

FYDEX – FYZIKÁLNÍ DATA LÁTEK DO EXCELU

HLUBUČEK V.

Neratovice, v Bratislav.hlubucek@centrum.cz

Při provádění chemicko-inženýrských výpočtů v EXCELU vždy potřebujete do výpočtů zahrnout fyzikální data vašich látek a směsí. Ten, kdo byl nucen opakovaně se zabývat přípravou fyzikálních dat pro chemické výpočty, bude jistě souhlasit, že se jedná o únavnou a ne příliš tvůrčí činnost. Navíc zde přistupují obtíže s dostupností a věrohodností dat u méně obvyklých látek, převody z nestandardních jednotek a možnost zanesení chyb vzhledem k velkému množství údajů. Přitom však věrohodnost prováděných výpočtů do značné míry závisí na přesnosti fyzikálních dat. Proč tedy tuto rutinní činnost nepřenechat počítači a získaný čas nevěnovat tvůrčím aspektům řešení úlohy. To jsou hlavní výhody, které vám nabízí volný systém FYDEX. Systém FYDEX byl naprogramován jako nadstavba tabulkového procesoru EXCEL verze 97 a vyšší (ověřen v 2007) fy Microsoft, protože se jedná o široce rozšířený a výkonný systém. Funguje pod operačními systémy Windows® 2000/XP/Vista a Win7. Fyzikální data látek a směsí napojí uživatel do svých tabulek a sešitů vyvoláním speciálních funkcí, které jsou zcela analogické funkcím (vzorcům) EXCELU, které je zvyklý používat. Získá tak mocný nástroj k provádění jednoduchých ale i komplexních výpočtů, aniž by musel znát programování. Stačí pouze definovat složky směsi, jejich koncentrace a v listu sešitu vyvolat funkce pro výpočet jednotlivých fyzikálních veličin v závislosti na teplotě a tlaku. FYDEX zahrnuje fyzikální vlastnosti 530 nejfrekventovanějších organických látek a technických plynů.

K jakým výpočtům a jak systém FYDEX používat?

Systém FYDEX můžete používat již od nejjednodušších výpočtů pouhých fyzikálních vlastností, tedy místo tabulek. Jistě vás brzy napadne, že si můžete vytvořit interaktivní rychlý systém pro zobrazení libovolné směsi a to včetně grafického zobrazení za použití mocných grafických prostředků EXCELU. Sám FYDEX již takovou možnost tabelace v sobě obsahuje. Odtud už je pouhý krok k výpočtům typu:

- přestup tepla, tepelné výměníky,
- tlakové ztráty v potrubí,
- výpočet škrticích orgánů (clony, regulační ventily),
- chemické reakční systémy,
- jednodušší destilační problémy,
- přepočty provozních dat na fyzikální veličiny,
- analýza a grafické zobrazení provozních nebo experimentálních dat,
- výuka studentů,
- látková a entalpická bilance uzlů a procesů.

Jistě vás napadne i mnoho dalších aplikací, jejichž vytvoření bude díky systému FYDEX velmi snadné.

Stažené soubory v komprimované formě *fydex.zip* rozbalíte do samostatného podadresáře vašich aplikací v Excelu. Aby byl systém FYDEX funkční, musíte mít na svém počítači již samozřejmě nainstalován EXCEL. Systém spustíte otevřením FYDEX.XLA. Spustí se Excel a na horním řádku bude mít nabídku FYDEX. U verzí 2007 a vyšší ji najdete pod záložkou *Doplňky*.

Použití je velmi jednoduché, jak vyplývá z následujících příkladů: Nejprve spustíme EXCEL s doplňkem FYDEX dvojklikem na *fydex.xla*.

Potom si ze seznamu látek vyberete složky vaší směsi a pak zadáte jejich složení (Obr. 1).

Použité směsi jsou zobrazeny na listu *Definice směsí* (Obr. 2).

