

О. ААРНА, Ю. КАЛЛАС, Э. УИБО

МАШИННЫЙ РАСЧЕТ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЖИДКИХ И ГАЗООБРАЗНЫХ СМЕСЕЙ

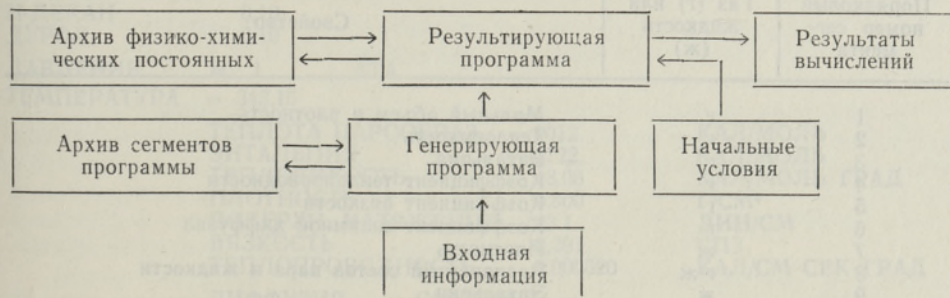
При математическом моделировании химико-технологических процессов необходимо иметь возможность расчета физико-химических свойств (ФХС) многокомпонентных смесей. Известны некоторые системы машинного расчета ФХС [1, 2, 3], созданные в США. Более подробно из них описана система AICHЕ, предназначенная для исследования широкого класса веществ. К сожалению, имеющиеся описания слишком поверхностны для того, чтобы использовать их при разработке новой системы.

Нами была поставлена задача создать систему машинного расчета ФХС многокомпонентных углеводородных смесей, содержащих до 30 компонентов. Система составлена на языке МАЛГОЛ-73 [4, 5] для ЭВМ «Минск-22/32»*.

Созданная нами система машинного расчета состоит из следующих основных частей:

- 1) архива физико-химических постоянных индивидуальных компонентов,
- 2) архива сегментов расчета ФХС,
- 3) генерирующей программы,
- 4) результирующей программы.

Оба архива, а также генерирующая программа записаны на магнитную ленту. Связь отдельных блоков в системе иллюстрируется схемой.



Блоксхема системы.

* В настоящее время описанная ниже система реализована на ЭВМ «Минск-32» и ЕС-1020 с применением языка ФОРТРАН.

Архив физико-химических постоянных содержит все необходимые физико-химические постоянные компонентов (молекулярные массы, постоянные Антуана, Леннарта-Джонса, Стокмайера и т. п.) для расчета ФХС компонентов и смесей. При составлении архива максимально использована справочная литература.

Архив сегментов программы состоит из трех частей:

1) сегментов результирующей программы (наибольшие из них представляют собой готовые транслированные программы расчета ФХС, например, в системе имеются программы для расчета парожидкостного равновесия [6]);

2) оглавления архива сегментов, содержащего начальные адреса сегментов на магнитной ленте;

3) матрицы соединений сегментов B , размерностью $m \times n$, где

$$b_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{если для расчета свойства } i \text{ требуется сегмент } j; \\ 0, & \text{если для расчета свойства } i \text{ сегмент } j \text{ не требуется} \\ (m - \text{число свойств, } n - \text{число сегментов}). \end{cases}$$

Свойства, расчет которых выполняется сегментами архива, представлены в таблице.

Работа системы машинного расчета

Если составлены архивы физико-химических постоянных и сегментов программы, то на основе списка требуемых физико-химических свойств генерирующей программой составляется результирующая программа (см. схему) «СВОЙСТВА СМЕСЕЙ». Генерирующая программа компилирует результирующую программу на магнитную ленту и передает управление транслятору. Входной информацией для генерирующей программы является вектор $A = (a_i)_m$, элементы которого следующие (см. таблицу):

$$\text{если } a_i = \begin{cases} 1, & \text{то } i\text{-тое свойство надо вычислить;} \\ 0, & \text{то } i\text{-тое свойство вычислять не надо.} \end{cases}$$

Результатом умножения вектора A и матрицы соединений B является

Свойства МКС, программы расчета которых содержатся в архиве сегментов программы

Порядковый номер сегмента	Газ (г) или жидкость (ж)	Свойство
1	г	Мольный объем и плотность
2	г	Теплоемкость
3	г	Энтальпия
4	г	Коэффициент теплопроводности
5	г	Коэффициент вязкости
6	г	Коэффициент взаимной диффузии
7	ж	Плотность
8	г-ж	Равновесный состав пара и жидкости
9	ж	Энтальпия
10	г-ж	Энтальпия парообразования
11	г-ж	Поверхностное натяжение
12	ж	Теплоемкость
13	ж	Коэффициент вязкости
14	ж	Коэффициент теплопроводности
15	ж	Коэффициент взаимной диффузии

вектор сегментов результирующей программы C . Если $C_j=1$, то j -тый сегмент результирующей программе нужен. По найденному вектору C обращаются к оглавлению архива и находят адреса сегментов, составляющих результирующую программу.

Результирующая программа «свойства смесей» вычисляет требуемые по вектору A свойства смесей. Работа ее следующая: по вектору компонентов смеси (содержащему порядковые номера нужных компонентов согласно архиву физико-химических постоянных) информация, вводимая из архива постоянных, обрабатывается (т. е. лишняя информация гасится). Затем с перфоленты вводятся такие начальные условия, как векторы составов (молярные доли компонентов), давление и температура. Нужные свойства вычисляются и печатаются (см. приложение).

