

Шаблоны для расчетов процессов водоподготовки

В.Ф.Очков, Чжо Ко Ко, Аунг Ту Ра Тун

Национальный исследовательский университет «Московский энергетический институт»

В статье описана новая технология организации расчетов на компьютере процессов водоподготовки с использованием «облачных» шаблонов и функций. Даны примеры расчетов с использованием этих новых IT-инструментов.

Ключевые слова: водоподготовка, Mathcad, «облачные» шаблоны, «облачные» функции.

The paper describes the new technology of the organization of calculations water treatment processes on the computer using the "cloud" of templates and functions. The examples of calculations using these new IT-tools.

Keywords: water, Mathcad, «cloud" patterns and functions.

Если необходимо в среде текстового редактора создать какой-нибудь нестандартный документ (отчет, приглашение, служебную записку и т.д. и т.п.) то, как правило, это делают не с «чистого листа», а открывают соответствующий *шаблон* (бланк), который содержит нужные заголовки и подзаголовки, форматы абзацев и текстов, поля и прочие «заготовки». Организаторы различных конференций также шлют своим участникам шаблоны для оформления докладов. Таким же образом поступают редакции журналов, рекомендуя своим авторам оформлять статьи нужным образом – по шаблону. Есть целая IT-индустрия создания шаблонов для пользователей различных компьютерных программ. (Альтернатива шаблонам – открытие старого документа. Но в этом случае велика вероятность «недоредктирования», ошибочного оставления в нем части старой информации. Из старого документа лучше убрать всю переменную часть, превратив его в шаблон с сохранением в папке шаблонов и в формате шаблонов.

Шаблоны могут быть встроены в локальную установку программы, а могут быть размещены в сети (локальной или глобальной) для скачивания (свободного или платного) всеми желающими. На рис. 1 показано диалоговое окно, появляющееся при открытии нового документа в среде Word 2013.

