попросит вас перезвонить через пару дней, за которые он проведет свой эксперимент над программой и попытается найти ответ. Да и обращение к самому автору часто ничего не дает, т. к. он уже забыл свое детище и всецело поглощен новым проектом. Если даже это не так, то автор может и не помнить всех свойств, а уж тем более нюансов своего творения.

Из-за этого при работе с программами пользователь часто забывает, что это продукт ума и рук человеческих (Природа сотворенная), полагая (на уровне подсознания и эмоций), что это плод работы анонимного и недоступного Создателя (Природа творящая), у которого нет hot-line. (Здесь, по-видимому, и кроется философское объяснение (но ни в коем случае не оправдание) широкого распространения нелегального копирования программ. Тут речь идет об относительно честных людях, ставящих на свой компьютер программу с диска, флешки или из Интернета, чтобы познать Природу и передать свои знания, например, студентам.)

Можно считать, что Создатель, бросив сверху яблоко и угодив им по голове Ньютона, приоткрыл нам одну из тайн своего Божественного Замысла. Заслуга гения (Ньютона) заключается в умении оказаться в нужном месте в нужное время. Программы (и не только гениальные) как бы тоже падают к нам сверху, и человек не обязан за них платить сумасшедшие по российским меркам деньги. Отсюда и живучесть идеи shareware, которой противятся в первую очередь продавцы, а не авторы программ.

Можно считать, что Бог создал не только человека, но и компьютер. Написание для него программы — это вдыхание души в безжизненное нагромождение железок. Торговля телом (трансплантация органов, переливание крови или, наконец, проституция) — реалии наших дней. Покупка и продажа души встречается только в сказках и художественной литературе (история Фауста, например). Приобретая программный продукт, мы опять же покупаем только "тело" — диски, документацию, информацию и скидки по новым версиям, а главное, слепопродажный сервис.

Отсюда следует вывод, подытоживающий наши вышеприведенные рассуждения. Эксперименты над программами типа RefProp [12], ThermoData Engine [13], WaterSteamPro [14] или Themoflow (см. введение) имеют такое же право на жизнь, как и классические эксперименты.

1.6. Еще раз: почему Mathcad?

Часто можно услышать такое утверждение (еще один упрек автору), что, мол, Mathcad — это "несерьезная" программа, годящаяся только для школьников или студентов. Инженеры и научные сотрудники должны работать с более серьезными программами, например с MATLAB.

Что тут можно сказать? Во-первых, MATLAB — это, как уже было сказано в *предисловии*, язык программирования, вернее, язык программирования технических

расчетов. Это не скрывает и сама фирма-разработчик MathWorks (www.mathworks.com). Mathcad же — это в первую очередь инженерный калькулятор с интерфейсом, максимально приближенным к "интерфейсу" расчетов, записанных на бумаге, а потом уже некий инструмент программирования.

Чтобы освоить пакет MATLAB, нужно фактически освоить вторую специальность — специальность программиста. Порог же вхождения в среду Mathcad почти незаметен: научно-технический работник или инженер, сев впервые за компьютер с программой Mathcad, уже через несколько часов начинает решать довольно сложные задачи: рассчитывать по формулам с привлечением единиц измерения (MATLAB, повторяем, это делать не может), решать уравнения и системы уравнений, строить сложные графики и диаграммы и т. д. И все это без малейшей потери квалификации в своей основной специальности. Пакет же MATLAB без специальных курсов или "толстых" учебников освоить весьма затруднительно. Из-за этого с этим пакетом часто работает не один человек, а двое. Первый специалист (прикладник) формирует задачу, а второй (знаток пакета MATLAB) переводит эту задачу на язык компьютера. А в такой цепочке (прикладник—программист—компьютер) часто бывают сбои и нестыковки. Если же убрать посредника, то специалисту-прикладнику придется серьезно "везжать" в программирование с неизбежной "потерей квалификации в своей основной специальности". Есть, конечно, исключения из этого правила, но они единичные.

Пакеты MATLAB и Mathcad не нужно сравнивать. Никто не мешает специалисту-прикладнику работать и с пакетом Mathcad, и с пакетом MATLAB. Более того, работая с Mathcad, можно автоматически передавать данные в MATLAB, там их обрабатывать, используя специализированные инструменты MATLAB⁹, и возвращать новые данные в Mathcad. Такая технология, кстати говоря, отработана на табличном процессоре Excel — еще одной программной среде, которую часто используют для научно-технических расчетов, хотя она предназначена в первую очередь для бухгалтерских расчетов.

Пакет Mathcad очень хорош для работы такого рода. Нужно сделать некую прикидку, черновой расчет какого-то процесса, аппарата или технологии. Здесь в интерактивном непрерывном взаимодействии работают знания и интеллект человека и быстрота и точность компьютера. А если к этому процессу подключить базу данных по свойствам веществ, то такая творческая работа становится весьма продуктивной, в чем, мы надеемся, читатель убедится весьма скоро.

1.7. Температурные шкалы

В таблице, помещенной в начале этюда (см. табл. 1.1 и рис. 1.3), использовалась температурная шкала Цельсия. Это не совсем типичный случай. Обычно такие таблицы опираются на абсолютную температуру — на шкалу Кельвина. Работа по различным температурным шкалам (Кельвина, Ренкина, Цельсия, Фаренгейта, а

⁹ Многие из них созданы и для Mathcad, но их нужно искать и потом осваивать.

