УДК 546. 294: 536. 7

РАЗРАБОТКА ИНТЕРНЕТ-РЕСУРСОВ ДЛЯ ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ ПРИМЕНИТЕЛЬНО К ИОННЫМ ЖИДКОСТЯМ

Очков В.Ф., Устюжанин Е.Е., Хуснулин А.Ш., Wu J.R.

Национальный исследовательский университет МЭИ, Москва, Россия
Университет транспорта, Сиань, КНР

Работа поддержана грантом РФФИ №12-08-91166 ГФЕН.

АННОТАЦИЯ

Работа посвящена анализу Интернет - ресурсов, содержащих информацию о теплофизических свойствах ионных жидкостей (*IL)*. Рассмотрена информация, размещенная в Интернет и относящаяся к базе данных №147 *NIST (National Institute of Standards and Technology, USA*). Пользователь, обратившийся к базе данных *NIST*, может получить численные данные о теплофизических свойствах *R* для ряда жидкостей *IL*, в том числе $R = (\rho,\lambda,c_p)$ при заданных аргументах $(P,T,...)$. Указанные свойства *R* имеют форму таблиц.

Показана актуальность задачи по созданию базы данных, которая, во-первых, ориентирована на теплофизических свойствах *R* для ряда жидкостей *IL,* во-вторых, опирается на современные Интернет - технологии и, в-третьих, предоставляет пользователю широкий спектр опций, включая опции, позволяющие рассчитывать свойства *R,* а также строить соответствующие графики. Авторами разработаны алгоритмы и программное обеспечение (ПО), которые позволяют оператору, создающему базу данных: а) работать с информацией, размещенной как в Интернете, так и литературных источниках, б) формировать первичные файлы и базу данных, которые содержат справочную информацию о свойствах *R* для жидкостей *IL*. Указанная база именуется как «*IL* каталог» и предназначена для эксплуатации в Интернете.

Обсуждаются структура «*IL* каталога», а также технология создания открытых интерактивных алгоритмов и соответствующих Интернет - ресурсов (первичные файлы, математические формулы, пользовательские функции, шаблоны и др.), которые входят в «*IL* каталог».

Сделаны комментарии к опциям, которыми может воспользоваться клиент, обратившийся к «*IL* каталогу» через Интернет. Рассмотренная база данных впервые в России описывает широкий спектр теплофизических свойств для *IL*.

ВВЕДЕНИЕ

На Интернет – сайтах известных организаций (ОИВТ РАН, ГСССД, *NIST* и др.) размещены данные о теплофизических свойствах широкого круга технически важных веществ. Авторами сделан анализ источников информации, которые содержат данные о теплофизических свойствах *IL,* при этом рассмотрены литературные публикации и Интернет – сайты, включая базу НИСТ *http://ilthermo.boulder.nist.gov/ILThermo/ mainmenu.uix)*. По нашим сведениям в России отсутствует база данных, описывающая теплофизические свойства *IL*.

*Дл*я работы с указанными источниками было создано ПО в форме «*Interactive Reference Books & Online Calculations» (IRBOC*), которое содержит такие блоки, как:

- Система формирования компонентов, входящих в «*IL* каталог», Эта система позволяет оператору , формирующему базу данных, работать с указанными источниками информации, включая Интернет – сайты, и отбирать необходимые сведения по *IL*.
- Система поиска теплофизической информации, входящей в «*IL* каталог». В системе использован ряд признаков: 1) вещество, 2) теплофизическое свойство вещества, 3) литературный источник (журнал), 4) другие признаки.

• Страница отображения (СО) компонентов и признаков (первичные файлы, вещества, численные данных о свойствах *R* вещества, наименование публикации и др.). Часть указанных объектов входит в «*IL* каталог». СО может быть воспроизведена в любое время. Ее *URL* адрес, а также содержание являются уникальными.

• Система онлайн расчетов, ориентированных на теплофизические свойства *R* ряда жидкостей *IL*. Эта система предоставляет возможность оператору: 1) вычислить свойство *R*, относящееся к заданному веществу, в различных (*T,P)* - точках, здесь (*T,P)* - параметры состояния, 2) построить график *R(T,P*). Эта система является составной частью «*IL* каталога».

• Система генерации программных кодов, которая предоставляет оператору возможность создавать Интернет - ресурсы (математические формулы, пользовательские функции, шаблоны), предназначенные для вычисления свойств *R* заданного вещества. Эта система поддерживает ряд языков программирования (*Java, Matcad* и др.).

