

文章编号: 1000-6761(2001)06-1564-04

水和水蒸汽热力性质 IAPWS-IF97 公式的通用计算模型

王培红, 贾俊颖, 程懋华

(东南大学 动力系, 南京 210096)

摘 要:以国际水和水蒸汽性质协会(IAPWS)提供的 1997 年工业用计算模型(简称 IAPWS-IF97 公式)为基础,讨论了通用计算机软件设计中有关的计算加速,非显函数的迭代分类、迭代算法及提高迭代速度的方法等问题。表 1 参 5

关键词:水和水蒸汽热力性质;迭代算法;计算模型

中图分类号:TK 211 **文献标识码:**A

0 前言

水蒸汽是热能动力工程中使用最早,也是目前使用最广泛的一种物质。在热工计算中需要随时确定水和水蒸汽的压力、温度、焓、熵和比容,因此建立水和水蒸汽的热力学性质的计算模型是必须的。

水和水蒸汽各热力学性质参数之间有着复杂的非线性关系,且多为隐式函数关系,在计算过程中频繁的使用迭代计算,因此如何保证迭代算法的收敛性,以及提高计算速度是水和水蒸汽性质通用计算模型首要解决的问题。

1 IAPWS-IF97 公式的适用范围、分区及模型公式

国际水和水蒸汽性质协会提供的 IAPWS-IF97 公式的适用范围为:

$273.15\text{K} \leq T \leq 1073.15\text{K}$ $0 < p \leq 100\text{MPa}$

$1073.15\text{K} \leq T \leq 2273.15\text{K}$ $0 < p \leq 10\text{MPa}$

整个区域被分成了 5 个区域,用 1~5 来标志。不同的分区使用不同的模型公式,各分区间的边界均有边界方程。

IAPWS-IF97 公式中应用的常数有:

气体常数 $R = 0.461526\text{kJ/kgK}$

收稿日期: 1999-10-14

作者简介:王培红(1959-),男,工学硕士,东南大学动力系副教授。主要从事火电厂热力系统评价、动力设备经济运行及故障诊断方法的应用研究。

临界点参数 $T_c = 647.096\text{K}$

$p_c = 22.064\text{MPa}$

$\rho_c = 322\text{kg/m}^3$

IAPWS-IF97 公式使用的对比态参数有:

$c = p/p^*$

$f = T^*/T$

$\theta = T/T^*$

$W = \rho/\rho^*$

$Z = h/h^*$

$e = s/s^*$

在不同的分区中 p^* 、 T^* 、 ρ^* 、 h^* 、 s^* 取不同的数值。

IAPWS-IF97 公式使用的函数:

单位吉布期自由焓函数 g

单位亥姆霍兹自由能函数 f

各区域的模型公式可以表示为:

分区 1 $\mathcal{X} = g/RT$

分区 2 $\mathcal{X} = \mathcal{X}^0 + \mathcal{X}^r = g/RT$

分区 3 $H = f/RT$

分区 4 $p_s(T)$

分区 5 $\mathcal{X} = \mathcal{X}^0 + \mathcal{X}^r = g/RT$

其中 \mathcal{X}^0 表示理想部分, \mathcal{X}^r 表示剩余部分。

使用分区 4 的公式可以实现饱和压力和饱和温度的互求,在此基础上可以应用分区 1、2、3 的公式计算饱和水和饱和蒸汽的焓、熵、比容。若已知干度,则可以根据分区 1、2、3 公式进行湿区计算。

在工程计算中,一般需要工质的焓、熵、比容。

等参数的差值。因此,必须选定一个计算参照点,其它状态点的参数以此为基础进行计算。IAPWS-IF97模型根据 1956年第五次国际水和水蒸汽会议的决定,选择水的三相点的饱和水参数作为基准点。规定在三相点饱和水的内能和熵为零,其它参数为:

$$T_t = 273.16\text{K}$$
$$p_t = 611.657\text{MPa}$$
$$h_t = 0.511783\text{kJ/kg}$$

2 模型公式的计算加速

IAPWS-IF97公式的模型公式均为多项式的形式,每一个模型公式都有几十项相加,每一项因子分别由 2个字变量 x, y 的幂的乘积。以分区 1 的基本公式为例说明公式的特点,和为加速计算采取的几点措施。令 $x = 7.1 - c, y = f - 1.222$

分区 1 的基本公式为:

$$\frac{g(p,T)}{RT} = V(c, f) = \sum_{i=1}^{34} n_i (7.1 - c)^{I_i} \times$$
$$(f - 1.222)^{J_i} = \sum_{j=1}^{34} n_j x^{I_j} y^{J_j}$$

