

SSS

中国石化集团公司职工培训系列教材

技 - SBII/123-P-0004

石油化工工艺工程师必读

第一册

物性、数据处理和优化

臧福录 应金良 主编



中国石化出版社

中国石化集团公司职工培训系列教材

石油化工工艺工程师必读

第一册

物性、数据处理和优化

臧福录 应金良 主编

中国石化出版社

内 容 提 要

《石油化工工艺工程师必读》共分三册，第一册物性、数据处理和优化（带磁盘一张），第二册多组分精馏的计算和分析，第三册化学反应器的计算和分析。

本书是第一册，流体物性估算部分介绍了气体和液体的密度、焓、热容、粘度、导热系数估算，蒸汽压的估算，石油馏分性质的估算及在自编程序中调用 BIPTCHEM 软件包物性数据库的方法。数据处理部分介绍了实验数据处理的常用手段、实验数据回归分析及化工过程数学模型的参数估计和检验等。化工过程优化介绍线性规划和非线性规划的求解方法、化工过程的优化方法和化工过程的优化实例。

本书所带软件是可用于工程实际计算的 BIPTCHEM 软件包，不仅可进行物性估算、数据处理、优化计算，还可配合第二、三分册进行精馏的计算、换热器的计算、板式塔的计算和化学反应器的计算。

本书适合于石油化工技术人员使用，也可供大专院校在校师生参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

石油化工工艺工程师必读 第1册：物性、数据处理和优化/臧福录主编.
—北京：中国石化出版社，1998
中国石油化工集团公司职工培训系列教材
ISBN 7-80043-755-8

I. 石… II. 臧… III. ①流体-物性学-技术培训-教材
②流体-实验数据-数据处理-技术培训-教材③流体-化工
过程-最佳化-技术培训-教材 IV. TQ022.1

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (98) 第 25577 号

中国石化出版社出版发行
地址：北京市东城区安定门外大街 58 号
邮编：100011 电话：(010) 64241850
海丰印刷厂排版印刷
新华书店北京发行所经销

*

787×1092 毫米 15 开本 10.25 印张 259 千字 印 1—2500

1998 年 12 月第 1 版 1998 年 12 月第 1 次印刷

定价：45.00 元（含磁盘）

序

由臧福录教授和应金良副教授主编的《石油化工工艺工程师必读》正式出版发行，为从事石油化工及相近专业工作的技术人员接受继续工程教育提供了一套难得的好教材，为他们的分析和解决生产中的技术问题提供了一套极有参考价值的工具书，也为同类专业的高校师生提供了一套很好的教学参考书。

世界科学技术飞速进步，科技知识几乎以几何级数迅速增加，自然科学、社会科学各学科之间互相渗透交融，一系列边缘学科、综合学科相继出现，科技成果更新速度的不断缩短，必将把对在职工程技术人员进行继续工程教育的课题客观而严肃地摆到了我们面前。80年代中期，大家对继续工程教育的必要性、重要性的认识开始转化成具体行动。1984年8月茅以升主编的《现代工程师手册》一书是我国工程技术人员接受继续工程教育的第一部通用教科书。但工程技术专业门类众多，不仅需要通用教材解决技术人员普遍需要的知识更新问题，还必须配有各类专业教材，使继续工程教育能体现专业特点，适合专业需求，更具有针对性。臧福录教授敏锐地觉察到了这一问题。他搞过教学，在石油化工专业方面有很深的理论功底；做过科研，组织指导过许多研究课题；多年在燕山石化公司工作，熟悉石油化工生产，利用这些优势，通过认真调查，针对石油化工工艺工程师的知识水平及需求，组织编写了这套供石油化工工艺工程师继续教育使用的教材。近十年来，在燕山石化公司、大庆石化总厂及扬子石化公司等单位领导的支持下，开办了20余期石油化工工艺工程师继续教育进修班，进行教学实践。由于教材与教学有很强的针对性、实用性，知识有相当的新颖性，使学员受益匪浅、反映良好。编者虚心听取学员的意见，做到教学相长，不断对教材进行修改、补充，在大量的教学实践中提炼升华，现在交付正式出版。因此，本书是编者从事石油化工继续工程教育实践经验的结晶，汇集了学员们的建议，更凝结了编者的心血和智慧。