• Система генерации файлов, которая позволяет оператору создавать первичные файлы; каждый первичный файл, представляющий единицу хранения «*IL* каталога» и именуемый как «Вещество (*K,M,L,…*)», содержит информацию (свойство, вещество, численные данные о свойстве *R*, текст и др.) о заданной жидкости *IL*. Эта система поддерживает ряд форматов (*TXT*, табличный *CSV*, и др.).

СТРУКТУРА «*IL* КАТАЛОГА»

Структура базы «*IL* каталог» показана на Рис. 1, где приведены два первичных файла.

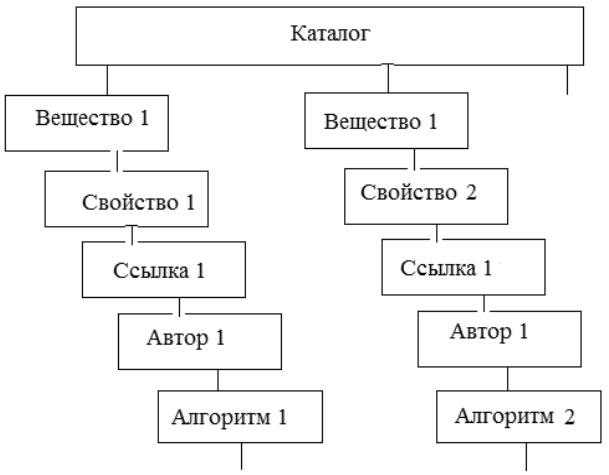

Рис.1 Структура «IL каталога».

«*IL* каталог» содержит следующие компоненты:

1. Первичные файлы; каждый первичный файл именуется как «Вещество (*K;R;L, …*)» и включает информацию, касающуюся заданной *IL,*

2. ПО, которое состоит из ряда блоков, в том числе некоторых систем, входящих в *IRBOC.*

Первичный файл включает следующие признаки и компоненты:

1) «Вещество *K*», здесь *K* – индекс вещества,

2) «Свойство *R*», здесь *R* – индекс свойства,

3) «Алгоритм *L»*, здесь *L* - индекс алгоритма, использованного для аналитического представления свойства *R*,

4) *Mathcad* – программа, например *Code- OI – IL*1*(R,Y),*

5) другие характеристики.

Например, первичный файл «*IL*1 (*K*=1*;R* =1*;L* = 1; …)» имеет такие признаки, как:

а) формула C12H19F6N3O4S2,

б) первое имя: гексил – 3 - метилимидазолий

бис (трифторметилсульфонил) имид,

в) второе имя: [*C*(6)*mim*][*NTf*2],

г) индекс *CASRN:* 382150-50-7,

д) свойство *R*=1 или плотность жидкости (*liquid density* ρ).

Для теплофизических расчетов, в которых используются Интернет-ресурсы, удобно привлекать не распространенные языки программирования (*C, Pascal, BASIC* и т.д.) и не табличные процессоры (*Excel* и др.), а так называемые математические программы: *Maple, Mathcad* [1–4] и др. При создании «*IL* каталога» авторы ограничились “общеинженерным” пакетом *Mathcad*, в среде которого успешно выполняются теплофизические расчеты применительно как к свойствам рабочих тел, так и теплообменным характеристикам энергоблоков, используемых в энергетике [5]. Пакет *Mathcad* выгодно отличается от других программ, нашедших применение в научно-технических расчетах, благодаря следующим особенностям:

- традиционная запись формул в книжной нотации, то есть виде, используемом в справочниках, учебниках и задачниках;
- использование имен переменных в той нотации, какая используется в справочниках и учебниках: а) традиционных имен, включая греческие буквы, б) индексов (верхний и нижний), в) штрихов и прочих символов;
- применение традиционных единиц измерения физических свойств;
- высокая степень адаптации инструментов *Mathcad* к Интернету; в связи с этим имеется рост числа клиентов, которые используют инструменты *Mathcad*, размещенные в Интернете, для выполнения собственных теплофизических расчетов.

ОТКРЫТЫЕ ИНТЕРАКТИВНЫЕ АЛГОРИТМЫ И МЕТОДИКА ИХ СОЗДАНИЯ

Алгоритм, входящий в первичный файл «*IL* каталога» и именуемый как открытый интерактивный алгоритм *(OI* – алгоритм), играет важную роль при формировании «*IL* каталога». Представление о том, какие источники информации необходимо использовать оператору для создания *OI* – алгоритма, дает следующий пример (Рис. 2.), где представлен алгоритм

Algor – OI – abc(R,Y,(https:\\klm),key(def)), здесь (*Algor – OI)* – обозначение того, что алгоритм является открытым интерактивным, а не алгоритмом, который, например, содержит выполняемую программу (*exe-file*);

abc – вещество, например, *IL*1*;*

R – свойство, например, энтальпия;

Y - граничные условия, которые включают:

а) входные данные *U = (P,T, ...),*

б) максимальную и минимальную температуры,

в) другие параметры;

(*https:\\klm)* – *URL* адрес,

key(def) – ключ/пароль.