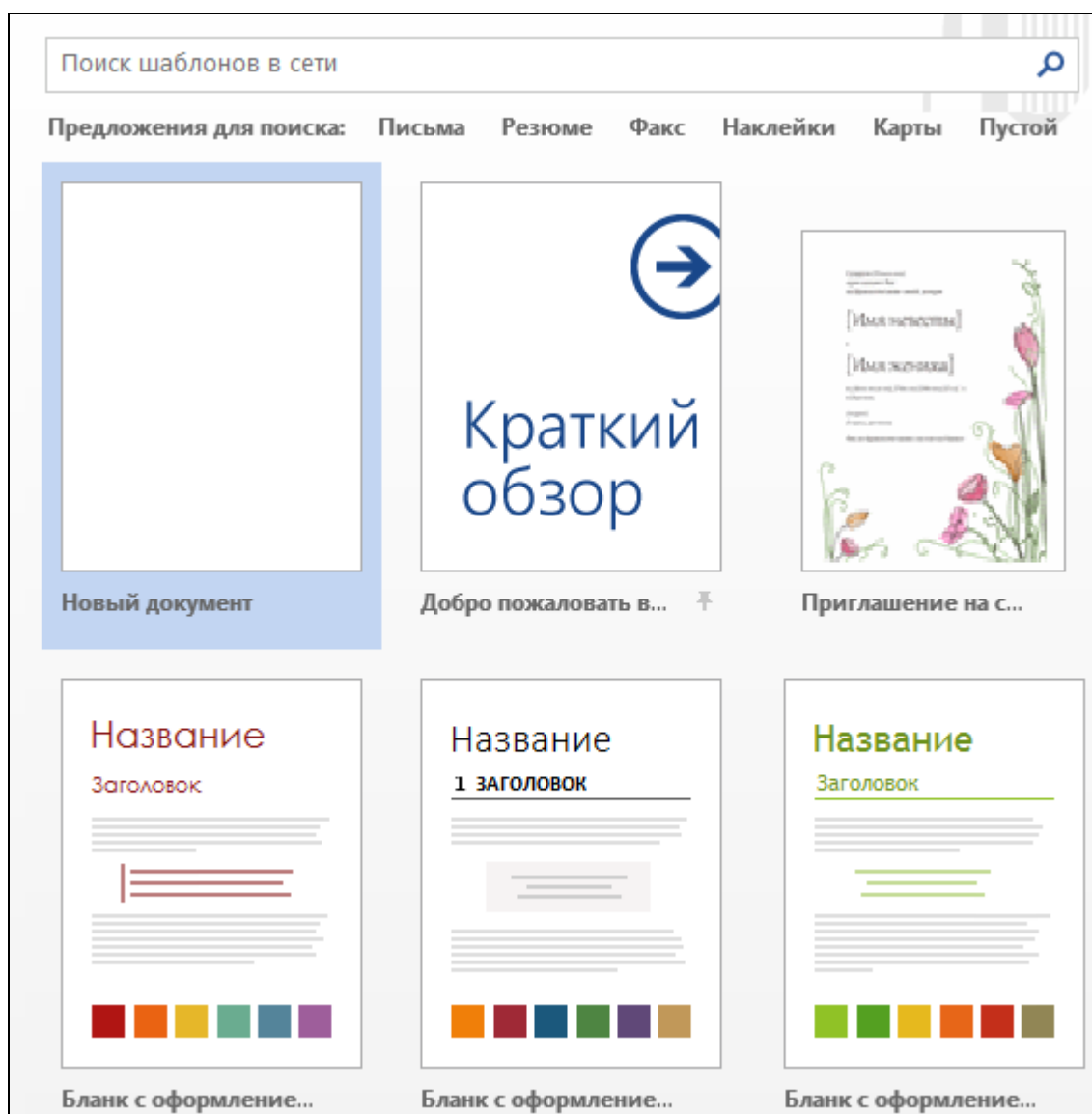


Рис. 1. Шаблоны (бланки) Word 2013

На рис. 1 показаны шесть шаблонов (а пустой – «новый» документ это тоже шаблон), вшитые в Word, и приглашение (верхняя часть рисунка) поискать что-то еще (письма, резюме, факсы, наклейки и т.д.) в Интернете (имеется в виду, что компьютер подключен ко Всемирной паутине).

Но компьютер это не только современная пишущая машинка, на которой набираются тексты, но в первую очередь – калькулятор, на котором проводятся расчеты. Последняя версия инженерного офиса (суперкалькулятора) Mathcad – Mathcad Prime 3 также может работать с шаблонами, как личными, так и размещенными в сети для общего пользования. (Сам пакет Mathcad можно бесплатно скачать с сайта разработчика <http://www.ptc.com/product/mathcad/free-trial>. Он месяц работает «в полную силу», а потом, если не оплачен, превращается в укороченную версию Mathcad Express, на которой, тем не менее, можно проводить довольно сложные расчеты).

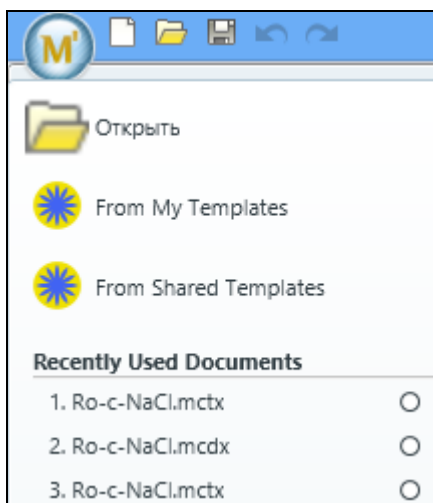


Рис. 2. Открытие шаблонов Mathcad Prime 3

На рис. 2 показан момент открытия в среде Mathcad Prime 3 документа. При этом компьютер предлагает пользователю:

- a. открыть расчет, хранящийся на дисках;
- b. скачать личный шаблон (From My Templates);
- c. скачать шаблон из локальной компьютерной сети организации (From Shared Templates);
- d. открыть расчет из списка недавно использовавшихся.