本套丛书内容包括了流体的物性估算、实验数据处理、石油化工最优化技术和应用、多组分精馏的计算及分析、典型化学反应器的设计计算和操作分析。实验数据处理部分包含逐步回归和非线性回归；流体物性估算部分包含有624种物质的基础数据库，纯组分和混合物气、液相物性的计算，石油馏分物性的计算；石油化工优化部分包括统计调优法的应用实例；多组分精馏的计算部分包括了单级平衡的计算，多组分精馏的简捷计算和严格计算，冷凝器和再沸器计算，板式塔的计算；典型化学反应器的计算部分包括间歇和连续操作釜式反应器，管式反应器，多段绝热固定床反应器，列管式固定床反应器等各种类型的反应器计算。本套丛书把建立数据模型、用计算机软件计算和解决工程实际问题作为重点，并且附有便于自学的源程序和可用于工程实际计算的应用软件。书中各篇既有利用软件计算，又有结合实际的例题和习题。这种应用软件与书本有机结合的读物，在国内外石油化工专业读物中尚属少见，十分适合石油化工类专业技术人员的自学和提高，这不仅包括没有接受过计算机应用技术教育的老工程技术人员，还包括接受过计算机应用技术教育、刚从大学毕业的技术人员，因为他们并不了解在实际的技术工作中如何应用计算机技术，本套丛书恰恰在这方面可以给予具体的指导和帮助。在燕山石化公司，目前能应用计算机及相应软件对生产过程进

行流程模拟、优化计算，提出改进操作和进行脱瓶颈改造建议并取得明显技术成果的科技人才几乎都曾接受过本教材的培训和学习。

我相信本套丛书一定会受到广大石油化工类专业技术人员的欢迎，成为大家经常会去翻阅和研读的最喜爱的读物。我认为，作为一名石油化工专业的技术人员，拥有这本书定会终生受益。

曹湘洪

1997年10月于北京燕山石化公司

前 言

在市场经济深入发展和改革力度不断加大的新形势下，石化行业面临着严峻的挑战。为迎接这一挑战，面向市场经济，必须加强对企业人员的继续工程教育，向科技要生产力。《石油化工工艺工程师必读》正是为适应这一要求而编写的。

《石油化工工艺工程师必读》是编者在从事近十年石油化工继续工程教育实践经验的基础上编写的，重点介绍数学模型的建立及使用计算机软件计算和解决工程实际问题。为强化计算机的应用，强调定量地分析石油化工生产中的典型问题，本书还有与之配套使用的计算机软件。读者通过本书的学习及所附软件的使用，可分析和解决石油化工工程中常见的许多问题。

全书共分三册：第一册介绍流体物性的估算、实验数据处理及化工优化技术和应用；第二册为多组分精馏的计算和分析；第三册为典型化学反应器的设计计算和操作分析。本书由臧福录教授，应金良主编；第一册由王琴、曹长兴、程宏远、应金良和李红文编写，第二册由应金良和李翠清编写，第三册由臧福录和盖旭东编写；全书由臧福录和应金良统稿，由郭天民教授主审。与本书配套使用的 BIPTCHEM 软件包，由应金良主编。

《石油化工工艺工程师必读》第一册编写分工如下：第一篇程宏远和李红文，第二篇王琴，第三篇曹长兴和程宏远，第四篇应金良。

本册由郭天民教授和金海林副教授审稿。他们对本书提出了许多宝贵的意见和建议，我们对此表示衷心的感谢。

本书在编写和出版过程中，得到了中国石化集团公司人教部培训处、北京石油化工学院及中国石化出版社等许多单位领导和有关同志的关心、鼓励和支持。燕山石化集团公司的曹湘洪总经理还在百忙中抽出时间为本书作序。我们还要特别感谢李秋燕同志，她为我们做了许多协调工作。在此，我们向所有关心和支持本书工作的同志表示衷心的感谢。