1 – открытый интерактивный алгоритм

*Algor– OI – IL*1(*R,Y,* (*https:\\klm),key(def*));

2 – часть, связанная с *Mathcad* - формулами, или *Mathcad* - поле;

3 –текстовая часть или текстовое поле;

4 - часть, связанная с информатикой и Интернет – технологиями;

5 – Интернет - ресурс

*Res – OI – IL*1*(R,U,(https:\\klm), key(def)),* например, Пользовательская функция,

6 – *Mathcad* - инструменты; 7 - *Mathcad* - программа *Code- OI – IL*1*(R,Y),*

8 - технология «*Mathcad Calculation Server*»;

9 – пакет «*Microsoft Expression Web* 3», а также другие операторы;

10 – персональный компьютер (*PC)* пользователя; 11 – Интернет;

12 – сервер *BS* и Интернет - портал;

13 – индивидуальная *Mathcad* – программа клиента.

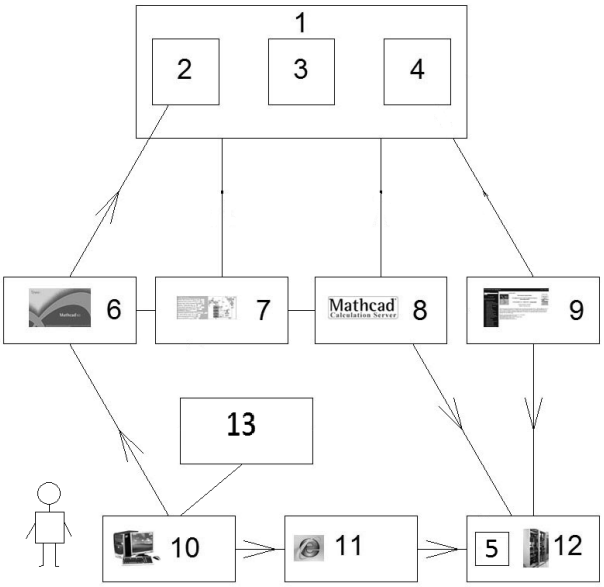

Рис.2 Схема источников информации и инструментов, используемых для создания *OI* –алгоритма.

На Рис. 2 показаны компоненты *OI* – алгоритма, в том числе: часть (2), которая связана с расчетными формулами; текстовая часть (3), содержащая справочную информацию о свойстве *R* (массив данных о свойстве *R* и др. информация)*;* часть (4), связанная с информатикой и Интернет – технологиями*; Mathcad* – программа (7), которая именуется как

*Code–OI–IL*1*(R,Y,*((*https:\\klm),key(def*)). Этот код, во-первых, содержит математические формулы (*MF*), используемые для вычисления свойства *R* в заданных граничных условиях *Y,* и, во-вторых, является составной частью Интернет-ресурса (5), который именуется как

*Res–OI–IL*1*(R,U,(https:\\klm),key(def)).*

В распространенных случаях [5] Интернет-ресурс может иметь такие формы, как: а) фор-

мула *MF,* б) Пользовательская функция или в) Шаблон (*a template*).

Что представляет собой технология, обеспечивающая размещение программы *Code – OI–IL*1*(R,Y,*((*https:\\klm),key(def*)) в Интернете? Для ответа на этот вопрос приведена поясняющая схема (Рис. 3), где показаны шаги преобразования традиционного кода на примере *Mathcad-* программы *Code-OI–Sum*((*https:\\klm),key(def*)), которая предназначена для вычисления суммы двух чисел и играющая роль формулы *MF* или Пользовательской функции, применяемых для суммирования двух чисел.

Рис.3 Преобразования, используемые при формировании *OI* - ресурса.

На первом шаге оператор, создающий шаблон для вычисления суммы двух чисел, редактирует *Code - OI - Sum* ((*https:\\klm),key(def*)) в среде *Mathcad*, следуя схеме (Рис. 3), а именно:

1) вставляет символы *WebControls* в программу *Code - OI - Sum* ((*https:\\klm),key(def*)) вместо символа присваивания,

2) группирует формулы *MF* и выделяет:

а) области, в которых выполняются основные расчеты,

б) области промежуточных результатов,

в) области условного доступа.

3) по электронной почте отсылает документ *Code - OI - Sum*((*https:\\klm),key(def*))

администратору, работающему на удаленном сервере *BS*.

