

От баз данных свойств веществ к «облачным» функциям и вычислениям

[В.Очков](#)

Меня побудило написать эту статью¹ письмо от «далекого индийского незнакомца». Вернее, не письмо, а «записка на доске объявлений» – просьба на форуме математической программы Mathcad² (<http://communities.ptc.com/message/196238>) [1] помочь вставить в расчет следующую таблицу (табл. 1).

Табл. 1.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I
1	p, bar\ t, °C	-50	0	50	100	150	200	300	400
2	1	1,563	1,275	1,078	0,932	0,823	0,736	0,607	0,517
3	50	83,79	65,20	53,96	46,25	40,57	36,18	29,08	25,37
4	100	175,6	131,4	107,1	91,13	79,66	70,92	58,37	49,71
5	200	340,3	253,7	205,4	174,3	152,2	135,6	111,8	95,41
6	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», просил посетителей форума создать функцию пользователя, которая бы в качестве аргументов имела значение давления в интервале от 1 до 300 бар (см. боковые таблицы) и температуры в интервале от –50°C до 400°C («шапка» таблицы) и возвращала бы ему значение плотности некоего вещества (содержание таблицы).

У меня была под рукой подобная давно созданная программа для такой задачи, я ее немного отредактировал и «вывесил» на форуме – см. рис. 1.

¹ Это, скорее, не статья, а некое «эссе», размышления на тему, зафиксированную в названии статьи. *Эссе* (из фр. *essai* «попытка, проба, очерк», от лат. *exagium* «взвешивание») — литературный жанр прозаического сочинения небольшого объема и свободной композиции. Эссе выражает индивидуальные впечатления и соображения автора по конкретному поводу или предмету и не претендует на исчерпывающую или определяющую трактовку темы. В отношении объема и функции граничит, с одной стороны, с научной статьёй, с другой — с философским трактатом. (<http://ru.wikipedia.org/wiki/эссе>).

² Эту программу называют и по-другому: суперкалькулятор, инженерный калькулятор, инженерный офис и т.д. Очень часто ее сравнивают с другой подобной программой инженерных вычислений – с Matlab.

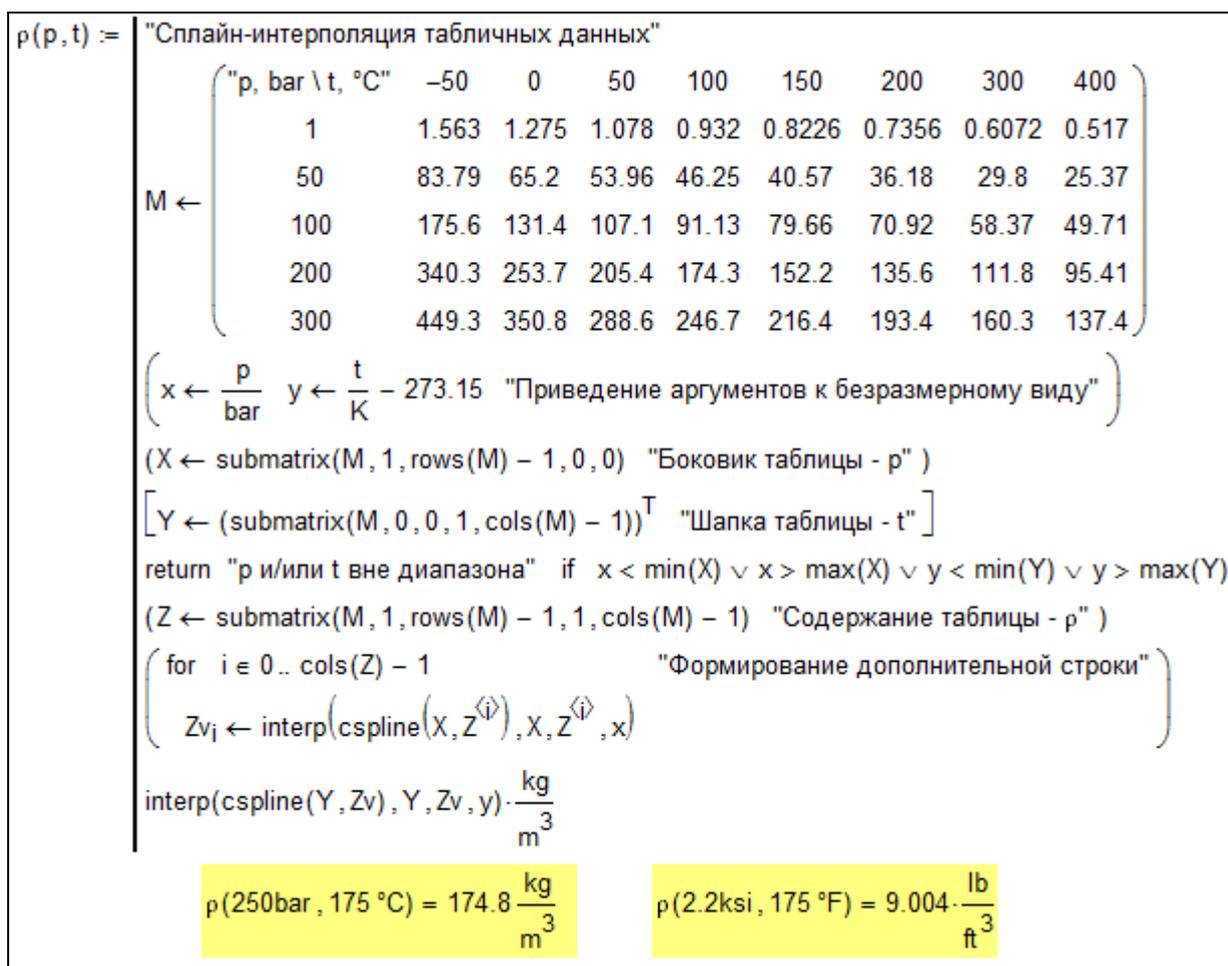


Рис. 1.

В программу, показанную на рис. 1, заложен метод двойной сплайн-интерполяции. По столбцам матрицы плотности сплайн-интерполяцией формируется дополнительная строка (вектор Zv) по заданному давлению, отсутствующему в боковике таблицы. Далее по этому вектору опять же сплайн-интерполяцией находится требуемое значение плотности.