由于作者水平有限，书中不妥或错误之处在所难免，恳请同行及广大读者批评指正。

编著者

目 录

第一篇 流体物性

第 1 章 基础物性数据	(1)
1.1 查询纯物质常数	(1)
1.2 BIPTCHEM 软件物性数据库结构及调用	(3)
1.2.1 BIPTCHEM 软件物性数据库的结构	(3)
1.2.2 BIPTCHEM 软件物性数据库的调用	(5)
第 2 章 流体的热力学性质	(7)
2.1 状态方程	(7)
2.1.1 RK 方程	(7)
2.1.2 SRK 方程	(8)
2.1.3 PR 方程	(8)
2.1.4 Lee-Kesler 方程	(9)
2.1.5 状态方程的求解	(12)
2.2 液体密度	(13)
2.3 蒸气压	(15)
2.3.1 Lee-Kesler 方程	(16)
2.3.2 Gomez-Thodos 蒸气压方程	(16)
2.4 汽化热、比热容和生成热	(17)
2.4.1 汽化热	(17)
2.4.2 理想气体比热容	(17)
2.4.3 生成热	(18)
2.4.4 液体比热容	(18)
2.5 焓的计算	(18)
2.5.1 焓差的计算	(18)
2.5.2 理想气体焓	(20)
第 3 章 流体的传递性质	(21)
3.1 粘度	(21)
3.1.1 低压下纯气体粘度	(21)
3.1.2 低压下气体混合物粘度	(22)
3.1.3 高压下纯气体粘度	(24)
3.1.4 高压下气体混合物粘度	(25)
3.1.5 液体粘度	(26)
3.2 导热系数	(27)
3.2.1 低压下气体导热系数	(27)
3.2.2 高压下气体导热系数	(28)

3.2.3 低压下气体混合物导热系数·····	(29)
3.2.4 高压下气体混合物导热系数·····	(30)
3.2.5 液体导热系数·····	(30)
3.2.6 液体混合物导热系数·····	(31)
第4章 石油和石油馏分物性计算 ·····	(32)
习 题 ·····	(36)
参考文献 ·····	(37)
附录 计算程序 ·····	(38)

第二篇 实验数据处理

第5章 随机误差及其统计分布 ·····	(43)
5.1 误差的概念·····	(43)
5.1.1 误差定义·····	(43)
5.1.2 误差分类·····	(44)
5.1.3 误差的表示方法·····	(44)
5.1.4 等精度测量与非等精度测量·····	(47)
5.1.5 加权平均·····	(47)
5.2 随机误差的统计分布·····	(48)
5.2.1 频数分布·····	(48)
5.2.2 正态分布·····	(50)
5.2.3 概率计算·····	(51)
习 题 ·····	(54)
第6章 离群值的检验与取舍 ·····	(55)
6.1 离群值的舍弃准则·····	(55)
6.2 离群值的检验方法·····	(55)
6.2.1 格鲁布斯 (Grubbs) 检验法·····	(55)
6.2.2 肖维奈特 (Chauvenet) 准则 ·····	(56)
习 题 ·····	(58)
第7章 回归分析与数据处理 ·····	(59)
7.1 回归分析和曲线拟合的概念·····	(59)
7.1.1 回归分析·····	(59)
7.1.2 曲线拟合·····	(59)
7.2 一元线性回归·····	(60)
7.2.1 经验公式·····	(60)
7.2.2 最小二乘法·····	(60)
7.2.3 相关性检验·····	(61)
7.2.4 回归系数的区间估计·····	(65)
7.2.5 预测与控制·····	(66)
7.3 多元线性回归·····	(69)
7.3.1 多元线性回归的数学模型·····	(69)

7.3.2 最小二乘法	(69)
7.3.3 相关性检验	(70)
7.3.4 逐步回归	(71)
7.4 非线性回归	(73)
7.4.1 可线性化的一元非线性回归	(74)
7.4.2 多项式回归	(76)
7.4.3 可线性化的多元非线性回归	(77)
7.4.4 不可线性化的非线性回归	(77)
习 题	(78)
参考文献	(80)

