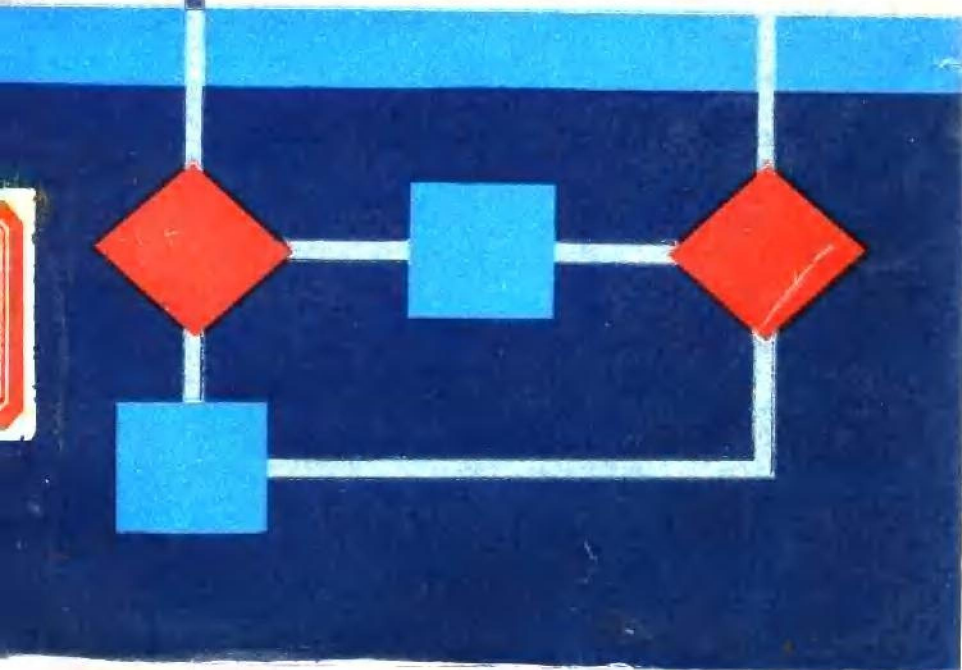


A yellow circle is positioned at the top left, with a vertical line extending downwards from its center.

化工设计 BASIC程序集

〔美〕 J.H. 韦伯

化学工业出版社



化工设计BASIC程序集

〔美〕 J. H. 韦伯

大庆石油化工设计院 译

化学工业出版社

译 者 说 明

翻译本书的目的在于将国外化学工程设计计算的BASIC程序介绍给我国的广大化学工程设计人员、研究人员及有关大专院校的师生。

在翻译过程中，我们对原书提供的方程、数据进行了核对，并对所有42个程序进行了检验，对个别明显的印刷错误作了改正，对有疑义之处加了译注。

参加本书译校工作的有张方纬、田东风、李纯煦、王子彬、林元圭、茹兆祺、曲伯志、张新等同志。由于水平所限，译文中难免有错误或疏漏，敬请读者批评指正。

在此对大庆市企业管理协会的大力支持表示感谢。

1985年10月

40502

前 言

很显然，计算机使计算技术发生了根本性的变革。过去需要经过冗长而反复的运算才能得出的结果，自从有了计算机以后很快就能得到解决。计算机使得从教育到最复杂的应用的每一方面都改变了工程和科学的面貌。

袖珍计算机的出现，使工程技术人员和科学工作者有可能在现场和实验室进行各种类型的计算。如果袖珍计算机带有打印机，就能得到硬拷贝结果。

就是出于这种想法，编制了本书中的程序。由于使用 BASIC 语言、打印和录音能力的原因，选用了 TRS—80 袖珍机。有了这种机或其它类似机，不管到哪里，技术人员都有了方便有力的计算工具。

本书的程序分为两大类型。第一类是计算一些物性和热力学性质的程序，这些程序包括状态方程、传递性计算、热力学数据计算等；第二类是用于设计设备的程序，包括孔板规格计算、流体压降计算、传热系数计算、各种类型汽液平衡计算等。计算各类性质的程序可以作为设计程序的子程序。

本书从各个方面介绍了程序，另外还给出了打印的程序和实例输出，以及计算前必须存储的信息，还有详细说明了程序注解。例题中使用的物性常数值列于附录中（原书并无附录——译者），如果只在一个程序中使用的物性常数，则列在“程序注解”中。用户可以利用这些资料来检查自己的程序。

