

Рубрика – ЦИФРОВИЗАЦИЯ И КОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
DIGITALIZATION AND COMPUTER TECHNOLOGY

Дискуссионная статья / Debate article

УДК 53.081.1

**Метрология в физико-химических задачах: проблемы и решения при
компьютерных вычислениях**

Валерий Федорович Очков¹✉, Амармурун Даваахуу²

^{1,2} Московский национальный исследовательский университет «Московский энергетический институт», Москва, Россия

¹ OchkovVF@mpei.ru✉, ² DavaakhuuA@mpei.ru

Аннотация. Рассмотрены особенности решения задач по химии в среде отечественной свободно распространяемой программы SMath с использованием именованных чисел. Раскрываются особенности пакета, связанные с тем, что исходные данные можно вводить в любых единицах измерения, так как пакет SMath сам делает нужные пересчеты и выдает ответ в нужных пользователю единицах измерения. Разбираются возможности встроенных в SMath функции solve и плагина CoolProps_Prop. Обосновывается необходимость замены общепринятых единиц измерения химических и физических величин для упорядочения метрологической картины мира.

Ключевые слова: единицы измерения, именованные числа, компьютерные вычисления, концентрация растворов, метрология, пакет SMath, температура

Финансирование: отсутствует.

**Metrology in physicochemical problems: problems and solutions in
computational computing**

Valery F. Ochkov¹✉, Amarmurun Davaakhuu²

^{1,2} National research university «Moscow Power Engineering Institute», Moscow, Russia

¹ OchkovVF@mpei.ru✉, ² DavaakhuuA@mpei.ru

Abstract. The features of solving problems in chemistry in the environment of the domestic freely distributed program SMath using named numbers are considered. The features of the package are revealed, related to the fact that the source data can be entered in any units of measurement, since the SMath package itself makes the necessary conversions and gives the answer in the units of measurement required by the user. The capabilities of the solve function and the CoolProps_Prop plugin built into SMath are examined. The necessity of replacing generally accepted units of measurement of chemical and physical quantities in order to streamline the metrological picture of the world is substantiated.

Keywords: units of measurement, named numbers, computer calculations, concentration of solutions, metrology, SMath package, temperature

Financial Support: none.

В последние два десятилетия пользователи компьютеров при научно-технических расчетах стали использовать специальные программы, опирающиеся не на числовые значения, а на именованные числа – на физические, химические, экономические и информационные величины [1–19]. Вследствие этого процесс расчетов упростился и стал проводиться быстрее, в расчетах стало меньше ошибок, связанных с пересчетом единиц измерения и несоответствием размерностей, в расчетах можно использовать те единицы, к которым пользователь привык, а не те, которые навязываются силой закона. Но данная расчетная технология породила ряд проблем, суть которых и пути их решения описаны в данной статье в отношении химических расчетов.

Рассмотрим некоторые особенности решения задач по химии в среде отечественной свободно распространяемой программы SMath.

На рисунках 1 и 6 показано решение в среде SMath двух задач, с которых часто начинается изучение аналитической химии – работа с видами выражения концентраций («крепости¹») водных растворов.

Задачу, показанную на рис. 1, можно спокойно решить в уме. Если к 20 граммам глюкозы добавить 180 грамм воды, то получится 200 грамм раствора. Если же 20 поделить на 200, то получится 0,1 или 10 % (весовой, точнее, массовый процент). В лабораторных условиях 180 грамм воды имеет объем примерно 180 миллилитров. Вот вам и ответ!

SMath Solver - [Glucose.sm*]

Файл Правка Вид Вставка Вычисление Сервис Листы Помощь

Какой объем воды необходимо добавить к 20 г глюкозы, чтобы получить 10% раствор глюкозы?

Исходные данные $масса_{глюкозы} := 20 \text{ г} = 0,02 \text{ кг}$ $\omega := 10 \% = 0,1$

$\frac{масса_{воды}}{масса_{воды}} := \left(solve \left(\omega = \frac{масса_{глюкозы}}{масса_{воды} \text{ кг} + масса_{глюкозы}} ; масса_{воды} ; 10 \text{ г} ; 300 \text{ г} \right) \right) \text{ кг} = 180 \text{ г}$

$T := 20 \text{ }^\circ\text{C} = 293,15 \text{ К}$ $p := 159 \text{ мм рт.ст.} = 21198,2596 \text{ Па}$

$\rho_{воды} := CoolProp_Props("D"; "T"; T; "P"; p; "water") = 998,1704 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$

Символы (α-ω)

α	β	γ	δ	ε	ζ
η	θ	ι	κ	λ	
μ	ν	ξ	ο	π	ρ
σ	τ	υ	φ	χ	
ψ	ω				

Ответ $V_{воды} := \frac{масса_{воды}}{\rho_{воды}} = 0,0002 \text{ м}^3$ $V_{воды} = 180,3299 \text{ мл}$

Рис. 1. Протокол расчета по водному раствору глюкозы

Fig. 1. Calculation protocol of aqueous glucose solution

Задачи учебного плана должны иметь заранее известный ответ. Читатель может изменить условие задачи, а именно, получить не 10-процентный, а, например, одномолярный водный раствор глюкозы и решить такую новую задачу. Мы же не просто так решаем химические задачи – мы учимся делать это на компьютере, опираясь на простые и понятные примеры.

Но вернемся к рисунку 1 и отметим некоторые детали работы. Вы установили и открыли на своем компьютере программу SMath, указали

¹ В химии нет такого термина – «крепость раствора». Есть термин – «концентрация раствора». См. ниже рассуждения о термине «концентрация» в таблицах 1 и 2.

