

# 给水管网水质化学稳定性判别软件开发与应用

牛璋彬, 张晓健, 张玉云, 王洋

(清华大学环境科学与工程系, 北京 100084)

**摘要:** 维持给水管网水质化学稳定性是目前供水领域研究的热点, 人们使用稳定指数、腐蚀指数、溶度积、pC-pH 图等工具对管网水质化学稳定性问题进行判别, 但是由于其涉及的问题多、过程复杂、计算繁冗, 难以被自来水厂实际工作人员掌握并加以使用, 为此本文介绍了一套自主开发的标准化、系统化、专业化的给水管网水质化学稳定性判断的计算软件(WCSAS), 该系统具有较强的通用性、实用性、灵活性, 能够解决大多数给水管网水质化学稳定性判断的问题, 判别结果能以图、文等多种形式表达。

**关键词:** 给水管网; 化学稳定性; 腐蚀指数; 软件开发

## Development and Application of Water Chemical Stability Analysis Software in Distribution Systems

NIU Zhang-bin, ZHANG Xiao-jian, ZHANG Yu-yun, WANG Yang

(Department of Environment Science and Technology, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**Abstract:** Maintain water chemical stability in drinking water distribution systems is viewed as a new frontier by the water industry. Methods such as saturation indices, corrosion indices, solubility calculation, pC-pH figure were used to determine water chemical stability. These methods were difficult to apply in practice because of the complexity of calculation processes and the intricacy of the deduction course. Therefore, the software for the determination of water chemical stability was developed. The water chemical stability Analysis software (WCSAS) taken on the characteristics as standardization, systematization and specialization could determine most water chemical stability problem and express the results in figures and texts.

**Key words:** drinking water distribution system; chemical stability; corrosion indices; software development

为了保障供水的安全性, 人们提出了管网水质稳定性的概念, 认为自来水进入给水管网后其所含化学成分、微生物等各个水质指标不应发生变化。管网只应起到输配水的作用, 在输配过程中不能改变自来水的水质。由于管网水通常不稳定的水质指标可以分为化学指标和微生物指标, 给水管网水质稳定性又可以分为水质化学稳定性和生物稳定性。

管网水化学稳定性包括很多方面, 如碳酸钙沉积、铝沉积和铁超标问题等。通过前期的研究<sup>[1,2,3,4]</sup>, 课题组已经提出了管网水质化学稳定性问题的判别方法体系, 但是由于判别涉及的理论知识复杂<sup>[5]</sup>、计算步骤繁冗, 很难被自来水厂操作人员直接掌握使用。为此急需开发出管网水质化学稳定性判别软件, 将其应用到实际中。

当今, 随着计算机技术的飞速发展, 计算机应用在企业管理中的普及, 利用计算机实现数据计算处理、信息处理势在必行。管网水质化学稳定性判别软件的应用对研究饮用水进入管网后的行为非常重要, 是饮用水安全、健康的保证, 有利于提高水厂的管理水平。

本文对清华大学环境系开发的我国首套化学稳定性判别软件(Water Chemistry Stability Analysis Software, 简称 WCSAS)的设计和应用情况进行了介绍。

### 1 软件的设计原则与要求

WCSAS 是一套标准化、系统化、专业化的给水管网水质化学稳定性判断的计算系统, 具有较强的通用性、实用性、灵活性, 能够解决大多数给水管网水质化学稳定性判断的问题, 结果以表、图、文等多种形式表达。

---

基金项目: 国家高技术研究发展计划(863 计划)资助项目(2006AA06Z301)

作者简介: 牛璋彬(1980-), 男, 博士生。主要研究方向为给水管网水质稳定性控制机理与技术。Email: nzb03@mails.tsinghua.edu.cn