第三篇 化工过程优化技术及应用

第8章 最优化方法	(81)
8.1 概论	(81)
8.1.1 优化问题的性质和数学描述	(81)
8.1.2 最优化方法的分类	(85)
8.1.3 优化问题求解的一般步骤	(86)
8.2 线性规划	(87)
8.2.1 线性规划问题的形成	(87)
8.2.2 线性规划问题的数学模型	(88)
8.2.3 线性规划问题的解和图解法	(90)
8.2.4 线性规划问题的单纯形法	(93)
8.2.5 线性规划问题的应用	(98)
8.3 非线性规划	(101)
8.3.1 非线性规划基本概念	(101)
8.3.2 无约束问题最优化	(105)
8.3.3 有约束问题最优化	(111)
习 题	(116)
参考文献	(120)
第9章 调优操作法	(121)
9.1 概述	(121)
9.2 统计调优法	(122)
9.2.1 统计调优策略	(122)
9.2.2 统计调优实例	(126)
9.3 模拟调优法概要	(133)
参考文献	(134)

第四篇 配套软件介绍

第10章 化工过程计算软件包	(135)
10.1 软件包的安装、运行及主菜单的打开	(135)

10.1.1	安装	(135)
10.1.2	运行	(136)
10.1.3	主菜单的打开	(136)
10.2	物性计算	(136)
10.2.1	基础数据库	(137)
10.2.2	估算纯物质的性质	(138)
10.2.3	估算混合物的性质	(139)
10.2.4	估算石油馏分的性质	(139)
10.3	数据处理	(140)
10.3.1	非线性回归	(140)
10.3.2	逐步回归	(142)
10.4	优化计算	(142)
10.4.1	线性规划	(142)
10.4.2	非线性规划 (拉格朗日乘因子法和单纯形法)	(144)
10.4.3	非线性规划 (复合形法)	(145)
附录	化工过程计算机软件中的 624 个组分	(145)

第一篇 流体物性

化工设计和计算中需要可靠的流体物性。对常见的工业物质可查到丰富的实验数据^{[1][2]}，但是，在许多情况下还需要流体物性的关联式和估算式。

流体的物理性质取决于组成流体物质的分子特征，人们已了解了许多分子行为的谜团，可至今还无法完全掌握分子运动的所有特征^[3]。因此，目前计算流体性质的方法多数为半经验半理论，或纯经验的计算式。

本部分内容为常用流体热力学性质和传递性质的计算方法。它们包括流体的密度、蒸气压、热容、焓、粘度和导热系数等性质。这些性质的计算方法选自文献[3]和[4]，适用于常见流体物性的工程计算。多数性质的计算方法已编入“化工过程计算 (BIPTCHEM)”软件包，因此本篇举例说明某性质计算方法时，多借助该软件包来完成。一些物性计算方法、特别是一些经验方法在形成时沿用的是非 SI 单位，它们在广泛使用中，对不同的物质积累了大量来自实验数据的方程参数，故此，仅对这些方程计算的最终物理量给出 SI 单位换算系数。

有关其他的流体物性的计算方法，可参考相关文献^{[1]~[5]}。

第 1 章 基础物性数据

基础物性数据指纯物质常数和与物质有关的关联方程参数，如相对分子量、临界温度、临界压力、热容关联式参数等等。本章介绍利用 BIPTCHEM 软件包查询基础数据以及在自编程中调用 BIPTCHEM 软件包数据库中数据的方法。具体计算式可参见文献[1] [2] 和[5]。

