

工程热力学大作业

作者：能动B2104 杨牧天 2212212998

项目背景

水作为地球上分布做广泛的液态流体具有十分重要的研究意义，它被用作动力循环中的工作流体，为工业化国家提供了大量的电力。

在化工行业，水是最常见的溶剂。而在生物领域，水占人体的60%~70%，其重要意义显而易见。

除了在常规领域，水在一些特殊应用中也发挥了重大的价值，例如超临界水氧化，超临界水氧化技术对处理有毒有害的废水和污泥具有非常好的效果，其在化工工业，制药工业，食品工业，电子工业都有所应用。

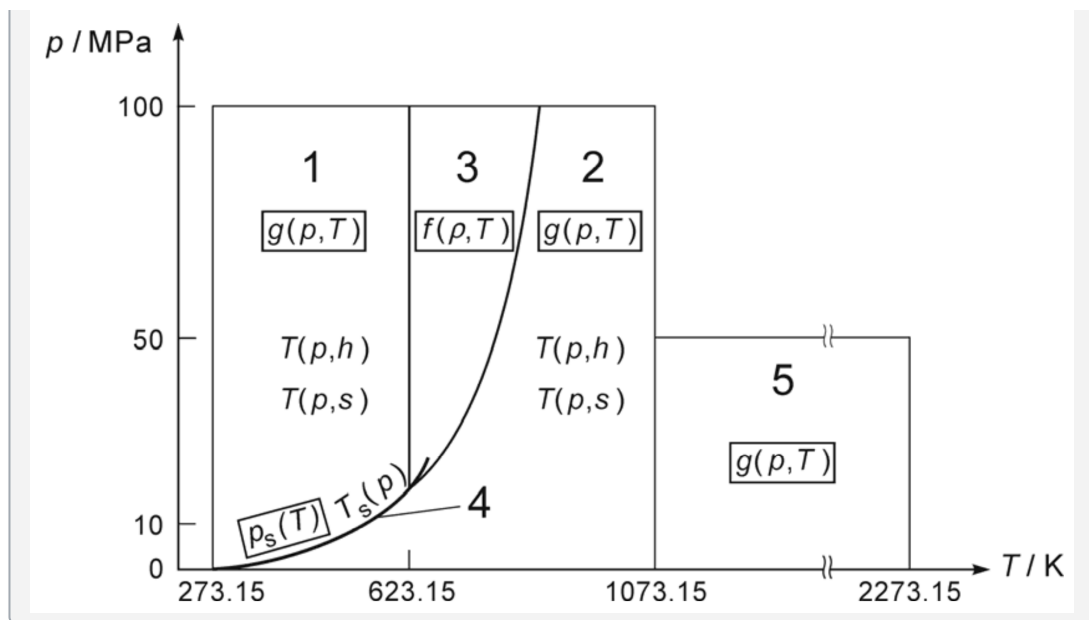
因此在实际生产中，明确水的物性至关重要，在以往的探索中，人们积累了大量实验数据，但由于现代工业对水的物性的精度不断提升，应用更加普遍，开发一个计算水及其蒸汽的物性的计算方法显得尤为重要。**水和蒸汽性质国际协会 (IAPWS)** 于2007年8月26-31日在瑞士卢塞恩举行会议，拟定发布了适用于工业用途的计算方法，称为IAPWS水和蒸汽热力学性能工业方案1997，简称IAPWS-IF97

本项目基于Python科学计算模块 (SymPy, Scipy, Numpy, Pandas) 以及可视化模块Qt5 for Python (PyQt5) 进行对IAPWS-IF97的编程实现并制作可视化界面。

算法简介

算法可用范围：

$$\begin{array}{ll} 273.15 \text{ K} \leq t \leq 1073.15 \text{ K} & p \leq 100 \text{ MPa} \\ 1073.15 \text{ K} \leq t \leq 2273.15 \text{ K} & p \leq 50 \text{ MPa} \end{array}$$



依据IAPWS-IF97，将整个有效范围划分为五个区域，其中，每个区域都有决定其性质的方程，根据此方程，我们可以通过数学运算将比体积，焓，熵等性质计算出来。

例：1区域的计算公式

$$\frac{g(p, T)}{RT} = \sum_{i=1}^{34} n_i (7.1 - \pi)^{I_i} (\tau - 1.222)^{J_i}$$

其中， $\pi = p/p^*$ ， $\tau = T^*/T$ ， $p^* = 16.53 \text{ MPa}$ ， $T^* = 1386 \text{ K}$