根据参考文献 [1] 可知: 幂指数 I_i 和 J_i 具有一定的规律性。下面给出 I_i 和 J_i 的数值

表 1 分区 1 模型公式的幂指数

I	1	2	3	4	5	6	7	8	9
I_i	0	0	0	0	0	0	0	0	1
J_i	-2	-1	0	1	2	3	4	5	-9
I	10	11	12	13	14	15	16	17	18
I_i	1	1	1	1	1	2	2	2	2
J_i	-7	-1	0	1	3	-3	0	1	3
I	19	20	21	22	23	24	25	26	27
I_i	2	3	3	3	4	4	4	5	8
J_i	17	-4	0	6	-5	-2	10	-8	-11
I	28	29	30	31	32	33	34		
I_i	8	21	23	29	30	31	32		
J_i	-6	-29	-31	-38	-39	-40	-41		

幂指数 I_i 在整个范围内分段去相同的数值,在每一分段内 J_i 按序号的方向增大。如果完全按照模型公式的形式进行计算,程序中的每一项都含有 x, y 2个变量,且乘幂计算大量的重复,计算速度很慢。为了提高模型公式的计算速度,对模型公式进行了如下的整理:

(1) 变量分离

以幂指数 I_i 为基准,把 I_i 不变的各项化为一

个单元,并用符号 $R-k (k = 0, \cdots, 5, 8, 21, 23, 29, \cdots, 32)$ 表示, $R-k$ 只含有变量 y , 其中 R 表示函数 $\gamma(c, f)$, k 表示 x 的幂指数 I_i 的数值。例如: $R-0$ 表示函数 $\gamma(c, f)$ 的变量 x 的幂为零的项,即

$$R-0 = \sum_{i=1}^8 n_i y^{J_i}$$

用这种方法可使变量 x, y 的计算互不干扰

(2) 采用 Hornor 算法

因为每一项中变量 y 的幂都较高,如果直接进行 y^{J_i} 计算,计算的工作量大,耗费时间长。通过观察可以看到: 在每一个单元 $R-k$ 中,变量 y 的幂指数是依次增加的,根据这一特点,采用 Hornor 的算法,对 $R-k$ 进行了如下的处理。以 $R-0$ 为例说明:

$$R-0 = \sum_{i=1}^8 n_i y^{J_i} = n_1^* y^{-2} + n_2 y^{-1} + n_3 + n_4^* y +$$
$$n_5^* y^2 + n_6^* y^3 + n_7^* y^4 + n_8^* y^5 =$$
$$(n_1/y + n_2)/y + n_3 + (((n_8^* y + n_7^*)^* y +$$
$$n_6^*)^* y + n_5^*)^* y + n_4^*)^* y$$

若以原公式进行计算,变量 y 要进行 18 次乘积运算,而采用整理后的公式,则变量 y 只需要进行 7 次乘积运算,计算速度明显的减少,同时也方便了公式的求导运算。

根据相同的方法,分别对 $R-k (k = 0, \cdots, 5, 8, 21, 23, 29, \cdots, 32)$ 进行整理后,函数 $\gamma(c, f)$ 对变量 x 也采用 Hornor 的方法进行整理如下:

$$R = (((((R_{-32} x + R_{-31}^*)^* x + R_{-30}^*)^* x + R_{-29}^*)^* x +$$
$$R_{-28}^*)^* x + R_{-27}^*)^* x + R_{-26}^*)^* x + R_{-25}^*)^* x +$$
$$R_{-24}^*)^* x + R_{-23}^*)^* x + R_{-22}^*)^* x + R_{-21}^*)^* x +$$
$$R_{-20}^*)^* x + R_{-19}^*)^* x + R_{-18}^*)^* x + R_{-17}^*)^* x +$$
$$R_{-16}^*)^* x + R_{-15}^*)^* x + R_{-14}^*)^* x + R_{-13}^*)^* x +$$
$$R_{-12}^*)^* x + R_{-11}^*)^* x + R_{-10}^*)^* x + R_{-9}^*)^* x +$$
$$R_{-8}^*)^* x + R_{-7}^*)^* x + R_{-6}^*)^* x + R_{-5}^*)^* x +$$
$$R_{-4}^*)^* x + R_{-3}^*)^* x + R_{-2}^*)^* x + R_{-1}^*)^* x + R_{-0}^*)^* x$$

规定符号 xk 表示 x^k , 符号 yk 表示 y^k 。

3 通用计算模型

根据工程热力学有关工质热力性质的基本理论,对水和水蒸汽的热力学性质,可以由任意 2 个独立的状态参数,确定其它 3 个未知的状态参数。为了能适应各种类型的热工计算需要,确定水和水蒸汽热力性质的计算机程序,要有多个以不同的 2 个独立参数作为自变量确定其余状态参数的功能。而 IAPWS-IF97 公式提供的模型是以温度 T 压力 p (在 1 区、3 区和 5 区) 为自变量计算焓 h 熵 s 比容 v , 或者温度 T 密度 d (在 3 区) 为自变量计算压力 p 焓 h 熵 s , 4 区为饱和区, IAPWS-IF97 公式提供了饱和压力 p_s 和饱和温度 T_s 。