Администратор, используя Интернет – технологии (Рис. 2, позиции 6,8 и 9), выполняет следующие действия:

1) выбирает *URL* адрес *(https:\\klm)* и ключ *key(def),*

2) размещает модифицированную программу *Code-OI - Sum* ((*https:\\klm),key(def*)) на сервере *BS* и формирует ресурс

Res – OI – Sum ((*https:\\klm),key(def*)), например, в виде Шаблона, по которому можно вычислить свойство *R* для жидкости *IL*1.

Клиент, которому необходимы данные о свойстве *R,* осуществляет следующие действия с помощью своего компьютера (10):

1) набирает адрес *https:\\klm*, который позволяет войти на Интернет - сайт и обратиться к *Res - OI – IL*1*(R,U, (https:\\klm),key(def));*

2) включает программу *Code - OI – IL*1*(Y,R),* использует опцию «Recalculate» и производит вычисление свойства *R* при выбранных граничных условиях *U,* которые представляют собой:

а) параметры состояния (*P,T*),

б) другие величины;

3) считывает с экрана *PC*:

а) значения свойств и параметров *(R, U),*

б) текстовую часть первичного файла,

4) вводит ключ *key(def),* который дает возможность пользователю открыть:

а) формулы *MF* или б) программу *Code - OI – IL*1*(R,Y),*

5) копирует формулы или программу *Code - OI– IL*1*(R,Y)* в индивидуальный код.

Авторами выполнены работы, связанные с формированием компонентов и текстовой части «*IL* каталога» на основе таких источников, как:

1) база данных №147 NIST,

2) научные статьи из периодических Российских изданий (ТВТ, Журнал физической химии и другие издания) и зарубежных журналов,

3) другие источники.

Отметим, что авторами были отобраны инструментальные средства, которые представляют собой *Mathcad* - и Интернет - ресурсы для создания и эксплуатации «*IL* каталога». Эти средства соответствуют современному уровню информатики, кибернетики и Интернет – технологии. Авторами были решены проблемы, которые являются важными для эксплуатации «*IL* каталога», в том числе:

а) снижение сбоев, которые возникают при совместной работе большой группы *OI* – алгоритмов в реальном времени,

б) обеспечение высокой скорости обмена данными по Интернету,

в) обеспечение безопасности работы *PC* пользователя и работы сервера *BS*,

г) проведение статистических оценок применительно к обращениям пользователей, которые интерактивно работают с «*IL* каталогом».

На рис. 5 и 6 представлены примеры *Mathcad* – и текстового полей, которые содержатся в ресурсе

Res – OI – IL2(R,U, (https:\\klm),key(def)), здесь *IL*2- имя ионной жидкости (1-*hexyl*-3-*methylimidazolium tetrafluoroborate*, формула - *C*10*H*19*BF*4*N*2),

Демонстрационный вариант «*IL* каталога», а также Интернет-ресурсов представлены на сайте http://www.irboc.com

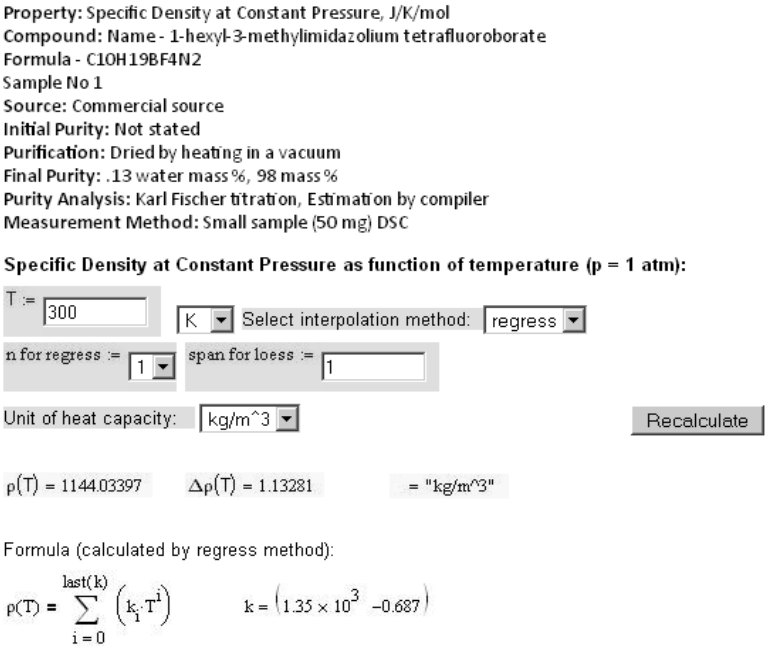

Рис.5 *Mathcad* –и текстовое поле, которые содержат информацию о жидкости C10H19BF4N2, включая *Mathcad* - операторы для вычисления плотности жидкости при P=1 физ. атм.