在开发该软件时，设计者考虑了 4 个设计原则，分别为通用性原则、实用性原则、简捷性原则和标准化原则。

(1) 通用性原则。软件能够胜任相应模块的所有计算，而不是针对某一实验或某一例题开发。

(2) 实用性原则。软件要紧密切合实际，使其能真正运用于生产、教学和相关决策过程中。

(3) 简捷性原则。要求软件的表现形式简单、直观，操作简便，做到窗口清晰、界面友好。

(4) 标准化原则。软件要强调结构化、模块化、标准化，特别是数据接口要标准统一，保证连接通畅。

为了便于软件的推广使用，设计者提出了 6 个设计要求。

(1) 软件界面友好，便于操作，能够向自来水厂进行推广应用；

(2) 软件需要涵盖所有化学稳定性问题，通过输入各个水质参数，得到不同化学稳定性问题的判别结果，结果以图、文等多种形式表达；

(3) 软件应针对不同的化学稳定性问题，设置不同的计算模块，每个模块设有独自的输入项、计算单元和输出项；

(4) 软件应该包括帮助文件（使用说明书）和相应的计算实例；

(5) 软件可以把输入和输出数据存成一个相应的文件，该文件可以在 Microsoft 软件平台下进行数据转换，便于作图；

(6) 软件在考虑各个化学稳定性判别时，设置的计算参数和变量应该全面系统。

## 2 软件的设计框架

WCSAS 软件的总体设计技术路线如图 1 所示，开发者首先对国内外关于管网水质化学稳定性现状进行了调研和分析，结合自己前期的研究成果，建立起水质化学稳定性判别方法体系，从而设计软件的结构及所要实现的功能，编写生成软件的语言，初步实现软件相应的功能，利用实际测定的数据对软件进行校核，最终得到 WCSAS 软件。

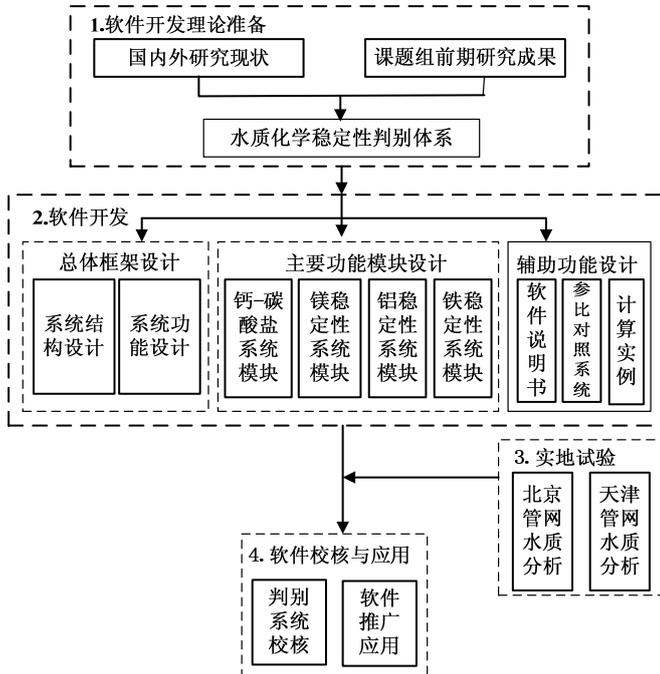


图 1 软件的总体设计流程图

### 2.1 结构设计

软件的界面设计主要包括软件启动界面设计、架构设计、菜单设计和软件图标的设计。

启动界面和图标是软件个性化的体现，启动界面要求象征性强、识别性高、视觉传达效果好；而软件的图标需要在小面积内表现出软件的功能涵义。根据这些要求对启动界面和软件图标进行了设计。软件的启动界面和图标包含了软件的基本信息，软件的名称为给水管网水质化学稳定性判别软件，用 WCSAS 表示，WCSAS 是 Water Chemistry Stability Analysis

Software 的英文首字母缩写。

架构设计也就是界面的框架设计。WCSAS 界面由六个不同的区域组成：

- ◇标题栏
- ◇菜单栏
- ◇工具栏
- ◇计算窗口
- ◇树状系统窗口
- ◇列表窗口

下图是 WCSAS 界面的布局。这些组成元素具有标准窗口的特性。



图 2 软件的界面布局图

### (1) 标题栏

标题栏沿着窗口的顶部显示软件的名称——给水管网水质化学稳定性判别。如果应用程序已保存，则在标题栏上标明的是当前使用的应用程序的名称——WCSAS。

### (2) 菜单栏

菜单栏位于标题栏的正下方，用户可以通过选择菜单中的相应的命令实现对活动文档的有关操作。菜单命令按其性质分成菜单栏上的 4 组菜单。WCSAS 菜单栏 提供的菜单命令如下：