使用BASIC语言的目的是为了便于更多的人对本程序稍加修改就能用于自己的相同语言的计算机中。

J. H. 韦伯

目 录

第一章 状态方程	1
1.1 用于纯物质的REDLICH—KWONG方程	1
1.2 用于二元混合物的REDLICH—KWONG方程	7
1.3 用于纯物质的PENG—ROBINSON方程	15
第二章 液体摩尔体积关系式	26
2.1 饱和压缩纯物质液体	26
2.2 饱和液体混合物	30
第三章 蒸气压—温度关联式	34
3.1 LEE—KESLER关联式	34
3.2 ANTOINE方程	38
3.3 RIEDEL—PLANK—MILLER关联式	38
3.4 FROST—KALKWARF—THODOS关联式	42
第四章 汽化潜热	43
4.1 经验关系式	43
4.2 CLAPEYRON方程	46
第五章 气体热容	48
5.1 $C_p = a + bT + cT^2 + dT^3$	48
5.2 $C_p = a + bT + c/T^2$	51
第六章 焓熵总变化	55
6.1 ΔH 和 ΔS 的计算	55
6.2 $\Delta S=0$ 时最终温度的计算	59
第七章 粘度	63
7.1 纯组分液体和二元混合物液体的粘度	63
7.2 气体	66

7.3 二元气相混合物	75
第八章 导热系数	79
8.1 纯组分液体和混合物	79
8.2 在低压和高压下的纯组分气体	83
8.3 二元气体混合物	87
第九章 扩散系数	90
9.1 液体扩散系数	90
9.2 非极性气体混合物的扩散系数	94
9.3 极性气体混合物的扩散系数	95
第十章 表面张力	99
10.1 非极性和极性的纯物质液体	99
10.2 二元混合物	102
第十一章 化学平衡常数	106
11.1 理想气体的平衡反应常数	106
第十二章 汽液平衡	110
12.1 出自 γ^∞ 值的参数	110
12.2 共沸条件下的参数	115
12.3 给定组成的计算	116
第十三章 流体摩擦和孔板计算	117
13.1 不可压缩流体的压力降计算	117
13.2 可压缩流体的压力降计算	121
13.3 孔板规格	124
13.4 液体流率的测定	127
13.5 气体流率的计算	129
第十四章 传热计算	132
14.1 总传热系数的计算	132
14.2 没有相变化的流体	137
14.3 冷凝蒸汽	138
14.4 管壳式换热器	142
第十五章 平衡状态计算	146

15.1	露点计算	148
15.2	泡点计算	149
15.3	闪蒸计算	153
15.4	提馏段理论塔板数	156
15.5	全回流条件下的精馏段理论塔板数	159

第一章 状态方程

状态方程 (EOS) 广泛应用于化工计算, 这些方程反映了流体的压力—体积—温度特性关系, 可以用来计算管道、压缩机的规格及预测热力学性质。这里研究的是气体状态方程。

本章编出了两种状态方程程序, 即 Redlich-Kwong 方程和 Peng-Robinson 方程的程序。Redlich-Kwong (R-K) 方程应用于纯组分及二元混合物, 而 Peng-Robinson (P-R) 方程仅应用于纯组分。在所有情况下程序都能用于求体积、压力或温度。在许多情况下还包含计算热力学性质、维里系数和逸度, 以及液相根的子程序。

1.1 用于纯物质的 REDLICH-KWONG 方程

Redlich-Kwong (R-K) 状态方程 (1949):

$$P = RT/(V - b) - a/(T^{0.5}V(V + b)) \quad (1.1)$$

该方程经常以原方程或修正方程的形式使用。由临界点条件确定的原表达式的两个参数是:

$$a = 0.4278R^2T_c^{2.5}/P_c \quad (1.2)$$

$$b = 0.0867RT_c/P_c \quad (1.3)$$

把这两个常数以温度函数的方式来表示往往更为方便。即:

$$A^2 = a/(R^2T^{2.5}) \quad (1.4)$$

$$B = b/(RT) \quad (1.5)$$

当已知两个变量时, R-K 方程可求出第三个变量。这样程序可以在已知 P 和 T 时确定 V; 在已知 V 和 T 时确定 P; 在

已知 V 和 P 时确定 T 。但是，只是对 P 可以直接求解确定，即表达式是 P 的显函数，而是 V 和 T 的隐函数。

1.1.1 求解体积

程序 1 是在已知 P 和 T 时求解 V 。改写 R-K 方程为：

$$Z^3 - Z^2 - (BP + B^2P^2 - AP)Z - (ABP^2) = 0 \quad (1.6)$$

式中， Z 是压缩因子，等于 PV/RT 。用牛顿法解式 (1.6) 是方便的。程序设 Z 的初值为 1，然后通过下面的表达式修正：

$$Z_1 = Z - (f(Z)/f'(Z)) \quad (1.7)$$

式中的 $f(Z)$ 是式 (1.6) 左边的数值，而 $f'(Z)$ 是其导数。这些在程序中是 35-50 步。按照任意选择的极限来检验 $f(Z)$ 的绝对值，本程序选 0.00001 为此极限。如果达不到此极限，则用 Z_1 代替 Z ，并进行另一次迭代。在极限满足之后，即算得体积后打印 Z 和 V (升/摩尔)。