иногда и Реомюра) часто приводит к путанице и ошибкам при работе с таблицами. Пакет Mathcad со своим инструментарием работы с единицами измерения существенно облегчает эту работу. Кроме этого, нужно помнить, что старые таблицы, графики и формулы, отображающие свойства веществ, могут опираться на температурную шкалу 1968 года (ITS-68). В настоящее время используется новая шкала 1990 года ITS-90. К набору "облачных" функций по свойствам веществ приложена пара функций, обеспечивающих пересчет температур по новой (ITS-90) и старой (ITS-68) шкалам, что исключает возможные ошибки при использовании старых, но, тем не менее, востребованным данных. На сайте <http://twt.mpei.ac.ru/PVNB/pvnb.html> Web-версии справочника "Физические величины" (М.: Энергоатомиздат,

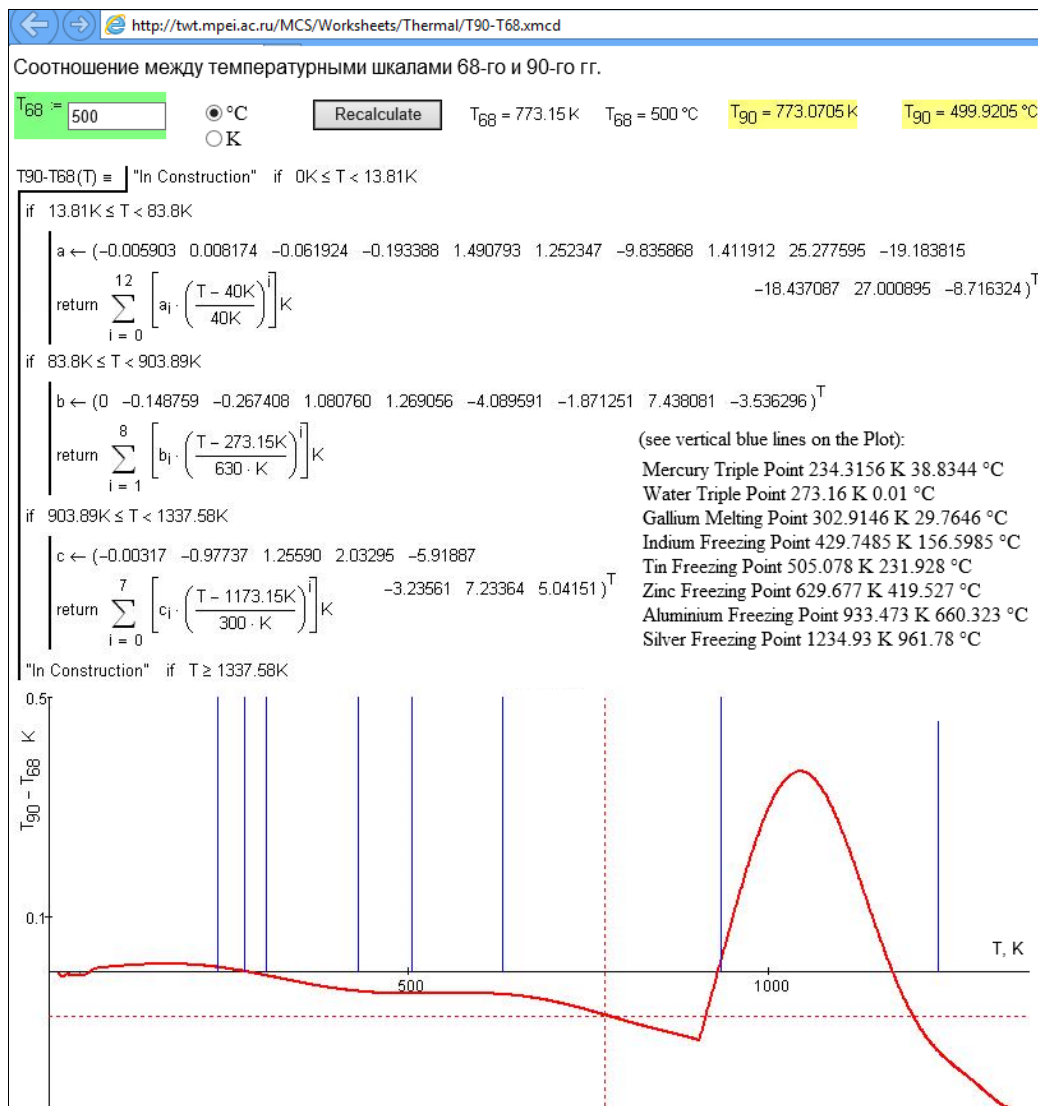


Рис. 1.17. Сайт с пересчетом температурных шкал

1991) в разделе "Термометрия" читатель найдет онлайн-пересчеты по температурным шкалам и соответствующие функции для встраивания их в Mathcad.

На рис. 1.17 показан сайт с пересчетом значений температур по вышеописанным шкалам. На сайте можно также найти ссылки на соответствующие функции пересчетов и на описание данного метрологического стандарта.

В старых российских (советских) справочниках наряду со старой температурной шкалой можно встретить и устаревшее обозначение единицы температуры, вернее, разности температур. В качестве единицы теплопроводности можно видеть ватты, деленные на метры и на градус Цельсия [$\text{Вт}/(\text{м} \cdot ^\circ\text{C})$], а в качестве единицы теплоемкости — калории, деленные на килограмм и на тот же градус Цельсия [$\text{кал}/(\text{кг} \cdot ^\circ\text{C})$]. В современных справочниках употребляются кельвины, а не градусы Цельсия, хотя не везде. В американских справочниках по-прежнему в качестве единицы теплопроводности можно видеть $\text{Btu}/(\text{hr} \cdot \text{ft} \cdot ^\circ\text{F})$, а в качестве единицы теплоемкости (или единицы удельной энтропии) — $\text{Btu}/(\text{hr} \cdot \text{lb} \cdot ^\circ\text{R})$. Автор этой книги спрашивал у одного из авторов подобного справочника, выпущенного в США под эгидой Национального института стандартов и технологий, почему они используют градус Ренкина в теплоемкости, но градус Фаренгейта в теплопроводности и в энтропии, хотя эти две единицы температуры численно равны. Ответ был таков: "Это американская инженерная традиция, и мы никак не можем ее изменить. Мы можем скорее изменить американскую конституцию, чем эту традицию".