Приложение.

Пример результатов расчета ФХС по программе «СВОЙСТВА СМЕСЕЙ». При генерировании программы $a_8=0$. Состав исходной смеси в молярных долях, температура в К.

ГАЗОВАЯ СМЕСЬ

1-ГЕКСЕН	0.10
БЕНЗОЛ	0.40
СТИРОЛ	0.30
Н-ДЕКАН	0.10
ДУРОЛ	0.10

ДАВЛЕНИЕ = 1 АТА

ТЕМПЕРАТУРА = 343.15

МОЛЯНЫЙ ОБЪЕМ	28158.	СМ ³ /МОЛЬ
ПЛОТНОСТЬ	0.00350	Г/СМ ³
ВЯЗКОСТЬ	0.0072	СПЗ
ТЕПЛОЕМКОСТЬ	34.64	КАЛ/МОЛЬ·ГРАД
ЭНТАЛЬПИЯ	6291.	КАЛ/МОЛЬ
ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ	0.000033	КАЛ/СМ·СЕК·ГРАД

ДИФФУЗИЯ	СМ ² /СЕК				
	0.0327071	0.0365211	0.0277603	0.0225357	0.0249637
	0.0365211	0.0411280	0.0309216	0.0248087	0.0276505
	0.0277603	0.0309216	0.0231762	0.0188272	0.0208623
	0.0225357	0.0248087	0.0188272	0.0154703	0.0169911
	0.0249637	0.0276505	0.0208623	0.0169911	0.0187407

ЖИДКАЯ СМЕСЬ

1-ГЕКСЕН	0.10
БЕНЗОЛ	0.40
СТИРОЛ	0.30
Н-ДЕКАН	0.10
ДУРОЛ	0.10

ДАВЛЕНИЕ = 1 АТА

ТЕМПЕРАТУРА = 343.15

ТЕПЛОТА ПАРООБРАЗ.	9012.	КАЛ/МОЛЬ
ЭНТАЛЬПИЯ	-2722.	КАЛ/МОЛЬ
ТЕПЛОЕМКОСТЬ	48.08	КАЛ/МОЛЬ·ГРАД
ПЛОТНОСТЬ	0.800	Г/СМ ³
ПОВЕРХН. НАТЯЖЕНИЕ	23.1	ДИН/СМ
ВЯЗКОСТЬ	0.391	СПЗ
ТЕПЛОПРОВОДНОСТЬ	0.000320	КАЛ/СМ·СЕК·ГРАД

ДИФФУЗИЯ	СМ ² /СЕК				
	0.0000592	0.0000500	0.0000353	0.0000348	0.0000370
	0.0000666	0.0000542	0.0000373	0.0000320	0.0000365
	0.0000449	0.0000372	0.0000256	0.0000220	0.0000247
	0.0000348	0.0000332	0.0000228	0.0000196	0.0000199
	0.0000370	0.0000294	0.0000206	0.0000199	0.0000194

Заклучение

Созданный вариант системы содержит ограниченное число компонентов и сегментов расчета физико-химических свойств, но, используя возможности МАЛГОЛ-системы, его легко расширить, т. е. включить новые сегменты и компоненты. Для экономии памяти и машинного времени предусмотрена возможность аппроксимации зависимостей вычисляемых ФХС от температуры (или давления) и состава полиномами Чебышева или квадратичными формами. Результирующие программы легко подключаются к более сложным.

ЛИТЕРАТУРА

1. Meadows E. L., Chem. Engng Progr., **61**, No. 5, 93—108 (1965).
2. Heitman R. E., Harris G. H., Industr. Engng Chem., **60**, No. 2, 50—59 (1968).
3. Yen L. C., Cantwell K. R., Giles B. L., Industr. Engng Chem., **60**, No. 2, 70—73 (1968).
4. Таммет Х., Справочные материалы для пользования системой МАЛГОЛ-73. Таллин. 1973.
5. Выханду Л., Салло К., Юргенсон Р., Система стандартных программ алгоритмического языка МАЛГОЛ. Таллин. 1972.
6. Каллас Ю. И., Уйбо Э. Э., О методе Вильсона для расчета многокомпонентного равновесия между жидкостью и паром. Тр. Таллинск. политехн. ин-та, № 359, 29—35 (1974).

Таллинский политехнический
институт

Поступила в редакцию
1/X 1975

O. AARNA, J. KALLAS, E. UIBO

MITMEKOMPONENDILISTE GAASIDE JA VEDELIKE SEGUDE FÜÜSIKALIS-KEEMILISTE OMADUSTE ARVUTAMISEST

Kirjeldatakse füüsilis-keemiliste omaduste arvutamist elektronarvutil. Koostatud variant arvutab 15 tähtsamat süsivesinike seguade omadust. On esitatud 5-komponendilise segu omaduste arvutamise näide.

O. AARNA, J. KALLAS, E. UIBO

COMPUTER CALCULATION OF PROPERTIES OF LIQUID AND GAS MIXTURES

A system for computer calculation of properties of multicomponent liquid and gas mixtures is described. The present version of system enables to calculate 15 mean properties of hydrocarbon mixtures. An example is presented.