

C 语言在闪蒸过程计算中的应用

常 兴

(青海大学化工学院, 青海 西宁 810016)

摘 要: 从物料衡算出发, 分析了闪蒸过程计算, 通过 一个计算实例探讨了 Newton 迭代求解法以及 C 语言编程方法在闪蒸过程计算的应用。

关键词: 闪蒸; 化工计算; C 语言

中图分类号: TP311.52 文献标识码: A 文章编号: 1008—858X (2004) 02—0039—04

1 问题的提出

闪蒸是连续的单级蒸馏过程。该过程主要用于化工过程混合物的初步分离^[1]。该过程要求将一定的流股加热到指定的温度, 然后使它通过减压阀突然地流到低压区。最终的平衡气相和液相混合物被分离。气相中将含有更多的轻组分。实际上, 闪蒸罐是单级平衡蒸馏单元^[2], 是多级分离塔的基本构成单元, 其模拟方法是复杂多级分离模拟化和模拟计算的基础, 对于沸程较宽的多组分混合物的粗分离应用更多^[3]。等温闪蒸过程如图 1 所示, 流量 F (摩尔流量, 下同)、组成为 z_i (摩尔分数, 下同) 的混合物经换热器进入气液分离罐, 在罐中经闪蒸分离出互成平衡的气液两相。汽相流量为 V , 组成为 y_i ; 液相流量为 L , 组成为 x_i 。分离罐压力为 P , 温度为 T 。

对于等温闪蒸过程的问题是: 已知混合物的总组成 z_i , 闪蒸温度 T 和压力 P , 要求计算闪蒸后汽相所占分率 e , 及平衡的汽液相组成 y_i 和 x_i 。这个问题的准确求解必须通过迭代法求解。如果采用计算机求解则比较方便, 程序的

通用性强。可以把计算者从繁重的试算工作中解脱出来, 同时为多组分模拟计算提供依据。

2 问题的解决

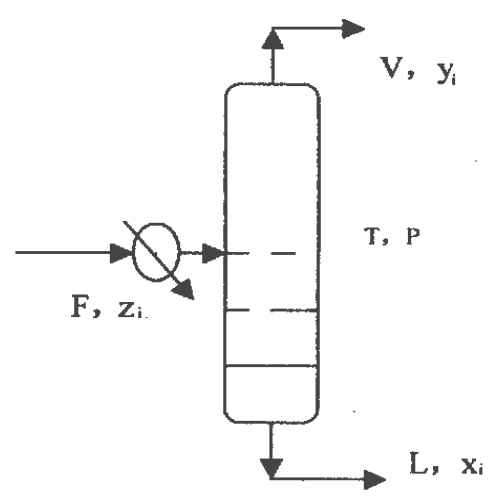


图 1 等温闪蒸
Fig. 1 Isothermal flash evaporation

2. 1 工作方程

对于如图 1 所示的闪蒸过程, 用物料衡算和相平衡方程得到:

$$\begin{cases} F=V+L \\ Fz_i=Vy_i+Lx_i \dots\dots\dots (1) \\ y_i=K_ix_i \\ \text{令汽化分率 } e \text{ 为 } e=V/F \dots\dots\dots (2) \end{cases}$$

由 (1) 得到:

$$x_i = \frac{z_i}{1+e(K_i-1)} \dots\dots\dots (3)$$

由 $\sum_{i=1}^C x_i=1$ 及 $\sum_{i=1}^C y_i=1$ 可得出:

$$\sum_{i=1}^C \frac{(K_i-1)e}{1+e(K_i-1)} z_i = 0 \dots\dots\dots (4)$$

当温度、压力及混合物组成给定之后, 方程 (4) 中只有一个未知数 e , 对于二元物系可直接求解, 但对于组分数 $C \geq 3$ 的体系用一般手算的方法已显得无能为力, 随着计算机技术的进步以及算法语言的不断出现, 求解这个问题显得简捷方便。

