



移动扫码阅读

万金雄,郑志秀,陈尼青,等.基于 IAPWS-IF97 的分区判断方法研究[J].能源环境保护,2020,34(6):55-60.

WAN Jinxiong, ZHENG Zhixiu, CHEN Niqing, et al. Research on subregion judgment based on IAPWS-IF97 [J]. Energy Environmental Protection, 2020, 34(6): 55-60.

基于 IAPWS-IF97 的分区判断方法研究

万金雄,郑志秀,陈尼青,阮徐均

(浙江千尧环境工程有限公司,浙江 杭州 311200)

摘要:基于 IAPWS-IF97 计算模型及其补充方程,提出了一种在 $p-T$ 热力学面上 4 区紧邻区域分区方法,通过 VBA 编制了相应的计算函数。结果表明:新函数具有较简单的结构形式及较高的准确性,保留了人工调整接口并提高了应用过程中的灵活性;新函数在临界点附近根据参数 δ 确定迭代算法范围,提高了临界点附近的计算精度并控制了计算量;在 Excel 中计算新函数可减少人工查询时间,提高应用优势。

关键词:水和水蒸气;IAPWS;Excel;VBA;热力性质

中图分类号:X383

文献标识码:A

文章编号:1006-8759(2020)06-0055-06

Research on subregion judgment based on IAPWS-IF97

WAN Jinxiong, ZHENG Zhixiu, CHEN Niqing, RUAN Xujun

(Zhejiang Qianyao Environmental Engineering Co., Ltd., Hangzhou 311200, China)

Abstract: Based on the IAPWS-IF97 and its supplementary equations, a method is proposed to partition 4 regions adjacent to each other on the $p-T$ thermodynamic surface. The corresponding calculation function is programmed by VBA. The results show that the new function has a simpler structure and higher accuracy. It retains the manual adjustment interface and improves the flexibility in the application process. The new function determines the range of iterative algorithm according to the parameter δ near the critical point, which improves the calculation accuracy near the critical point and controls the amount of calculation. Calculating new functions in Excel can reduce the time of manual query and improve the application advantages.

Key Words: Water and steam; IAPWS; Excel; VBA; Thermodynamic properties

0 引言

水和水蒸气由于具有优良的热力学性能以及来源广泛、价格低廉等优点而广泛的应用于能源、化工、环保等领域,其热力性质的精确快速计算在工程应用和科学研究中有极其重要的意义^[1]。国际水和水蒸气协会(IAPWS)发布的 IAPWS-IF97 模型及其补充方程详细介绍了水和水蒸气物性参数的计算及分区方法,但其对 4 区紧邻区域划分方法并未详细阐述,国内众多文献^[2-8]也未针对此问题作详细、统一讨论。目前国内多种基于 IAPWS-IF97 的水和水蒸气参数计算软件由于各

自采用自有分区方法,分区情况不尽相同,计算结果也存在一定差异。本文研究并提出了一种该区域分区方法,并基于研究结果编制了新的水和水蒸气参数计算函数(以下简称新函数)。

1 IAPWS-IF97 计算模型及其补充公式

IAPWS-IF97^[9] 及其补充方程 IAPWS-IF97-S01^[10]、IAPWS-IF97-S03rev^[11]、IAPWS-IF97-S04^[12]、IAPWS-IF97-S05^[13] 将整个 $p-T$ 热力学面划分为 5 个子区域^[1,14],详见图 1。其有效范围为:

$$T_0 \leq T \leq 1\ 073.15\ K \text{ 且 } p_0 \leq p \leq 100\ MPa, \\ T_0 = 273.15\ K, p_0 = 611.213\ Pa;$$

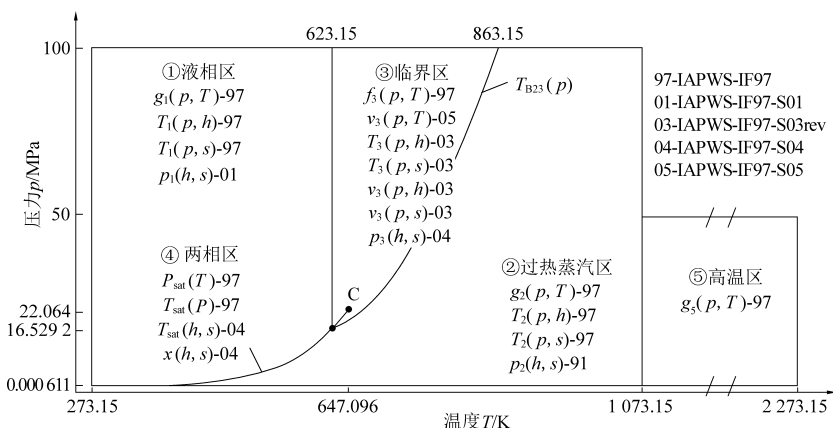


图1 IAPWS-IF97模型及其补充公式的分区及公式

注： $g(p, T)$ ：吉布斯自由能, Gibbs free energy, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ ； $f(\rho, T)$ ：亥姆霍兹自由能, Helmholtz free energy, $\text{kJ} \cdot \text{kg}^{-1}$

$$1\ 073.15\ \text{K} < T \leq 2\ 273.15\ \text{K} \text{ 且 } 0 \leq p \leq 50\ \text{MPa} \quad (1)$$