由此，如果已知上述正则方程式所拟合而成系数 n_i, I_i, J_i ，那么便可以求出无量纲吉布斯自由能的表达式

再根据如下关系：

$$\begin{aligned} v &= \left(\frac{\delta g}{\delta p} \right)_T \\ s &= - \left(\frac{\delta g}{\delta T} \right)_p \\ h &= g - T \left(\frac{\delta g}{\delta T} \right)_p \\ &\dots \end{aligned}$$

即可以求出比体积，比焓，比熵等热力学性质。

系数具体数值如下表：

i	Ii	Ji	ni
1	0	-2	0.14633
2	0	-1	-0.84548
3	0	0	-3.756360
4	0	1	3.39E+00
5	0	2	-0.95792

i	li	Ji	ni
6	0	3	0.15772
7	0	4	-1.66E-02
8	0	5	8.12E-04
9	1	-9	2.83E-04
10	1	-7	-6.07E-04
11	1	-1	-1.90E-02
12	1	0	-3.25E-02
13	1	1	-2.18E-02
14	1	3	-5.28E-05
15	2	-3	-4.72E-04
16	2	0	-3.00E-04
17	2	1	4.77E-05
18	2	3	-4.41E-06
19	2	17	-7.27E-16
20	3	-4	-3.17E-05
21	3	0	-2.83E-06
22	3	6	-8.52E-10
23	4	-5	-2.24E-06
24	4	-2	-6.52E-07
25	4	10	-1.43E-13
26	5	-8	-4.05E-07
27	8	-11	-1.27E-09
28	8	-6	-1.74E-10
29	21	-29	-6.88E-19
30	23	-31	1.45E-20
31	29	-38	2.63E-23
32	30	-39	-1.19E-23
33	31	-40	1.82E-24
34	32	-41	-9.35E-26

可视化

通过使用Qt5 For Python进行可视化界面的设计

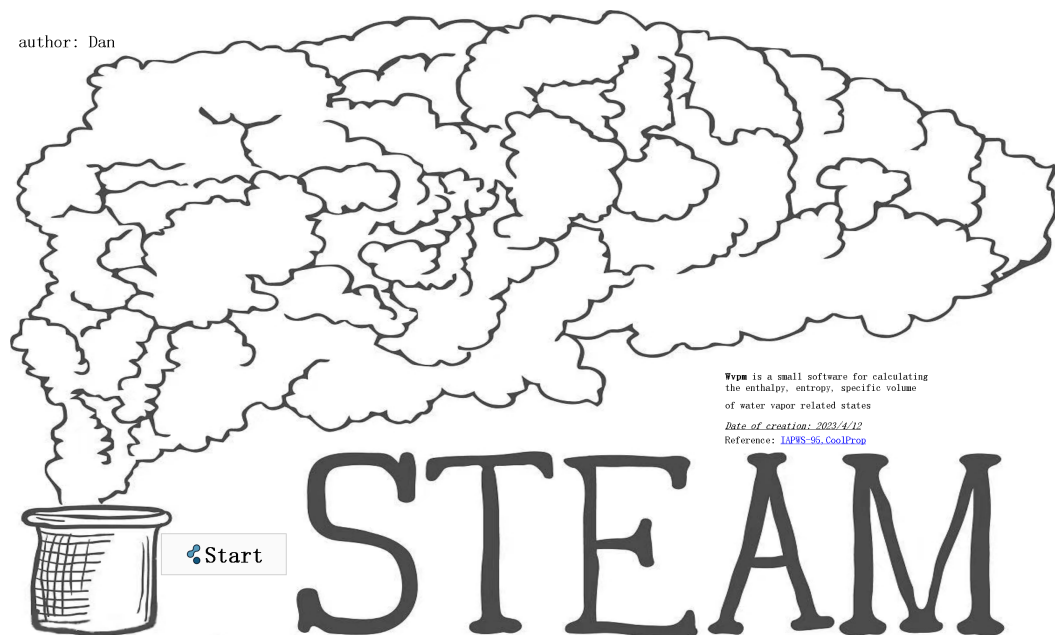
可视化界面共分为如下几个功能：

1. 单次计算：即根据输入的 p ， T 的数值计算出对应状态下的 v ， h ， s

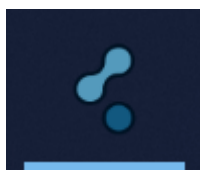
2. 批量计算：通过读取输入的csv文件计算对应热力学值，并通过tab表格显示出来
3. 结果绘图：将计算出来的热力学性质数据连同 p ， T 绘制在三维立体图上，并添加绘制等压线，等温线等功能，并提供绘图风格选择