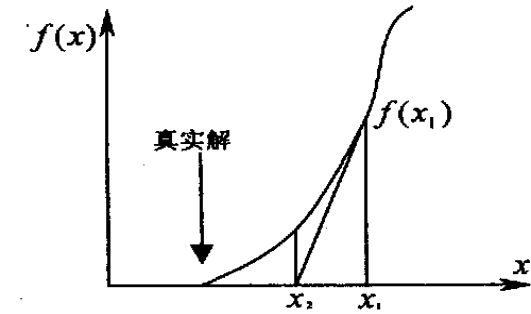


图 2 牛顿法
Fig. 2 Newton iterative method

2. 2 计算原理

计算机的计算采用牛顿法。牛顿法在许多情况下比线性内插法收敛得快些, 并且只需要一个起点^[4]。如图 2 所示, 设 x_1 为近似解, $f(x_1)$ 是在这一点的函数值。如果通过点 $f(x_1)$ 对曲线 $f(x)$ 做切线, 则切线与 x 轴的交点 x_2 就是 x 的第二个近似值。为提高精度, 可以通过 $f(x_2)$ 再做曲线 $f(x)$ 的切线交 x 轴于 x_3 , 如此一直进行下去, $f(x)$ 就可使近似接逐渐逼近真实解。

在点 $x_1, x_2, f(x_1)$ 的连线所构成的三角

形中有: $\frac{f(x_1)}{x_1-x_2} = \tan\alpha = f'(x_1)$; 所以有: $x_2 = x_1 - \frac{f(x_1)}{f'(x_1)}$ 推广到一般: $x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$

2. 3 计算过程

对于 (4) 式采用 Newton 迭代法计算。令:

$$f(x) = \sum_{i=1}^C \frac{(K_i-1) z_i}{1+e(K_i-1)} \dots\dots\dots (5)$$

若目标函数为 $f(x) = 0$ 。此时求解得到的 e 即为问题的解。计算框图如图 2:

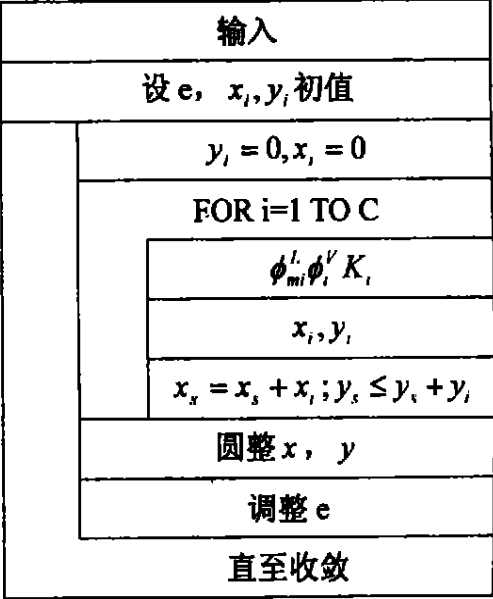


图 3 等温闪蒸计算框图
Fig. 3 Flowchart for calculation of isothermal flash evaporation

3 计算算例

组成 (mol) 为 60% 苯, 25% 甲苯和 15% 对二甲苯的 100kmol 液体混合物, 在 102.3kPa 和 100℃下闪蒸。试计算液体和汽体产物的量及组成^[5]。

此条件下物系可看成是理想体系, 因此可以用安托因公式计算饱和蒸汽压。

3. 1 计算程序^[6]

```
#include "stdarg. h"
#include "math. h"
#define T (100+273. 15)
static float Z[ 3]=0. 60, 0. 25, 0. 15}, K[ 3];

main ()
{ int i;
double p [ 3];
float f, f1, x, y, a, b, s;
float V, F, L, P0;
static float l[ 3]={ 20. 7936, 20. 9065, 20. 9891},
m [ 3] = { 2788. 51, 3096. 52, 3346. 65},
n [ 3] = { 52. 36, 53. 67, 57. 84};
clrscr (); / * K * /
P0=101. 3;
for (i=0; i<3; i++)
p [ i] =exp (1 [ i] - (m [ i] / (T-n [ i] )));
K [ i] = (p [ i] /p0) /1000;
printf ("k=%f \n", K [ i]; / * s, f, f1 * /
s=0. 1;
for (i=0; i<3; i++)
do {f=0. 0;
```

```
printf ("s=%f", s);
for (i=0, i<3; i++)
{a=Z[ i] *(1. 0-K[ i]);b=1. 0+s *(K[ i]-1. 0);
f+=a/b;
printf ("f=%f \n", f);
f1=0. 0;
for (i=0; i<3; i++)
x=(K[ i]-1. 0) *(K[ i]-1. 0) *Z[ i];
y=(1. 0+s *(K[ i]-1. 0)) *(1. 0+s *(K[ i]-1. 0));
f1+=x/y;
printf ("f1=%f \n", f1);
s+=fabs (f) /fabs (f1);
while (fabs (f) >0. 001);
/ * V, L, F, x, y * /
for (i=0; i<3; i++)
x=Z [ i] / (1. 0+s *(K [ i] -1. 0));
y=K[ i] *Z[ i] / (1. 0+s *(K[ i] -1. 0));
printf ("x=%f, y=%f \n", x, y);
F= 100. 00;
V= s *F;
printf ("V=%fkmol \n", V);
L=F-V;
printf ("L=%fkmol \n", L);
```