文件：执行与文件有关的操作，包括文件的打开、保存、退出等。

编辑：实现对已有列表的命名、删除和清空列表的功能。

计算：包括各个稳定性问题的计算系统，新建计算界面。

帮助：有关 WCSAS 的信息和软件的使用说明书。

WCSAS 的各种操作均可以通过上述 4 组菜单栏中的命令项完成，有些命令也可以通过“快捷键”来实现。观察菜单，会发现一些菜单命令的右边显示有此命令的快捷键。

### (3) 工具栏

在菜单栏的下方是工具栏，工具栏充分体现了窗口图形界面的方便之处。工具栏提供了新建、打开、保存、删除等工具按钮，用鼠标单击工具按钮可立即执行相应操作。

### (4) 计算窗口

计算窗口占据着大部分屏幕，这就是数据输入、判别结果输出的区域。打开软件时这个窗口显示软件的基本信息。在 WCSAS 中，可以打开不同的稳定性问题、不同判别指数的计算界面。该窗口的界面元素主要由三个元素组成：命名栏、数据输入栏、判别结果输出栏，这些元素在固定的位置上显示。每个输入栏的右边都有一个方框，作用是显示是否进行数据输入，输入数据前后方框会由黄色的“×”变成绿色的“√”。

### (5) 树状系统窗口

树状系统窗口由各个稳定性问题的计算系统组成，选中命令后双击鼠标左键可以在计算

窗口新建相关的计算判别窗口，并且新建的窗口会自动保存到列表窗口中。树状系统窗口的基本功能与菜单栏中的“计算”菜单相同，但更具有操作快捷、直观醒目的特点。

### (6) 列表窗口

列表窗口在计算窗口的下方，计算界面和计算类型会自动保存到列表窗口。窗口名称和计算类型两部分内容组成。若没有对计算命名，名称栏显示“未命名计算”，选中后点击鼠标右键，选择“修改标题”可以对未命名计算进行命名。双击列表中的任意一行，可以查看原始的计算界面，还可以对输入数据进行修改。选中列表中的任意一行，单击工具栏的删除按钮，可以进行删除。单击清空按钮可以清空整个列表。关闭软件时系统提示是否保存文件，选择保存命令会把整个计算列表保存下来。通过软件的“打开”命令打开已保存的文件，可以查看列表中的任意一项计算的计算界面，同样也可以对计算进行修改。

菜单根据软件的功能进行设计。文件、编辑、计算、帮助是菜单栏的四个组成部分。其中“计算”是实现软件主要功能的主菜单。计算菜单包括钙——碳酸盐系统稳定性、镁稳定性、铝稳定性、铁稳定性四个次级菜单，以下拉菜单的形式设计，而各个稳定性问题又根据其判别的方法包括各自的子菜单。使用时，单击鼠标左键选择命令，计算窗口会显示选择的计算界面。

## 2.2 功能设计

软件的功能由主要功能和辅助功能两部分组成。主要功能是实现管网水质化学稳定性判别功能的核心。主要功能包括以下四大判别功能模块，如图3所示：

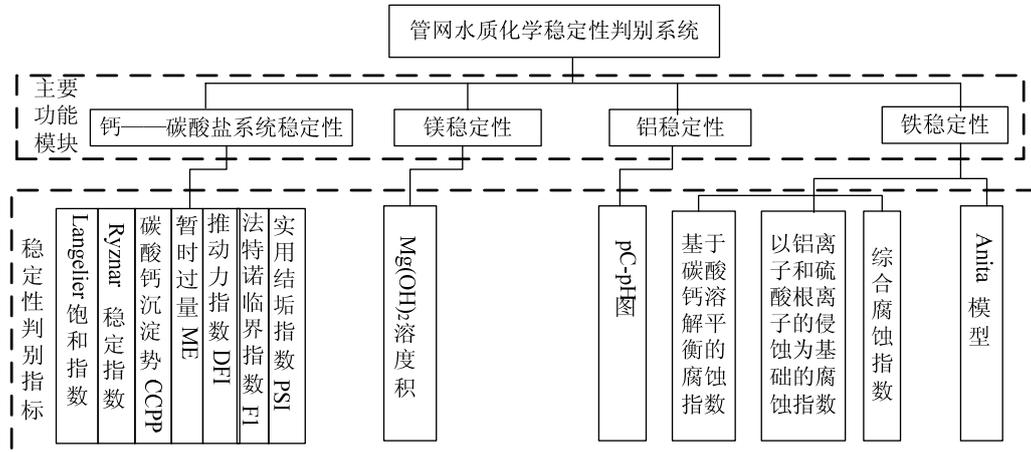


图3 软件的四大判别功能模块

1) 钙——碳酸盐系统稳定性。对于钙——碳酸盐系统的判断指数较多，软件选择 Langelier 饱和指数、Ryznar 饱和指数、碳酸钙沉淀势 CCPP、暂时过量 ME、法特诺临界指数 FI、实用结垢指数 PSI 等六个指数作为这一系统稳定性的判别指标。这一计算模块分别根据各个指数的计算公式建立函数关系，以指数的判别标准为临界条件进行源程序的编写。此模块可实现各指数值的计算和此系统稳定性的判别。