可视化成果展示及使用说明

主界面及图标

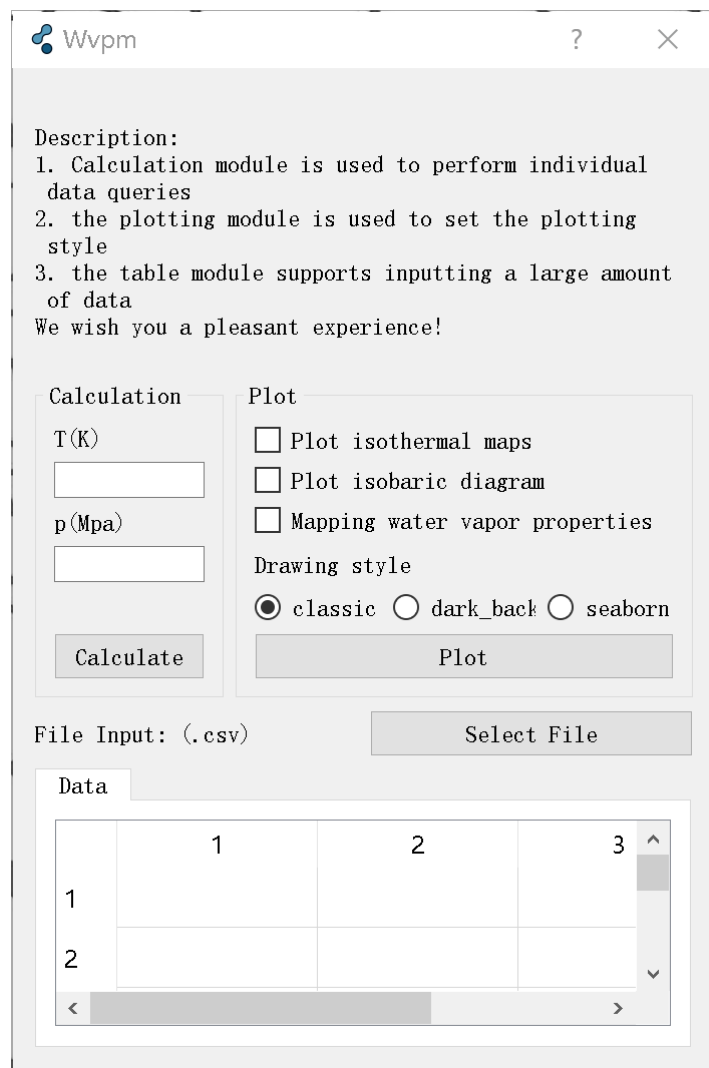


左上角为作者昵称，封面为蒸汽，与软件功能相扣；中间偏左区域为一个简短的功能说明以及参考资料来源



图标模仿某知名游戏平台

点击Start进入功能界面



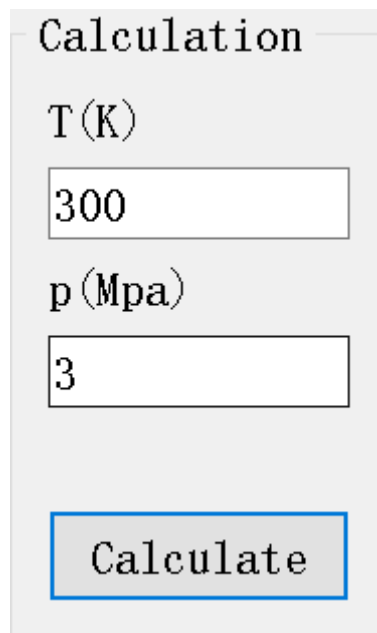
软件共分为四个功能区域

1. **最上方区域**为使用说明区域，说明软件的使用方法以及注意事项
2. **左中区域**为单次查询区域，输入T与p点击Calculate即可得到计算结果
3. **右中区域**为绘图区域，仅在存在输入文件时可以使用，共有三个功能可以使用
 - 绘制等压面
 - 绘制等温面
 - 在整个范围内绘制特性曲面

此外，还提供三种绘图风格，及经典模式，暗背景模式，seaborn模式

4. **最下方区域**为文件输入与显示区域，**该部分仅支持输入csv文件**，输入文件后可在下方tab表格中显示

单次计算功能介绍



Calculation

T (K)