На рис. 1 последними двумя операторами показан вызов функции $\rho(p, t)$ при разных значениях давления (p) и температуры (t) 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 – фунты и футы, например. Работа с единицами измерения (не просто с величинами, а с физическими величинами) – это уникальная особенность Mathcad, существенно облегчающая расчеты и предотвращающая множество ошибок [2].

По функции двух аргументов в среде Mathcad легко построить поверхность (рис. 2), на которой видно, что функция $\rho(p, t)$ гладкая, растет при увеличении давления и падает при увеличении температуры.

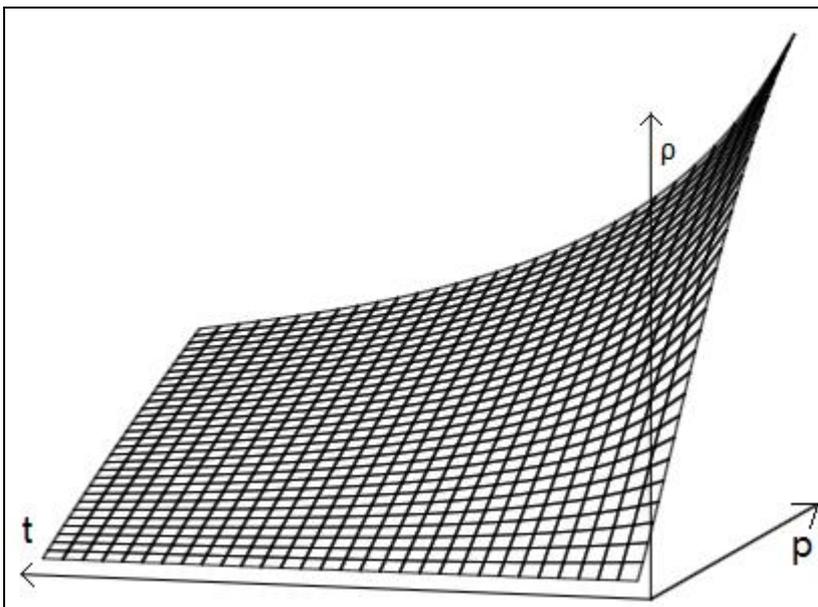
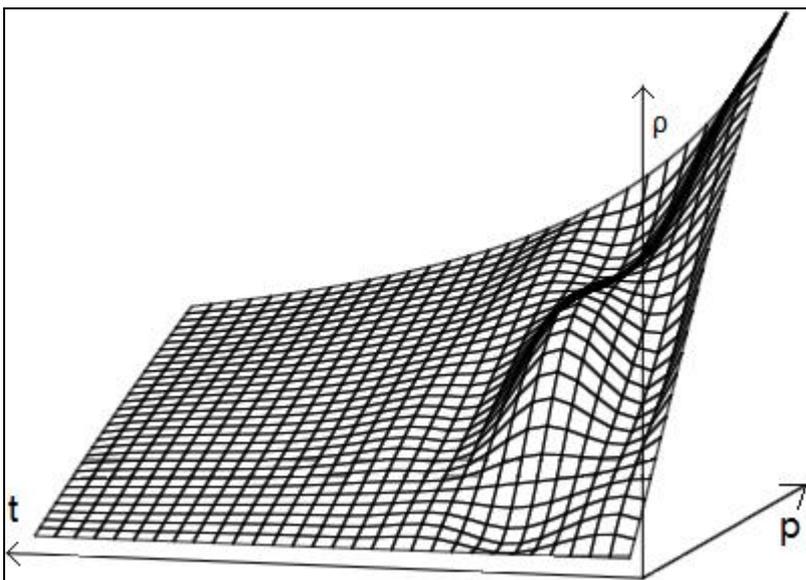


Рис. 2.

На рис. 2 отображено 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, случайно или намеренно заменить значение плотности с 107.1 кг/м^3 (оно выделено рамкой) на 170.1 кг/м^3 (это довольно распространенная ошибка (опечатка, оплошность) при публикации чисел в журналах и книгах и/или при ручном вводе чисел на компьютере или при сканировании таблиц), то поверхность, показанная на рис. 2, изменит свой вид – см. рис. 3³.



³ Здесь не так все просто. Всплеск на графике (см. рис. 3) может быть не просто ошибкой, а... неким аномальным свойством вещества – так что, видя такую «ошибку», нужно перед ее «исправлением» проверить, опечатка ли это, или ... научное открытие.

Рис. 3.

Конечно, нужно было бы сразу спросить у «далекого индийского друга», что это за вещество (газ), плотность которого зафиксирована в табл. 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 и послал функцию $\rho(p, t)$, которую он с благодарностью принял и вставил в свой расчет.

Этот довольно рядовой эпизод моей работы на форуме Mathcad⁴ поднимает очень важную проблему, которую я хочу обрисовать в этой статье.

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), графиков, формул или компьютерных программ⁵. Но с другой стороны, специалисты, занятые исследованием, проектированием, созданием, эксплуатацией и/или утилизацией различных «процессов, аппаратов и технологий», не всегда могут эффективно использовать эти базы данных. Почему?! Во-первых, их нужно где-то найти. Во-вторых, нужно убедиться в их надлежащем качестве, в том, что они сертифицированы. В-третьих, и это главное, нужно потратить много сил и времени, чтобы как-то подсоединить эти базы данных к рабочей программной среде (Excel, Mathcad, Matlab, языки программирования, специализированные программы и т.д.), с помощью которых ведутся прикладные расчеты, осуществляется проектирование и ведется управление технологическими процессами. Здесь часто можно наблюдать такую картину – специалист, работающий на компьютере в дорогой и мощной специализированной программной оболочке для проектирования или управления каким-то сложным технологическим процессом, вынужден лезть в бумажные справочники, в Интернет или запускать отдельные программы, чтобы узнать и сообщить компьютеру, к примеру, плотность рабочего тела теплоносителя или какого-то конструкционного материала. В некоторые подобные специализированные программы «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 (от температуры, например), не дают возможности работать с новыми материалами, имеют ограниченный диапазон применимости да и,

⁴ А там есть специальный раздел по свойствам веществ – (см. <http://communities.ptc.com/groups/properties-of-substances-for-mathcad>), открытый автором этих строк.