通过适当的组合,可以由式 $g(p, T)$ 、 $f(\rho, T)$ 及其衍生式,推导出 1、2、3 区及 5 区的所有热力学性质参数。

2 p - T 热力学面上区域划分

水和水蒸气的热力学性质参数不是完全相互独立的,可以通过任意两个相互独立的参数得出其它参数^[14]。在 p - T 热力学面上,1、2、5 区参数均可以由 $g(p, T)$ 表述,3 区参数由 $f(\rho, T)$ 及 $v(p, T)$ ^[13] 共同计算,4 区饱和和线则用 $p_{\text{sat}}(T)$ 、 $T_{\text{sat}}(p)$ 定义^[9]。基于 p 、 T 的区域划分方法如表 1。

表 1 p - T 热力学面上区域划分

有效范围	区域
$p_0 \leq p \leq 50\ \text{MPa}$ 且 $1\ 073.15\ \text{K} \leq T \leq 2\ 273.15\ \text{K}$	5 区
$p_0 \leq p \leq p_c$ 且 $T_0 \leq T \leq T_c$ ($p_c = 22.064\ \text{MPa}$, $T_c = 647.096\ \text{K}$ ^[15])	4 区
$p_0 \leq p \leq p_s$ $T_0 \leq T < T_{\text{sat}}(p)$	1 区
($p_s = 16.529\ 2\ \text{MPa}$, $T_s = 623.15\ \text{K}$) $T_{\text{sat}}(p) < T \leq 1\ 073.15\ \text{K}$	2 区
$T_0 \leq T \leq 623.15\ \text{K}$	1 区
$p_s < p \leq 100\ \text{MPa}$ $623.15\ \text{K} < T \leq T_{B23}(p)$	3 区
$T_{B23}(p) < T \leq 1\ 073.15\ \text{K}$	2 区

2.1 4 区的判断及允差分析

4 区的计算有效范围如下,与文献[9]略有区别。

$$T_0 \leq T \leq T_c \text{ 且 } p_0 \leq p \leq p_c \quad (2)$$

在 p - T 热力学面上,4 区仅为一条饱和曲线,当水和水蒸气状态处于饱和线两侧紧邻区域时,物性参数变化极大。

由于工程测量仪表精度有限,极易因读数误差导致区域判断错误,最终得到错误的计算结果。为使实际应用与理论计算相结合,本文在 4 区设置允差区间。基于允差区间的 4 区定义为:

$$T_0 \leq T \leq T_c \text{ 且 } p_0 \leq p \leq p_c \text{ 且 } (|T - T_{\text{sat}}(p)| \leq 10^\circ(-e) \text{ 或 } |p - p_{\text{sat}}(T)| \leq 10^\circ(-e)) \quad (3)$$

其中, $|T - T_{\text{sat}}(p)| \leq 10^\circ(-e)$ 或 $|p - p_{\text{sat}}(T)| \leq 10^\circ(-e)$ 即为允差区间,区间大小由 e 值调整。根据常用工程测量仪表的精度等级,默认 $e = 1$ 。

2.2 允差区间内的判断

由于允差区间的存在,4 区由一条曲线变成一块窄长带形区域,与 4 区紧邻的 1 区、2 区及 3 区被允差区间部分覆盖。在该允差范围内计算时,新函数采用可选标记参数 $xTag$: $xTag = 0$ 时,按左侧区域公式计算(亦即按蒸汽干度 $x = 0$ 计算); $xTag = 1$ 时,按右侧区域公式计算(即按蒸汽干度 $x = 1$ 计算),详见图 2(以 $3y/3z$ 区为例,其他同);在该允差范围以外计算时,按照表 1 进行分区判断。

