"十一五"国家重点图书

高等学校化工类专业规划教材

# 计算机化工辅助计算

JISUANJI HUAGONG FUZHU JISUAN

浦伟光 曹正芳 / 编著

華東理工大學出版社
EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

“十一五”国家重点图书
高等学校化工类专业规划教材
华东理工大学优秀教材出版基金资助图书

# 计算机化工辅助计算

浦伟光　曹正芳　编著

華東理工大學出版社
EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

**图书在版编目(CIP)数据**

计算机化工辅助计算/浦伟光,曹正芳编著. —上海:华东理工大学出版社,2008.10
"十一五"国家重点图书
高等学校化工类专业规划教材
ISBN 978-7-5628-2442-8

Ⅰ.计... Ⅱ.①浦...②曹... Ⅲ.化学工程—计算机辅助计算—高等学校—教材 Ⅳ.TQ02-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2008)第 142224 号

"十一五"国家重点图书

高等学校化工类专业规划教材

# 计算机化工辅助计算

**编　　著** / 浦伟光　曹正芳
**责任编辑** / 周　颖
**责任校对** / 张　波
**出版发行** / 华东理工大学出版社
地　址:上海市梅陇路 130 号,200237
电　话:(021)64250306(营销部)
传　真:(021)64252707
网　址:www.hdlgpress.com.cn
**印　　刷** / 上海展强印刷有限公司
**开　　本** / 787 mm×960 mm　1/16
**印　　张** / 11.5
**字　　数** / 222 千字
**版　　次** / 2008 年 10 月第 1 版
**印　　次** / 2008 年 10 月第 1 次
**印　　数** / 1—4050 册
**书　　号** / ISBN 978-7-5628-2442-8/TQ·134
**定　　价** / 26.00 元

(本书如有印装质量问题,请到出版社营销部调换。)

# 内容提要

本书把化工知识、数值计算方法和计算机语言的编程能力三方面的内容紧密结合起来，以期提高读者的化工计算机应用所需的分析、建模、计算和编程的能力。并通过C语言的应用示范例子和程序，使读者更容易掌握相关的知识，也可获得更多的练习机会。本书编写时考虑读者已有化工原理的知识，对单元操作的过程描述尽量简化，把重点放在过程的数学模型的建立、解题的计算步骤和程序的模块化设计及计算机运行的可靠性上。

本书共分八章，分别为化工物性数据和平衡数据、流体输送和管路计算、传热计算，精馏计算、其他单元操作的计算、化工优化计算、常用流程模拟软件简介、化工常用数值计算方法。附录还给出了部分计算程序、常用化合物的物性计算常数和Wilson模型参数。本书的各章内容各自独立，所以作为教材使用可选择全部或部分内容，也可结合实际适当补充其他有关内容。

本书可作为化学、化工及相关专业的本科和研究生教材，也可作为相关研究人员的参考用书。

# 前　言

计算机技术的发展引发了化工计算的巨大变化。化学工程师已经有可能从更深层的机理角度来建立过程的数学模型，摒弃不必要的简化假定，对化工过程进行更加精确的描述，并通过计算机进行求解。在化工设计和过程操作模拟方面取得了很大的成功。

化工过程十分复杂，其原因在于影响因素繁多，主要归纳为三大类：化合物物性参数、化工过程操作参数及化工设备的尺寸参数。同时描述化工过程的数学模型数量繁多，其方程的非线性程度很强，需要通过一定的数学方法才能进行数值求解。由于过程的复杂性，编程计算时需进行模块化设计，然后再拼装成应用程序，来解决相应的化工问题。因此化工计算机计算需要以三个方面的知识作为基础。一是化工的知识，二是数值计算方法，三是计算机语言的编程能力。本书把这三方面的内容紧密结合起来，以期提高读者的化工计算机应用所需的分析、建模、计算和编程的能力，并通过C语言的应用范例和程序，使读者更容易掌握相关的知识，也可获得更多的练习机会。本书编写时考虑读者已有化工原理的知识，对单元操作的过程描述尽量简化，把重点放在过程的数学模型的建立、解题的计算步骤和程序的模块化设计及计算机运行的可靠性上。