Скачивание шаблонов из Интернета, как это делается в среде Word (см. рис. 1), в среде Mathcad не предусмотрено, т.к. многие организации запрещают это делать из-за опасения заражения вирусами и троянскими программами. Шаблон из Интернета (о нем будет сказано ниже), особенно из незнакомого источника по заявке потенциального пользователя должен скачать администратор локальной компьютерной сети, протестировать его и разместить в своей организации для общего пользования.

На кафедре Технологии воды и топлива Московского энергетического института вместе со специалистами ООО «Триеру» разработаны шаблоны для расчетов, в том числе, и в области водоподготовки, которые можно скачать с расчетного сервера www.trieru.ru в разделе «Водная химия». Скаченный шаблон можно будет потом разместить в папке шаблонов своего компьютера или в локальной компьютерной сети, чтобы им могли воспользоваться коллеги.

Если, например, пользователь Mathcad Prime 3 скачает с расчетного сервера www.trie.ru файл с полным именем <http://tw.t.mpei.ac.ru/ТТНВ/1/NaCl-Solution-Prime-2.rar>, то он будет иметь инструменты (константы и функции) для расчета водного раствора хлористого натрия, который широко используется при водоподготовке, например, при Натрионировании воды в целях ее умягчения. Вот неполный перечень этих функций:

- прямая и обратная функции, связывающие плотность и концентрацию NaCl в воде;

- функции для переводов концентраций;
- функции по свойствам насыщенного раствора NaCl;
- функции по температуре замерзания раствора NaCl и др.

Последующие рисунки иллюстрируют использование данного шаблона для расчетов. На рис. 3 показано начало шаблона с его именем и с захлопнутой областью (см. линию со знаком «плюс» слева), содержащего вышеперечисленные функции.

Расчет параметров водного раствора NaCl (если температура не указана, то $t=20^{\circ}\text{C}$)

+

Концентрация (разные виды) раствора NaCl с плотностью 1.1 мг/мл

$\rho := 1.1 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$ $C_{\text{NaCl}}(\rho, "w") = 13.88\%$ $C_{\text{NaCl}}(\rho, "T") = 152.7 \frac{\text{мг}}{\text{мл}}$

$C_{\text{NaCl}}(\rho, "m") = 2.758 \frac{\text{моль}}{\text{кг}}$ $C_{\text{NaCl}}(\rho, "M") = 2.613 \frac{\text{моль}}{\text{л}}$

Плотность 0.9% раствора NaCl $\rho_{\text{NaCl}}(0.9\%) = 1.004215 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$

Титр 0.9% раствора NaCl $T_{\text{итр}}_{\text{NaCl}}(0.9\%) = 9.038 \frac{\text{мг}}{\text{мл}}$

Молярность 0.9% раствора NaCl с титром 200 $\text{Молярность}_{\text{NaCl}}\left(200 \frac{\text{мг}}{\text{мл}}\right) = 3.422 \frac{\text{моль}}{\text{л}}$

Молярность раствора NaCl с моляльностью 1. $\text{Молярность}_{\text{NaCl}}\left(1.2 \frac{\text{моль}}{\text{кг}}\right) = 1.172 \frac{\text{моль}}{\text{л}}$

Какова концентрация насыщенного раствора NaCl при 15°C

$t := 15^{\circ}\text{C}$ $w := w_{\text{насыщ}}_{\text{NaCl}}(t) = 26.41\%$ $\text{Молярность}_{\text{NaCl}}(w) = 5.423 \frac{\text{моль}}{\text{л}}$

При какой температуре замерзнет 21% раствор NaCl $t_{\text{замерз}}_{\text{NaCl}}(21\%) = -17.821^{\circ}\text{C}$

При какой температуре замерзнет 1.1 молярный раствор NaCl $t_{\text{замерз}}_{\text{NaCl}}\left(\text{Процент}_{\text{NaCl}}\left(1.1 \frac{\text{моль}}{\text{кг}}\right)\right) = -3.78^{\circ}\text{C}$

Рис. 3. Шаблон для расчетов водных растворов NaCl (начало)

Если щелкнуть мышкой по знаку «плюс», показанному на рис. 3, то эта захлопнутая область откроется (распахнется) и будут видны все функции и константы, необходимые для расчетов. Их работа показана на рис. 4, 5 и 6.