程序 1 列于表 1.1，而表 1.2 为实例输出，输入数据为 P 大气压和 T °C。在使用程序之前必须存入的常数及提示性注解见表 1.2。图 1.1 为流程图。

程序 1 包括若干子程序。可任意选用。这些程序用于计算：

1. 等温焓变。
2. 等温熵变。
3. 逸度系数和逸度。
4. 第二、第三和第四维里系数。
5. 液体体积 (如果有的话)。

等温焓变是：

$$(H - H^*)_T = (3a/(2bT^{0.5})) \ln(V/(V + b)) - RT + PV \quad (1.8)$$

式 (1.8) 由下面表达式和 R-K 方程得到：

$$(H - H^*)_T = - \int_{V_0}^V (P - T(\partial P / \partial T)_V) dV - d(PV) \quad (1.9)$$

式中 H^* 是物质的理想气体状态 (V_0) 的焓, 而 H 是摩尔体积 V 下真实气体的焓。

$$(S - S^*)_T = R(\ln((V - b)/V) - (a/(2bT^{1.5}))) \quad (1.10)$$

$$\ln((V + b)/B) + R \ln(V/(RT))$$

表 1.1 程序1

当摩尔体积是未知数时, Redlich—Kwong 状态方程的解法及计算 $(H - H^*)_T$, $(S - S^*)_T$, f/P , 逸度, 液体体积和第二、第三、第四维里系数的子程序

1: "A" INPUT P, T	55: IF ABS (I) < .000
4: PRINT "P="; P; "	001 GOTO 100
-Atm"; "T="; T; "	60: Z=A(31)
-C"	61: PAUSE USING ; Z
5: Z=1: T=T+A(29)	65: GOTO 35
10: A(30)=T/A(27)	100: Z=A(31): U=(Z*R
15: A=(.4278/(A(30)	*T)/P
)^2.5*A(28)))	105: PRINT "Z="; Z; "
20: B=(.0867/(A(30)	U="; U; "--LITER
)*A(28)))	S/GMOL"
25: C=(B*P+B^2*P^2	106: GOSUB 150
-A*P)	107: GOSUB 200
30: D=(A*P^2*B)	108: GOSUB 230
35: G=Z^3-Z^2-C*Z-	110: END
D	150: C=P*R^2*T^2.5:
40: F=3*Z^2-2*Z-C	D=B*R*T
45: A(31)=Z-(G/F)	155: O=U/(U+D)
50: I=A(31)^3-A(31)	
)^2-C*A(31)-D	

```

160: H=((3*D)/(2*D
    *T^1.5))*LN (Q)
    -R*T+P*U)*24.2
179
165: S=R*(LN ((U-D)
    /U))-(C/(2*D*T
    ^1.5))*LN (1/Q
    )+R*LN (U/(R*T
    ))
166: S=S*24.2179
170: M=(Z-B*P):N=(1
    +(B*P)/Z)
175: F=(Z-1-LN (M)-
    ((A/B)*LN (N))
    )
180: F=EXP (F):J=F*
    P
185: PRINT "H=";H;"
    --CAL/GMOLE-";
    "S=";S;"--CAL/
    GMOL-K--";"F/P
    =" ;F
186: PRINT "FUG=";J
    ;"--ATM"
190: RETURN
200: A(32)=D-(C/(R*
    T^1.5))
205: A(33)=D^2+((C*
    D)/(R*T^1.5))
210: A(34)=D^3-((C*
    D^2)/(R*T^1.5)
    )
215: PRINT "2ND=";A
    (32);"--L/GMOL
    E"
216: PRINT "3RD=";A
    (33);"--(L/GMO
    L)^2"
217: PRINT "4TH=";A
    (34);"--(L/GMO
    L)^3"
220: RETURN
230: K=(ABS (Z-1)^2
    -(4*(Z*(Z-1)+(
    A*P-B^2*P^2-B*
    P))))
235: IF K<0 GOTO 270
240: A(35)=((1-Z)-K
    ^1.5)/2
245: Z=A(35)
250: U=(Z*R*T)/P
252: PRINT "ZL=";Z;
    "UL=";U
255: GOSUB 150
260: GOTO 275
270: PRINT "OTHER-R
    OOTS-ARE-IMAGI
    NERY"
275: END