本书共分八章，分别为化工物性数据和平衡数据、流体输送和管路计算、传热计算、精馏计算、其他单元操作的计算、化工优化计算、常用流程模拟软件简介、化工常用数值计算方法。附录给出了部分计算程序、常用化合物的物性计算常数和Wilson模型参数。本书的各章内容各自独立，所以作为教材使用可选择全部或部分内容，也可结合实际适当补充其他有关内容。

本书编写过程中，应再正、罗振科在C语言程序编写方面给予了支持，在此表示感谢。

由于作者水平所限，书中难免有错误和不当之处，欢迎读者指正。

浦伟光　曹正芳

2008年4月于华东理工大学

此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

# 目录

## 第1章　化工物性数据和平衡数据


1.1　化工物性数据库简介 …… 1
1.2　化工物性子程序的建立 …… 2
1.2.1　数据型数据子程序 …… 2
1.2.2　公式计算数值型子程序 …… 3
1.2.3　插值数值型数据子程序 …… 6
1.2.4　估算数值型子程序 …… 6
1.2.5　混合物的物性 …… 7
1.2.6　物性的压力校正 …… 9
1.3　气液平衡数据 …… 11
1.3.1　气液平衡关系 …… 11
1.3.2　活度系数的计算 …… 12
1.3.3　逸度系数的计算 …… 14
1.3.4　利用实验数据 …… 16
1.4　液液平衡数据 …… 17
1.4.1　液液平衡关系 …… 17
1.4.2　利用实验数据 …… 18
1.5　实验数据的拟合 …… 19


## 第2章　流体输送和管路计算


2.1　流体输送过程的数学模型和设计自由度分析 …… 22
2.2　管路的摩擦系数计算 …… 24
2.3　几种实际应用计算 …… 25
2.3.1　简单管路的管径设计 …… 25
2.3.2　简单管路的模拟计算 …… 28

2.3.3 离心泵的工作点计算 …… 29
**2.4 复杂管路的计算** …… 31
2.4.1 分支和汇合管路 …… 31
2.4.2 并联管路 …… 32
**2.5 管路网络的计算和模拟** …… 33
2.5.1 数学模型 …… 33
2.5.2 编程要点 …… 34
**2.6 可压缩流体输送的计算** …… 36
2.6.1 数学模型 …… 36
2.6.2 可压缩气体的管路计算 …… 37

## 第3章 传热计算

**3.1 列管换热器的设计** …… 41
3.1.1 设计计算的数学模型 …… 41
3.1.2 列管换热器设计步骤 …… 44
**3.2 列管式换热器的操作模拟** …… 45
3.2.1 传热单元数和换热器效率 …… 46
3.2.2 第一类命题换热器模拟计算的步骤 …… 47
3.2.3 第二类命题换热器模拟计算的步骤 …… 47
3.2.4 冷凝器的操作模拟 …… 48
**3.3 换热器系统的模拟** …… 50
3.3.1 序贯换热器系统模拟 …… 50
3.3.2 带分支的换热器系统 …… 52
3.3.3 复杂换热器网络系统 …… 53
**3.4 传热物体内的温度分布** …… 54

## 第4章 精馏计算

**4.1 相平衡和泡露点的计算** …… 59
4.1.1 泡露点的计算 …… 59
4.1.2 理想物系的泡露点计算 …… 60
4.1.3 非理想物系的泡露点计算 …… 61
4.1.4 精馏塔操作压强的确定 …… 62
**4.2 闪蒸的计算** …… 63
4.2.1 闪蒸过程的数学模型 …… 63
4.2.2 等温闪蒸 …… 64