Функция с именем C_{NaCl} возвращает концентрацию раствора NaCl в зависимости от его плотности ρ . Вторым аргументом этой функции нужно указать вид концентрации: w – массовый процент (доля), T – титр, M – молярность или m – моляльность. Нормальность тут отдельно не рассчитывается, т.к. для NaCl она равна молярности. Но в других шаблонах по расчету растворов с «многозарядными» солями такой пересчет концентраций

предусмотрен. В функцию с именем ρ в качестве аргумента можно подставлять концентрации всех четырех видов – эта функция сама «разберется» что к чему и выдаст правильный ответ.

Функции с именами ω_{NaCl} , $Tитр_{NaCl}$, $Молярность_{NaCl}$ и $Моляльность_{NaCl}$ предназначены для пересчета концентрации. Аргументом этих функций будет исходная концентрация. Возвращают эти функции требуемую концентрацию. Суть остальных функций, показанных на рис. 3, не требует дополнительных комментариев.

Имея под рукой такой набор функций, несложно вести в среде Mathcad нужные расчеты, три примера которых приведены на рис. 4, 5 и 6. При этом достаточно только помнить, что такое массовый процент (доля – отношение массы растворенного вещества к массе раствора), титр (отношение массы растворенного вещества к объему раствора), молярность (отношение количества растворенного вещества к объему раствора) и моляльность (отношение количества растворенного вещества к массе растворителя). Всю остальную работу возьмет на себя пакет Mathcad. Более того, контроль размерностей, предусмотренный в Mathcad, будет отсекал многие неправильные действия пользователя.

Задача: Смешали два раствора NaCl - 100 мл с плотностью 1.18 г/мл и 150 мл с плотностью 1.1 г/мл. Что получили?		
Исходные данные	$V_1 := 100 \text{ мл}$	$\rho_1 := 1.18 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$
	$V_2 := 150 \text{ мл}$	$\rho_2 := 1.1 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$
Решение		
Массы растворов	$mass_1 := V_1 \cdot \rho_1 = 118 \text{ г}$	$mass_2 := V_2 \cdot \rho_2 = 165 \text{ г}$
Концентрации растворов	$\omega_1 := C_{NaCl}(\rho_1, \omega) = 24\%$	$\omega_2 := C_{NaCl}(\rho_2, \omega) = 13.88\%$
Параметры смеси:	$mass := mass_1 + mass_2 = 283 \text{ г}$	
$\omega := \frac{\omega_1 \cdot mass_1 + \omega_2 \cdot mass_2}{mass} = 18.1\%$	$\rho := \rho_{NaCl}(\omega) = 1.133 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$	
$V := \frac{mass}{\rho} = 249.82 \text{ мл}$	$Молярность_{NaCl}(\omega) = 3.509 \frac{\text{моль}}{\text{л}}$	
$Tитр_{NaCl}(\omega) = 205.04 \frac{\text{мг}}{\text{мл}}$	$Моляльность_{NaCl}(\omega) = 3.782 \frac{\text{моль}}{\text{кг}}$	

Рис. 4. Шаблон для расчетов водных растворов NaCl (задача 1)

Задача: Сколько нужно добавить воды в 100 мл раствора NaCl с плотностью 1.08 г/мл, чтобы получить физиологический раствор (0.9%)?