мышкой начало пустого расчетного документа и стали набирать слово «Какой». После нажатия клавиши пробела переменная с именем *Какой* превратится в начало комментария – в запись условия задачи. Далее на второй строке расчета вводятся исходные данные: в переменные с именами *масса_{глюкозы}* (переменная с текстовым индексом) и ω (греческая буква омега). В расчете в эти переменные вводятся не числовые значения, а *именованные величины* – числовые значения, дополненные единицами измерения или иными символами. В частности, в нашем расчете вводится физическая величина (масса) и процентное соотношение. Но в памяти компьютера будут храниться числа не 20 и 10, а 0,02 и 0,1. Запомним это!

Примечание: Текстовый индекс (часть имени переменной, сдвинутая вниз) у имени переменной создается вставкой в имя переменной точки. В среде SMath есть еще и числовые индексы, формирующие оператор обращения к элементу массива – к вектору или матрице. Внешне эти два индекса очень похожи, что часто путает начинающих пользователей SMath. Числовой индекс вводится в расчет не через точку, а через открывающуюся квадратную скобку или через кнопки $\blacksquare \blacksquare$ (вектор) или $\blacksquare \blacksquare \blacksquare$ (матрица) панели инструментов «Матрицы».

В данном расчете разделителем целой и дробной частей чисел служит запятая. Но можно одной командой меню (Сервис/Опции) заменить запятые на точки. Это же касается и имен единиц измерения, которые допустимо, опять же через упомянутую команду меню, заменить с русских на английские (международные – см. рис. 3).

Единицы измерения прикрепляются пользователем к числовым значениям, превращая их в именованные числа, с помощью диалоговых окон, четыре из которых показаны на рис. 2. Открыты списки единиц массы, безразмерных величин (тех же процентов) и единиц количества вещества. Четвертое диалоговое окно помогает вводить в расчет различные физико-

химические константы – универсальную газовую постоянную, например, о которой речь пойдет в конце статьи.

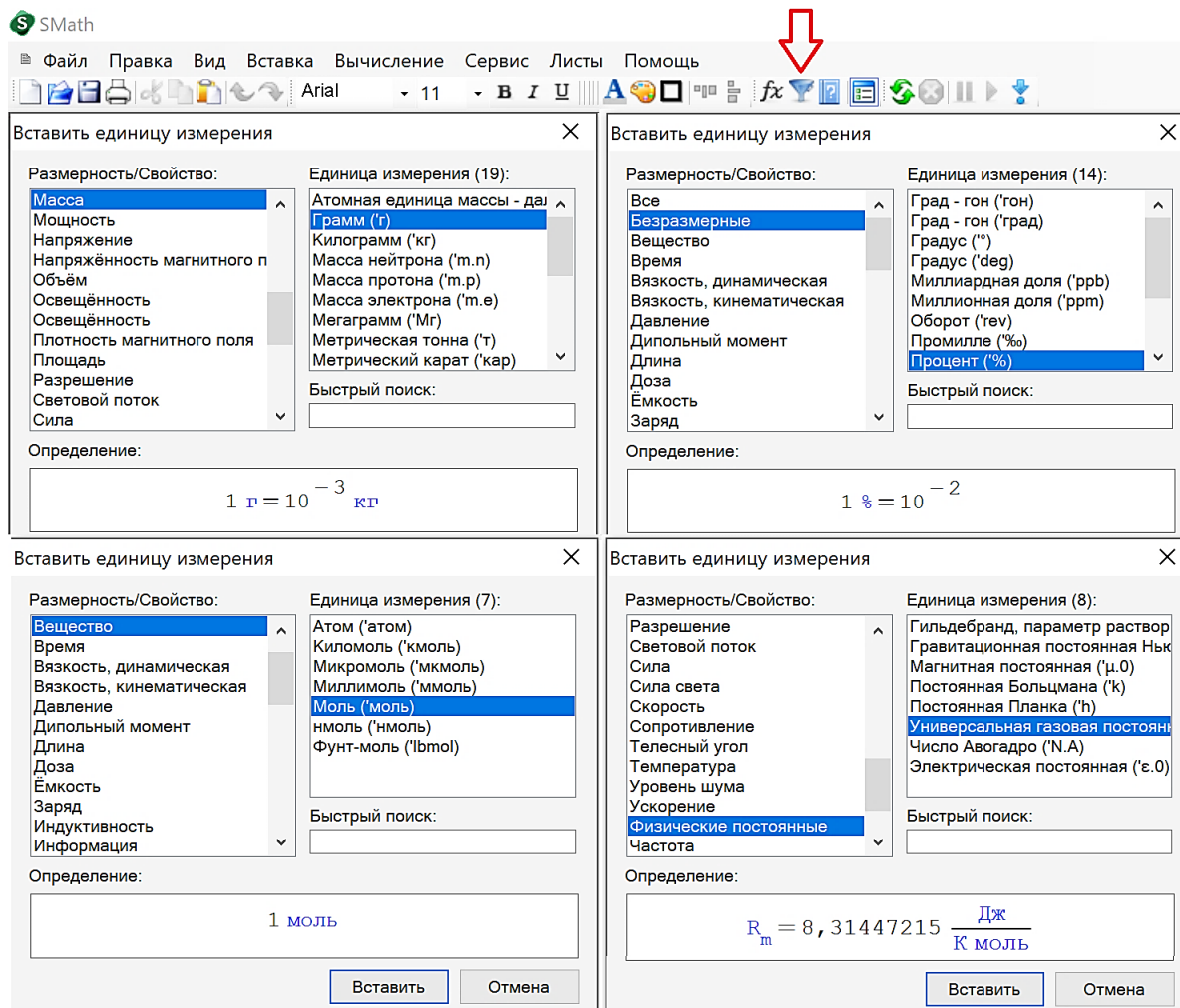


Рис. 2. Диалоговые окна ввода единиц измерения

Fig. 2. Unit Input Dialog Boxes

Единицы измерения можно ввести проще – набором на клавиатуре соответствующей единицы измерения – килограммов, например, см. рис. 3. Появится список переменных, начинающихся на буквы «кг», из которого достаточно выбрать нужную переменную (единицу измерения).