的互求公式 因此,迭代逻辑和算法就成为通用计算模型的关键。

3.1 迭代求解问题的分类

如果自变量组合为已知温度 T 与焓 h 熵 s 比容 v 中的任一个参数,则其它热力参数的计算为隐式方程 同样,如果自变量组合为已知压力 p 或密度 d (在 3 区) 与焓 h 熵 s 比容 v 或压力 p (在 3 区) 中的任一个参数,则其它热力参数的计算为隐式方程 我们称这类至少知道一个基本参数的自变量组合形式为第 1 类问题

如果自变量组合形式为已知焓 h 熵 s 比容 v 或压力 p (在 3 区) 中的任 2 个参数,则其它热力参数的计算也为隐式方程 我们称这类不含有基本参数的自变量组合形式为第 2 类问题

3.2 水和水蒸汽热力参数的第 1 类问题的求解

如果自变量组合形式为已知温度 T 与焓 h 熵 s 比容 v 中的任一个参数,则可根据相应的基本公式进行一维迭代求解 例如,已知温度 T 和焓 h 求压力 p 熵 s 比容 v ,可由基本公式 $h(p, T)$ 建立迭代方程 $f = h - h(p, T) = 0$ 计算压力 p ,比容 v 和熵 s 可由所得的压力 p 与温度 T 根据相应的基本公式计算 同理,如果自变量组合形式为已知压力 p 或密度 d (在 3 区) 与焓 h 熵 s 比容 v 或压力 p (在 3 区) 中的任一个参数,则可根据相应的基本公式进行一维迭代求解

3.3 水和水蒸汽热力参数的第 2 类问题的求解

如果已知自变量组合形式为已知焓 h 熵 s 比容 v 或压力 p (在 3 区) 中的任 2 个参数,即已知参数不包含基本参数,则其它热力参数的计算需要二维迭代 在这类问题中最常见的是已知焓 h 熵 s 组合,因为在第 1 类问题中已经解决了已知温度 T 焓 h 计算熵 s 的问题,则可以构造新的迭代策略,由焓 h 熵 s 迭代温度 T ,再根据已知的迭代方法温度 T 和焓 h 计算其它的热力参数 同时,对于自变量组合形式为已知焓 h 比容 v 或压力 p (在 3 区) 及已知熵 s 比容 v 或压力 p (在 3 区) 可以根据类似的方法构造迭代策略,计算其它的热力参数

3.4 饱和汽水参数的计算

IAPWS-IF97 公式的 4 分区为饱和区,模型给出了饱和压力 p_s 与饱和温度 T_s 互求的基本公式 $p_s(T)$ 和导出公式 $T_s(p)$ 因此,若已知饱和压力 p_s 或饱和温度 T_s 计算其它的汽水参数,可以首先根据 $T_s(p)$ 或 $p_s(T)$ 方程求得饱和温度 T_s

或饱和压力 p_s 在此基础上,根据工质所处区域,使用 1 区、2 区或 3 区的模型公式分别计算出其它汽水参数 若已知的是除饱和温度 T_s 和饱和压力 p_s 以外的其它任何一个饱和参数,则计算属于第 2 类问题

4 模型的迭代算法与迭代加速

由于需要频繁使用非显函数的计算格式,在通用计算模型中广泛使用迭代算法 在迭代策略的设计过程中,我们分别使用了参考文献 [5] 中介绍的割线法、试位法与 Ridders 法,在进行大量的数值试验和对比的基础上,根据不同的迭代算法的收敛性和稳定性,我们选择使用了不同的迭代算法

在通用计算模型设计中,为了减少重复计算,最大限度地提高计算速度,充分考虑了 IAPWS-IF97 公式的特点,在自变量分离重组的基础上,引入了计算标志 flag 可以根据迭代计算的不同情况,分别完成模型中与 p 和 T 均有关 仅与 p 有关 仅与 T 有关或者与两者皆无关的计算部分,从而实现计算加速

对于适用的迭代算法,亦进行了稳定性和收敛性改进,如割线法的收敛性较好,但收敛速度较试位法和 Ridders 法慢 鉴于此,在割线法的基础上引入了试位法的根区域判断,以及 Ridders 法的快速缩小根区间的算法,大大加快了收敛的速度 迭代初值的选取适当与否,直接影响到迭代的收敛性和收敛速度 针对不同的自变量组合形式,采用了不同的迭代初值选取方法 如采用前全苏热工研究所提出的 BTN 模型,确保算法的收敛性和收敛速度