Исходные данные $V_1 := 100 \text{ мл}$ $\rho_1 := 1.08 \frac{\text{г}}{\text{см}^3}$ $\omega := 0.9\%$

Решение

Молярность исходного раствора $M_1 := C_{NaCl}(\rho_1, "M") = 2.08 \frac{\text{моль}}{\text{л}}$

Сколько в нем соли $NaCl := V_1 \cdot M_1 = 0.208 \text{ моль}$

Моляльность исходного раствора $m_1 := \text{Моляльность}_{NaCl}(M_1) = 2.171 \frac{\text{моль}}{\text{кг}}$

Сколько в нем воды $H_2O_{-1} := \frac{NaCl}{m_1} = 95.842 \text{ г}$

Моляльность физиологического раствора $m := \text{Моляльность}_{NaCl}(\omega) = 0.155 \frac{\text{моль}}{\text{кг}}$

Сколько в нем воды $H_2O := \frac{NaCl}{m} = 1338.748 \text{ г}$

Ответ $H_2O - H_2O_{-1} = 1.243 \text{ кг}$ $\frac{H_2O - H_2O_{-1}}{\rho_{H_2O}(20 \text{ }^\circ\text{C})} = 1245.1 \text{ мл}$

Рис. 5. Шаблон для расчетов водных растворов NaCl (задача 2)

Задача. Сколько нужно взять насыщенного при $t=20^{\circ}\text{C}$ раствора NaCl и сколько нужно добавить в него воды чтобы отрегенировать Na -катионитный фильтр с $d=1.5$ м и высотой слоя смолы 1.5 м. Удельный расход соли $b=70$ кг/м.куб. смолы. Концентрация регенирационного раствора соли 4%

Исходные данные $t:=20^{\circ}\text{C}$ $d:=1.5$ м $h:=1$ м $b:=70 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$ $\omega_2:=4\%$

Сколько нужно твердого NaCl , чтобы отрегенировать катионит

$$\frac{\pi \cdot d^2}{4} \cdot h \cdot b = 123.7 \text{ кг} \quad \text{или} \quad \text{NaCl} := \frac{\frac{\pi \cdot d^2}{4} \cdot h \cdot b}{\text{MM}_{\text{NaCl}}} = 2116.7 \text{ кмоль}$$

Концентрация NaCl в насыщенном растворе $\omega_1 := \omega_{\text{насыщ}_{\text{NaCl}}}(t) = 26.47\%$

$$M_1 := \text{Молярность}_{\text{NaCl}}(\omega_1) = 5.438 \frac{\text{моль}}{\text{л}}$$

$$m_1 := \text{Моляльность}_{\text{NaCl}}(\omega_1) = 6.1602 \frac{\text{моль}}{\text{кг}}$$

Сколько нужно взять насыщенного раствора NaCl чтобы отрегенировать катионит (ответ) $V_1 := \frac{\text{NaCl}}{M_1} = 389.3$ л

Сколько воды в этом насыщенном растворе $H_2O_{-1} := \frac{\text{NaCl}}{m_1} = 343.6$ кг

Регенирационный раствор $m_2 := \text{Моляльность}_{\text{NaCl}}(\omega_2) = 0.713 \frac{\text{моль}}{\text{кг}}$

Сколько в нем воды $H_2O_{-2} := \frac{\text{NaCl}}{m_2} = 2.969$ м

Сколько нужно добавить воды (ответ) $\frac{H_2O_{-2} - H_2O_{-1}}{\rho_{H_2O}(20^{\circ}\text{C})} = 2.63$ м³

Рис. 6. Шаблон для расчетов водных растворов NaCl (задача 3)

Несколько комментариев к примерам, показанным на рис. 4, 5 и 6.