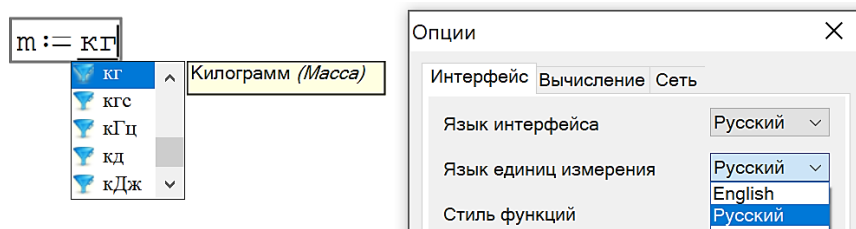


Рис. 3. Превращение числового значения в именованное

Fig. 3. Convert a numeric value to a named value

Цвет единиц измерения синий, что отличает их от простых переменных с черным цветом. Это позволяет, например, иметь в расчете две переменные с одинаковыми именами: m – масса и m – метр.

Дополнительно используется форматирование переменных: прямой шрифт – это встроенные конструкции, а курсив – пользовательские. Это все заводские настройки пакета SMath, которые при желании можно изменить.

Ответ у задачи (третья строка на рис. 1) ищется через решение (solve) уравнения, хранящего определение массовой доли как отношения массы растворенного вещества к массе раствора. Это отношение безразмерное или выраженное в «безразмерных» процентах, что не совсем удобно и может приводить к ошибкам. Дело в том, что есть и такой еще один параметр, характеризующий растворы, – отношение массы растворенного вещества к массе растворителя, а не раствора (массовая моляльность, если так можно выразиться). В знаменитом справочнике по аналитической химии [20] приведены данные по растворимости в вводе многих неорганических и органических соединений именно как отношение массы растворенного вещества или соединения к массе растворителя (воды), а не раствора. В сильно разбавленных растворах эти две характеристики примерно равны. Но в «крепких» растворах они отличаются значительно, что может приводить к ошибкам в толковании этих величин и в расчетах.

Встроенная в SMath функция solve не может работать с размерной искомой величиной. Но мы эту функцию «обманули» – сделали неизвестную (масса воды) безразмерной, приписав к ней килограммы.

У функции solve четыре аргумента: решаемое уравнение, далее переменная, по которой ищется корень, и диапазон поиска корня. Из-за нашего «обмана» функция solve выдаст безразмерную величину, что мы исправили, приписав к ответу килограмм. В итоговом ответе мы заменили его на грамм. Это делается просто – к ответу (к именованному числу) подводится курсор. После этого справа от ответа появляется черный квадратик, в который нужно будет ввести иную единицу измерения. Можно просто щелкнуть дважды по этому квадратику и вызвать список единиц данной физической величины, показанный на рис. 2.

Решение уравнения, а не использование готовой формулы, – это еще один прогрессивный тренд в расчетной практике на компьютере с использованием пакетов типа SMath.

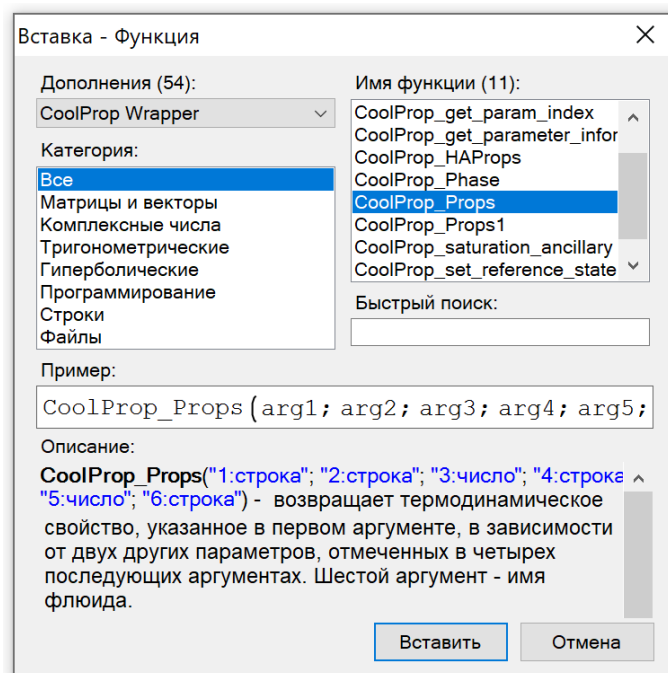


Рис. 4. Диалоговое окно ввода в расчет встроенных функций

Fig. 4. Dialog box for entering built-in functions into calculation

Объем добавляемой воды по ее массе находится тоже довольно просто – через вызов функции `CoolProps_Prop`, возвращающей плотность воды (`water`) в зависимости от температуры и давления (рис. 4), которые вводятся в расчет с градусами Цельсия и миллиметрами ртутного столба, но которые тут же переводятся в кельвины и паскалы (основные единицы температуры и давления СИ). Мы это подчеркнули лишний раз, сделав после ввода величины (`:=`) ее вывод (`=`).