⁵ Мы одну такую программу только что создали – см. рис. 1.

вообще, просто-напросто устарели⁶. 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 вшитых в компьютер. Это делается, в том числе, и из-за опасения, что при ручном вводе может иметь место тривиальная опечатка (сравним рис. 2 и 3) или перепутаны единицы измерения – нужны, например, джоули, а введены калории, в таблице температурная шкала была по Цельсию (см. табл. 1), а компьютер настроен на шкалу Кельвина или (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» сервер параметры этого вещества, а этот сервер должен вернуть на компьютер пользователя значение этого свойства при заданных параметрах.

Как это реализуется на практике?! Конкретный пример. Mathcad-документ с функцией, показанной на рис. 1, был размещен на сервере по адресу <http://twf.mpei.ac.ru/ТТНВ/Ro-p-t.xmcdz>. Если в прикладном расчете необходимо иметь значение плотности вещества в зависимости от давления и температуры, то пользователю достаточно *вставить ссылку* (рис. 4) на нужный Mathcad-документ (он показан на рис. 1) и функция $\rho(p, t)$ станет, как говорят программисты, *видимой* в расчете.

⁶Некая проектная организация купила когда-то некий программный комплекс, освоила его, успешно работает с ним и не хочет ничего менять – «лучшее – враг хорошего».

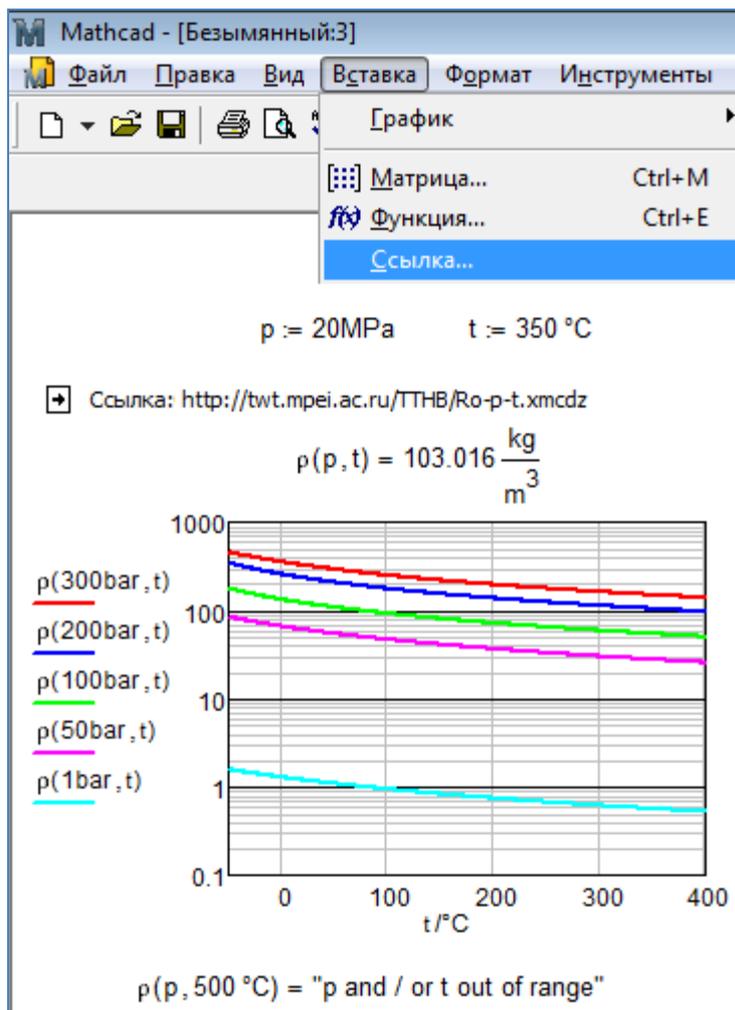


Рис. 4.

На рис. 4 показан такой оператор *ссылки* на «облачную» функцию $\rho(p, t)$, которая вызвана при $p := 20\text{ MPa}$ и $t = 350^\circ\text{C}$. Эта функция дополнительно визуализирована семейством изобар. При $t := 500^\circ\text{C}$ (а такая температура находится вне диапазона, охваченного табл. 1) функция $\rho(p, t)$ вернула текст – сообщение об ошибке⁷.

На расчетном сервере, который создан совместными усилиями специалистов НИУ «МЭИ», ОИВТ РАН и ООО «Триеру» (см. www.trie.ru)⁸, собрано большое количество подобных «облачных» функций. И их число непрерывно увеличивается.

Эти функции создаются по разным мотивам и разными путями.

Во-первых, если автор видит в книге или в Интернете таблицу, подобную табл. 1, то он поручает своим студентам «оживить» ее с помощью, например, программы, показанной на рис. 1. В нее достаточно только вставить новую матрицу и сделать некоторые другие незначительные изменения. Если же «в книге или Интернете» даны

⁷ К этому ограничению мы еще вернемся в приложении Экстраполяция – см. ниже.

⁸ На этот сервер можно зайти, если в поисковой машине Google сделать запрос «Расчеты в интернете». При этом ссылка на наш сервер будет находиться на первом месте, Потом уже будут идти ссылки на сайты денежных расчетов. Это свидетельствует о том, что расчетный сервер НИУ «МЭИ», ОИВТ РАН и ООО «Триеру» очень востребован.

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 является пятым, дополнительным томом справочной серии [4]. Этот том справочной серии выпущен по гранту РФФИ.

Во-вторых, такие «облачные» функции создаются по заказу пользователей Mathcad, работающих в области тепловой и промышленной энергетики. Так, например, были созданы и размещены на сервере функции по теплофизическим свойствам этанола для расчета паротурбинных циклов на органических рабочих телах (OCR), по расчету холодильных установок [5] и др.