Рис. 4. Объем смеси двух растворов NaCl (249.82 мл) оказался чуть меньше, чем сумма объемов исходных растворов (250 мл). Это является следствием того, что у исходных растворов концентрации разные, а плотность раствора NaCl – это не константа, а функция от его концентрации. В примере фактически решается система двух алгебраических уравнений: уравнение сохранения масс растворов ($mass_1 + mass_2 = mass$) и уравнение сохранения масс растворенного вещества ($\omega_1 \cdot mass_1 + \omega_2 \cdot mass_2 = \omega \cdot mass$).

Рис. 5. Это некий «медицинский» пример. Конечно, так физиологический раствор в больницах не готовят, но расчет, тем не менее, интересен. Пусть читатель повторит его без нашего шаблона и без Mathcad и заодно проверит вкладки авторов (и Mathcad'a).

Рис. 6. Этот пример прямо касается водоподготовки – предметной области данного журнала. Аппаратчику установки Na -катионирования воды поручили приготовить разбавленный раствор NaCl из насыщенного: определить, сколько взять исходного

раствора и сколько добавить в него воды. От расчета, показанного на рис. 5, расчет на рис. 6 отличается некой «грубостью». Если для приготовления физиологического раствора берут особо чистую соль и разбавляют ее дистиллятом или даже бидистиллятом (сейчас в медицинских учреждениях все чаще и чаще используют не дистилляторы, а установки обратного осмоса), то для регенерации Na-катионитных фильтров берут техническую соль с большой долей примесей и не обессоленную, а умягченную воду с достаточно высоким содержанием катионов и анионов – натрия, сульфатов, хлоридов, бикарбонатов и др. Тем не менее, расчет, показанный на рис. 6, тоже интересен и тоже, надеемся, «дразнит» читателей на предмет ручного счета и проверки.

В среде Mathcad 15 (предшественник Mathcad Prime) возможен недокументированный прием *ссылок* на другой Mathcad документ, хранящийся на внешнем «облачном» сервере [1], что также очень полезно при проведении расчетов.

После соответствующих ссылок (reference) в рабочем документе становятся видимыми константы и функции документа, на который сделана ссылка. На рис. 7 показан расчет потери давления в трубопроводе, по которому перекачивается водный раствор NaCl. (Тут раствор NaCl выступает в роли не регенерационного раствора, хладагента в системе кондиционирования и имеет температуру ниже нуля, но выше температуры замерзания раствора – см. соответствующую функцию в конце рис. 3). Для данного расчета нужны функции, возвращающие свойства раствора NaCl (плотность и вязкость) не только в зависимости от его концентрации, но и от температуры. Кроме того, в расчете используется «облачная» функция по расчету перепада давления в зависимости от параметров течения жидкости (числа Рейнольдса Re) и шероховатости внутренней поверхности трубы Δ .