Пакет функций по теплофизическим свойствам флюидов (газов и жидкостей) не входит в ядро `SMath`. Этот пакет (дополнение, плагин) можно подгрузить из облака Интернета цепочкой команд меню «Сервис/Дополнения/Галерея онлайн/CoolProp Wrapper». В этом отношении пакет `SMath` очень похож на язык программирования Python, у которого есть небольшое ядро, и который тоже «оброс» многочисленными приложениями [21].

Давайте теперь переведем проценты «крепости» раствора глюкозы в моли, деленные на литры – в молярность. Для этого нужно знать плотность 10 % водного раствора глюкозы и ее молярную массу. Все это несложно найти в бумажных справочниках или в интернете. Там же легко отыскать и формулу для такого пересчета в виде таблиц, одна из которых показана в табл. 1.

Формулы для пересчета видов выражения концентраций при ручных расчетах

Определяемая концентрация	Исходная концентрация			
	ω , %	C_M	C_H	T
Массовая доля ω , %	$\frac{m_{\text{вещества}}}{m_{\text{раствора}}} \cdot 100$	$\frac{C_M \cdot M}{10 \cdot \rho}$	$\frac{C_H \cdot M \cdot f}{10 \cdot \rho}$	$\frac{T \cdot 100}{\rho}$
Молярная C_M , моль/дм ³	$\frac{\omega \cdot 10 \cdot \rho}{M}$	моль/дм ³	$C_H \cdot f$	$\frac{T \cdot 1000}{M}$
Молярная концентрация эквивалента C_H , моль экв/дм ³	$\frac{\omega \cdot 10 \cdot \rho}{M \cdot f}$	$\frac{C_M}{f}$	моль экв/дм ³	$\frac{T}{M \cdot f}$
Титр T , г/см ³	$\frac{\omega \cdot \rho}{100}$	$\frac{C_M \cdot M}{1000}$	$\frac{C_H \cdot M \cdot f}{1000}$	г/см ³
Примечание	ρ – плотность раствора, г/см ³ ; f – фактор эквивалентности вещества; M – молярная масса вещества, г/моль; m – масса вещества, г.			

Есть в интернете и интерактивные сайты, по которым можно узнать плотность раствора глюкозы и другие его параметры при комнатной температуре (рис. 5).

← ↻ 🏠 <https://www.freechemistry.ru/sprav/pl-gluc.htm?ysclid=lnyxglcnzr115885826>

ПЛОТНОСТЬ РАСТВОРОВ ГЛЮКОЗЫ ПРИ 20°C

плотность г/л % г/л моль/л

Рис. 5. Пример сайта с расчетом плотности раствора в зависимости от его концентрации

Fig. 5. Sample site with calculation of solution density depending on its concentration

На рисунке 6 в трех строках показаны три попытки решения задачи о молярности водного раствора глюкозы.

$\rho := 1,0375 \frac{\text{Г}}{\text{СМ}^3}$	$\omega := 10 \%$	$M := 180,16 \frac{\text{Г}}{\text{МОЛЬ}}$	$c_M := \frac{\omega \cdot 10 \cdot \rho}{M} = 5,7588 \frac{\text{МОЛЬ}}{\text{Л}}$
$\rho := 1,0375$	$\omega := 10$	$M := 180,16$	$c_M := \frac{\omega \cdot 10 \cdot \rho}{M} = 0,5759$
$\rho := 1,0375 \frac{\text{Г}}{\text{СМ}^3}$	$\omega := 10 \%$	$M := 180,16 \frac{\text{Г}}{\text{МОЛЬ}}$	$c_M := \frac{\omega \cdot \rho}{M} = 0,5759 \frac{\text{МОЛЬ}}{\text{Л}}$

Рис. 6. Протокол расчета молярной концентрации раствора глюкозы

Fig. 6. Calculation protocol of molar concentration of glucose solution

Первая попытка – плотность раствора (ρ), его массовый процент (ω) и молярная масса (M) введены с единицами измерения (это требует современный стандарт расчетов), а формула пересчета скопирована (бездумно скопирована!) из таблицы 1. Ответ (5,7588) получился неправильным – завышенный в 10 (!!!) раз, но с правильной размерностью: моль на литр, что дополнительно дезориентирует пользователя.

Вторая попытка – три исходные величины заданы безразмерными (устаревший стандарт калькуляторов, электронных таблиц и языков программирования), а формула пересчета также взята из таблицы 1. Ответ (0,5759) получился правильным, но безразмерным. Размерность, вернее, единицу измерения нужно будет взять из таблицы 1.

Третья попытка – это правильное решение, когда исходные величины размерные, а из формулы пересчета убрано «лишнее» число десять.

Откуда взялась такая ошибка? В статьях [22,23] автор вводит понятие *псевдоэмпирической формулы*. Таких формул достаточно много в учебниках и справочниках. Они очень часто выдают неверные ответы при их бездумном использовании в современных программах с инструментарием единиц измерения – в пакете SMath, например. Таблица 1 должна быть переписана так, как это отображено в таблице 2. Кроме исключения из таблицы коэффициентов, кратных десяти, из таблицы убрано упоминание единиц измерения вводимых величин. Исходные данные можно вводить в любых

единицах – пакет SMath сам сделает нужные пересчеты и выдаст ответ в нужных пользователю единицах.