```

表 1.2 程序1

实例输出、输入数据、存储信息及程序注解

P=1.-ATM-T=-161.	3RD=1.070291838E
45-C	-02--(L/GMOL)^2
Z=0.966441289U=8	4TH=-2.6638867E-
.859292494--LITE	04--(L/GMOL)^3
RS/GMOL	ZL=4.460529805E-
H=-19.77571885--	03VL=4.088933148
CAL/GMOLE-S=-1.1	E-02
13266153E-01--CA	H=-2229.25165--C
L/GMOL-K--F/P=9.	AL/GMOLE-S=-19.3
674805791E-01	5435868--CAL/GMO
FUG=8.674805791E	L-K--F/P=7.38901
-01--ATM	4211E-01
2ND=-2.985935638	FUG=7.389014211E
E-01--L/GMOLE	-01--ATM

程序1的输出

输入数据:

P = 1 大气压

t = -161.45°C

注: 甲烷的正常沸点。

存储信息:

R = 气体定律常数 (0.08206 升·大气压/摩尔·K)

A (27) = T_c , KA (28) = P_c , 大气压

A (29) = 273.16 K (0°C)

程序注解:

1. 61行 "Pause Using; Z"。用TRS-80这个指令是暂短地显示 Z 的现时值。这可以观察计算过程。
2. 在程序中, $f(Z)=G$; $f'(Z)=F$; $Z1=A(31)$; $f(Z1)=I$; f (逸度) 为 FUG。
3. 虽然可以使用任意种类的单位制, 但输入数据 P 为大气压, T 为°C。
4. 在输入的条件下, R-K 方程不能给出气相和液相的根。但是因为两相的逸度不相等, 所以不能予测出蒸汽的压力-温度关系的准确点。
5. 在实例中, 用了甲烷的物性数据。

式 (1.10) 中, 基准压力定为 1 大气压。逸度系数计算为:

$$\ln(f/P) = (Z - 1 - \ln(1 + (BP/Z))) - ((A/B)\ln(Z - BP)) \quad (1.11)$$

R-K 方程能改写为维里形式:

$$Z = 1 + \beta(T)/V + \gamma(T)/V^2 + \delta(T)/V^3 \quad (1.12)$$

式中, $\beta(T)$ 、 $\gamma(T)$ 、 $\delta(T)$ 是第二、第三、第四维里系数, 它们是温度的函数。并为:

$$\beta(T) = b - (a/RT^{1.5}) \quad (1.13)$$

$$\gamma(T) = b^2 + (ab/RT^{1.5}) \quad (1.14)$$

$$\delta(T) = b^3 - (ab^2/RT^{1.5}) \quad (1.15)$$

最后, R-K 关系式如式 (1.6) 所说明的那样, 是一个有关摩尔体积的三次方程。在式 (1.6) 的最初的一个根确定之后, 就能得出一个二次方程。如果其数量定为 K:

$$K = abs(Z - 1)^2 - (4(Z(Z - 1) + (AP - B^2P^2 - BP))) \quad (1.16)$$

K 是负值时 (230 行), 其他根是虚根。至此通告用户并中断计算。如果 K 是正值时, 则其他两个根是实根。液相压缩因子是这两个根中较小的一个, 并且是

$$Z_L = ((1 - Z) - K^{0.5})/2 \quad (1.17)$$

这是程序 240 行。使用 Z_L 、 V_L , 液相的等温焓变 (式 1.8)、等温熵变 (式 1.9)、逸度系数和逸度 (式 1.11) 可通过前面给出的子程序计算。

补充两点: 第一点, 在式 (1.16) 中 (230 行), $(Z - 1)$ 量通过 abs(绝对值) 预定, 这是必要的。因为 TRS-80 计算机在负数平方时产生一个负数。因此要用 $(Z - 1)$ 的绝对值。第二点, 在确定液相压缩因子时, 要计算两个比较小的数字之

间的差。由于各种计算机取舍的方法不同，尽管输入数据（本例为 Z_L ）是非常一致的，也还会有差异。

1.1.2 求解压力或温度

当 P 或 T 是未知变量时，用程序2解 $R-K$ 状态方程。因为 $R-K$ 方程中 P 是显函数，因此可以直接求解。这程序在表1.3中，定义为“A”，可求出这个解。表1.4为实例的输出。存储与程序1相同。