В Mathcad, кстати, в плане поддержки этой традиции введены две единицы температуры — $\Delta^\circ\text{C}$ и $\Delta^\circ\text{F}$, численно равные кельвину и градусу Фаренгейта соответственно. Мы еще вернемся к этим единицам температуры в *этиде 21* (см. рис. 21.3).

1.8. Погрешность

Значения свойств веществ выдаются базами данных с определенной *погрешностью*. Эта погрешность зафиксирована в различных формулициях по свойствам веществ, но далеко не всегда показывается в соответствующих таблицах и на графиках.

"Облачные" функции, описанные в данной книге, дополнены сайтами Интернета для онлайн-расчетов по свойствам веществ. В этих расчетах выдается не только рассчитанное значение свойства, но и погрешность расчета, интервал допустимых значений рассчитанного свойства. Пример представлен на рис. 1.18.

"Облачные" функции, о которых идет речь в книге, также при необходимости можно модифицировать, чтобы они возвращали не одно значение (скаляр), а несколько (вектор): само значение свойства вещества, погрешность (абсолютную и/или относительную), максимальное и минимальное значения свойства, определяемые погрешностью.

Последнее время у нас и за рубежом вместо термина "погрешность" стали применять термин "неопределенность" (uncertainty).

http://twf.mpei.ac.ru/MCS/Worksheets/rbtp/tab6.xmcd

Таблица VI. Истинная массовая изобарная теплоемкость воды и водяного пара
(из справочника: Александров А.А., Орлов К.А., Очков В.Ф.
Теплофизические свойства рабочих веществ теплоэнергетики
М.: Издательский дом МЭИ, 2009)

Область допустимых значений p и T >>>

T := 100.5 °C p := 10.5 МПа

digits := 4

Recalculate

$c_p = 4.194 \text{ кДж/(кг К)}$

$c_{p \text{ max}} = 4.202 \text{ кДж/(кг К)}$
 $\pm \Delta c_p / c_p = 0.2 \%$
 $c_{p \text{ min}} = 4.186 \text{ кДж/(кг К)}$

Если ответа нет, то проверьте исходные данные - не вышли ли Вы, например, из допустимого диапазона значений температуры (T) и/или давления (p).

Рис. 1.18. Сайт по расчету удельной изобарной теплоемкости воды с указанием погрешности

1.9. IT-безопасность

Использованию "облачных" функций может мешать одно обстоятельство. Во многих "серьезных" организациях (НИИ, проектные бюро, наладочные организации) в целях безопасности блокируют или ограничивают выход в Интернет с компьютеров конечных пользователей. Выход в Интернет имеет только системный администратор. Такие организации могут использовать "облачные" функции так: скачивать их из "облака" и размещать на локальном сервере этой организации или рабочих станциях конечных пользователей. В *этиде 17* мы покажем, как одна и та же задача решается со ссылками на "облачные" функции (см. рис. 17.9) и с работой с шаблоном (см. рис. 17.12).

Но преимущества работы с "облачными" функциями неоспоримы. Во-первых, эти функции всегда "свежи": их непрерывно оптимизируют, уточняют, расширяют диапазон их аргументов. Во-вторых, исключаются проблемы, связанные с потерей установленных программ — баз данных при смене компьютера или его операционной системы. Сейчас ведется работа по перемещению самих расчетных программ в "облака". Так, например, "русский Mathcad" — программа SMath (www.smith.info) — может работать и онлайн в Интернете.

1.10. Шаблоны

С проблемой безопасности (см. разд. 1.9) связана и такая важная сторона информационных технологий, как работа с шаблонами.

Дело в том, что технология ссылок на "облачные" функции в среде Mathcad 15 — это, честно говоря, недокументированный прием, который разработчиками был заблокирован в новой версии Mathcad — Mathcad Prime. И это было сделано по сооб-

ражениям безопасности. Альтернативой же ссылкам на "облачные" функции в среде Mathcad Prime 3 служат шаблоны, в том числе и "облачные".

Что это такое — шаблоны? Для нас более привычным является термин "бланк", восходящий еще к пишущим машинкам и повсеместному письму ручкой по бумаге. Если нам нужно написать какое-то официальное или неофициальное письмо, приглашение или еще что-то, то мы делаем это, используя бланк или шаблон, как сейчас принято говорить. Такие бланки есть почти во всех организациях. Их вставляли раньше в пишущие машинки, а потом и в принтеры. Но в настоящее время все чаще и чаще используют электронные бланки. К бумажным бланкам для принтеров сейчас прибегают обычно в том случае, если бланк цветной, а текст на нем должен быть черно-белым.

Бланки вшиты во многие текстовые редакторы. Так, на рис. 1.19 показана часть экрана дисплея после запуска программы Word 2013, в среде которой, кстати, писалась эта книга.

На рис. 1.19 показано, как MS Word предлагает своему пользователю не начинать писать на пустом листе бумаги (а это, кстати, тоже шаблон, правда, примитивный), а выбрать подходящий для данного случая шаблон.