4.2.3 绝热闪蒸 …… 66
4.3 二元精馏的计算 …… 67
4.3.1 二元精馏的数学模型 …… 67
4.3.2 精馏塔理论塔板的逐板计算 …… 70
4.4 多元精馏的简捷计算 …… 73
4.4.1 全回流条件下的最少理论板数 …… 73
4.4.2 非关键组分的分布 …… 73
4.4.3 多元精馏分离的最小回流比 …… 74
4.4.4 理论板数的计算 …… 75
4.4.5 多元精馏简捷计算的计算步骤 …… 75
4.5 多元精馏的严格计算 …… 79
4.5.1 通用的数学模型 …… 79
4.5.2 常规精馏塔的求解 …… 81
4.5.3 泡点法求解 MESH 方程组 …… 84
4.5.4 流量加和法求解 MESH 方程组 …… 84

## 第 5 章 其他单元操作的计算

5.1 流体与颗粒的相对运动 …… 89
5.1.1 流体绕过颗粒的数学模型 …… 89
5.1.2 流体带出最大颗粒直径的计算 …… 90
5.1.3 颗粒的沉降速度 …… 91
5.1.4 计算颗粒由静止开始的加速运动 …… 92
5.1.5 过滤常数的测定计算 …… 92
5.2 吸收计算 …… 95
5.2.1 填料吸收塔的计算 …… 95
5.2.2 多组分板式吸收塔的模拟计算 …… 99
5.3 萃取计算 …… 101
5.3.1 单级萃取计算 …… 102
5.3.2 多级逆流萃取理论级数的计算 …… 103

## 第 6 章 化工优化计算

6.1 技术经济数据 …… 106
6.1.1 设备费用 …… 106
6.1.2 操作费用 …… 108
6.2 几个化工单元操作优化实例 …… 108

6.2.1 最佳管径的设计 …… 108
6.2.2 换热器冷却水出口温度的优化 …… 110
6.2.3 精馏塔最佳回流比的确定 …… 111
**6.3 过程系统的优化** …… 113
6.3.1 温焓图和复合曲线 …… 114
6.3.2 夹点和换热系统的集成 …… 115
6.3.3 系统热集成的目标函数 …… 115

## 第7章 常用流程模拟软件简介

**7.1 PRO/Ⅱ软件简介** …… 117
7.1.1 软件的物性数据库 …… 117
7.1.2 热力学方法 …… 118
7.1.3 主要单元操作模型 …… 118
7.1.4 附加模块 …… 119
7.1.5 图形界面 …… 119
7.1.6 应用工业领域 …… 120
**7.2 Aspen Plus 软件简介** …… 120
7.2.1 完备的数据库 …… 121
7.2.2 Aspen Plus 具有很强的集成能力 …… 121
7.2.3 提供丰富的单元操作模块 …… 122
7.2.4 具有模型/流程分析功能 …… 122
**7.3 ChemCAD 软件简介** …… 123
7.3.1 高度集成、界面友好和较为详尽的帮助系统 …… 123
7.3.2 丰富的物性选择 …… 125
7.3.3 完整的单元操作单元以及强大的计算和分析功能 …… 126
7.3.4 集成的设备标定模块和附带工具模块 …… 126
7.3.5 支持动态模拟 …… 126

## 第8章 化工常用数值计算方法

**8.1 插值** …… 128
8.1.1 线性插值 …… 128
8.1.2 二次插值(拉格朗日三点插值) …… 129
**8.2 一元非线性方程的迭代求解** …… 130
8.2.1 直接迭代 …… 130
8.2.2 韦斯顿迭代 …… 132

8.2.3 牛顿迭代 …… 133
**8.3 方程组求解** …… 134
8.3.1 解三对角线性方程组 …… 134
8.3.2 优先排序解非线性方程组 …… 134
**8.4 方程的拟合** …… 136
8.4.1 线性方程的拟合 …… 136
8.4.2 非线性函数的线性化 …… 137
**8.5 一阶常微分方程的数值解** …… 138
8.5.1 欧拉法 …… 138
8.5.2 四阶龙格库塔法 …… 139
**8.6 数值积分** …… 140
8.6.1 梯形法 …… 140
8.6.2 辛普森法 …… 140