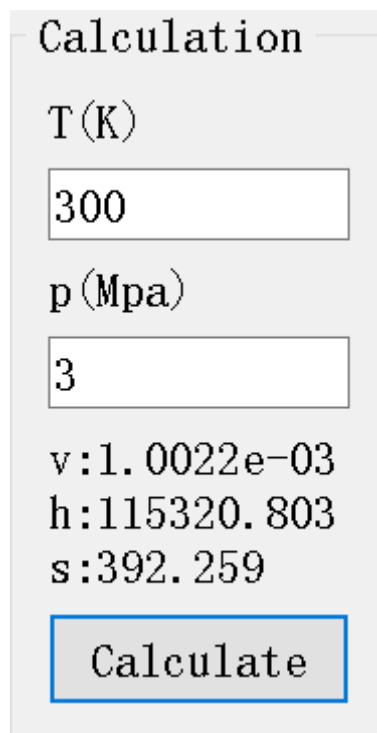
300

p (Mpa)

3

Calculate

如图输入T为300K，p为3Mpa，点击Calculate得到结果如下：



Calculation

T (K)

300

p (Mpa)

3

v:1.0022e-03
h:115320.803
s:392.259

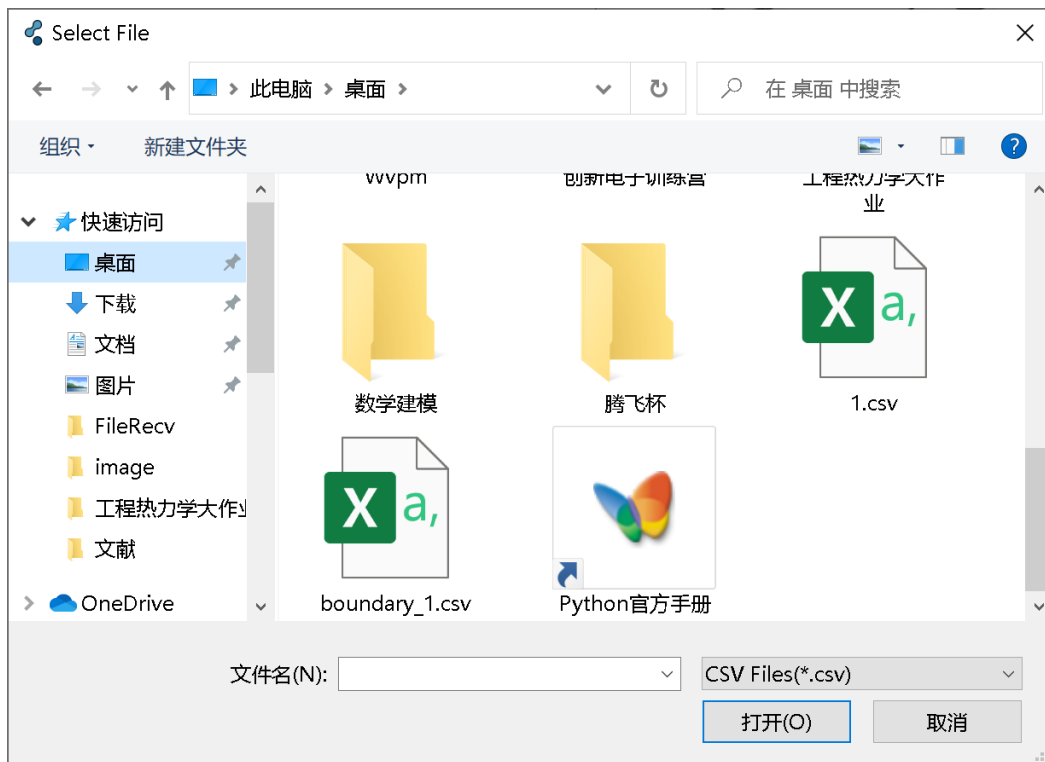
Calculate

(界面有些简陋不要介意)