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 (основное рабочее тело отечественной и зарубежной тепловой и атомной энергетики), базируются на формуляциях, утвержденных Международной ассоциацией по свойствам воды и водяного пара (www.iapws.org). Эти формуляции основаны не на табличных данных, а на формулах. Так, например, давление и температура насыщения воды в интервале от тройной точки до критической точки связаны неявным квадратным уравнением. Но на практике очень часто расчет по формулам заменяют интерполяцией по отдельным точкам. Так поступают не только для расчета свойств на линии насыщения, но и для отдельных однофазных областей – областей недогретой жидкости или перегретого пара. 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, по которым инженеры и ученые, не имеющие в те времена наших современных вычислительных средств, считали, «водя пальцем» по таблице⁹ или по графику¹⁰. С появлением электронных вычислительных средств стали отходить от таблиц и графиков и переходить к формулам, а затем и к компьютерным программам, где эти формулы запрограммированы. Процесс же создания формуляций по ранее не исследованному или вновь синтезированному веществу ведется так: 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

⁹ Были даже специальные механические устройства типа логарифмической линейки, по которым можно было вести линейную интерполяцию по точкам таблицы.

¹⁰ Так и сейчас нередко ведут расчеты, проводя на большой диаграмме состояния воды и водяного пара (на h, s – диаграмме, например) различные изолинии, ставя на них точки, замеряя расстояния между ними.

методами генерируется функция или набор функции для различных областей с правилами их применения и с указанием погрешностей для использования, в первую очередь, в компьютерных программах. При этом по-прежнему часто публикуются только таблицы без их математической обработки. Но имея под рукой мощные и удобные средства интерполяции – такие, например, какие встроены в Mathcad (пример на рис. 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 потери точности. Дело в том, что эти расчеты должны вестись в on-line режиме, иначе пропадет весь смысл такого тренажера. Интерполяция по точкам в ряде случаев ведется намного быстрее, чем счет по громоздким формулам, которые в ряде случаев представляют собой некий многочлен с высокой степенью.

Проблему функций по свойствам веществ, базирующихся на ранее созданных базах данных, можно обрисовать одной старой «вычислительной» ситуацией. Когда давно появились механические, а затем и электронные устройства (логарифмическая линейка, арифмометр, простейший калькулятор и др.), облегчающие и ускоряющие счет, исключая в них ошибки. На этих устройствах можно было проводить только четыре элементарные арифметические действия – сложить, вычесть, перемножить и поделить. Если же в расчете нужно было вычислить, к примеру, синус угла, то приходилось отрываться от счетного устройства и прибегать к справочным таблицам¹¹ – искать там нужные строки и столбцы, проводить при необходимости интерполяцию, учитывать, в чем измеряется угол – в градусах или радианах и т.д. т.п. Все это существенно затрудняет и замедляет расчет, повышает риск ошибок в них.

Сейчас такая ситуация часто повторяется при расчетах, включающих в себя 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».

¹¹ Читатели старшего поколения тут сразу вспомнят знаменитые таблицы Брадиса. Они, кстати, отсканированы и опубликованы в Интернете. Люди, склонные к ностальгии, могут ими воспользоваться.

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

Встроить в современные счетные устройства *все* функции по *всем* свойствам *всех* возможных веществ нереально и не рационально. Нужно дать возможность делать *ссылки* на облачные функции по нужным свойствам конкретного вещества. Эта информационная технология нами опробована на пакете Mathcad и описана в данной статье.

А теперь обрисуем некоторые нюансы этой работы.

Исходные данные нестандартной конфигурации

Программа, показанная на рис. 1, довольно простая вследствие того, что исходная прямоугольная матрица полностью заполнена. Если бы матрица была квадратной, то это еще бы упростило работу. Но такой матрице сплайн-интерполяция в среде Mathcad ведется парой операторов без привлечения программирования (цикла), показанного на рис. 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 такой таблице линия фазового перехода отмечена скачком значений свойства вещества. Кроме того, такие таблицы нередко бывают заполнены только частично.

Нами разработана [9] эффективная технология интерполяции такого типа данных: они разбиваются на отдельные области, отображаемые векторами (кривые фазовых переходов), частично заполненными матрицами, отдельными уравнениями и др. Подобная работа ведется и в Германии [10].

Исходные данные для таблиц можно брать не только из справочников и из Интернета, но и из других программ. Так данные по свойствам этанола для расчета паротурбинного цикла на органическом топливе, упомянутого выше и некоторых хладагентов, 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 рисунками 1 и 5. Делается это так. В среде RefProg генерируются нужные матрицы, которые вставляются в Mathcad-функции, подобные той, какая показана на рис. 1. Получается функция, которая возвращает нужное свойство вещества с нужными размерностями и имеет размерные аргументы, но работает не с уравнениями состояния, скрытыми в программе RefProg, а с табулированными данными, которые можно просмотреть и в случае необходимости подправить. 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. Кстати, о памяти компьютера. Раньше она была одним из главных лимитирующих факторов в работе с компьютером. Из-за этого отказывались от интерполяции, требующей хранения в оперативной памяти компьютера больших массивов, и переходили к работе по уравнениям состояния. Сейчас это ограничение практически снято.

Создание обратных функций

Встроенные в современные математические программы средства решения уравнений и поиска нулей функций позволяют легко и быстро создавать *обратные* функции по свойствам веществ. Вернемся к нашей о плотности вещества в зависимости от по давления и температуры (рис. 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 по-другому – см. рис. 5.

Function $\rho(p, t)$

$\rho(300\text{bar}, 100\text{ }^\circ\text{C}) = 246.7 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$

$\rho(250\text{bar}, 175\text{ }^\circ\text{C}) = 174.755 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$

Обратные функции

1. $t(p, \rho) := \text{root}(\rho(p, t) - \rho, t, 223.15\text{K}, 673.15\text{K})$

$t\left(300\text{bar}, 246.7 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) = 100\text{ }^\circ\text{C}$

$t\left(250\text{bar}, 174.755 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}\right) = 174.999\text{ }^\circ\text{C}$

2. $p(\rho, t) := \begin{cases} p \leftarrow 100\text{bar} \\ \text{root}(\rho(p, t) - \rho, p) \end{cases}$

$p\left(246.7 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}, 100\text{ }^\circ\text{C}\right) = 300\text{ bar}$

$p\left(174.755 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}, 175\text{ }^\circ\text{C}\right) = 250.001\text{ bar}$

Рис. 5.