**参考文献** …… 142
**附录 1 部分 C 语言计算程序** …… 143
**附录 2 一些常用化合物物性公式的计算常数** …… 161
**附录 3 Wilson 模型参数** …… 172

# 第1章 化工物性数据和平衡数据

化工物性和平衡关系的定量描述是化工过程计算必不可少的基础。在实际的化工计算中化合物物性数据和平衡数据的计算占有相当大的比例，有时化合物物性的计算甚至成为整个计算过程的关键。

由于物性数据量和平衡数据量非常巨大，对于一个具体的化工过程计算需要建立能满足该物系和过程的物性数据计算子程序库（又称为化工数据库），在计算机计算过程中根据需求进行调用。本章主要介绍这类化工数据库或物性计算子程序的建立方法，以及重要物性数据和平衡数据的计算方法。

化工纯物性数据可以分成两类：一类与状态温度或压力无关，如临界温度、临界压力、标准态沸点、偏心因子等，称作数据型数据；另一类与温度或压力有关，如密度、黏度、导热系数、表面张力等，称作数值型数据。第一类数据只要知道物质的名称就可查得；而第二类数据必须知道系统的温度、压力或组成再通过计算（对函数关系式）或插值（对列表函数）才能得到。混合物的物性数据则需在纯物性数据的基础上由合适的混合规则计算得到。

化工平衡数据也可分成两类：一类为实验数据，经过上百年的积累，已经有了相当数量的气液、液液平衡的实验数据，一般都以列表函数的形式存在，由于物性繁多特别是多元的平衡关系，其使用范围比较有限；另一类为通过状态方程进行计算，但各种状态方程对物系类型有一定的要求，也有一定的局限性。

在进行设备计算时还需要设备的系列尺寸数据，而进行过程优化时还需要设备、材料和能源价格的经济数据。

## 1.1 化工物性数据库简介

伴随着信息时代的到来以及计算机软件管理系统水平的不断提高，近年来化工物性数据库不断得到完善和发展。国内外众多的数据库在提供化工物性数据检索咨询服务、进行物性推算、数据深度加工等方面，已经成为化工科技人员从事过程设计与开发、指导生产与管理的有力工具。化工物性数据库的研制成功是化工科技进步的重要标志之一。



此为试读，需要完整PDF请访问：www.ertongbook.com

化工物性数据库是根据化学工业的特点，针对大量需要经常反复检索或运算的广义化合物物性数据资料，利用化学工程、热力学、应用数学和计算机软件等多学科综合技术而建立的数据信息文件系统。一个完整的物性数据库主要由六部分组成：纯物质的基础物性数据和混合物的有关数据，数据来源信息，物性推算系统，计算方法模块库，数据加工处理系统和主调度管理系统。

自 20 世纪 70 年代以来，国际上许多大型化工企业、科研机构和高等院校，为了满足化工过程模拟、优化、控制和辅助设计中计算机应用的需要，都纷纷建立了各种类型的化工物性数据库，制成软件商品出售或出版物性数据集或提供在线报务（即通过中央计算机经由电话线或其他通道与计算机保持通讯，终端得到数据信息）。国内的化工物性数据库的开发与应用工作虽起步较晚，但由于各方面的重视和努力，至今已有数十个较有特色的数据库（包括引进的与化工模拟软件配套的嵌入型数据库）投入使用，取得了重大的经济效益和社会效益。

## 1.2　化工物性子程序的建立

化工物性子程序是将化工计算过程必需的一些物性数据以一定的结构存放在计算机程序中，供主程序运行过程中随时调用。对应于特定的化工过程计算，数据库的物性数据量只需要满足要求即可，连接太大的数据库会延长计算时间。

### 1.2.1　数据型数据子程序

这类数据库相对比较简单，只要知道物质的名称就可以查阅或调用所需的物性数据。如需知道某物质在常压下的沸点、熔点、临界参数、标准生成焓等数据，对数据库只需一个查询系统，无需计算。以建立一个包含苯（benzene）、甲苯（toluene）、乙苯（ethylbenzene）、邻二甲苯（*o*-xylene）、间二甲苯（*m*-xylene）、对二甲苯（*p*-xylene）六种物质的数据型物性子程序为例，其物性数据见表 1－1。