Таблица 2

Формулы для пересчета видов выражения концентраций при компьютерных расчетах с использованием единиц измерения

Определяемая концентрация	Исходная концентрация			
	ω	C_M	C_H	T
Массовая доля ω	1	$\frac{C_M \cdot M}{\rho}$	$\frac{C_H \cdot M \cdot f}{\rho}$	$\frac{T}{\rho}$
Молярная C_M	$\frac{\omega \cdot \rho}{M}$	1	$C_H \cdot f$	$\frac{T}{M}$
Молярная концентрация эквивалента C_H	$\frac{\omega \cdot \rho}{M \cdot f}$	$\frac{C_M}{f}$	1	$\frac{T}{M \cdot f}$
Титр T	$\omega \cdot \rho$	$C_M \cdot M$	$C_H \cdot M \cdot f$	1
Примечание	ρ – плотность раствора; f – фактор эквивалентности вещества; M – молярная масса вещества.			

При этом в таблице 2 все же останутся некоторые недоработки.

Во-первых, термины «Исходная концентрация» и «Определяемая концентрация» не совсем верны. Молярная концентрация и титр – это концентрации: отношение количества или массы растворенного вещества именно к объему раствора. Массовая же доля (как, впрочем, и моляльность, которой нет в таблицах 1 и 2) – это не концентрации, так как в знаменателях стоит не объем, а масса раствора или растворенного вещества. Но у химиков уже издавна вошло в привычку называть и массовую долю, и моляльность концентрациями.

Во-вторых, титр, в понимании химиков-аналитиков, – это не просто отношение массы растворенного вещества к объему раствора, а концентрация, выраженная именно в граммах на миллилитр и никак иначе. Формулы, размещенные в таблице 2 правее записи «Титр T », будут возвращать концентрацию раствора в килограммах на метр кубический

(базовые единицы СИ), которые пользователи SMath вправе заменить на иные: на граммы на литр, на миллиграммы на миллилитр, на фунты на галлон или, наконец, на правильные для титра граммы на миллилитр.

Останется в таблице 2 и «крупная недоработка». Если кто-то захочет использовать эту таблицу для расчета в «безразмерных» программных средах и будет опираться на привычные в химии единицы измерения, то он получит ошибку. В справочниках стоит публиковать обе таблицы – таблицу 1 и таблицу 2 с соответствующими комментариями.

Задачу о пересчете видов выражения «крепости» раствора можно решить по-иному – не через поиск готовой формулы в интернете, а через вывод этой формулы. Сделаем это для пары «молярность-моляльность».

На рисунке 7 первой строкой записано уравнение, левая часть которого – это количество вещества в растворе, подсчитанное через молярность c_M (V – это объем раствора), а правая часть – это количество вещества в растворе, подсчитанное через молярность L . В скобках правой части уравнения записана масса растворителя: масса раствора ($V \cdot \rho$) за вычетом массы растворенного вещества ($c_M \cdot V \cdot M$). Переменную V можно, конечно, сократить, но этого не стоит делать во избежание потери физического смысла уравнения. Эта переменная сократится при решении уравнения.

$$c_M \cdot V = L \cdot (V \cdot \rho - c_M \cdot V \cdot M)$$

$$L := \text{maple} \left(\text{solve} \left(c_M \cdot V = L \cdot (V \cdot \rho - c_M \cdot V \cdot M); L \right) \right) = \frac{c_M}{\rho - c_M \cdot M}$$

$$c_M := \text{maple} \left(\text{solve} \left(c_M \cdot V = L \cdot (V \cdot \rho - c_M \cdot V \cdot M); c_M \right) \right) = \frac{L \cdot \rho}{1 + L \cdot M}$$

Рис. 7. Протокол правильного расчета моляльности раствора по его молярности

Fig. 7. Correct calculation protocol of solution molality by its molarity

Составленное уравнение решается аналитически (см. вторую и третью строку на рис. 7) с помощью приложения к SMath под названием Maple.

Генерируются правильные формулы для таблицы 2 без лишних числовых коэффициентов.

Механизм работы с физическими величинами в будущем должен будет распространен и на аналитические преобразования. Так, в уравнении на рис. 7 все переменные при их первом вводе в расчет должны быть связаны пользователем с физическими величинами – базовыми (масса, расстояние, время...) и составными (концентрация, плотность, молярная масса...). Это позволит автоматически вести контроль размерностей при аналитических преобразованиях так, как это сейчас это делается при численных расчетах.

Удобная для химиков особенность SMath – это возможность работы с особым видом имен переменных (рис. 8) с протоколом расчета жесткости (общей и карбонатной) и щелочности воды с проверкой условия электронейтральности. При этом учитывается молярная (моль на литр) и нормальная (мг-экв на литр) концентрации – см. фактор эквивалентности f в таблицах 1 и 2. В первом случае количество вещества относится к ионам, а во втором – к зарядам ионов: подсчитали число ионов или зарядов ионов и все это поделили на число Авогадро. Кроме того, карбонатная жесткость выражена с более правильными дециметрами кубическими, а не литрами. Эти единицы измерения имеют одинаковые числовые значения, но, тем не менее, это разные физические величины – *вместимость* (литры) и *объем* (дециметры кубические).