程序2中的“B”程序可用于求解 T 。要用试差法求解。用理想气体定律得到 T 的初值，

$$T = PV/R \quad (1.18)$$

然后按牛顿法用 T 的初值得出（70行）压力 P_1 以及计算出导数 dP/dT 值（75行）。下一个温度的估算值 T_1 由下式（80行）得出。

$$T_1 = T - (P_1 - P)/(dP/dT) \quad (1.19)$$

然后用 T_1 来计算第二个压力值 P_2 （85行）。如果两次算得的压力值之差的绝对值小于一个任意的极限时（本例中为 $0.0005P$ ），那么就得到一个满意的解。如果不是这样，则使 T_1 等于 T ，并重复计算。一般经过四次试算就可以得到一个满意的解。

当结果可以较为满意时，作为计算出的 P 和 T 下的 Z 值就会被算出并打印出来。表1.3是程序，而表1.4是一个实例输出。图1.2是流程图。程序1给出的子程序可以与这些程序一起用。

1.2 用于二元混合物的REDLICH-KWONG方程

与用于纯物质一样， $R-K$ 方程可以应用于二元混合物。方程的形式与原来相同，并且解法也相同。常数是一个辅助变量的函数，即是组分的函数。临界温度和压力必须重新定义。

表 1.3 程序2

当压力或温度是未知变量时Redlich—Kwong状态方程的解

A

```

1: "A" INPUT U, T
4: PRINT "U="; U; "
  T="; T
5: T=T+A(29): A(30
  )=A/A(27)
10: A=.4278/(A(30)
  ^2.5*A(28))
15: B=.0867/(A(30)
  *A(28))
20: C=A*R^2*T^2.5:
  D=B*R*T
25: P=((R*T)/(U-D)
  )-(C/(T^1.5*U*(
  U+D)))
30: Z=(P*U)/(R*T)
35: PRINT "Z="; Z; "
  P="; P; "--ATM"
45: END

```

B

```

50: "B" INPUT U, P
51: PRINT "U="; U; "
  P="; P
55: T=(P*U)/R
60: C=(.4278*R^2*A
  (27)^2.5)/A(28)

```

```

65: D=(.0867*R*A(2
  7))/A(28)
70: Q=((R*T)/(U-D)
  )-(C/(T^1.5*U*(
  U+D)))
73: N=(R/(U-D))+C
  /(2*T^1.5*U*(U
  +D))
80: U=T-(Q-P)/N
85: Q=((R*U)/(U-D)
  )-(C/(U^1.5*U*(
  U+D)))
90: IF ABS (Q-Q)<.
  0005*PGOTO 125
95: T=U
96: PAUSE USING ; T
100: GOTO 70
125: P=Q: T=U: Z=(P*U
  )/(R*T)
126: T=T-A(29)
130: PRINT "Z="; Z; "
  P="; P; "T="; T; "
  --CENTI"
131: T=T+A(29)
132: A=C/(R^2*T^2.5
  ): B=D/(R*T)
140: END

```

表 1.4 程序2
实例输出、输入数据、存储信息及程序注解

A	B
U=25.46T=37.73	U=25.46P=1.
Z=9.984081569E-0	Z=9.984063766E-0
1P=1.000432949--	1P=9.999999999E-
ATM	01T=37.5960128--
U=0.5891T=37.73	CENT I
Z=9.393303281E-0	U=0.5891P=40.83
1P=40.67874889--	Z=9.998638178E-0
ATM	1P=40.82999995T=
U=0.1279T=37.73	38.7088212--CENT
Z=8.542711634E-0	I
1P=170.3975977--	U=0.1279P=170.11
ATM	Z=8.536374953E-0
	1P=170.11T=37.43
	56676--CENT I
程序求 P = ?	程序求 T = ?
输入数据:	
“A” V= (三个值)	t=37.73℃
“B” V= (三个值)	P= (三个值)
存储信息: (两种解法存储相同)	
R = 气体常数(0.08206升·大气压/摩尔·K)	
A (27) = T _c , K	
A (28) = P _c , 大气压	
A (29) = 273.16K(0℃)	
程序注解:	
1. 96行“Pause Using; T”可以观察计算过程。	
2. 在程序“B”中, P ₁ =0; dP/dT=N; T ₁ =U; P ₂ =Q。	
3. 实例中使用了甲烷的物性数据, 并在附录中给出。	

这些不同点应予以考虑。

$$T_{cm} = ((\sum y_i (T_{ci}^{5/2} / P_{ci})^{1/2})^2 / \sum y_i (T_{ci} / P_{ci}))^{2/3} \tag{1.20}$$