5 水和水蒸汽的区域判定

IAPWS-IF97 公式提供了边界方程 B23 公式和饱和线方程 $p_s(T)$ 或 $T_s(p)$,它们给出了边界上温度 T 和压力 p 的关系 根据 B23 方程, $p_s(T)$ 和等温线 $T = 623.15 \text{ K}$ 即可进行区域判断 如果已知温度 T 和压力 p ,可根据温度 T 求得边界上的压力 p_s ,与输入压力 p 相比较,即可判断工质所在区域 如果已知温度 T 与其它热力参数中的任一个可由边界方程计算出等温线上的压力 p_s ,再计算出相应的热力参数,与输入参数进行比较,即可判定工质所在区域 同理,如果已知压力 p 与其它热力参数中的任一个,可由边界方程计算出

等压线上的温度 T ,再计算相应的热力参数,与输入参数进行比较,即可判定工质所在区域.如果已知焓 h 和熵 s ,可以拟合出边界方程以焓 h 或熵 s 为自变量计算熵 s 或焓 h 的形式.

6 水和水蒸汽热力性质的通用计算软件

利用上述方法,笔者建立了基于 IAPWS-IF97模型的通用计算软件,目前提供了 2种使用形式的软件,即全面支持 EXCEL97应用和一般在 WIN 9X下单独应用的形式.

该软件可以分区域应用,亦可全区域应用.可以完成已知压力、温度;已知压力、焓;已知压力、熵、已知温度、焓;已知温度、熵;已知焓、熵等多种

组合,求其它水和水蒸气热力学性质参数的通用计算.

使用结果表明,该软件能够满足电厂热力系统计算、节能潜力分析以及机组热力特性仿真等多方面应用.

参考文献:

[1] The International Association for the Properties of Water and Steam. IAPWS-IF97 International Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam[C].
[2] 王培红,程懋华,等.水和水蒸汽热力性质 IFC公式通用计算软件[J].汽轮机技术,1996,6.
[3] 李庆扬,等.数值分析[M].华中工学院出版社,1982.
[4] 徐士良. C常用算法程序集[M].清华大学出版社,1996,11.
[5] William H. Press et. Numerical Recipes IN C [J]. Cambridge University Press, 1992.

General Calculating Models of Water and Steam Properties (IAPWS-IF97)

WANG Pei-hong, JIA Jun-ying, CHENG Mao-hua

(Dept. of Power Engrg., Southeast Univ., Nanjing 210096, China)

Abstract In order to meet the need for engineering application, By Using the formulation of water and steam properties for industrial use offered by IAPWS-IF1997 (the international association for the properties of water and steam), iterative arithmetic are researched so that iterative calculation is faster and steady and convergent. The problems deal with program general software are solved. Table 1 and refs 5.

Key words properties of water and steam; iterative arithmetic; calculating models

· 学会动态 ·

2001年西安国际动力工程会议圆满成功

2001年西安国际动力工程会议 (ICOPE-2001 Xi'an)于 10月 8~ 12日在西安南洋大酒店 (西安交通大学学术交流中心)召开.参加会议的代表共约 200人,包括来自美国、日本、荷兰、德国、波兰、韩国等国外代表 60余名.

10月 8日晚举行欢迎招待会,大会主席中国动力工程学会副理事长、西安交通大学校长徐通模致欢迎词,陕西省副省长潘连生,日本 JSME代表及美国 ASME代表致贺词.

10月 9日上午大会开幕并由中国机械工业联合会常务副会长陆燕荪,日本东京大学吉识晴夫博士和安芷生院士分别作了专题报告.自 9日下午起分 6个会场进行论文交流.

本次会议共征集论文近 300篇,经评审收录论文集的共有 261篇,所有收录论文都安排了交流.论文集由清华大学出版社, Springer联合编辑室编辑出版,共 2册 1700页精装,部分优秀论文将推荐到 EII收录,代表们对论文集的内容和出版质量表示满意.

国际动力工程会议 (ICOPE)由中、日、美共同组织,每二年轮流在中、日、美召开. 2001年在中国由中国动力工程学会主办,学会经研究决定在西安由西安交通大学协助筹备,经过近一年半时间的准备在西安交通大学各级领导和部门的大力支持下,尤其是在西安交大能源与动力系的具体帮助下,落实了从论文征集、审稿、定稿,到会务安排等各项筹备工作,使会议顺利进行,并得到圆满成功.

大会期间,还召开了国际顾问委员会会议 (IAC).会议听取了 2001年西安会议的筹备过程并确定了下次会议. ICOPE-2003将于 2003年 11月在日本神户举行. (学会秘书处)