Na listě *Aplikace* a dalších pak uživatel programuje svůj výpočet za využití vzorců pro výpočet fyzikálních vlastností.

T je buňka obsahující teplotu směsi (absolutní v K). Je buď pojmenovaná a pak je možno uvádět přímo T, nebo je to absolutní odkaz na buňku, např. \$D\$8. Obdobně P je buňka obsahující absolutní tlak směsi v Pa.

Xsl1 je rozmezí buněk obsahující složení v molárních zlomcích. Je buď pojmenovaná (zajišťuje systém) a pak je možno přímo uvádět Xsl1, Xsl2, Xsl3 apod., nebo absolutní rozmezí, např. \$D\$10:\$D\$29

FYDEX obsahuje na 89 uživatelských vzorců.

FYDEX se ovládá pomocí nabídky FYDEX v nabídkách EXCELU. U verzí 2007 a vyšších je skryta pod kartou *Doplňky*. Zde je 31

Tab. – Příklady vzorců v buňkách sešitu EXCELU

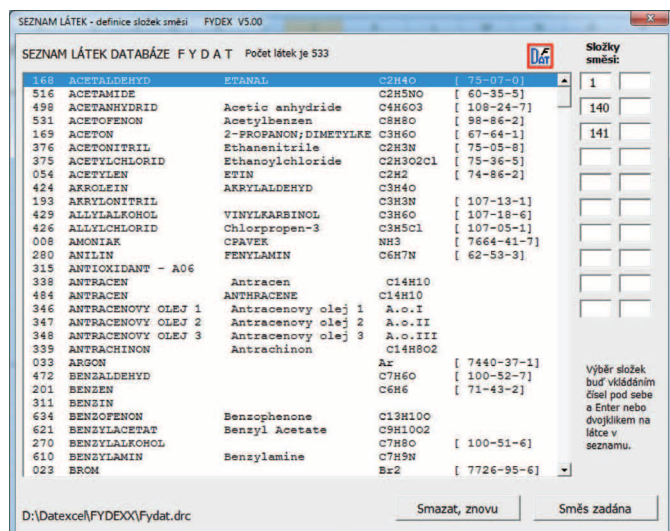
=HustL(1;T;Xsl1) nebo =ROLW(1;\$D\$8;\$D\$10:\$D\$29)	hustota kapalná fáze 1. směsi (kg/m ³) <i>některé funkce mají dvojitý vyjádření (ROLW i HustL)</i>
=HustG(1;T;P;Xsl1) nebo =ROGW(1;\$D\$8;\$E\$8;\$D\$10:\$D\$29)	hustota plynné fáze 1. směsi (kg/m ³)
=CPLW(2;T;Xsl2) nebo =CPLW(2;\$D\$8;\$D\$10:\$D\$29)	měrná tepelná kapacita c _p kapaliny 2. směsi (J/kg/K)
=RHustG(1;T;P;Xsl1) nebo =RROGW(1;\$D\$8;\$E\$8;\$D\$10:\$D\$29)	hustota plynné fáze 1. směsi s korekcí na reálné chování za vyšších tlaků
=ViskL(1;T;Xsl1) nebo =ViskL(1;\$D\$8;\$D\$10:\$D\$29)	viskozita kapalná fáze 1. směsi (Pa.s)
=VodG(3;T;Xsl3) nebo =VodG(3;\$D\$8;\$D\$10:\$D\$29)	tepelná vodivost plynné fáze 3. směsi (W/m/K)
=TBV(1;P;Xsl1) nebo =TBV(1;\$E\$8;\$D\$10:\$D\$29)	teplota bodu varu 1. směsi (K)
=TBV(2;T;Xsl1) - 273.15 nebo =TBVC(2;T;Xsl1)	teplota bodu varu 2. směsi (°C)
=TnbviC(1;3)	teplota norm. b.v. třetí složky první směsi
=Xsloz(1; 6)	mol. zlomek 6. složky první směsi
=Fnazevs(2; i)	název i-té složky 2. směsi
=PrG(1;T;P;Xsl1)	Prandtlovo číslo plynné fáze 1. směsi
=MV(„Na2SO4“) nebo =MV(B5)	výpočet mol. hmotnosti (kg/mol) ze strukturního vzorce