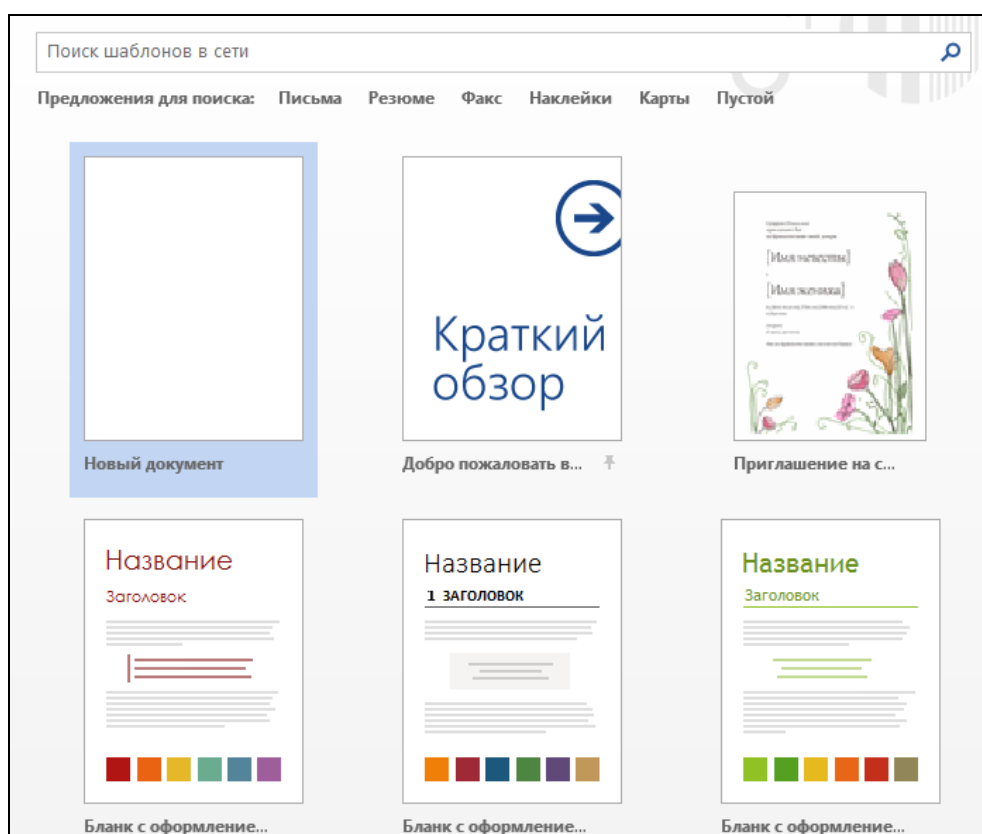


Рис. 1.19. Шаблоны текстового процессора MS Word

Готовый документ MS Word (например, официальное письмо) будет, повторяем, состоять из двух частей — постоянной (название организации, ее реквизиты и пр.), которая была в шаблоне, и переменной — той, что мы внесли в шаблон. Шаблон при этом отформатирован надлежащим образом и в постоянной, и в переменной своих частях. Все это существенно ускоряет и упрощает работу, уменьшает риск ошибок в ней.

Шаблоны есть и у пакета Mathcad. Но работающие с Mathcad ими пользуются довольно редко, в том числе и из-за того, что после запуска этой программы на экране появляется не список шаблонов, как в Word (см. рис. 1.19), а пустой документ (самый примитивный шаблон). Если же в среде Mathcad не нажимать значок (иконку) с изображением нового пустого документа, а отдать команду **Новый** в меню **Файл** (Mathcad 15), то на экран будет выведен список шаблонов, встроенных в Mathcad (рис. 1.20).

Шаблоны могут быть не только *встроенными* (рис. 1.19 и 1.20), но и *пользовательскими*. Создать такой шаблон несложно: нужно открыть какой-либо встроенный шаблон, что-то изменить в нем и записать в папку шаблонов с новым именем шаблона и стандартным расширением шаблона xmcst. Такую же операцию можно сделать и с готовым документом, а не со встроенным шаблоном. На рис. 1.21 отображена рабочая ситуация, когда пользователь Mathcad открывает новый документ и видит в нем новую позицию, новый пользовательский шаблон "Дополнительные единицы измерения".

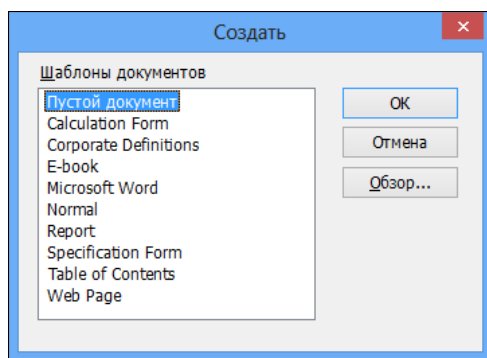


Рис. 1.20. Встроенные шаблоны Mathcad 15

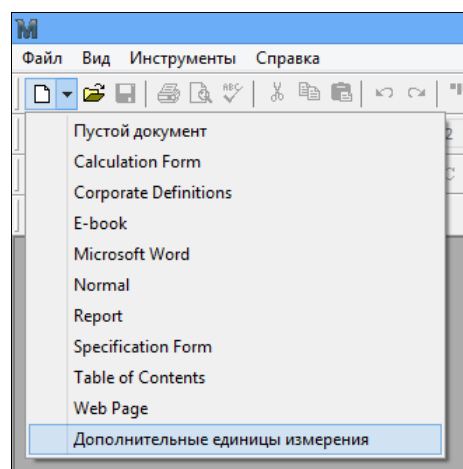


Рис. 1.21. Список с пользовательским шаблоном

Если открыть пользовательский шаблон "Дополнительные единицы измерения", отмеченный на рис. 1.21, то в Mathcad-документе можно будет использовать русские единицы измерения, которые не встроены в Mathcad — см. рис. 1.22. Можно также сделать ссылку на "облачный" Mathcad-документ с полным именем <http://twf.mpei.ac.ru/ochkov/units.xmcdz>, и в рабочем документе станут доступными русские и некоторые дополнительные английские единицы измерения. Они

также встроены в "облачный" документ с именем <http://twm.mpei.ru/tthb/H2O.xmcdz>, на который мы часто будем ссылаться в этой книге.