1.1 查询纯物质常数

启动 BIPTCHEM，在屏幕中选择“物性”一项，屏幕出现项目菜单：

基础数据库
估算纯物质性质
估算混合物的性质
石油馏分性质的估算
单位换算
退出

选择“基础数据库”一项，屏幕出现弹出菜单：

查询数据库中的基础数据
 改变数据库中的基础数据
 在数据库中增加一种物质基础数据
 查询或改变 Wilson 二元交互作用能量参数
 退出

选择“查询数据库中的基础数据”一项，屏幕出现：

数据库中有 624 种物质
 输入组分的标号或分子式—

在此可输入某物质的标号或分子式。各物质的标号可从第十章的附录中查到。

例 1.1 查询 1-戊烯的纯物质常数。

按上述方法运行软件，直到屏幕出现：

数据库中有 624 种物质
 输入组分的标号或分子式—

可键入“C5H10”，按回车，屏幕出现：

环戊烷
 1-戊烯
 2-戊烯（顺）
 2-戊烯（反）
 2-甲基-1-丁烯
 2-甲基-1 丁烯
 3-甲基-1-丁烯
 EXIT

选择“1-戊烯项”，按回车，屏幕显示出（排列方式与此处不同）：

标号： 294 分子式：C5H10 名称：1-戊烯
 相对分子量：70.134
 凝固点：107.9 K
 沸点：303.1K
 临界温度：464.8 K
 临界压力：35.3 bar
 临界体积：300 cm³/mol
 临界压缩因子：0.31
 偏心因子：0.233
 偶极矩：0.4 debye
 293K 时的液相密度：640 kg/m³
 理想气体摩尔热容计算式：C_p = a + b * T + C * T² + d * T³ [J/mol·K]

各系数如下:

$$a = -0.134 \quad b = 0.4329 \quad c = -0.0002317 \quad d = 4.681E-08$$

生成焓: -20930 J/mol 生成 Gibbs 能: 79170 J/mol

汽化热: 25196.65 J/mol

理想气体焓计算式: $H^0 = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4 + fT^5 \text{ [J/mol]}$

理想气体熵: $S^0 = g + b \ln T + 2cT + 1.5dT^2 + 4eT^3/3 + 1.25fT^4 \text{ [J/mol} \cdot \text{K]}$

各系数如下:

$$a = 4919.244 \quad b = -2.018426 \quad c = 0.2225423 \quad d = 8.641272E-05$$

$$e = 1.718969E-08 \quad f = -9.737707E-13 \quad g = 235.8965$$

粘度 μ 计算式: $\ln(\mu) = a + b/T$ (μ ——cP, T ——K), 其中:

$$a = -4.023 \quad b = 702.9, \text{ 温度从 } 183.2\text{K 到 } 273.2\text{K}$$

温度 273.2K 时的粘度为: 0.24 cP

饱和蒸气压方程:

$$\lg(P_s/P_c) = a(1 - T_r) + b(1 - T_r)^{1.5} + c(1 - T_r)^3 + d(1 - T_r)^6/T_r$$

$$a = -7.04875 \quad b = 1.17813 \quad c = -2.45105 \quad d = -2.21727$$

温度从 190K 到 464.8K

液体导热系数计算式: $DI = a + b(T - c) \text{ W/m} \cdot \text{K}$

$$a = 0.120952 \quad b = -4.4194E-04 \quad c = 293.2$$

SRK 方程偏心因子: $0.2842 \quad V^* = 0.2951 \quad Z_{RA} = 0.2899$

25°C 时的溶解度参数: $14.5 \text{ MPa}^{0.5}$

25°C 时的摩尔体积: $V_L = 110.4 \text{ cm}^3/\text{mol}$

含有 1 个 CH_3 , 1 个 CH_2 , 1 个 $\text{CH}_2 = \text{CH}$ UNIFAC 基团

有关改变数据库中的基础数据、在数据库中增加一种物质基础数据和查询或改变 Wilson 二元交互作用能量参数等项目的详细使用方法请参见第十章软件使用说明。

1.2 BIPTCHEM 软件物性数据库结构及调用

利用简单的程序可调用 BIPTCHEM 软件数据库中的基础数据, 用于自编程序。通过了解该软件基础物性数据库的结构, 可达到上述目的。

1.2.1 BIPTCHEM 软件物性数据库的结构

BIPTCHEM 软件物性数据库均由 Quick BASIC 语言编制的随机数据文件组成, 它包括 9 个数据文件。

1. 纯物质临界参数文件 (Y1.DAT)

纯物质临界参数文件的文件名为 Y1.DAT。该文件存放纯物质的临界性质, 每一记录中含有 6 个域, 依次存放纯物质的相对分子量、临界温度 (K)、临界压力 (MPa)、临界体积 (cm^3/mol)、临界压缩因子和偏心因子。每个域均为单精度型数。

2. 熔点、沸点和汽化热数据文件 (Y2.DAT)