**表 1－1　苯、甲苯、乙苯等物性数据**

| 序号 | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | 物　质 | $M_W$/(g·mol$^{-1}$) | $T_F$/K | $T_B$/K | $T_C$/K | $p_C$/$10^2$ kPa | $V_C$/(cm$^3$·mol$^{-1}$) | $Z_C$ | $\Omega$ |
| 1 | benzene | 78.114 | 278.68 | 353.24 | 562.16 | 48.98 | 258.9 | 0.271 | 0.211 |
| 2 | toluene | 92.141 | 178.18 | 383.78 | 591.79 | 41.09 | 315.8 | 0.264 | 0.264 |

续　表

| 序号 | | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| | 物　质 | $M_W$/(g·mol$^{-1}$) | $T_F$/K | $T_B$/K | $T_C$/K | $p_C$/$10^2$ kPa | $V_C$/(cm$^3$·mol$^{-1}$) | $Z_C$ | $\Omega$ |
| 3 | ethylbenzene | 106.17 | 178.20 | 409.35 | 617.17 | 36.09 | 373.8 | 0.263 | 0.304 |
| 4 | *m*-xylene | 106.17 | 225.30 | 412.58 | 617.05 | 35.41 | 375.8 | 0.259 | 0.326 |
| 5 | *o*-xylene | 106.17 | 247.98 | 417.58 | 630.37 | 37.34 | 369.2 | 0.263 | 0.313 |
| 6 | *p*-xylene | 106.17 | 286.41 | 411.51 | 616.26 | 35.11 | 379.1 | 0.260 | 0.326 |

在 C 语言程序中，简单的方法可以把上述表格中的数据部分以一个外部文件 critical.txt 存放。建立一个函数 float arene (char m, char n)，该函数是浮点型的，函数名为 arene(芳香烃)，字符型参数 m 为物质，n 为物性。

在函数中定义一个数值型二维数组 float critical[6][8]，两个字符型二维数组 char substance[6] 和 char property[8]，并把外部文件 critical.txt 中数据部分读入数值型二维数组，物质和物质序号及物性和物性序号分别读入两个字符型二维数组中；然后根据形式参数，用循环语句和判断语言，在数组 substance 和 property 中找出物质和物性的序号，再根据序号调出数组 critical 中的数据返回主程序。在主程序的调用形式如下：

Benzenetb＝arene (“benzene”, “tb”)

即在参数 Benzenetb 上赋值 353.24。虽然这种方法简单，但不太适合大量物质和物性的情况。

## 1.2.2　公式计算数值型子程序

化工过程中的物性数据大部分与系统的状态有关，一般在低压条件下，压力的影响比较小，所以可以认为是温度的函数，常用的物性如：密度、黏度、比热容、汽化潜热、蒸气压、导热系数、表面张力等都是温度的函数。经过多年化工物性数据的积累，许多文献和手册已经把这类化工物性数据关联成计算公式。由于每种物性的计算公式繁多，下面挑选部分常用有机化合物物性计算公式作一介绍。

(1) 恒压比热容

气相　$c_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$　　(1－1)

液相　$c_p = A + BT + CT^2 + DT^3$　　(1－2)