Пользовательский шаблон, показанный на рис. 1.22, — это встроенный в Mathcad стандартный шаблон (Normal), в который вставлена свернутая область с именем "Дополнительные единицы измерения". В этой области хранятся операторы ккал := kcal, кг := kg и др., т. е. привязка русских имен единиц измерений к встроенным английским аналогам.

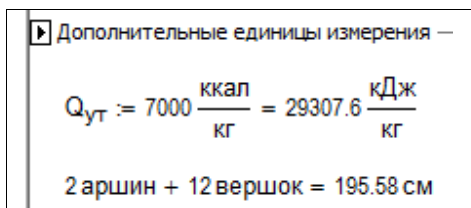


Рис. 1.22. Работа с пользовательскими (русскими) единицами измерения

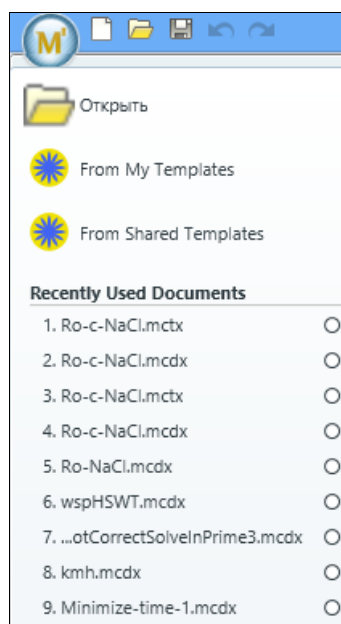


Рис. 1.23. Открытие шаблонов в среде Mathcad Prime 3.0

В среде Mathcad Prime 3.0 возможности работы с шаблонами расширены. В частности, можно иметь не только собственные шаблоны (My Templates — см. рис. 1.23), но и шаблоны, открытые для всех пользователей локальной компьютерной сети (Shared Templates), а также стандартные шаблоны фирмы PTC — разработчика Mathcad.

Шаблоны в какой-то мере призваны заменить Mathcad-сервер в тех организациях, которые по разным технологическим причинам и причинам безопасности не имеют выхода в Интернет с рабочих станций.

Шаблоны Mathcad в первую очередь содержат не тексты (заголовки и подзаголовки, отформатированные надлежащим образом), а расчетные элементы. Так, на рис. 1.24 показан шаблон для работы с водными растворами NaCl (об этом будет подробно описано в *этой* 4). В этот шаблон вшиты следующие функции:

- функция, возвращающая плотность водного раствора NaCl в зависимости от его концентрации, выраженной разными способами: массовый процент (%), молярность (mole/kg), молярность (mole/L) и титр (gm/mL);

- обратная функция (концентрация от плотности);
- функции пересчетов концентрации;
- функция зависимости температуры замерзания этого раствора от концентрации соли

и другие полезные функции. Все это существенно упрощает и ускоряет расчет, где фигурирует данный раствор, например, расчет системы кондиционирования воздуха в помещениях с этим раствором в качестве теплоносителя или хладагента (см. *этюд 17*).

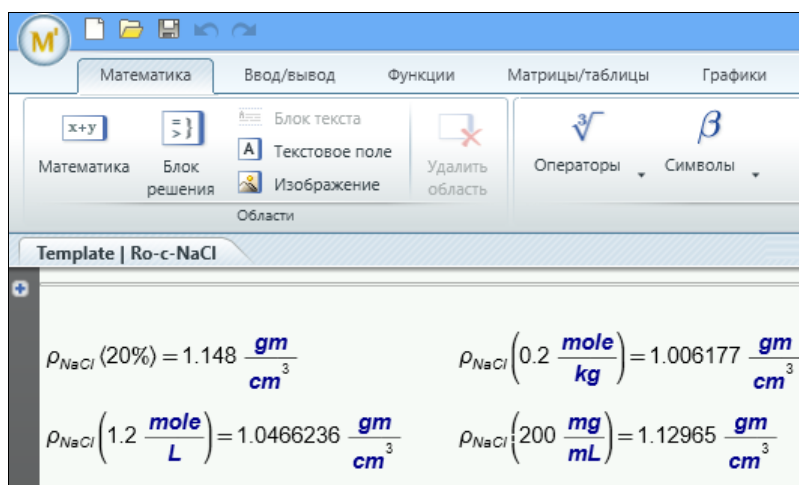


Рис. 1.24. Шаблон со свойствами водного раствора NaCl

Шаблон для Mathcad 15 может содержать ссылки на "облачные" функции по свойствам воды и водяного пара — основного рабочего тела теплоэнергетики. На рис. 1.25 показан расчет плотности воды при заданных температуре и давлении по функции $wspDPT$, которая записана в "облачном" файле с именем H2O.xmcdz. Более подробно об этом расчете рассказано в *этюде 8*.

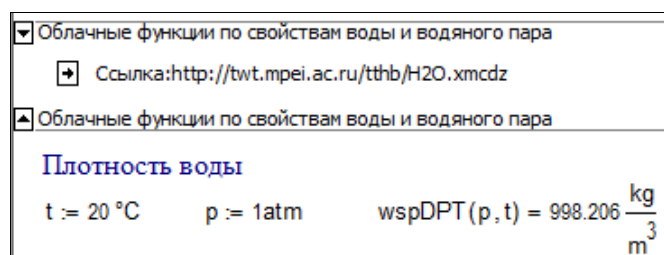


Рис. 1.25. Шаблон со свойствами воды и водяного пара

Работа с шаблонами может существенно интенсифицировать и упростить расчеты. Приступая к новому проекту, нужно будет не открывать пустой документ, а не полениться и поискать во Всемирной паутине нужный шаблон с нужными функциями.