3. 2 计算结果

k=1. 777352	k=0. 732189	k=0. 316452	
s=0. 100000	f=-0. 253920	f ₁ =0. 411828	x=0. 378531, y=0. 672782
s=0. 716567	f=-0. 015732	f ₁ =0. 446265	x=0. 313114, y=0. 229259 V= 75. 265381kmol
s=0. 751821	f=0. 000391	f ₁ =0. 469147	x=0. 308944, y=0. 097766 L= 24. 734619kmol

以上结果在 HP-Bri0 P III-450 上运行通过。

4 结 语

利用 C 语言求解闪蒸问题方便、快捷、其它等温闪蒸问题只需调换其中的输入变量即可进行，程序的通用性强，计算结果直观、准确，完全可以取代烦琐的手工迭代计算，在科研计算中有推广意义。

参考文献:

[1] 臧福录, 应金良. 多组分精馏的计算和分析 [M]. 北

京: 中国石化出版社, 1998. 16-17.
[2] [澳] R. 拉曼. 许锡恩, 张福芝, 等. 译. 化工过程计算 [M]. 北京: 化学工业出版社, 1992. 115-118.
[3] 韩方煜, 郑世清, 荣本光. 过程系统稳态模拟技术 [M]. 北京: 中国石化出版社, 1999. 31-33.
[4] 王树森. 化学工程计算方法 [M]. 北京: 化学工业出版社, 1989. 14-15.
[5] 陈洪钊, 刘家祺. 化工分离过程 [M]. 北京: 化学工业出版社, 1995. 38-41.
[6] 徐士良. C 常用算法程序集 [M]. (第二版). 北京: 清华大学出版社, 1996. 80-81.

Application of Flash Process Calculation with C—Language

CHANG Xing

(College of Chemical Technology, Qinghai University, Qinghai, Xining 810016, China)

Abstract: This paper analyzes the calculation of flash process through material balance, by an example to discuss the basic application of Newton iterative method and C language in flash process calculation.

Key words: Flash; Chemical calculation; C—Language

·简讯·

祝贺中国科学院青海盐湖研究所盐湖化学分析测试部 通过国家实验室认可/计量认证的初评审

2004 年 4 月 13—14 日, 受中国实验室国家认可委员会的委派, 国家认可委专家评审组一行 3 人对中国科学院青海盐湖研究所盐湖化学分析测试部进行国家实验室认可/计量认证的现场评审。

评审组依据实验室 CNAL/AC01: 2002 (ISO/IEC17025: 1999) 标准建立的质量管理体系及其运行情况, 采用不同方式对实验室认可的检测项目进行了现场考核, 检查了实验室设施内部质量审核、管理评审及近几年来实施质量活动的适宜性、充分性和有效性。在评审过程中, 专家们主要通过现场观察和现场试验, 与有关的管理人员、检测技术人员进行交流和座谈, 同时还查阅了盐湖化学分析测试部办公室有关的管理活动、检测技术活动记录以及有关的证明。

评审组认为中国科学院青海盐湖研究所盐湖化学分析测试部拥有一批高技术水平的研究、测试人员, 并具有优良的设施环境和完善的检测设备。该实验室建立了符合 ISO/IEC17025: 1999 标准的质量管理体系, 符合 CNAL/AC01: 2002 实验室认可准则的要求; 经评审组对实验室申请认可的检验项目逐项评审, 提出了推荐认可的 7 类 25 项检测范围。

评审组同时对此次评审工作提出了建设性的意见和建议, 希望实验室在今后的工作中, 充分发挥内部质量审核和管理评审的作用, 进一步完善质量管理体系, 使实验室质量管理体系为实验室建设起到更大作用。

(供稿 白华, 宋粤华)