式中 A、B、C、D、E——计算系数，在附录中查取，不同的物质为不同的数值；

$c_p$——比热容，J/(mol·K)；

$T$——温度，K。

(2) 密度

气相 低压时可用理想气体状态方程

液相 $$\rho = 1\,000A \cdot B^{-(1-T/T_C)^n} \tag{1-3}$$

式中 A、B、n——计算系数，可在附录中查取；

$T_C$——临界温度，K；

$\rho$——密度，kg/m³；

$T$——温度，K。

(3) 黏度

气相 $$\mu = A + BT + CT^2 \tag{1-4}$$

液相 $$\lg\mu = A + B/T + CT + DT^2 \tag{1-5}$$

式中 A、B、C、D——计算系数，可在附录中查取；

$\mu$——黏度，$10^{-7}$ Pa·s(气相)或 $10^{-3}$ Pa·s(液相)；

$T$——温度，K。

(4) 导热系数

气相 $$\lambda = A + BT + CT^2 \tag{1-6}$$

液相 $$\lg\lambda = A + B(1 - T/C)^{2/7} \tag{1-7}$$

式中 A、B、C——计算系数，可在附录中查取；

$\lambda$——导热系数，W/(m·K)；

$T$——温度，K。

(5) 汽化潜热

$$\Delta H = A(1 - T/T_C)^n \tag{1-8}$$

式中 A、n——计算系数，可在附录中查取；

$T_C$——临界温度，K；

$\Delta H$——汽化潜热，kJ/mol；

$T$——温度，K。

(6) 蒸气压

$$\ln p = A - \frac{B}{T + C} \tag{1-9}$$

式中 A、B、C——计算系数，可在附录中查取；

$p$——饱和蒸气压，mmHg，1 mmHg=133.322 4 Pa；

$T$——温度，K。

（7）表面张力

$$\sigma = A(1 - T/T_C)^n \tag{1-10}$$

式中　$A$、$n$——计算系数，可在附录中查取；

$T_C$——临界温度，K；

$\sigma$——表面张力，$10^{-3}$ N/m；

$T$——温度，K。

仍以建立苯、甲苯、乙苯、邻二甲苯、间二甲苯、对二甲苯六个物质的液相黏性随温度变化的子程序为例，其计算系数见表 1-2。

**表 1-2　苯、甲苯、乙苯等液相黏度计算公式参数**

| 序号 | | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|---|---|
| | 物　质 | $A$ | $B$ | $C$ | $D$ |
| 1 | benzene | −7.400 5 | 1 181.5 | 0.014 888 | −0.000 013 713 |
| 2 | toluene | −5.164 9 | 810.68 | 0.010 454 | −0.000 010 488 |
| 3 | ethylbenzene | −5.258 5 | 830.65 | 0.010 784 | −0.000 010 618 |
| 4 | *m*-xylene | −6.051 7 | 924.60 | 0.012 583 | −0.000 011 850 |
| 5 | *o*-xylene | −7.880 5 | 1 250.0 | 0.016 116 | −0.000 013 993 |
| 6 | *p*-xylene | −9.465 5 | 1 440.0 | 0.019 910 | −0.000 016 994 |

比较简单的方法是把上述表格中数据部分以一个外部文件 viscosity.txt 存放。建立一个函数 float mu (char m, float t)，该函数是浮点型的，函数名为 mu（符号 $\mu$），字符型形式参数 m 为物质名，浮点型形式参数 t 为开氏温度。

在函数中定义一个数值型二维数组 float viscosity[6][4]、两个字符型二维数组，并把外部文件 viscosity.txt 中数据读入数值型二维数组中；然后根据形式参数的序号，调出数组中相应的 $A$、$B$、$C$、$D$ 值，用公式

$$\lg\mu = A + B/T + CT + DT^2$$

进行计算，然后计算值返回至主程序。主程序的调用形式如下：

toluenemu=mu (toluene, 359.7)

程序运行结果，把温度为 359.7 K 时的甲苯的黏度赋值在参数 toluenemu 上。该方法简单实用，但不同的物性需建立相应的函数子程序。

### 1.2.3 插值数值型数据子程序

有些手册的物性数据以列表函数的形式出现，如水的物性(列表函数)，空气的物性(列表函数)，水的焓和熵(过冷水，饱和水，饱和汽，过热汽)。

如果需要列表中非温度点值的物性数值，就需在列表函数中插值，常用的插值方法有两种：线性插值和二次插值。列表函数的点值比较密集或要求不高时可以用线性插值，点值稀疏或要求较高时可用二次插值。