如此我们计算出了300K温度和3Mpa压强下的比体积，比焓，比熵的数值

批量计算功能介绍

点击Select File按钮进入文件选择界面：



选择测试文件1.csv

	A	B	C
1	压强	温度	s
2	3	300	
3	80	300	
4	3	500	

输入文件说明：

撰写文件时第一列为压强，第二列为温度，第三列只需设置标题，可选h,s,v

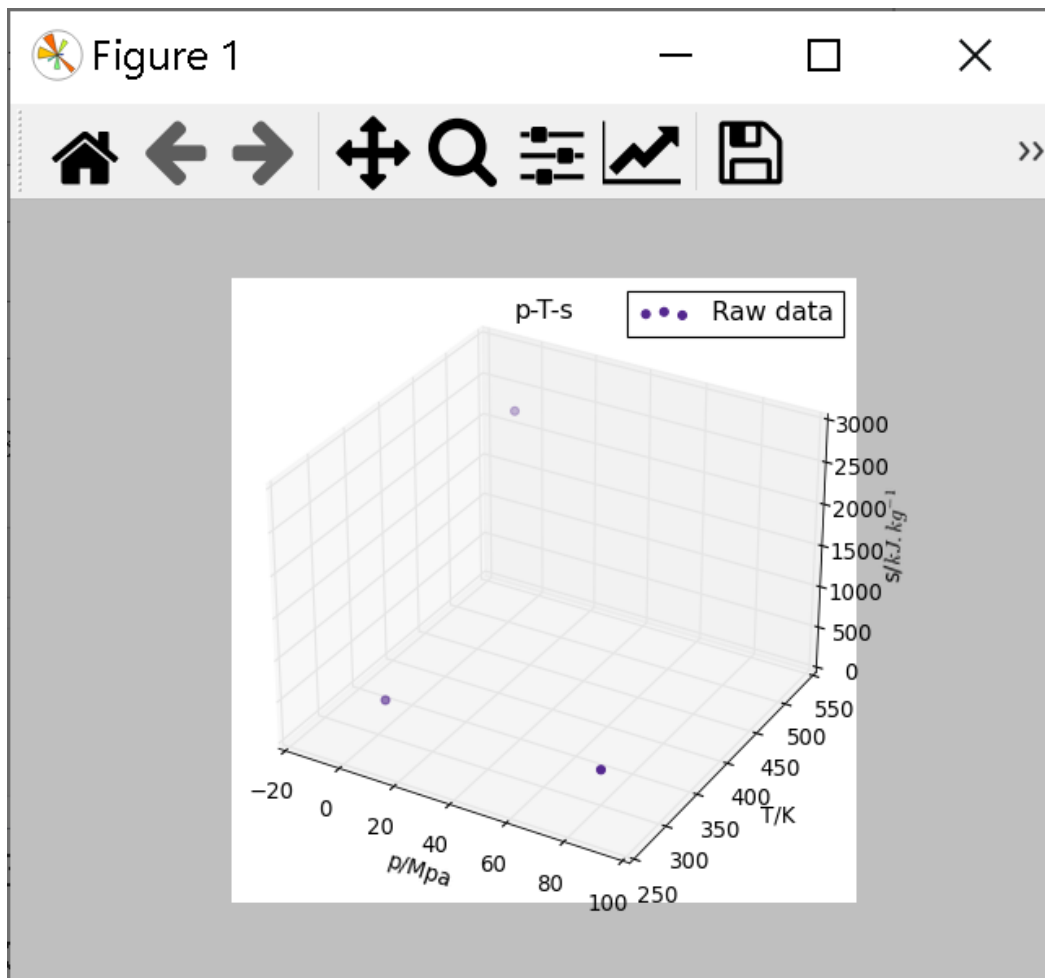
得到如下结果：

Data			
	压强	温度	s
1	3.00000e+00	3.00000e+02	3.92259e+02
2	8.00000e+01	3.00000e+02	3.68520e+02
3	3.00000e+00	5.00000e+02	2.58023e+02