表 2 中列出了 4 区允差范围与各区重叠部分的划分方法,其他区域划分详见文献[13]。

表 2 p - T 热力学面上 4 区附近的区域划分

压力范围	温度范围	$xTag = 0$ /分界线/ $xTag = 1$
$p_0 \leq p \leq p_s$	$ T - T_{\text{sat}}(p) \leq 10^\circ(-e)$	1 区/ $T_{\text{sat}}(p)$ /2 区
$20.5\ \text{MPa} < p \leq P_{\text{sat}643}$	$T_{3cd}(p) < t \leq T_{3jk}(p)$	$3s/T_{\text{sat}}(p)/3r$
$p_{3cd} < p \leq 20.5\ \text{MPa}$	$T_{3cd}(p) < t$	$3s/T_{\text{sat}}(p)/3t$
$p_s < p \leq p_{3cd}$	/	$3c/T_{\text{sat}}(p)/3t$
$p_{\text{sat}264} < p \leq p_c$	$T_{3wv}(p) < t \leq T_{3wx}(p)$	$3y/T_{\text{sat}}(p)/3z$

续表

压力范围	温度范围	$x_{\text{Tag}}=0$ /分界线/ $x_{\text{Tag}}=1$
$psat385 < p \leq psat264$	$T3qu(p) < t \leq T3wx(p)$	$3u/T_{\text{sat}}(p)/3z$
$psat643 < p \leq psat385$	$T3qu(p) < t \leq T3rx(p)$	$3u/T_{\text{sat}}(p)/3x$

其中:

$$psat643 = 21.04\ 336\ 732\ \text{MPa}$$

$$p3cd = 19.00\ 881\ 189\ 173\ 929\ \text{MPa}$$

$$psat264 = 21.93\ 161\ 551\ \text{MPa}$$

$$psat385 = 21.90\ 096\ 265\ \text{MPa}$$

$T3ab(p)$: 3a、3b 子区的分界线, 其他同, 详见文献[13]。

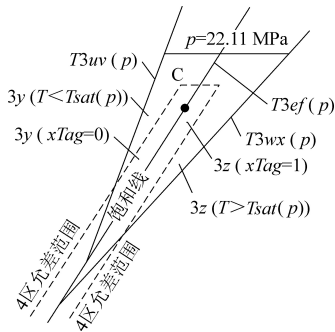


图2 饱和线附近区域判断 (3y/3z)

2.3 临界点附近迭代区间

在临界点附近区域, 物性参数变化极为剧烈, 即使如文献[13]采用了细分区域的方法, 仍不能完全满足精度要求。如临界点 $c(p_c, T_c)$, 位于子区 3y、3z 的分界线上, 分别按照 3y、3z 两区公式计算结果见表 3, 与 IAPWS 定义值偏差达到了 $-1.60\% \sim 1.82\%$ 。

表3 临界点计算偏差

计算方法	$\rho / (\text{kg} \cdot \text{m}^{-3})$	偏差
3y 区公式	327.860 3	1.82%
3z 区公式	316.842 2	-1.60%
牛顿迭代法	322.090 7	0.03%
IAPWS 定义: $\rho_c^{[15]}$	322	/

因此在临界点 c 附近, 应采用 $f(\rho, T)$ 公式进行迭代计算。新函数采用牛顿迭代法^[4,16]作为迭代算法。结果表明, 随着给定的 (p, T) 值与临界点 c 的距离 δ 减小, 根据 IAPWS-IF97-S05 的计算结果与迭代法计算结果偏差 Δ 也在增大, 如图 3 所示, 当 $\delta < 0.1$ 时, $\Delta_{\text{max}} > 0.911\%$ 。新函数选取 $\delta = 0.1$ 为分界, 当 $\delta < 0.1$ 时, 均采用迭代法进行求解计算。 δ 定义为:

$$\delta = \sqrt{\left(\frac{p - p_c}{1\ \text{MPa}}\right)^2 + \left(\frac{T - T_c}{1\ \text{K}}\right)^2} \quad (4)$$