ми. Этот шаблон в процессе работы можно будет подправить и расширить: добавить в него, например, новые функции и вернуть в Интернет, открыв его для других пользователей. Это один из путей связи баз данных по свойствам веществ с расчетными и САПРовскими программами.

В бесплатной и укороченной версии Mathcad Prime — в Mathcad Express отключены инструменты программирования. В связи с этим будет весьма полезно создавать функции, возвращающие свойства веществ, не прибегая к программированию. На рис. 1.26 показаны три функции, разные по виду, но одинаковые по содержанию, возвращающие растворимость (массовый процент) хлористого натрия в воде в зависимости от температуры.

For Mathcad Prime

$$NaCl_1(T) := \begin{cases} \text{"Solubility: P - mass NaCl/mass water, } \omega \text{ - mass NaCl/mass solution"} \\ \text{if } T < 0 \text{ } ^\circ\text{C} \\ \quad \text{return error ("T must be } \geq 0^\circ\text{C")} \\ \text{if } T > 100 \text{ } ^\circ\text{C} \\ \quad \text{return error ("T must be } \leq 100^\circ\text{C")} \\ t \leftarrow \frac{T}{K} - 273.15 \\ P \leftarrow (35.71189 + 8.48019 \cdot 10^{-3} \cdot t + 3.17016 \cdot 10^{-4} \cdot t^2) \cdot 1\% \\ \omega \leftarrow \frac{P}{1 + P} \end{cases}$$

For Mathcad Express

$$NaCl_2(T) := \text{if} \left(\frac{T}{K} - 273.15 < 0, \text{error ("T must be } \geq 0^\circ\text{C")} \right), \text{if} \left(\frac{T}{K} - 273.15 > 100, \text{error ("T must be } \leq 100^\circ\text{C")} \right), \left(\frac{T}{K} - 273.15 \right) \cdot (35.71189 + 8.48019 \cdot 10^{-3} \cdot (\frac{T}{K} - 273.15) + 3.17016 \cdot 10^{-4} \cdot (\frac{T}{K} - 273.15)^2) \cdot 1\%$$

Рис. 1.26. Функция по растворимости NaCl: два варианта

Зависимость растворимости хлористого натрия от температуры хорошо описывается полиномом второй степени. На сайте <http://twmmas.mpei.ac.ru/mas/Worksheets/Chem/solutions.html> открыт доступ к расчетам растворимости 372 неорганических соединений, основанных на таблицах из справочника Лурье по аналитической химии (М.: Химия, 1972). На рис. 1.27 показан такой расчет для водного раствора NaCl.

На рис. 1.26 можно видеть две функции с именем NaCl и индексами 1 и 2, возвращающие растворимость хлористого натрия в зависимости от температуры. Первая из них создана с использованием инструментов программирования (оператор добавления строки программы, оператор if, локальная переменная). Во второй функции (показана только ее часть) использована лишь встроенная в Mathcad функция if, что позволяет этой функции с именем NaCl работать как в полной версии Mathcad Prime, так и в ее укороченной версии Mathcad Express, хотя первая функция (с элементами программирования) более прозрачна в смысле ее понимания и

возможности редактирования. Вторую функцию, кстати, можно упростить — ввести в нее новые коэффициенты полинома, чтобы сразу учитывалась температура по шкале Кельвина, а не Цельсия и чтобы полином выдавал значение ω (отношение массы растворенного вещества к массе раствора), а не P (отношение массы растворенного вещества к массе воды).

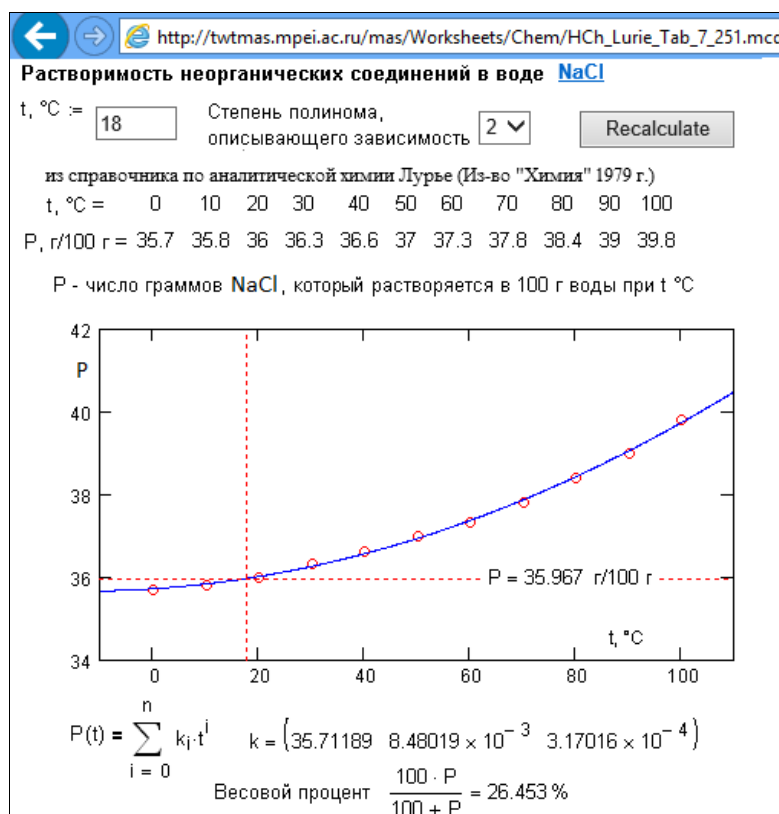


Рис. 1.27. Онлайн-расчет растворимости NaCl в воде

Теме концентрации растворов будет посвящен *этюд 3*. Сейчас же можно упомянуть, что в различных справочниках можно встретить сильно отличающиеся данные по теплофизическим свойствам растворов. Это происходит в том числе и потому, что в одних справочниках под процентной концентрацией понимают отношение массы растворенного вещества к массе раствора, в других — отношение массы растворенного вещества к массе растворителя, а в третьих — отношение количества растворенного вещества к количеству растворителя и т. д. Так что использовать эти данные нужно с большой осторожностью.