$$\begin{aligned}
 & \text{мг-ЭКВ} := \text{ммоль} \\
 [Na^+] & := 0,5 \frac{\text{ммоль}}{\text{л}} & [Ca^{**}] & := 1,5 \frac{\text{ммоль}}{\text{л}} & [Mg^{**}] & := 1,3 \frac{\text{ммоль}}{\text{л}} \\
 [HCO_3^-] & := 2,4 \frac{\text{ммоль}}{\text{л}} & [Cl^-] & := 1,3 \frac{\text{ммоль}}{\text{л}} & [SO_4^{--}] & := 1,2 \frac{\text{ммоль}}{\text{л}} \\
 \Sigma_{\text{катионов}} & := [Na^+] + 2 \cdot [Ca^{**}] + 2 \cdot [Mg^{**}] = 6,1 \frac{\text{мг-ЭКВ}}{\text{л}} \\
 \Sigma_{\text{анионов}} & := [HCO_3^-] + [Cl^-] + 2 \cdot [SO_4^{--}] = 6,1 \frac{\text{мг-ЭКВ}}{\text{л}} \\
 \mathcal{J}_{\text{общ}} & := 2 \cdot [Ca^{**}] + 2 \cdot [Mg^{**}] = 5,6 \frac{\text{мг-ЭКВ}}{\text{л}} \\
 \mathcal{I}_{\text{общ}} & := [HCO_3^-] = 2,4 \frac{\text{мг-ЭКВ}}{\text{л}} \\
 \mathcal{J}_{\text{карб}} & := \text{Min}(\mathcal{J}_{\text{общ}}; \mathcal{I}_{\text{общ}}) = 2,4 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}
 \end{aligned}$$

Рис. 8. Протокол расчета параметров природной воды

Fig. 8. Calculation protocol of natural water parameters

«Химические» имена переменных записываются внутри квадратных скобок² и могут содержать в себе операторы степени, отмечающие заряды ионов, и прочие элементы.

Рисунок 8 иллюстрирует следующую особенность. Современные нормативные документы обязывают отмечать молями (миллимолями) как молярную, так и нормальную концентрацию растворов. Но многие привыкли работать с миллиграммами-эквивалентами (мг-экв). Здесь также требуются инструменты автоматического уточнения понятия количества вещества.

Жесткость воды (суммарное содержание в воде катионов кальция и магния) – это очень важный параметр природной воды. В мире до сих пор используются различные градусы жесткости. На рис. 9 показан пересчет английского градуса жесткости в российский, из которого легко понять, что представляют собой эти два вида выражения жесткости. Английский градус жесткости соответствует содержанию одного грана (grain – зерно – одной

² В химии имена переменных в квадратных скобках обычно используются для обозначения равновесных концентраций. Но специфика компьютерных расчетов вносит коррективы в такие правила.

семитысячной фунта) CaCO₃ (карбоната кальция) в одном британском (не американском) галлоне (УКгал) воды, вернее, водного раствора. А еще есть немецкий, американский и французский градусы жесткости³. Есть попытки ввести и российский градус жесткости природной воды, приравняв его к немецкому.

$$\begin{aligned}
 \text{grain} &:= \frac{\text{lb}}{7000} = 64,7989 \text{ мг} & \text{УКгал} &:= 4,5462 \text{ л} & \text{мг-ЭКВ} &:= 2 \text{ ммоль} \\
 1 \frac{\text{grain}}{\text{УКгал}} &= 14,2534 \frac{\text{мг}}{\text{л}} \\
 \text{Eng}^\circ &:= \frac{1 \frac{\text{grain}}{\text{УКгал}}}{\left(\begin{array}{c|c|c} \text{Ca} & \text{C} & \text{O} \\ \hline 40,078 & 12,011 & 15,9994 \end{array} \right) \cdot 3} \frac{\text{г}}{\text{моль}} = 0,0712 \frac{\text{мг-ЭКВ}}{\text{дм}^3}
 \end{aligned}$$

Рис. 9. Протокол пересчета жесткости воды

Fig. 9. Water hardness recalculation protocol

Расчет, показанный на рис. 9, вскрывает еще одну проблему единиц измерения в компьютерных расчетах. Ее суть в том, что одинаковые единицы могут прикрепляться к разным размерным величинам. И это касается не только составных единиц. Например, в джоулях, деленных на килограмм, измеряют не только удельную массовую внутреннюю энергию, но и удельную массовую энтальпию (теплосодержание), хотя разные физические величины, которые нельзя складывать. Эта особенность касается и базовых единиц. Количество ионов в растворе и количество зарядов ионов в растворе предписывается измерять молями в обоих случаях. Но это разные физико-химические величины. В расчете на рис. 9 эта проблема решается вводом «незаконной» единицы количества вещества мг-экв, равной удвоенному миллимолю – грамм-молю, как писали раньше. Но это решение не вписывается в рамки СИ...

³ Пересчет значений жесткости воды. URL: <http://twf.mpei.ac.ru/MCS/Worksheets/Water/Hardness-Degree.xmcd> (accessed: 02.11.2023)

Переход к вычислениям с использованием механизма единиц измерения заставляет не только переписывать многие формулы (сравните таблицы 1 и 2), но и затронуть основу основ – метрологическое описание температуры и формулу закона идеального газа. Это подробно описано в статье [24] и поясняется следующим расчетным примером.

В баллоне вместимостью 40 литров находится кислород под избыточным давлением в 100 атмосфер технических. Температура 20 градусов по шкале Цельсия. Атмосферное давление 740 мм ртутного столба. Найти массу газа в баллоне.

На рисунке 9 показан протокол решения задачи в двух вариантах – с использованием закона состояния идеального газа и с использованием функции `CoolProp_Props`, возвращающей плотность кислорода при заданных температуре и давлении. Особенности расчета отмечены операторами в красных рамках.

Особый режим работы пакета `SMath`, описанный в разделе 8.6 книги [25], приводит к тому, что введенная температура по шкале Цельсия хранится в памяти компьютера не в кельвинах (см. четвертую строку на рис. 1), а в... джоулях, деленных на моли. В расчете (рис. 10) число 20 (числовое значение температуры по шкале Цельсия) сначала переводится в значение 293,15 (кельвины), а затем умножается на переводной коэффициент, который по традиции называют универсальной газовой постоянной. Получается число 2437,3875...