熔点、沸点和汽化热数据文件的文件名为 Y2.DAT。该文件存放纯物质的熔点 (K)、

沸点 (K) 和汽化热 (J/mol) 数据, 每一记录中含有 3 个域, 依次存放纯物质的熔点、沸点和汽化热。每个域均为单精度型数。

3. 理想气体热容参数文件 (Y3.DAT)

理想气体热容参数文件的文件名为 Y3.DAT。该文件存放理想气体热容关联式参数, 每一记录中含有 4 个域, 依次存放参数 a 、 b 、 c 、 d 。每个域均为单精度型数。该关联式为:

$$C_P = a + bT + cT^2 + dT^3 \quad (1.1)$$

式中 C_P ——理想气体热容, J/mol·K;

T ——温度, K;

a 、 b 、 c 、 d ——参数。

4. 理想气体的焓和熵数据文件 (Y4.DAT)

BIPTCHEM 采用的理想气体焓和熵关联式为:

$$H^0 = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4 + fT^5 \quad (1.2)$$

$$S^0 = g + b \ln T + 2cT + 1.5dT^2 + \frac{4}{3}eT^3 + 1.25fT^4 \quad (1.3)$$

式中 H^0 ——理想气体的焓, J/mol;

S^0 ——理想气体的熵; J/mol·K;

T ——温度, K;

a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 f 、 g ——常数。

Y4.DAT 的每一记录有 7 个域, 依次存放参数 a 、 b 、 c 、 d 、 e 、 f 、 g 。每个域均为单精度型数。

5. 标准生成焓和吉布斯 (Gibbs) 自由能数据文件 (Y5.DAT)

标准生成焓和吉布斯 (Gibbs) 自由能数据文件的文件名为 Y5.DAT。该文件存放标准生成焓 (J/mol) 和吉布斯 (Gibbs) 自由能 (J/mol) 数据, 每个域均为单精度型数。

6. 蒸气压关联式参数文件 (Y6.DAT)

BIPTCHEM 采用的蒸气压关联式为以下三个关联式之一:

$$(1) \lg \frac{P_s}{P_c} = [a(1 - T_r) + b(1 - T_r)^{1.5} + c(1 - T_r)^3 + d(1 - T_r)^6] / T_r \quad (1.4)$$

式中 P_s ——饱和蒸气压, MPa;

P_c ——临界压力, MPa。

$$(2) \lg P_s = a + \frac{b}{T} + c \ln T + d \frac{P_s}{T^2} \quad (1.5)$$

$$(3) \lg P_s = a - \frac{b}{T + c} \quad (1.6)$$

式中 P_s ——饱和蒸气压, mmHg;

$T_r = T / T_c$;

T ——温度, K;

T_c ——临界温度, K。

蒸气压关联式参数文件的文件名为 Y6.DAT。该文件存放蒸气压关联式参数数据, 依次存放关联式编号 (1、2 或 3), 关联式参数 a 、 b 、 c 、 d , 关联式适用温度范围 (最低温度和最高温度 T_{low} 、 T_{max}), 每个记录有 7 个域。关联式编号为整数型数, 其他均为单精度型数。

7. 粘度关联式参数文件 (Y7.DAT)

BIPTCHEM 采用的粘度关联式为以下四个关联式之一：

$$(1) \mu = aT^b \quad (1.7)$$

$$(2) \lg \mu = a + \frac{b}{T} \quad (1.8)$$

$$(3) \lg \mu = a + \frac{b}{T} + cT + dT^2 \quad (1.9)$$

$$(4) \lg \mu = a \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{b} \right) \quad (1.10)$$

式中 μ ——液体粘度，cP；

T ——温度，K。

粘度关联式参数文件的文件名为 Y7.DAT。该文件存放粘度关联式参数，依次存放关联式编号（1、或 2、或 3、或 4），关联式参数 a 、 b 、 c 、 d ，关联式适用温度范围（最低温度和最高温度 T_{low} 、 T_{max} ），粘度的实验值（cP），实验值的温度条件（K）。每个记录有 9 个域，关联式编号为整型数，其他均为单精度型数。