以建立 0～100℃水的物性子程序为例，其物性随温度的列表函数见表 1-3。

**表 1-3 水的密度、比热容等物性随温度的列表函数**

| 温度/℃ | 密度/($kg \cdot m^{-3}$) | 比热容/($kJ \cdot kg^{-1} \cdot ℃^{-1}$) | 热导率/($W \cdot m^{-1} \cdot ℃^{-1}$) | 黏度$\times 10^6$/$Pa \cdot s$ |
|---|---|---|---|---|
| 0 | 999.9 | 4.212 | 0.550 8 | 1 788 |
| 10 | 999.7 | 4.191 | 0.574 1 | 1 305 |
| 20 | 998.2 | 4.183 | 0.598 5 | 1 004 |
| 30 | 995.7 | 4.174 | 0.617 1 | 801.2 |
| 40 | 992.2 | 4.174 | 0.633 3 | 653.2 |
| 50 | 988.1 | 4.174 | 0.647 3 | 549.2 |
| 60 | 983.2 | 4.178 | 0.658 9 | 469.8 |
| 70 | 977.8 | 4.167 | 0.667 0 | 406.0 |
| 80 | 971.8 | 4.195 | 0.674 0 | 355.0 |
| 90 | 965.3 | 4.208 | 0.679 8 | 314.8 |
| 100 | 958.4 | 4.220 | 0.682 1 | 282.4 |

对于这类列表函数，把物性数据部分以一个外部文件 water.txt 存放。建立一个函数 float water (char m, float t)，该函数是浮点型的，函数名为 water，字符型形式参数 m 为物性名，浮点型形式参数 t 为摄氏温度。函数结构如下：

① 在函数中定义一个数值型二维数组 float water[11][4]；

② 打开外部文件 water.txt，把数据读入该二维数组 float water[11][4]；

③ 用循环及判断语句，根据由函数参数传递的温度，确定温度区间；

④ 应用插值方法计算温度区间的对应温度的物性值，然后返回主程序。

### 1.2.4 估算数值型子程序

由于化合物种类繁多，在手册上能够查到的基本上都是常用物质的物性，而许

多物质在实际计算过程中所需的物性只能通过估算的方法得到。目前的物性估算方法有对应状态原理、基团贡献法(GCVOL 法)、分子拓扑等。其中基团贡献法所需已知参数少,计算相对简单,估算精度比较高,能够满足工程计算的要求,但必须要对分子结构进行基团的划分。通过编程对已知分子结构进行正确地划分尚有一定困难,特别是复杂结构的分子。对于实际的化工计算,涉及的特殊化合物不会很多,因此分子基团的划分先由人工进行,其后的计算可以编入程序运行。

如计算饱和液体的密度,其典型的 GCVOL 法的计算式如下:

$$\rho_s = \frac{M}{\sum n_i \Delta v_i} \tag{1-11}$$

$$\Delta v_i = A_i + B_i T + C_i T^2 \tag{1-12}$$

其中,$M$ 为相对分子质量,$T$ 为温度,$n_i$ 为 $i$ 基团数,$A_i$、$B_i$、$C_i$ 为 GCVOL 法基团值。相对分子质量通常是已知的,$A_i$、$B_i$、$C_i$ 可以在相关的手册中查到,该方法误差较小,约为 1%。

通过人工划分,得到相应化合物的基团数和基团值后,可以用前述方法把密度与温度的关系编程运行。

## 1.2.5　混合物的物性

上述物性数据均为纯物性数据的计算和查询,实际化工过程的物料多是两个或多个组分的混合物。在求取混合物物性的计算中,一般先计算在一定温度和压强条件下的纯物质组分的物性,然后按混合规则计算混合物的物性。

1. 混合物比热容的计算

理想物系的混合物比热容计算如下:

$$c_p = \sum_i x_i c_{pi} \tag{1-13}$$

式中　$c_p$——混合物的比热容,J/(mol·K);

$c_{pi}$——$i$ 纯组分的比热容,J/(mol·K);

$x_i$——组分的摩尔分数。

非理想系统的混合热不可忽略,计算比较复杂,其计算方法可查阅有关文献。

2. 混合物密度的计算

理想气体的混合密度可直接按理想气体状态方程计算:

$$\rho_g = \frac{w}{V} = \frac{\overline{M}p}{RT} \tag{1-14}$$

式中　$\overline{M}$——气体的平均相对分子质量,kg/kmol;



此为试读,需要完整PDF请访问: www.ertongbook.com