činností od založení úlohy, až po její ukončení, včetně pomocných. Sešit s aplikací se ukládá jako jiné standardní sešity. Uživatel má také možnost přepínat mezi automatickým a manuálním přepočítáváním vzorců sešitu. Manuální se hodí při tvorbě sešitu, aby nedocházelo k zbytečným vyčíslováním, případně chybovým stavům v ještě nedoučené úloze.

Vlastnosti zahrnuté do báze:

- molární hmotnost (kg/mol),
- kritické veličiny (tlak, teplota, objem: Pa, K, m³/mol),
- acentrický faktor (-),
- index lomu (-),
- teplota normálního bodu varu (K),
- teplota tání (K),
- teplo tání (J/mol),
- bod varu (při obecném tlaku: K),
- teplota rosného bodu (K),

Obr. 1



Obr. 2

A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L
1	Definice směsi látek používaných uživatelem										
2	č slož	Název	Vzorec	Mol hm.	Tkrit	Pkrit	Vkrit	Tnbv	Složení		
3	1	1 směs		(kg/mol)	(K)	(MPa)	10 ³ m ³ /mol	(°C)	Poměrové	Hm zl	Mol zl
4	1	1 VODA	H2O	0.018	647,3	22.04	56.00	100.0	1	0.25000	0.42656
5	2	140 METANOL	CH4O	0.032	512,6	8.09	118.00	64.5	1	0.25000	0.23903
6	3	141 ETANOL	C2H6O	0.046	516,2	6.38	167.00	78.3	2	0.50000	0.33361
7	4										
8	5										
9	6										
10	7										
11	8										
12	9										
13	10										
14	11										
15	12										
16	13										
17	14										
18	15										
19	16										
20	17										
21	18										
22	19										
23	20										
24	SI	3	Načtení fyz dat							1,0000	1,0000

- výparné teplo (J/mol, J/kg),
- hustota kapaliny i parní fáze (kg/m³),
- viskozita dynamická kapalné i parní fáze (Pa.s),
- měrná tepelná kapacita kapalné i parní fáze (J/mol/K, J/kg/K),
- tepelná vodivost kapalné i parní fáze (W/m/K),
- povrchové napětí (N/m),
- tenze par (Pa),
- základní termodynamické funkce (entalpie, entropie, vnitřní energie),
- Joule-Thompsonův koeficient,
- adiabatický exponent.

Údaje jsou uvažovány v základních jednotkách soustavy SI, pokud není uvedeno jinak.

Výpočty prováděné s FYDEXem můžete výhodně kombinovat i s využitím Řešitele (Solver) systému EXCEL. Například pokud ve směsi různých alkoholů hledáte takový obsah etanolu, při zachování poměru zbývajících složek, aby bod varu směsi byl řekněme 100 °C. Řešitel vyžaduje, aby všechny buňky úlohy byly na aktivním listě. Proto máte dvě možnosti: buď si výpočet bodu varu směsi přidat na list Definice směsí, kde už je zadáno složení, nebo si na listě aplikace vytvořit dva sloupce nového složení. Obdobně se s řešitelem řeší i úlohy komprese nebo škrcení, kde jde o hledání nulové změny entropie či entalpie směsi.

Jak lze systém FYDEX získat

Pro nekomerční použití můžete FYDEX volně používat a stáhnout si ho z webové stránky autora hlubucek.net v nabídce Aplikace nebo též případně ze stránky fydex.webz.cz a jeho použití řádně ocitovat. Vyzkoušejte si ho. Nenahradí vám samozřejmě drahé simulační programy, ale jistě rozšíří paletu a hlavně operativnost vámi řešených problémů. Vám i studentům umožní osahat si problém citlivostní analýzou typu "co když".