В среде Mathcad есть встроенная функция `root`, возвращающая нуль другой, анализируемой функции методом половинного деления (см. п. 1 на рис. 5) или методом секущих (см. п. 2 на рис. 5). В первом случае для численного решения задачи нужно указать диапазон возможных значений искомого параметра – температуры, если иметь в виду п. 1 на рис. 5, а во втором – начальное приближение искомого параметра, давление (см. п. 2 на рис. 5).

Наша функция, создание которой отображено на рис. 1, довольно простая – она непрерывная и монотонная в выбранной области значений давлений и температуры. При работе с более сложными функциями состояния, обратные функции которых могут иметь два и более значений при заданных параметрах, необходимо будет в созданной обратной функции предусмотреть дополнительный аргумент – начальное приближение к нужному решению.

Конкретный пример. Если попытаться определить давление воды и/или водяного пара по температуре и удельной энтальпии, то это может быть либо в однофазная среда (вода под давлением), либо в двухфазная среда (влажный пар).

Иногда полезно в качестве первого приближения при расчете значений по обратной функции использовать случайное число в оговоренном диапазоне. На рис. 5а показано построение в среде Mathcad семейства показателей изэнтропы водяного пара. Функция `wspРТК` строится на основе функции `wspКРТ`, входящей в пакет `WaterSteamPro` (см. www.wsp.ru). Функция `wspРТК` возвращает разные значения в зависимости от первого приближения. Генератор случайных чисел помог построить требуемое семейство кривых.

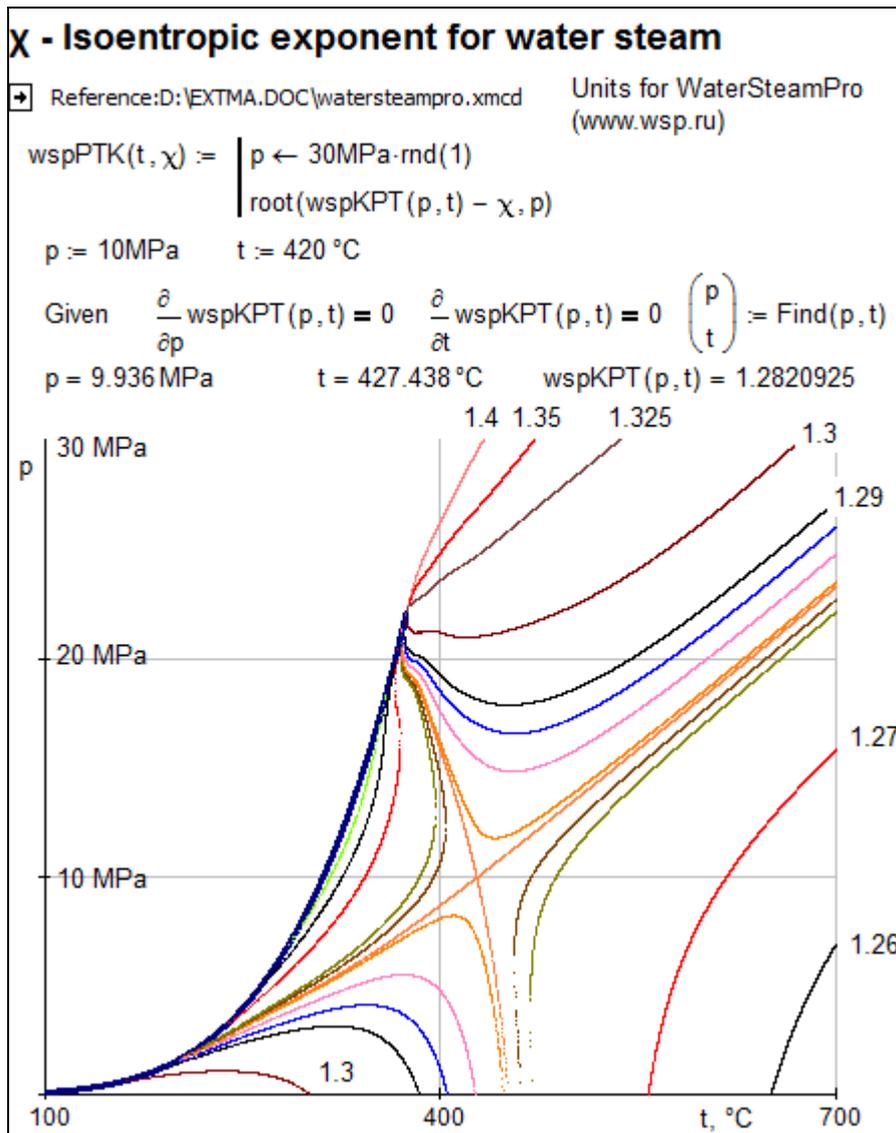


Рис. 5а.

В среде Mathcad, имея «прямую» функцию по свойствам веществ и инструменты решения уравнений и систем, можно, понимая суть задачи, легко строить необходимые для расчетов обратные функции.

Люди эксперимента и люди на эксперименте

Меня часто упрекают в том, что я «в своей жизни не получил ни одной экспериментальной точки, не провел ни одного замера свойств веществ, а занимаюсь только тем, что беру чужие опубликованные экспериментальные данные, их обрабатываю и размещаю на своем сервере в виде on-line 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!» Но эти упреки можно продолжить. Человека, проводящего эксперименты на стенде и замеряющего какие-то свойства вещества можно упрекнуть так: «Проводить

эксперименты на готовом стенде – это каждый <...> может. А ты вот попробуй сам собрать и наладить подобный стенд!» И далее. 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.д.

В настоящее время, вернее, уже довольно давно не только в производстве, но и в науке происходит некий процесс разделения труда. Есть научные организации (NIST, например, Национальный институт стандартов и технологий, США), который наряду с исследованием свойств индивидуальных веществ занимается 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. Конкретный пример – программа RefProp (см. выше). 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, ты их берешь в свою программу и указываешь, откуда она взята. Все, вроде бы, корректно. Но потом оказывается, что в справочнике, на который ты сослался, сказано, что эта таблица взята из другого справочника и т.д.

Конкретный примертакого «разделения труда».