Исходные данные:

$$V := 40 \text{ л} \quad p_{\text{изб}} := 100 \frac{\text{КГС}}{\text{СМ}} = 9,8067 \cdot 10^6 \text{ Па} \quad T := 20 \text{ }^\circ\text{C} = 2437,3875 \frac{\text{Дж}}{\text{МОЛЬ}}$$

$$p_{\text{атм}} := 740 \text{ мм рт.ст.} \quad p := p_{\text{изб}} + p_{\text{атм}} = 9,9053 \cdot 10^6 \text{ Па} \quad M_{\text{O}_2} := 2 \cdot 16 \frac{\text{Г}}{\text{МОЛЬ}} = 0,032 \frac{\text{КГ}}{\text{МОЛЬ}}$$

Решение 1

$$p \cdot v = T \quad v := \frac{T}{p} = 0,0002461 \frac{\text{М}^3}{\text{МОЛЬ}} \quad q := \frac{V}{v} = 162,5562 \text{ МОЛЬ}$$

$$\text{mass}_{\text{O}_2} := q \cdot M_{\text{O}_2} = 5,2018 \text{ КГ}$$

Решение 2

$$R_m = 8,3145 \frac{\text{Дж}}{\text{К МОЛЬ}} \quad \frac{T}{R_m} = 293,15 \text{ К}$$

$$\rho_{\text{O}_2} := \text{CoolProp_Props} \left(\text{"D"; "T"; } \frac{T}{R_m}; \text{"P"; } p; \text{"O2"} \right) = 137,3485 \frac{\text{КГ}}{\text{М}^3}$$

$$\text{mass}_{\text{O}_2} := V \cdot \rho_{\text{O}_2} = 5,4939 \text{ КГ} \quad T = 0,0253 \text{ эВ } N_A$$

Рис. 10. Протокол расчета массы кислорода в баллоне
 Fig. 10. Calculation protocol of oxygen weight in the cylinder

Зачем это делать? А затем, что физики [26] уже давно измеряют температуру не кельвинами, а единицами энергии – электронвольтами, (см. последний оператор в расчете на рис. 10). История такой особенности подробно описана в¹ и [24]. Нужно же наконец-то привести в порядок «метрологический дом», куда непонятно зачем добавили в качестве основных единиц измерения амперы, канделы, моли и кельвины. Непонятно также почему там оказался именно ампер, а не ом или вольт, если вспомнить самый известный закон электричества: ток – это напряжение, деленное на сопротивление.

Лишние переводные коэффициенты необходимо убрать не только в формулах перевода видов концентрации (сравните таблицы 1 и 2), но и в уравнении идеального газа (решение 1, рис. 10) с формулой $p \cdot v = T$. В эмпирической функции CoolProp_Props (решение 2, рис. 10) температуру, измеряемую в джоулях на моли, нужно будет перевести в кельвины, поделив ее на универсальную газовую постоянную, чтобы получить численный ответ, а не сообщение об ошибке. Подобные переводы, кстати, мы делаем уже

давно. На рис. 11 показано, как нужно работать с еще одной эмпирической формулой, возвращающей теплопроводность некоего теплоизоляционного материала в зависимости от температуры, выраженной по шкале Цельсия.

$$\lambda(T) := \left| \begin{array}{l} t := \frac{T}{\text{К}} - 273,15 \\ (0,54 + 0,00023 \cdot t) \frac{\text{Вт м}}{\text{м}^2 \text{К}} \end{array} \right.$$

$$\lambda(20 \text{ }^\circ\text{C}) = 54,46 \frac{\text{Вт см}}{\text{м}^2 \text{К}} \quad \lambda(200 \text{ }^\circ\text{C}) = 58,6 \frac{\text{Вт см}}{\text{м}^2 \text{К}}$$

Рис. 11. Протокол расчета теплопроводности теплоизоляционного материала

Fig. 11. Calculation protocol of thermal conductivity of thermal insulation material

Нас когда-то чуть ли не насильно заставляли переходить от градусов Цельсия к кельвинам. Настала пора переходить нам от кельвинов к истинной единице температуры – к единице энергии, деленной на единицу количества вещества.

Спрашивается, а для чего все это нужно делать? А для того, чтобы наконец-то навести порядок в метрологической картине мира! И в этом нам помогут расчетные программы типа SMath, оборудованные инструментарием работы с именованными числами – физическими, химическими, экономическими, информационными и прочими.

Список источников / References

1. Dieterichs H. *Units of measure validator for C#*; 2012. URL: <https://www.codeproject.com/Articles/413750/Units-of-Measure-Validator-for-Csharp> (accessed: 02.11.2023).
2. Sonin AA. *The Physical Basis of Dimensional Analysis. Technical Report*. Boston, MA: Massachusetts Institute of Technology; 2001.
3. Cmelik RF, Gehani NH. *IEEE Software*. 1988;5(3):21–27. <https://doi.org/10.1109/52.2021>