2) 镁稳定性。在水中溶解性的镁为二价离子，络合物少，因此镁离子的稳定性主要根据沉淀溶解平衡，通过比较溶度积来进行判断。应用氢氧化镁溶度积的计算公式进行程序设计。

3) 铝稳定性。根据 pC-pH 图进行判别。首先假定水中不含磷酸盐，只考虑 的沉淀作用，绘制可溶性 与 相平衡的 pC—pH 图；之后假定没有 的沉淀，绘制 的 pC—pH 图，将两图合并，可以得到判别铝的 pC-pH。通过建立模型的得出总铝与 pH 的关系函数进行程序设计。此功能模块可以输出铝的 pC-pH。根据 pC-pH 图，我们可以很直观的在图上找出某个 pH 条件下，Al 的种类、存在形式和浓度。

4) 铁稳定性。铁稳定性判别由腐蚀指数和铁释放量两部分组成。利用腐蚀指数进行腐蚀判别，腐蚀指数根据建立原理分为三大类：基于碳酸钙溶解平衡的腐蚀指数、以氯离子、硫酸根的中性离子侵蚀为基础的腐蚀指数、考虑多个水质参数的综合指数。这个模块的腐蚀指数包括：侵蚀指数 AI、Larson 指数 LI、经验指数 Y、Riddick 指数 RI、Casal 指数 CI。采用 Anita Tangra 建立的包括腐蚀、碳酸盐系统和溶解沉淀的模型进行铁释放量计算。此模块的腐蚀指数和铁释放量是独立计算的，分别输出腐蚀指数值和水中二价铁离子、三价铁离子、氢氧化铁沉淀的浓度及其随时间变化的关系曲线。

辅助功能的作用在于为用户提供详细的、易于理解的帮助，包括软件使用说明书、参比对照系统、判别实例三部分内容。

1) 使用说明书。包括软件界面各个窗口、菜单的功能介绍，各个稳定性系统的详细计算说明，参数的选取说明、软件的操作使用说明。

2) 参比对照系统。介绍国内外对各个判别指数应用，使用户对判别指数的应用情况及其局限性有所了解，便于参比对照。

3) 判别实例。利用软件分别对实际城市给水管网的化学稳定性进行判别，并进行详细的分析，为用户提供判别参考。

### 3 软件的技术实现

软件总体的技术实现分程序设计及界面可视化实现和软件校核两步完成。具体步骤为：通过文献调研对化学稳定性问题及其判别方法进行分析、选择和分类，为软件开发做好理论准备，从分别从结构和功能两方面进行软件设计；同时进行实地试验以修正模型、校核软件。

#### 3.1 程序设计及界面可视化实现技术路线

以 WinXP 为软件开发平台，以面向对象、功能强大、使用普遍、执行速度快的 Visual C++ 作为软件开发工具。通过 VC++ 强大开发能力开发出融合大量科学计算功能的应用程序，并通过 VC++ 自带的可视化功能实现软件可视化界面的设计。系统判别功能实现的逻辑流程如图 4 所示。