Примерно год назад я получил на рецензию одну статью о теплопроводности водных растворов NaCl. Статья традиционная – в ней были даны в виде таблиц данные по замеру этого свойства в зависимости от давления, температуры и концентрации соли – чужие и авторские. В конце статьи была приведена довольно сложная формула, по которой можно было определить теплопроводность раствора NaCl в зависимости от давления, температуры и концентрации. Я тут же в среде Mathcad ввел эту формулу и попытался с ней работать. Но оказалось, что мои данные сильно отличались от контрольных данных, приведенных в статье. В чем дело? Я позвонил одному из авторов статьи и обрисовал проблему. Этот автор ответил мне, что статья много раз проверялась и что это «что-то твой Mathcad дурит». Но потом оказалось, что в статье были две опечатки (взят не тот коэффициент и записано $T_{кр}/T$ вместо $T/T_{кр}$). Статья вышла не только без опечаток, но и со ссылкой на on-line расчет по формуле статьи и с «облачной» функцией, возвращающей теплопроводность соленой воды в зависимости от p , T и C_{NaCl} – см. <http://twf.mpei.ac.ru/MCS/Worksheets/rbtp/tcon.sol.sod.hl.lf.xmcd>.

Я, кстати, на заре своей научной карьеры занимался экспериментом – сам собирал стенд и проводил на нем опыты. Но потом волею судеб был вынужден серьезно заняться вычислительной техникой. Эта работа меня увлекла и позволила кое-чего добиться. Когда я слышу слова о том, что «по клавишам компьютера каждый <...> может стучать», я

отвечаю (обычно не в слух, а мысленно – про себя), что 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 [11], ThermoData Engine [12] или WaterSteamPro [13]. 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 не отходила от научной этики.

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 работники должны работать с более серьезными программами – с Matlab, например.

Что тут можно сказать?!

Во-первых, Matlab – это язык программирования, вернее, язык программирования технических расчетов, как об этом заявляет 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.

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 свои довольно сложные задачи: рассчитывать по формулам (с привлечением единиц измерения; Matlab, кстати говоря, этого делать не может), решать уравнения и системы уравнений, строить сложные графики и диаграммы и т.д. и т.п. И все это без малейшей потери квалификации по своей основной специальности.

Пакет Matlab без специальных курсов освоить весьма затруднительно. Из-за этого с этим пакетом часто работает не один человек, а пара специалистов. 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. Если же убрать посредника, то специалисту прикладнику придется «въезжать» в программирование с неизбежной «потерей квалификации по своей основной специальности». Есть, конечно, исключения из этого правила, но они единичные.

И потом, 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 специализированными инструментами Matlab¹², и возвращать новые данные в Mathcad. Такая технология, кстати говоря, отработана на табличном процессоре Excel – на еще одной программной среде, которую часто используют для научно-технических расчетов, хотя она предназначена в первую очередь для бухгалтерских расчетов. Табл. 1, кстати, это таблица Excel – в ней удобно хранить массивы данных.

Пакет Mathcad очень хорош вот для работы вот такого рода. Нужно сделать некую прикидку, черновой расчет какого-то процесса, аппарата и/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.

Температурные шкалы

Наша исходная таблица (см. табл. 1 и рис. 2) использовала температурную шкалу 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 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 – 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.

Погрешность

Значения свойств веществ выдается 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 статье, дополнены сайтами Интернета для on-line расчетов по свойствам веществ. В этих расчетах выдается не только

¹² Многие из них созданы и для Mathcad, но их нужно искать и потом осваивать.

рассчитанное значение свойства, но и погрешность расчета, интервал допустимых значений рассчитанного свойства. Пример на рис. 6.

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 теплотехники** М.: Издательский дом МЭИ, 2009)

Область допустимых значений p и T >>>

T := °C

p := МПа

digits :=

$c_p = 4.194 \text{ кДж/(кг К)}$

$c_{p \max} = 4.202 \text{ кДж/(кг К)}$

$\pm \Delta C_p / C_p = 0.2 \%$

$c_{p \min} = 4.186 \text{ кДж/(кг К)}$

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

Рис. 6

«Облачные» функции, о которых идет речь в статье, 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 значение свойства, определяемые погрешностью.

Экстраполяция

В программу, показанную на рис. 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 возможные ошибки пользователя, который может по ошибке или наперенно 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).

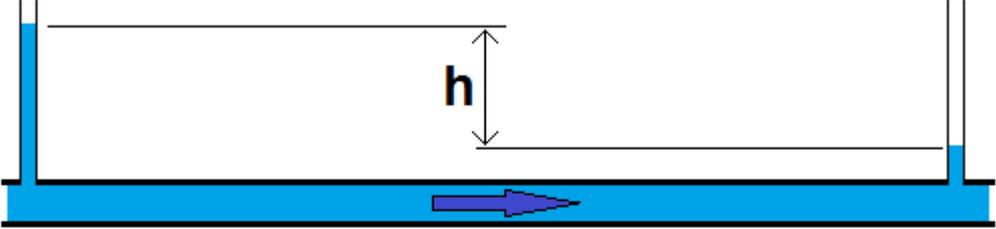
Дело в том, что при реализации численных алгоритмов поиска нуля функции (см., например, п. 2 на рис. 5) можно выходить за оговоренные пределы функции при промежуточных итерациях, получая при этом корректный ответ. В связи с этим в «облачные» функции по свойствам веществ можно ввести дополнительный аргумент, разрешающий или исключающий экстраполяцию.

Кстати об экстраполяции в среде Mathcad. Функция с корнем в имени spline (см. рис. 1) может иметь три предлога (префикса) – l, p и c: espline, pspline и cspline. Эти префиксы означают линейную (l), квадратную (параболическую – p) и кубическую (c) экстраполяцию. Внутри же области табличных данных интерполяция ведется кубическими сплайнами.

Примеры, использующие функции по свойствам веществ

Сайт, на котором размещены «облачные» функции, описанные в статье, дополнен примерами использования этих функций. Так на рис. 7 можно видеть расчет в среде Mathcad потери напора воды в трубопроводе [14].