Еще одним современным способом публикации данных о свойствах веществ является создание сайтов, генерирующих код для отдельных программ. Так на рис. 1.28 можно видеть сайт в Интернете, зайдя на который можно создать функцию пользователя для программы инженерных расчетов MATLAB.

IRBOC v2 - Properties of Ionic Liquids

Data search :: Help :: Site info :: Backfeed

<< Search results :: Data review :: Online Calculation :: Code Generator :: File Generator

Code generator

Select programming language: (dropdown menu with options: Java, Matlab, VBA TEST)

Select method of interpolation/approximation: (dropdown menu with options: nearest, linear, spline, pchip, cubic, vScubic)

Code of function:

```
function S_C6H11BrN2 = S_C6H11BrN2(T)
%Compound: 1-ethyl-3-methylimidazolium bromide;
%Formula: C6H11BrN2;
%Property: Entropy as function of Temperature;
%Year Pub.: 2007;
%Authors: Paulechka, Y. U.; Kabo, G. J.; Blokhin, A. V.; Shaplov, A. S.; Lozinskaya, E. I.; Vygodskii, Y. S.;
%Source: J. Chem. Thermodyn. 39 , 158-166;
%Phase: Crystal;
variable1 = [0 5 10 15 20 25 30 35 40 45 50 60 70 80 90 100 110 120 130 140 150 160 170 180 190 200 210
220 230 240 250 260 270 280 290 298.15 300 310 320 330 340 349.92];
prpvalue = [0 0.109 0.998 3.6 7.26 11.89 17.17 22.85 28.73 34.7 40.67 52.43 63.81 74.72 85.22 95.2 104.8
114.1 123.1 131.7 140 148.2 156.1 164 171.6 179.1 186.4 193.7 201 208 215.1 222.2 229.1 236.1 243 248.8 250
257 264 270.9 277.9 284.8];
if T >= min(variable1) && T <= max(variable1)
S_C6H11BrN2 = interp(variable1, prpvalue, T, 'nearest');
else
S_C6H11BrN2 = 'Error: value of argument is out of range.';
end
```

Copy into one big Matlab project

Рис. 1.28. Интернет-генерация функции пользователя по свойствам веществ для MATLAB

http://www.iapws.org/relguide/ThCond.html

IAPWS 2011 Formulation fo... x | флешка - Поиск в Google | Поиск людей по запросу Ол... | ЗАО "ЭКОС-1": завод химиче...

Найти: изобретр | Назад | Далее | Параметры

Home

Releases and Guidelines

Technical Guidance Documents

IAPWS Certified Research Needs

Meetings

Working Groups

National Contacts

Main Thermodynamic Formulations

IAPWS Awards

Education

FAQs about Water and Steam

FAQs about IAPWS

IAPWS News

Tributes

Release on the IAPWS Formulation 2011 for the Thermal Conductivity of Ordinary Water Substance (September 2011)

[PDF of document](#)

Description

This formulation is recommended for the calculation of the thermal conductivity of ordinary water in its fluid phases.

The formulation consists of a dilute-gas term that is only a function of temperature, a finite-density term as a function of temperature and density, and a near-critical term as a function of temperature and density.

The region of validity the entire stable fluid region from the melting curve to 1173 K at pressures to 100 MPa, with lower maximum temperatures at higher pressures up to 1000 MPa; see the release document for details. It extrapolates in a physically reasonable way outside this region.

Online calculation

The Russian National Committee of IAPWS (through Moscow Power Engineering Institute) has provided online calculation pages, which may be useful in program development and verification.

Note that IAPWS is not responsible for the content of these online calculation pages:

- [for general and scientific use](#)
- [for industrial use](#)

Рис. 1.29. Ссылка на онлайн-расчеты автора с сайта Международной организации по свойствам воды и водяного пара

В заключении можно сказать, что Международная ассоциация по свойствам воды и водяного пара использует разработки автора по интерактивным расчетам свойств этого основного рабочего тела и материала теплоэнергетики. Пример — на рис. 1.29, где показана одна из страниц сайта этой организации. Там дана ссылка на официальный документ с инструкциями, как нужно рассчитывать теплопроводность воды и водяного пара (PDF of document), затем краткое описание данного документа (Description) и ссылки на "живые" расчеты теплопроводности (Online Calculation) для общего и научного использования (for general and scientific use) и использования для промышленных целей (for industrial use). После ввода исходных данных выдается не только итоговый результат расчета, но и все промежуточные данные. При отладке программ сравнение промежуточных расчетов поможет быстро локализовать и устранить ошибку, если она имела место. Кроме того, "живые" расчеты, ссылки на которые показаны на рис. 1.29, содержат график с областями формуляции с отмеченной рабочей точкой на нем, а также значения погрешности расчета (рис. 1.30).