可见软件已经自动将对应的熵值计算了出来

绘图功能介绍

接着上述操作，直接点击Plot按钮



得到如下包含三个散点的散点图

勾选Plot isobaric diagram,

Plot

☐ Plot isothermal maps

☒ Plot isobaric diagram

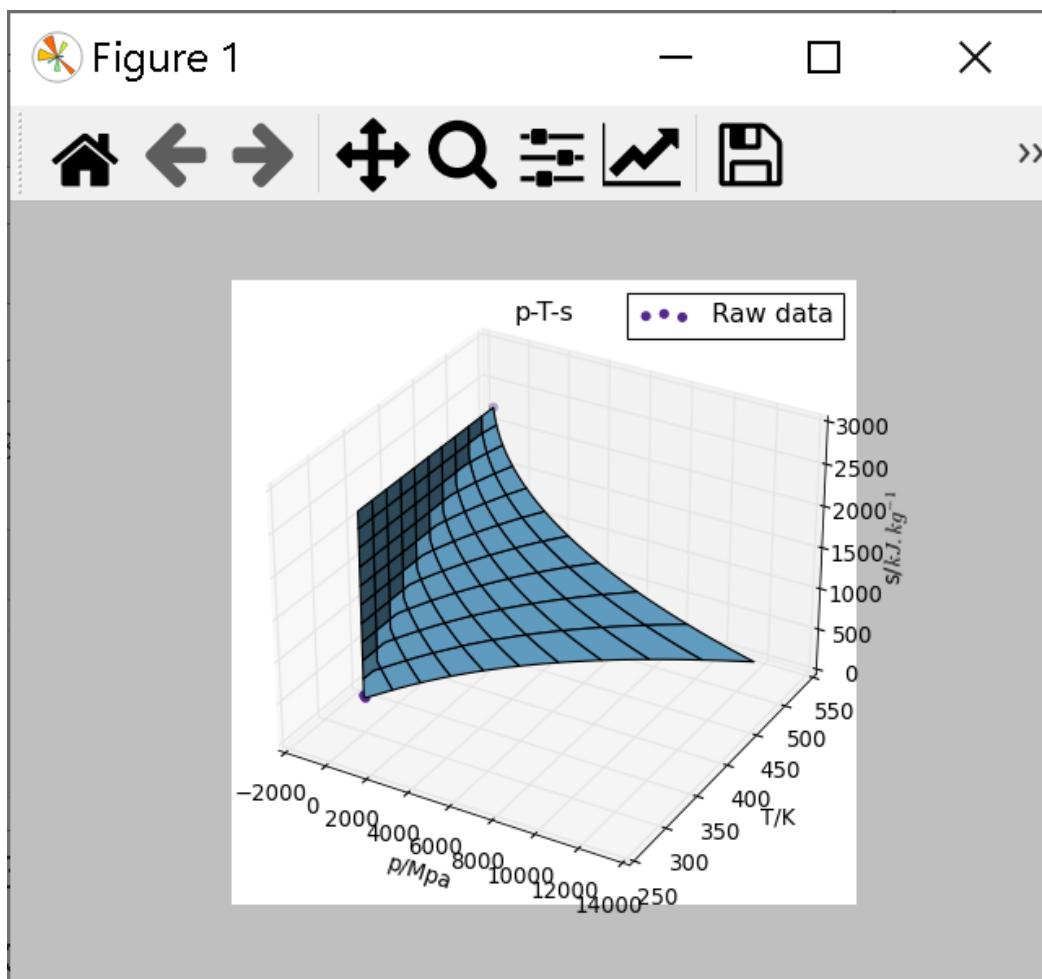
☐ Mapping water vapor properties