Расчет потери напора воды в горизонтальном трубопроводе



Исходные данные

Внутренний диаметр трубы:	$d := 50 \text{ mm}$
Длина трубы:	$L := 900 \text{ m}$
Относительной шероховатость внутренней поверхности трубы:	$\Delta := 0.0005$
Температура воды:	$t := 16 \text{ }^\circ\text{C}$
Расход воды:	$Q := 4 \frac{\text{liter}}{\text{s}}$

Решение со ссылками на "облачные" функции из web-справочников:
<http://twt.mpei.ac.ru/rbtp> и <http://twt.mpei.ac.ru/GDHB/hgd.html>

Сечение трубы: $F := \pi \frac{d^2}{4} = 0.00196 \cdot \text{m}^2$

Скорость воды в трубе: $v := \frac{Q}{F} = 2.04 \cdot \frac{\text{m}}{\text{s}}$

Плотность воды Ссылка: <http://twt.mpei.ac.ru/rbtp/MC-WSP/M15/wspDPT.xmcdz>

$$\rho := \text{wspDPT}(5 \text{ atm}, t) = 999.133 \cdot \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

Динамическая вязкость воды Ссылка: <http://twt.mpei.ac.ru/rbtp/MC-WSP/M15/wspDYNVISCTD.xmcdz>

$$\mu := \text{wspDYNVISCTD}(t, \rho) = 1.108 \times 10^{-3} \cdot \text{Pa} \cdot \text{s}$$

Кинематическая вязкость воды $\nu := \frac{\mu}{\rho} = 1.109 \times 10^{-6} \frac{\text{m}^2}{\text{s}}$

Число Рейнольдса: $Re := \frac{v \cdot d}{\nu} = 91861$

Коэффициент сопротивления трения - функция относительной шероховатости Δ и Re
 Ссылка: <http://twt.mpei.ac.ru/GDHB/La-De-Re-formulas.xmcdz> $\lambda := \lambda_{\text{friction}}(\Delta, Re) = 0.02064$

Потеря напора: $h := \lambda \cdot \frac{L}{d} \cdot \frac{v^2}{2g} = 78.62 \text{ m}$

Рис. 7.

Расчет, показанный на рис. 7, опирается на две «облачные» функции по свойствам воды, возвращающие плотность и динамическую вязкость воды в зависимости от давления и температуры. Зная эти два значения, можно рассчитать число Рейнольдса Re . Это число в паре со значением относительной шероховатости внутренней поверхности трубы (Δ) определяют потерю напора. Формулы для оценки потери напора разные для разных режимов течения жидкости – ламинарный режим, переходной от ламинарного к

турбулентному и турбулентный. Эта сложная формула была оформлена в виде «облачной» функции $\lambda_{\text{friction}}(\Delta, \text{Re})$, на которую можно делать ссылки из расчетов.

На рис. 7а показан другой пример, использующий не только облачные функции по свойствам воды и водяного пара, но и облачные функции для расчета процессов, протекающих с использованием этого рабочего тела и теплоносителя.

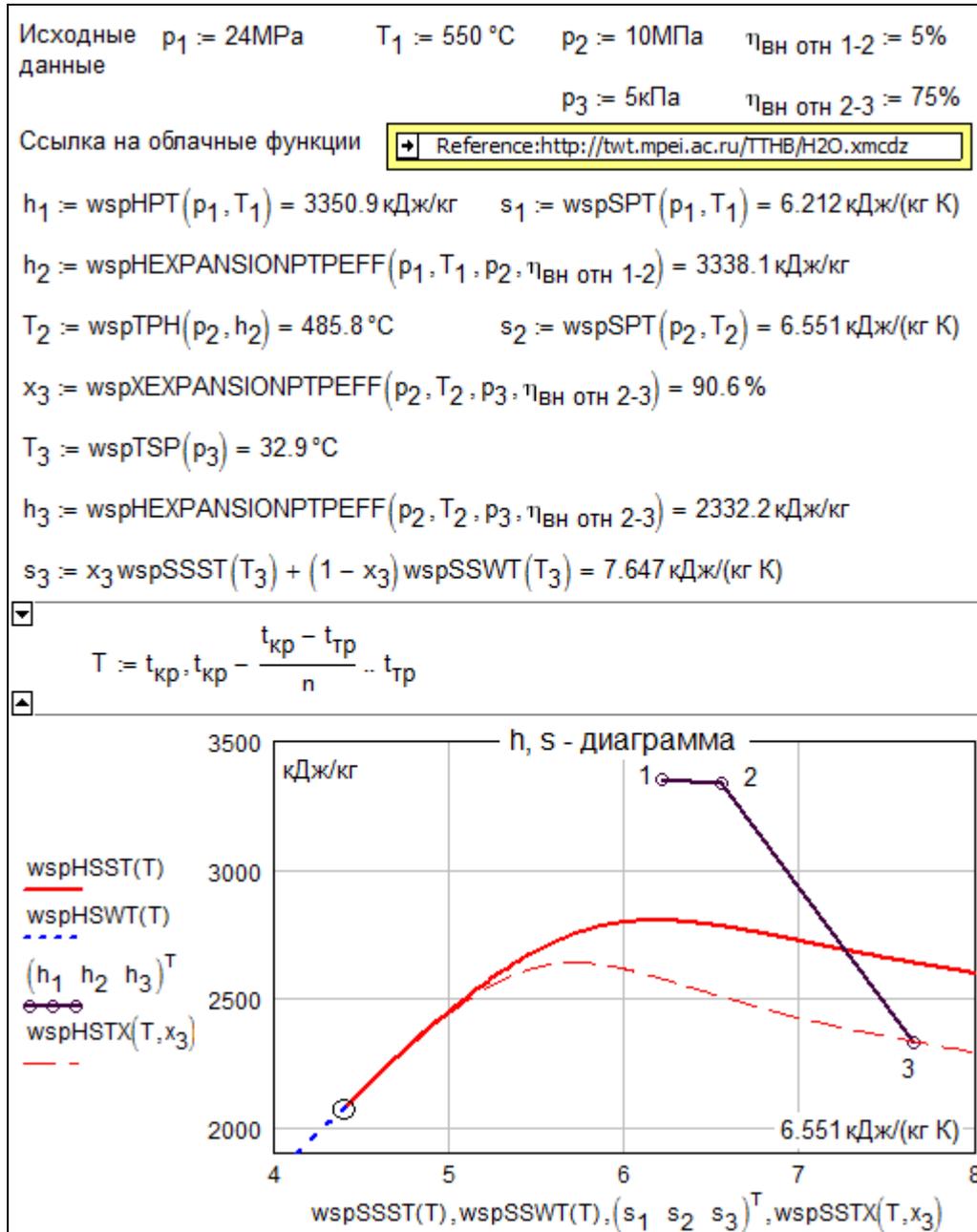


Рис. 7

Первыми операторами расчета, показанного на рис. 7а, вводятся исходные данные: давление (p_1) и температура (T_1) свежего пара, давление, до которого пар дросселируется