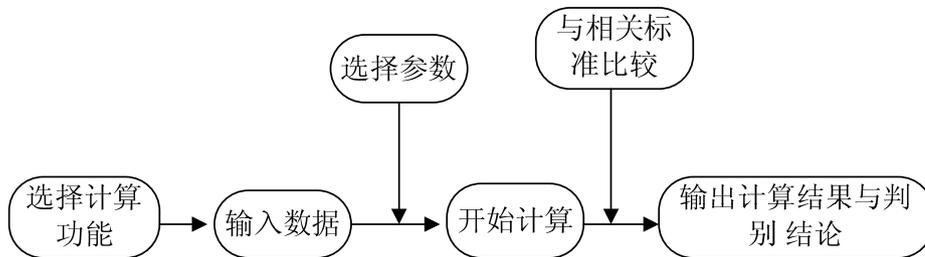


图 4 软件的程序设计及界面可视化设计技术路线图

#### 3.2 软件校核技术路线

软件校核是修正判别方法模型和调试软件程序直至软件运行判别结果与实际情况相吻合的过程。也是一个完善模型、调整参数、反复进行模拟计算的过程。软件校核的总体思路：首先比较实际情况与软件判别结果的差异，找出存在差异的原因，完善、修正模型，直到模型判别结果与实际情况一致。若软件的判别结果与实际情况相比较存在明显的不合理，则还应核实试验数据的准确性。软件的校核过程也是软件的应用过程，软件校核无误后就可以推广到水厂管网水的化学稳定的检测中。具体实现是将实际城市的管网水测定的实验数据应用判别软件进行分析，若软件判别结果与试验结果相符合，可将软件推广使用；若软件判别结果与试验结果不相符合，通过检查各个环节包括对判别模型进行修改及对程序进行调节测试，直到实际结果和软件输出结果相关性良好。软件校核的过程如图 5 所示。

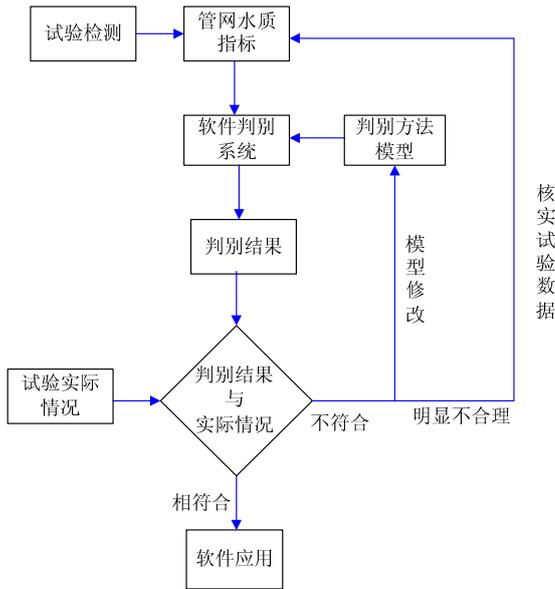


图 5 软件的校核技术路线图

#### 4 软件的使用说明与应用案例

##### 4.1 软件的使用说明

开发出的 WCSAS 软件的具体使用方法如下：使用鼠标左键双击软件运行图标，进入 WCSAS 软件主界面，双击左边树型结构中的判别系统的任意项，如“钙——碳酸盐系统→Langelier 饱和指数”，右边即是 Langelier 饱和指数的计算判别窗口，右上为系统数据输入端，输入框右端有输入项的单位和方框，输入数据前后方框会由黄色的“×”变成绿色的“√”。右下为数据计算值及判别结果输出端。也可以从“计算”菜单单击选择下拉菜单，打开计算界面。

计算界面将保存在此次计算列表中，双击列表的名称栏可以对未命名的计算进行命名，例如“1#”，名称之后是计算类型的说明。双击列表中的相应名称，如“1#”，可调用“Langelier 饱和指数”计算界面。可对输入数据进行修改后重新计算、保存。点击删除按钮确认后将会删除列表中的某一列。点击清空按钮确认后会清空整个计算列表。关闭软件时系统提示是否保存文件，选择保存命令会把整个计算列表保存下来。通过软件的“打开”命令打开已保存的文件，可以查看列表中的任意一项计算的计算界面，同样也可以对计算进行修改。若输出图片，单击“图片另存为”按钮对图片进行命名保存。

##### 4.2 软件的应用案例

软件可以针对实际管网中的钙——碳酸盐系统，镁稳定性系统，铝稳定性系统和铁稳定性系统进行判别分析，由于篇幅有限，这里仅对钙——碳酸盐系统判别的一个应用案例进行介绍。

首先根据管网水的水质监测值输入计算软件，软件运行后对各个指数进行计算，综合分析得到的判别结果，总结出管网水的钙——碳酸盐系统稳定性特点。

例：某给水管网 1#点水质检测值如表 1 示。Ca 离子、碱度的单位以  $\text{mg/L CaCO}_3$  计。

表 1 钙稳定性判别的水质监测值

检测指标	水温(K)	pH	电导率 ( $\mu\text{S/cm}$ )	Ca 离子 ( $\text{mg/L}$ )	碱度 ( $\text{mg/L}$ )
检测结果	286.5	7.6	620	135	130