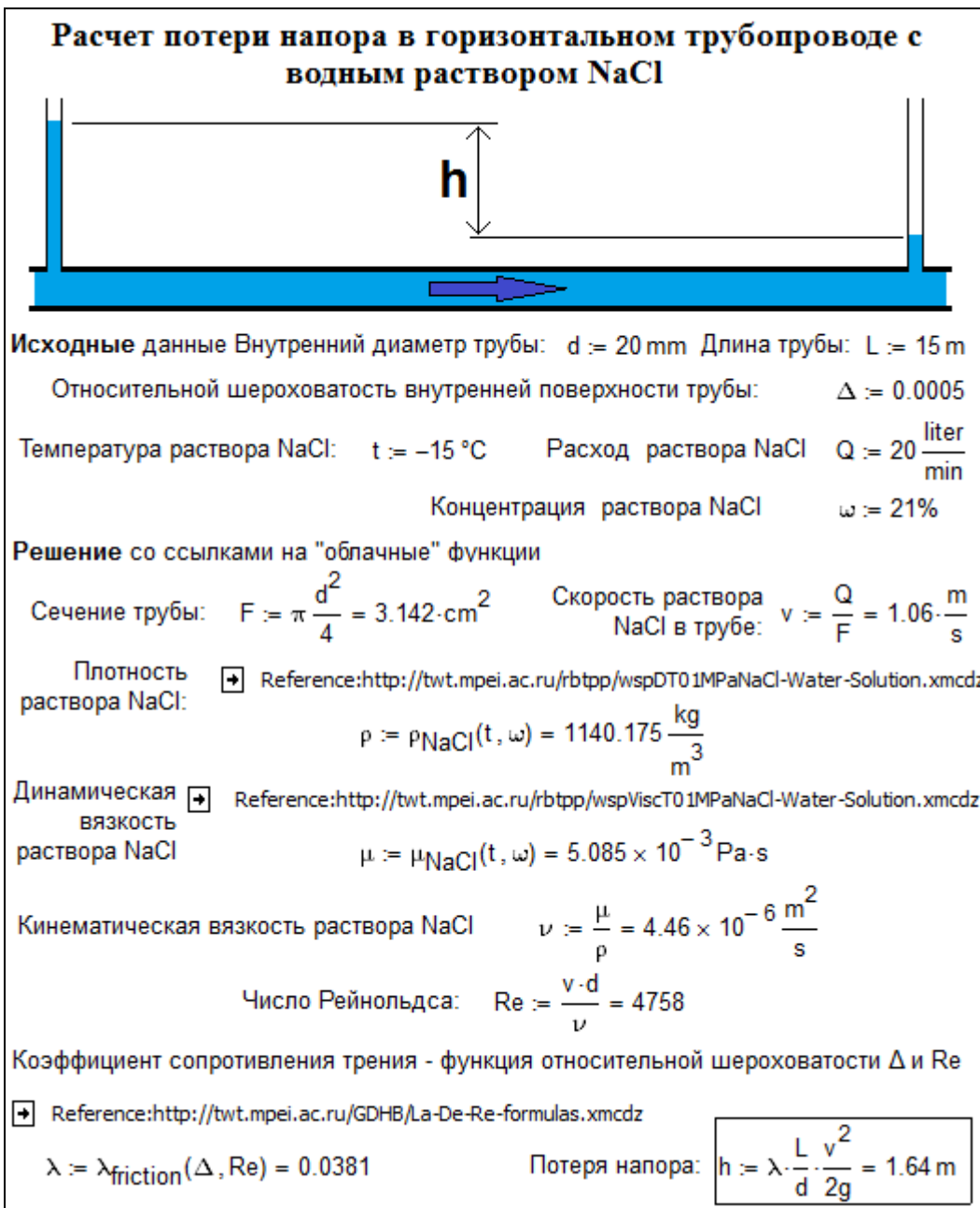


Рис. 7. Расчет перепада давления

Выводы.

Использование шаблонов существенно ускоряет расчеты, повышает их точность, снижает вероятность ошибок в них.

Данная работа выполняется в рамках проекта Национальный исследовательский университет МЭИ: «Информационная поддержка энергетики, энергоэффективности и энергосбережения – создание центра по теплофизическим свойствам веществ и решений для энергетики». Она позволяет снабдить инженеров, занимающихся проектированием, сооружением, наладкой, эксплуатацией, ремонтом и выводом их эксплуатации (утилизацией) энергетических объектов и систем водоснабжения «облачной» базой данных [2-3].

Литература:

1. Очков В.Ф., Орлов К.А., Чжо Ко Ко, Анохин Д.А. «Облачные» функции для инженерных расчетов водоснабжения // Водоснабжение и канализация № 9-10, 2012 г., С.68-74 (<http://twf.mpei.ac.ru/GDHB/CloudFunction.pdf>)
2. 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://twf.mpei.ac.ru/ochkov/WSPHB/Web-function-Power.pdf>)
3. Очков В.Ф., Яньков С.Г. Эволюция техники инженерных расчетов // Труды Международной научно методической конференции "Информатизация инженерного образования", 10 –11 апреля 2012 г., М.: Издательский дом МЭИ, С. 222-223 (http://inforino2012.mpei.ru/App_Text/proc.pdf)