$(p_2)^{13}$ и давление в конце процесса расширения пара в турбине (давление в конденсаторе – p_3). Кроме того, задаются внутренние относительные КПД этих процессов – $\eta_{\text{вн. отн.}}$. Если этот КПД равен 100%, то это идеальный процесс расширения (работы) пара в турбине, при котором значение энтропии пара не меняется. Если этот КПД равен 0%, то это «идеальный» процесс дросселирования пара, при котором энтальпия остается постоянной. При реальном же дросселировании (при прохождении пара по паропроводу, например) энтальпия пара немного уменьшается, что и определяет значение «внутреннего относительного КПД дросселирования» отличным от нуля (5% в расчете, показанном на рис. 7а).

После ввода исходных в расчете данных сделана ссылка на Mathcad-документ, хранящийся в Интернете (в «облаках») по адресу <http://tw.t.mpei.ac.ru/ТТНВ/Н2О.xmcdz>. После такой ссылки в рабочем документе, показанном на рис. 7а, станут видимыми все функции, определенные в Mathcad-документе, на который сделана ссылка. А это не только функции, возвращающие теплофизические свойства воды и водяного пара: удельную энтальпию (h), удельную энтропию (s), температуру (T) и степень сухости (x) [6], но и функции, возвращающие параметры (расчеты) некоторых теплотехнических процессов – дросселирования и расширения (работы) пара в паровой турбине – значений удельной энтальпии и степени сухости пара в конце этих процессов. Имена этих двух функций имеют корень в имени EXPANSIONPTPEFF¹⁴: expansion – расширение, PT – давление и температура пара в начальной точке, P – давление пара в конечной точке и EFF (efficiency) – внутренний КПД процесса.

Имея под рукой нужные функции, можно быстро и безошибочно рассчитать все нужные параметры расширения пара (рис. 7а) и отобразить его на диаграмме, на которой дополнительно показаны линии насыщения по воде и водяному пару, а также линия постоянной степени сухости (влажности) пара. Все эти линии довольно легко построить на графике, имея видимыми в расчете соответствующие функции: wspHSST – удельная энтальпия (h) насыщенного (s – saturated) водяного пара (s – steam) в зависимости от температуры (t), wspHSWT – тоже для воды (w – water) на линии насыщения. Если в именах этих двух функций букву H заменить на S, то они будут выдавать удельные энтропии (s) воды и водяного пара на линии насыщения. Для построения линии постоянной влажности пара используется две функции wspHSTX и wspSSTX,

¹³ Мы задали очень большой перепад давления (24 МПа – 10 МПа) для того, чтобы этот процесс был отображен на диаграмме рис. 7а. На реальных ТЭС потеря давления в паропроводе от котла до турбины составляет порядка 5%. Если ввести p_2 меньшим, чем p_1 на эти 5%, то точки 1 и 2 сольются в одну.

¹⁴ У имен всех функций приставка wsp. Это аббревиатура программы WaterSteamPro, которую можно скачать с сайта www.wsp.ru. Описываемые в этой статье облачные функции являются малой частью пакета WaterSteamPro.

возвращающие удельную энтальпию (h) и удельную энтропию (s) влажного пара в зависимости от его температуры (T) и степени сухости (x). На h, s -диаграмме рис. 7а построены параметрические графики: задается параметр T в интервале от критической точки воды до ее тройной точки (эти константы также становятся видимы в расчете после ссылки описанной выше), а на осях зафиксированы три пары функций от T и пара векторов с параметрами трех точек.

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.

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.smath.info) может работать и on-line в Интернете.

Выводы

Ссылки на облачные функции по свойствам веществ и процессам их использования, работа которых опробована на инженерном калькуляторе Mathcad и описана в данной статье, – это инновационная технология, позволяющая эффективно организовать процесс расчета энергетических и прочих объектов.

Литература:

1. Очков В.Ф. Mathcad 14 для студентов и инженеров: русская версия. БХВ-Петербург 2009 (http://twt.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
(http://twt.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. (<http://tw.t.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
(<http://tw.t.mpei.ac.ru/ТТНВ/tthb.html>)
5. Очков В.Ф., Орлов К.А., Очков А.В., Знаменский В.Е., Волощук В.А.,
Чижмакова В.Ю. «Облачный» сервис по свойствам рабочих веществ
холодильных установок // Вестник Международной академии холода, принята к
публикации в №2 за 2013 (в печати – [http://tw.t.mpei.ac.ru/ochkov/WSPHB/Web-
Refr-Ochkov-R-407c.pdf](http://tw.t.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[8] с.: ил. (<http://tw.t.mpei.ac.ru/rbtpp>)
7. Очков В.Ф. , Орлов К.А., Френкель М.Л., Очков А.В., Знаменский В.Е.
«Облачный» сервис по свойствам рабочих веществ для теплотехнических
расчетов // Теплоэнергетика №7, 2012 г. С. 79-86.
(<http://tw.t.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, №6, 2011, С. 40-49
(<http://tw.t.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, № 2,
2009, С.13-32 (<http://tw.t.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. In: W. Honekamp, P. Schindler,
Tagungsband der 13. Nachwuchswissenschaftlerkonferenz mitteldeutscher
Fachhochschulen Görlitz, S.209-214, Re Di Roma-Verlag, Remscheid (2012)
(http://thermosymposium.nist.gov/archive/symp17/pdf/Abstract_320.pdf)
11. www.nist.gov/srd/nist23.cfm
12. <http://trc.nist.gov/tde.html>
13. www.wsp.ru

14. Очков В.Ф., Орлов К.А., Чжо Ко Ко, Анохин Д.А. «Облачные» функции для инженерных расчетов водоснабжения // Водоснабжение и канализация, №1, 2013 г. (<http://twi.mpei.ac.ru/GDHB/CloudFunction.pdf>)