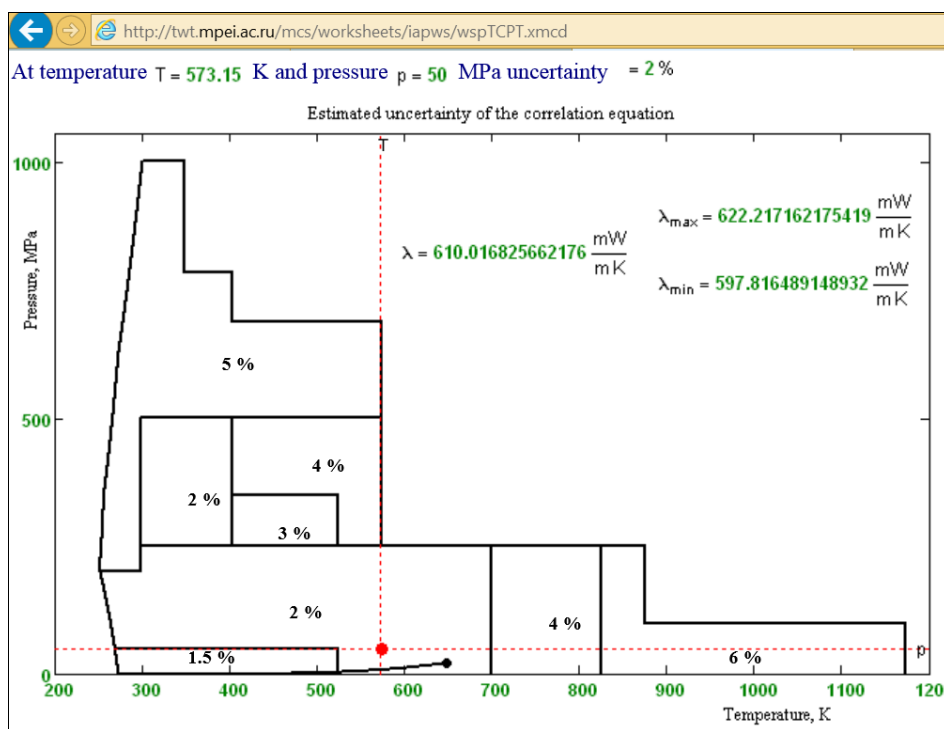


Рис. 1.30. Страница сайта с интерактивным расчетом теплопроводности воды и водяного пара

Литература

1. Очков В. Ф. Mathcad 14 для студентов и инженеров: русская версия. — СПб.: БХВ-Петербург, 2009. URL: http://twf.mpei.ac.ru/ochkov/Mathcad_14/RusIndex.html.

2. Очков В. Ф. Физические и экономические величины в Mathcad и Maple. — М.: Финансы и статистика, 2002. URL: http://twf.mpei.ac.ru/ochkov/Units/Forword_book.htm.
3. Интернет-версия справочника "Теплоэнергетика и теплотехника. Инструментальные средства создания и развития" / Под общ. ред. В. Ф. Очкова. — М.: Издательский дом МЭИ, 2007. — 160 с. URL: <http://twf.mpei.ac.ru/ТТНВ/5>.
4. Теплоэнергетика и теплотехника. Справочник в четырех книгах / Под общ. ред. А. В. Клименко и В. М. Зорина. — М.: Издательский дом МЭИ, 2004. URL: <http://twf.mpei.ac.ru/ТТНВ/tthb.html>.
5. Очков В. Ф., Орлов К. А., Очков А. В. и др. "Облачный" сервис по свойствам рабочих веществ холодильных установок // Вестник Международной академии холода. — 2013. — № 2. URL: <http://twf.mpei.ac.ru/ochkov/WSPHB/Web-Refr-Ochkov-R-407c.pdf>.
6. Александров А. А., Орлов К. А., Очков В. Ф. Теплофизические свойства рабочих веществ теплоэнергетики: Интернет-справочник. — М.: Издательский дом МЭИ. 2009. — 224 с. URL: <http://twf.mpei.ac.ru/rbtp>.
7. Очков В. Ф., Орлов К. А., Френкель М. Л. "Облачный" сервис по свойствам рабочих веществ для теплотехнических расчетов // Теплоэнергетика. — 2012. — № 7. — С. 79–86. URL: <http://twf.mpei.ac.ru/ochkov/WSPHB/Web-function-Power.pdf>.
8. Очков В. Ф., Орлов К. А., Знаменский В. Е. Теплотехнические расчеты с опорой на интернет-функции по свойствам рабочих веществ теплоэнергетики // Новое в российской электроэнергетике. — 2011. — № 6. — С. 40–49. URL: <http://twf.mpei.ac.ru/ochkov/WSPHB/Ochkov-Znamensky-Web-Rankine.html>.
9. Очков В. Ф. Публикация в Интернете теплофизических свойств веществ: проблемы и решения при работе с таблицами // Труды Академэнерго. — 2009. — № 2. — С. 13–32. URL: <http://twf.mpei.ac.ru/ochkov/TablSite>.
10. Kunick M., Kretschmar H.-J., Gampe U. Schnelle und flexible Berechnung thermodynamischer Stoffwerte mit Spline-Interpolation für die Modellierung instationärer Energieumwandlungsprozesse / W. Honekamp, P. Schindler. Tagungsband der 13. Nachwuchswissenschaftlerkonferenz mitteldeutscher Fachhochschulen Görlitz. — Re Di Roma-Verlag. Remscheid, 2012. — S. 209–214. URL: http://thermosymposium.nist.gov/archive/symp17/pdf/Abstract_320.pdf.
11. NIST Standard Reference Database 23 // NIST Standard Reference Data. URL: www.nist.gov/srd/nist23.cfm.
12. ThermoData Engine // Thermodynamics Research Center. URL: <http://trc.nist.gov/tde.html>.
13. WaterSteamPro [Электронный ресурс]: сайт программы. Режим доступа: www.wsp.ru, свободный.