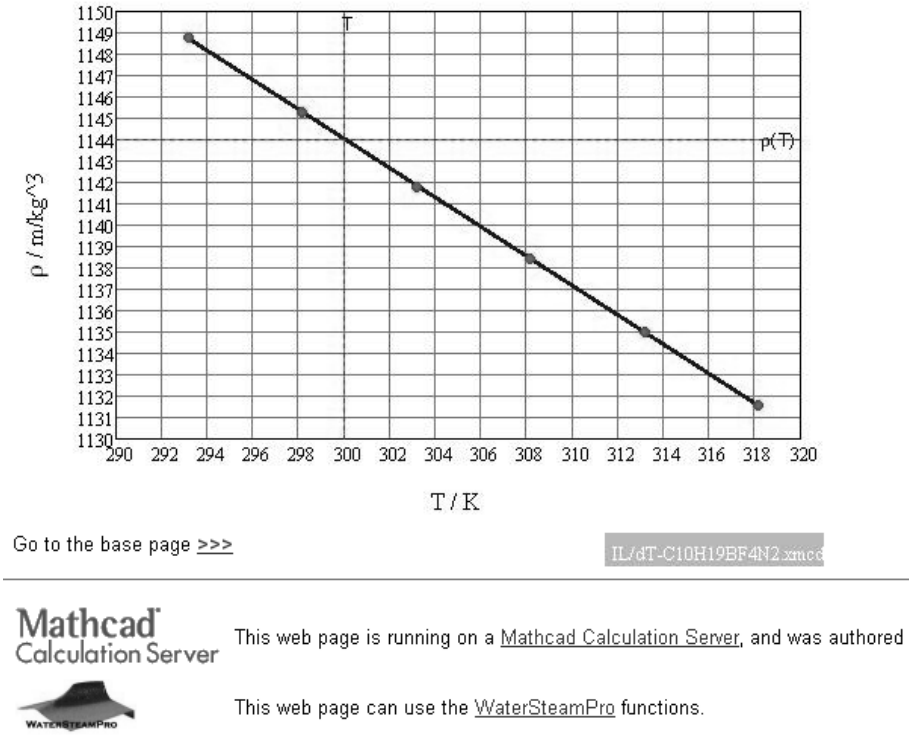

Рис.6 *Mathcad* – поле, которое отражает зависимость плотности жидкости от температуры для C10H19BF4N2 при P=1 физ. атм.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основе анализа Интернет - ресурсов, содержащих информацию о теплофизических свойствах ионных жидкостей (*IL)* сделан вывод об актуальности задачи, которая касается создания базы данных, ориентированной на теплофизических свойствах *R* для ряда жидкостей *IL* и опирающейся на современные Интернет- технологии. Авторами разработаны открытые интерактивные алгоритмы и соответствующие Интернет – ресурсы, включая первичные файлы, математические формулы, пользовательские функции и шаблоны), которые содержат справочную информацию о теплофизических свойствах жидкостей *IL*.

Сформированная база данных в виде «*IL* каталога», который размещен сайте кафедры Технологии воды и топлива НИУ “МЭИ”, предоставляет пользователю спектр опций, в том числе: а) считывание справочной информации, б) выполнение некоторых теплофизических расчетов, в) копирование пользовательских функций и шаблонов. Указанные опции ориентированы на теплофизические свойства *R* для широкого ряда ионных жидкостей.

ЛИТЕРАТУРА

1. Очков В.Ф. Mathcad 14 для студентов и инженеров: русская версия БХВ – Петербург, 2009. – С. 84.
2. Коробов В.И., Очков В.Ф. Химическая кинетика: введение с Mathcad/Maple/ MCS М.: Горячая линия-Телеком, 2009. – С. 64.
3. Korobov V.I., Ochkov V.F. Chemical Kinetics with Mathcad and Maple - Springer, 2011.– P. 95.
4. Муратов О.В. Mathcad в расчетах теплообменных аппаратов химической технологии. СПб.: Из-во СПбГТИ, 2010. – С. 40.
5. В.Ф. Очков, Е.Е. Устюжанин, В.Е. Знаменский. Анализ некоторых Интернет – объектов, содержащих информацию о теплофизических свойствах рабочих тел. Труды Академэнерго, № 2, 2011. – С. 45 – 64.

© Очков В.Ф., Устюжанин Е.Е., Хуснулин А.Ш., Wu J.R.