4. Karr M, Loveman DB. *Communications of the ACM*. 1978;21(5):385–391.
<https://doi.org/10.1145/359488.359501>
5. Gehani N. *Computer Languages*. 1977;2(3):93–111.
[https://doi.org/10.1016/0096-0551\(77\)90010-8](https://doi.org/10.1016/0096-0551(77)90010-8)
6. Dreiheller A, Mohr B, Moerschbacher M. *ACM Sigplan Notices* 1986;21(12):114–123. <https://doi.org/10.1145/15042.15048>
7. Antoniu T, Steckler PA, Krishnamurthi S, Neuwirth E, Felleisen M. *Proceedings of the 26th International Conference on Software Engineering*; Edinburgh, UK, 28 May 2004. IEEE; 2004. pp. 439–448.
<https://doi.org/10.1109/ICSE.2004.1317466>
8. Mayerhofer T, Wimmer M, Vallecillo A. *Proceedings of the 2016 ACM SIGPLAN International Conference on Software Language Engineering*; 20 October 2016. New York, NY, United States: Association for Computing Machinery. C. 118–131. <https://doi.org/10.1145/2997364.2997376>
9. Gibson JP, Méry D. *Proceedings of the 1st International Workshop on Handling IMPLICIT and EXPLICIT knowledge in formal system development*. Xi'An, China; 2017:64-79. <https://doi.org/10.4204/EPTCS.271.5>
10. YouTube. Bekolay T. A comprehensive look at representing physical quantities in python // *Scientific Computing with Python*; 2013. Available from: <https://www.youtube.com/watch?v=N-edLdxiM40> (accessed: 02.11.2023).
11. Baumann T. *Quantities, Libraries in other programming languages*. 2017. Available at: <https://github.com/timjb/quantities/wiki/Links>. (accessed: 02.11.2023).
12. Bennich-Björkman O, McKeever S. *Proceedings of the 11th ACM SIGPLAN International Conference on Software Language Engineering*. Boston; 2018:121-132. <https://doi.org/10.1145/3276604.3276613>

13. McKeever S, Paçacı G, Bennich-Björkman O. *Proceedings of the 7th International Conference on Model-Driven Engineering and Software Development*. Prague; 2019. <https://doi.org/10.5220/0007524704410447>

14. Cooper J, McKeever S. *Softw. Pract Exper.* 2008;38(4):337–359. <https://doi.org/10.1002/spe.828>

15. Jiang L, Su Z. *Proceedings of the 28th International Conference on Software Engineering*. Shanghai, China, 2006 pp. 262–271. <https://doi.org/10.1145/1134285.1134323>

16. Ore JP, Detweiler C, Elbaum S. *Proceedings of the 26th ACM SIGSOFT International Symposium on Software Testing and Analysis*. Santa Barbara; 2017. pp. 341–351. <https://doi.org/10.1145/3092703.3092722>

17. Krisper M, Iber J, Rauter T, Kreiner C. *Proceedings of the 22nd European Conference on Pattern Languages of Programs*. 2017. pp. 1–20. <https://doi.org/10.1145/3147704.3147715>

18. Очков В.Ф. Физические и экономические величины в Mathcad и Maple. М.: Финансы и статистика, 2002. 191 с. [Ochkov VF. *Fizicheskie i ekonomicheskie velichiny v Mathcad i Maple*. Moscow: Finansy i statistika Publ.; 2002. 191 p. (In Russ.)]

19. McKeever S, Bennich-Björkman O, Salah O-A. *Software: Practice and Experience*. 2021;51(4):711–734. <https://doi.org/10.1002/spe.2926>

20. Лурье Ю.Ю. Справочник по аналитической химии. Изд. 6-е, перераб. и доп. М.: Химия, 1989. 448 с. [Lur'e YuYu. *Spravochnik po analiticheskoi khimii* [*Handbook of Analytical Chemistry*]. 6th edition. Moscow: Khimiya Publ.; 1989. 448 p. (In Russ.)]

21. Очков В.Ф., Орлов К.А., Чудова Ю.В., Ивашов А.П., Тихонов А.И. Информационные технологии в инженерных расчетах: SMath и Python: учебное пособие. СПб.: Лань, 2023. 212 с. [Ochkov VF, Orlov KA, Chudova YuV, Ivashov AP, Tikhonov A.I. *Informatsionnye tekhnologii v inzhenernykh*

raschetakh: SMath i Python [Information Technologies in Engineering Calculations: SMath and Python]: textbook. Saint-Petersburg: Lan' Publ.; 2023.472 p. (In Russ.)]

22.Очков В.Ф., Орлов К.А. Единицы измерений в трех видах формул: в физических, эмпирических и... псевдоэмпирических» // Мир измерений. 2021. №. 1. С. 37–39. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=44820834> [Ochkov VF, Orlov KA. The units of measurements in three types of formulas: physical, empirical and... pseudo-empirical. *Mir izmerenij*. 2021;(1):37–39. (In Russ.)]

23.Очков В.Ф., Орлов К.А. Единицы измерений в трех видах формул: в физических, эмпирических и... псевдоэмпирических» (окончание) // Мир измерений. 2021. №. 2. С. 57–61. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=45703984> [Ochkov VF, Orlov KA. The units of measurements in three types of formulas: physical, empirical and... pseudo-empirical (continued). *Mir izmerenij*. 2021;(2):57–61. (In Russ.)]

24.Очков В.Ф., Орлов К.А. Когда $p \cdot V = T$ // Законодательная и прикладная метрология. 2022. №. 2. С. 38–44. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=48396698> [Ochkov VF, Orlov KA. When $p \cdot V = T$. *Legal and applied metrology*. 2022(2)38–44. (In Russ.)]

25.Очков В.Ф., Тихонов А.И. Math CAD и Python: обучение по технологии STEM: учебное пособие. СПб: Лань, 2023. 472 с. [Ochkov VF, Tikhonov AI. *Math CAD i Python: obuchenie po tekhnologii STEM [Math CAD and Python: STEM education]: textbook. Saint-Petersburg: Lan' Publ.; 2023. 472 p. (In Russ.)]*

26.Курс теоретической физики Ландау и Лифшица // Википедия: [сайт]. [Kurs teoreticheskoi fiziki Landau i Lifshitsa. *Wikipedia*. Available at: <https://w.wiki/9SVC> (accessed: 02.11.2023). (In Russ.)]

Дата принятия