8. 液体导热系数关联式参数文件（Y8.DAT）

BIPTCHEM 采用的液体导热系数关联式为以下两个关联式之一：

$$(1) \lambda_L = a + \frac{b}{T - c} \quad (1.11)$$

$$(2) \lambda_L = a + bT + cT^2 \quad (1.12)$$

式中 λ_L ——液体导热系数，W/m·K；

T ——温度，K。

导热系数关联式参数文件的文件名为 Y8.DAT。该文件存放导热系数关联式参数数据，依次存放关联式编号（1 或 2），关联式参数 a 、 b 、 c 。每个记录有 4 个域，关联式编号为整型数，其他均为单精度型数。

9. 液相密度（Y9.DAT）

液相密度文件的文件名为 Y9.DAT。该文件依次存放液体密度的实验值（ ρ ），实验值的温度条件，SRK 方程的偏心因子 ω_{SRK} ，液体密度计算式的特征体积值 V^* ，液体密度计算式的 Z_{RA} 值。每个记录有 5 个域，均为单精度型数。

1.2.2 BIPTCHEM 软件物性数据库的调用

例 1.2 调用 BIPTCHEM 软件基础数据库中水的临界参数的 Quick BASIC 程序。

解：利用 Quick BASIC 语言编制的程序如下：

```
TYPE cP
  M AS SINGLE
  TC AS SINGLE
  PC AS SINGLE
  VC AS SINGLE
  ZC AS SINGLE
  W AS SINGLE
END TYPE
DIM JY1 AS cP
```

```
OPEN "\DAT\Y1.DA" FOR RANDOM AS #1 LEN=LEN (JY1)
INPUT "INPUT COMPONENT'S ID(RECORD ID)";ID
GET #1, ID, JY1
TC=JY1.TC
PC=JY1.PC
W=JY1.W
CLOSE #1
PRINT "TC="; TC; [K]
PRINT "PC="; PC; [MPa]
PRINT "W="; W
END
```

水的标号为 77，可由第十章附录查得。打开文件路径中的盘符由 BIPTCHEM 所在硬盘的盘符确定。

第2章 流体的热力学性质

2.1 状态方程

状态方程描述了流体的压力、体积和温度的行为。流体的热力学性质，如流体密度、焓、逸度和相平衡关系，可用状态方程来计算。状态方程可用于除临界区以外非常宽的温度和压力范围。对理想和轻度非理想系，状态方程仅需少量组分数据便可计算汽相和液相的热力学性质。

工程上使用的状态方程主要有两类：立方型状态方程和维里型状态方程。立方型状态方程主要有 Redlich-Kwong (RK)、Redlich-Kwong-Soave (SRK)、Peng-Robinson (PR) 和它们的一些修正式。维里型状态方程主要有 Hayden-O'Connell、BWR-Lee-Starling、Lee-Kesler 和它们的一些修正式。立方型状态方程可描述气（汽）体和液体的许多热力学性质，但不能准确表达液体的摩尔体积，一些状态方程（如 Schwartzentruber-Renon）经过体积校正可实现上述目的。维里型状态方程可以可靠地描述汽相和液相性质，它在许多时候优于立方型状态方程，但它不适用极性混合物。此处主要介绍 RK、SRK、PR 和 Lee-Kesler 状态方程。

2.1.1 RK 方程

RK 方程可用于计算汽相的热力学性质，它不适用液体密度的计算。压缩因子形式的 RK 方程为：

$$Z^3 - Z^3 + (A - B - B^2)Z - AB = 0 \quad (2.1)$$

式中

$$Z = \frac{PV}{RT} \quad (2.2)$$

$$A = 0.42748 \frac{P_r}{T_r^{2.5}} \quad (2.3)$$

$$B = 0.08664 \frac{P_r}{T_r} \quad (2.4)$$

其中 Z ——压缩因子，对于理想气体， $Z=1$ ；

P ——压力，Pa；

T ——温度，K；

V ——摩尔体积， m^3/kmol ；

R ——气体常数；

P_r ——对比压力， $P_r = P/P_c$ ；

T_r ——对比温度， $T_r = T/T_c$ ；

P_c ——临界压力，Pa；