以 Langelier 指数为例进行软件操作，启动软件后双击树状窗口的“Langelier 指数”命令，在计算窗口打开的计算界面进行数据输入计算。选中列表窗口名称中的“未命名计算”，单击鼠标右键后选择“修改标题”，将计算命名为“1#”。计算界面如图 6 所示。

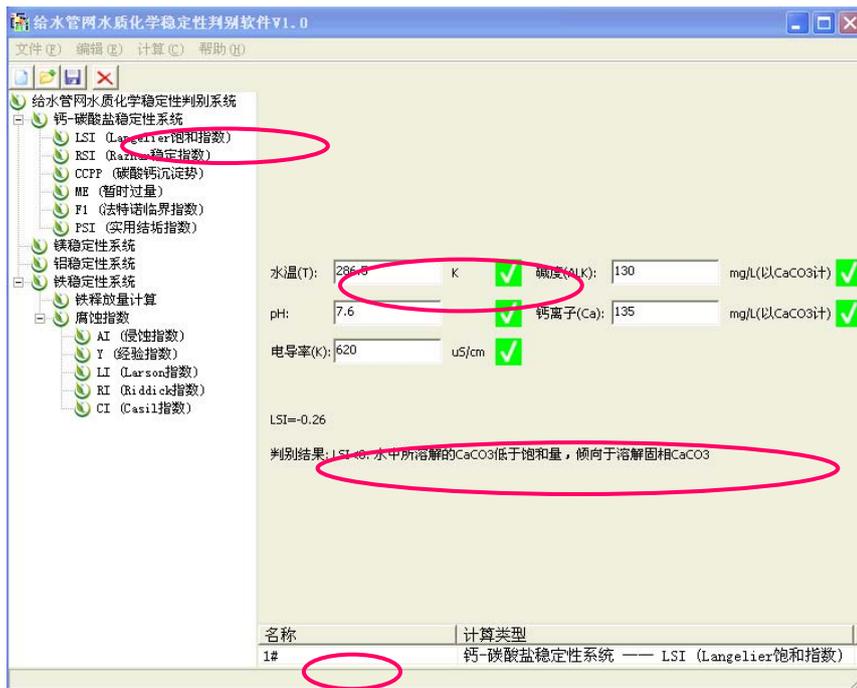


图 6 Langelier 饱和指数计算示例

数据输入完毕后, 程序自动进行计算和判别, 输出栏显示计算结果和判别结果, 各判别指数的计算结果如表 2 所示。

表 2 稳定指数的计算结果

判别指数	LSI	RSI	CCPP	ME	F1	PSI
计算结果	-0.26	8.13	-5.68	-0.28	-2.08	7.72

对判别结果进行分析:

LSI<0, 水中溶解的  $\text{CaCO}_3$  低于饱和量, 倾向于溶解固相  $\text{CaCO}_3$ ;

RSI>7, 表明管网水可以溶解碳酸钙, 处于不稳定状态;

CCPP<0, 碳酸钙能够溶解, 溶解潜能为 5.68mg/L;

ME<0, 管网水不形成碳酸钙沉淀, 有溶解碳酸钙的趋势, 能够溶解碳酸钙的量为 0.28mg/L;

F1<-2, 碳酸钙结垢溶解;

PSI>6 管网水溶解碳酸钙, 有产生腐蚀的趋势。

综上分析可以得出, 该处管网水不会产生碳酸钙沉淀, 碳酸钙仍可被溶解。

#### 参考文献

- [1] 牛璋彬, 王洋, 张晓健, 等. 给水管网中金属离子化学稳定性分析[J]. 中国给水排水. 2005, 21 (5): 18~21.
- [2] 张晓健, 牛璋彬. 给水管网中铁稳定性问题及其研究进展[J]. 中国给水排水. 2006, 22 (1): 13~16.
- [3] 牛璋彬, 王洋, 张晓健, 等. 某市给水管网中铁释放现象影响因素与控制对策分析[J]. 环境科学. 2006, 27 (2): 310~314.
- [4] 牛璋彬, 王洋, 张晓健, 等. 给水管网中管内壁腐蚀管垢特征分析[J]. 环境科学. 2006, 27 (6): 1150~1154.
- [5] 蒋展鹏、刘希曾译, 水化学[M], 北京: 中国建筑工业出版社, 1990.