Drawing style

☒ classic ☐ dark_back ☐ seaborn

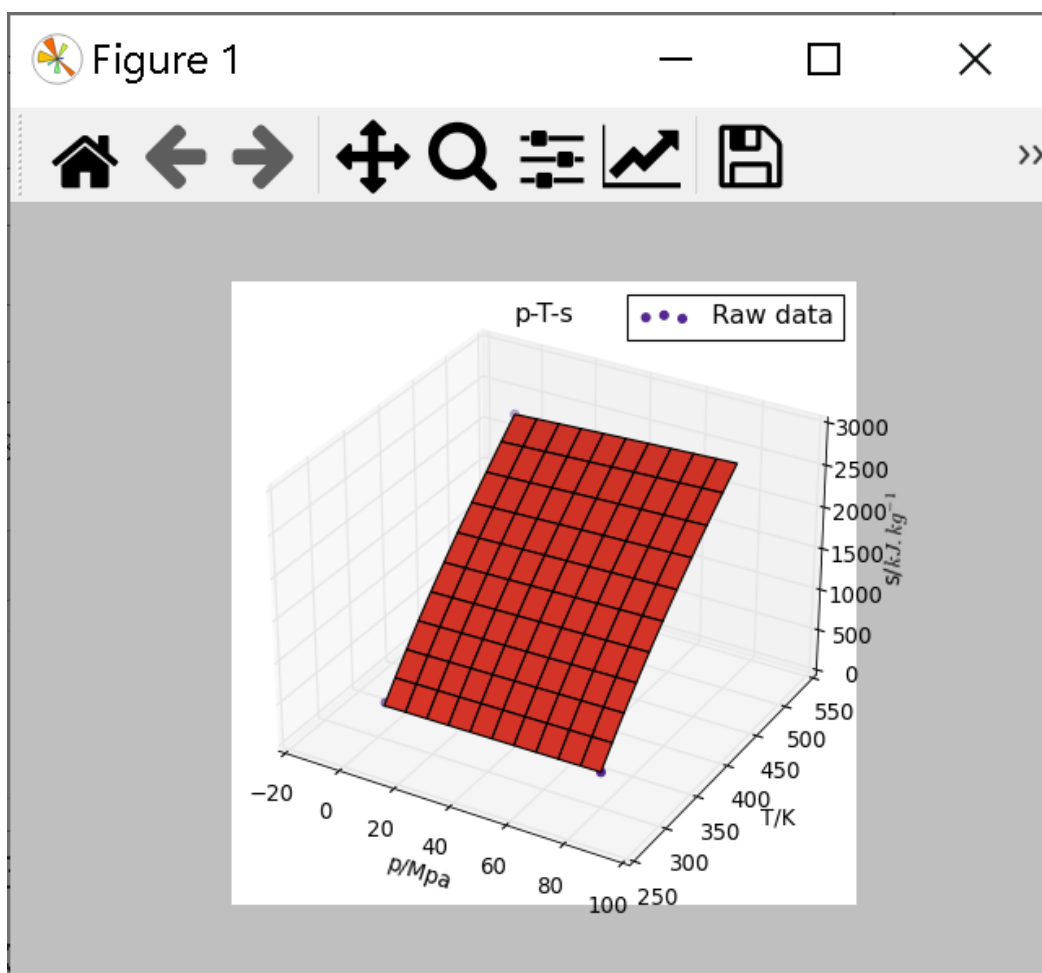
Plot

再次点击Plot按钮：



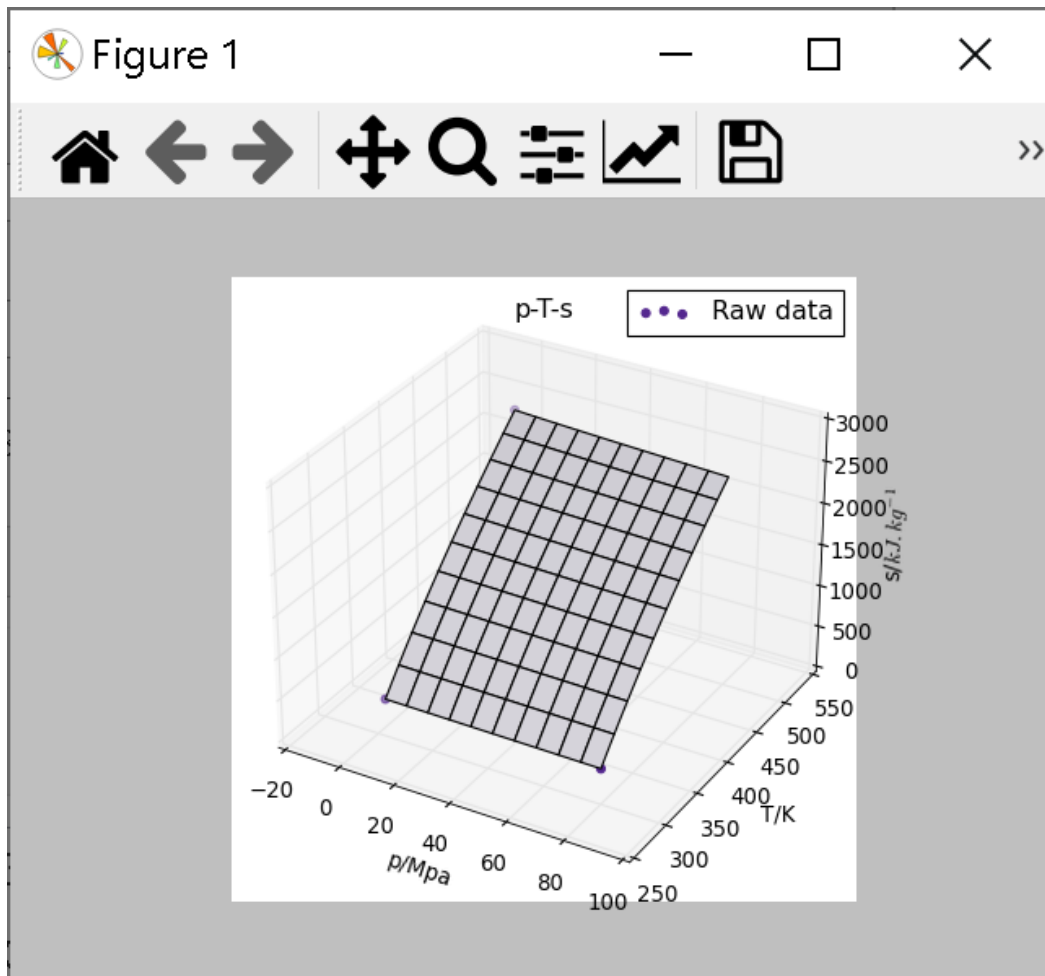
得到包含等压面的三维图像

同理勾选Plot isothermal maps, 点击Plot按钮:



得到包含等温面的三维图像

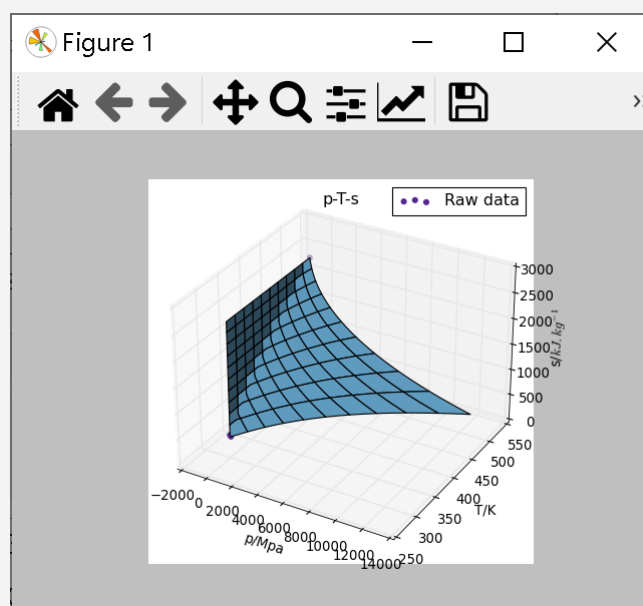
勾选Mapping water vapor properties, 点击Plot:



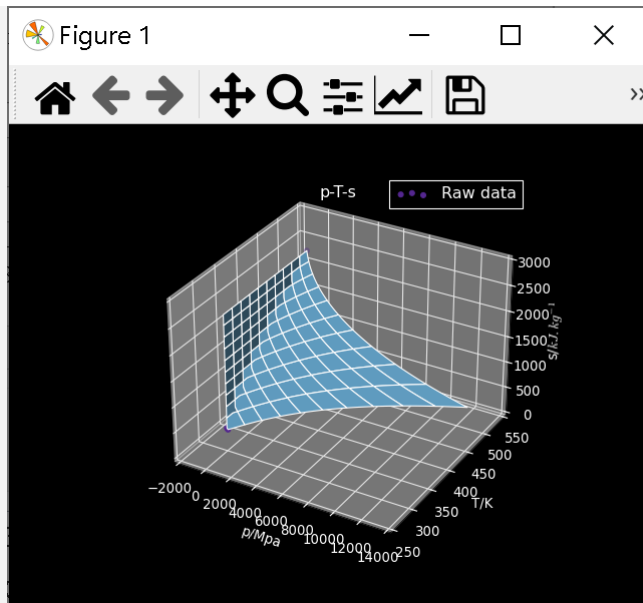
得到完整的热力学性质图，也就是说，**所有的散点都应落在该曲面上**

接下来，换不同的绘图风格做出包含等压面的图像如下：

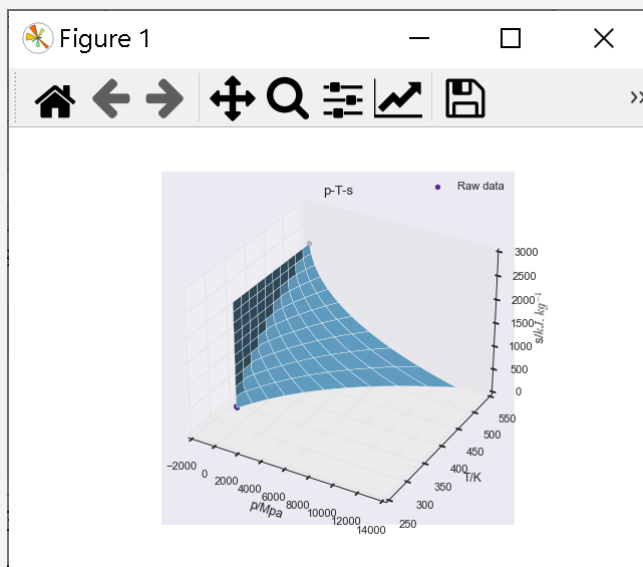
classic:



dark_background:



seaborn:



缺点及不足之处

1. 没有考虑区域边界的连续性
2. 模型系数精确度不高，产生一定的误差
3. 软件仍然存在许多bug

感谢您的观看！