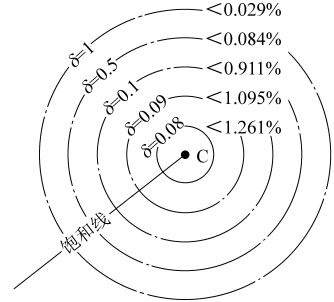


图3 临界点附近偏差示意图

3 函数、计算结果及分析

根据 IAPWS-IF97 模型及以上分析结果, 新编制的主要公用功能函数见表 4。

在各区一些典型点, 新函数与 IAPWS-IF97 模型及部分常用的计算软件计算结果对比见表 5。

表4 主要公用功能函数

函数	功能	参数
$h_pT([p][, T][, xTag][, eTag=1])$ $s_pT([p][, T][, xTag][, eTag=1])$ $u_pT([p][, T][, xTag][, eTag=1])$ $cp_pT([p][, T][, xTag][, eTag=1])$ $cv_pT([p][, T][, xTag][, eTag=1])$ $w_pT([p][, T][, xTag][, eTag=1])$	4 区: 饱和水或饱和水蒸气热力性质	p/T : 可缺省一个, 不缺省时需对应 $xTag$: 0-饱和水; 1-饱和蒸汽, 不可缺省 $eTag$: 允差范围, 默认 $eTag=1$
$T_ph(p, h[, eTag=1])$ $T_ps(p, s[, eTag=1])$ $p_hs(h, s[, eTag=1])$	1/2/3/5 区: 水或水蒸气热力性质	p/T : 缺一不可 $xTag$: 必缺省 $eTag$: 同上
$T_ph(p, h[, eTag=1])$	p/h 计算温度	p/h : 不可缺; $eTag$: 同上
$T_ps(p, s[, eTag=1])$	p/s 计算温度	p/s : 不可缺; $eTag$: 同上
$p_hs(h, s[, eTag=1])$	h/s 计算压力	h/s : 不可缺; $eTag$: 同上

表5 计算结果对比

区域	已知参数	IAPWS-IF97 ¹	新函数	计算软件1	计算软件2	计算软件3	
	区域判断	手动选择	自动判断	自动判断	自动判断	手动选择	
验证函数: $h_{pt}(p,t)/(kJ \cdot kg^{-1})$							
一 区	$p=3.0$ MPa $t=26.85$ °C	1.1533E+02	1.1533E+02	1.1533E+02	1.1533E+02	1.1533E+02	
	$p=80.0$ MPa $t=26.85$ °C	1.8414E+02	1.8414E+02	1.8414E+02	1.8414E+02	1.8414E+02	
二 区	$p=1.0$ MPa $t=276.85$ °C	3.0019E+03	3.0019E+03	3.0019E+03	3.0019E+03	3.0019E+03	
	$p=1.5$ MPa $t=276.85$ °C	1.9862E+03	2.9862E+03	2.9862E+03	2.9862E+03	2.9862E+03	
验证函数: $h_{rt}(p,t)/(kJ \cdot kg^{-1})$							
三 区	$\rho=500$ kg/m ³ $t=376.85$ °C	1.8634E+03	1.8634E+03	1.8634E+03	1.8634E+03	无法计算 ²	
	$\rho=200$ kg/m ³ $t=376.85$ °C	2.3751E+03	2.3751E+03	2.3751E+03	2.3751E+03	无法计算 ²	
验证函数: $psat(t)/MPa$							
四 区	$t=26.85$ °C	3.5366E-03	3.5366E-03	3.5366E-03	3.5366E-03	3.5370E-03	
	$t=326.85$ °C	1.2344E+01	1.2344E+01	1.2344E+01	1.2344E+01	1.2344E+01	
验证函数: $v_{pt}(p,t)/m^3 \cdot kg^{-1}$							
四 区 紧 邻 区 域	$p=5.0$ MPa $t=263.9$ °C	1.2863E-03 ³ 3.9438E-02	1.2863E-03 3.9438E-02	1.2863E-03 3.9438E-02	1.2863E-03 3.9438E-02	1.2860E-03	
	$p=10.0$ MPa $t=311.0$ °C	1.4526E-03 1.8034E-02	1.4526E-03 1.8034E-02	1.4526E-03 1.8034E-02	1.4526E-03 1.8034E-02	1.8034E-02	
	$p=15.0$ MPa $t=342.15$ °C	1.6569E-03 1.0339E-02	1.6569E-03 1.0339E-02	1.6570E-03 1.0340E-02	1.6569E-03 1.0340E-02	1.6570E-03	
	$p=18.0$ MPa $t=356.9$ °C	1.8370E-03	1.8370E-03	1.8370E-03	1.8370E-03	3.7960E-03	
	$p=20.0$ MPa $t=365.7$ °C	2.0355E-03	2.0355E-03 5.8396E-03	2.0355E-03	2.0355E-03	3.4400E-03	
	$p=21.5$ MPa $t=371.8$ °C	2.2074E-03 4.9680E-03	2.2074E-03 4.9680E-03	2.2119E-03 4.9877E-03	2.2103E-03	3.3070E-03	
	$p=22.0$ MPa $t=373.7$ °C	2.6871E-03	2.6871E-03 3.4196E-03	2.7504E-03 3.5766E-03	2.7466E-03	3.2730E-03	
	$p=22.063$ MPa $t=373.940$ °C	2.9607E-03	2.9153E-03	无法计算 ⁴	3.0370E-03	2.9150E-03	
	临界点 附近	$p=22.062$ MPa $t=373.940$ °C	3.2460E-03	3.3028E-03	无法计算 ⁴	3.0370E-03	3.3030E-03
		$p=22.064$ MPa $t=373.946$ °C	3.0501E-03	3.1047E-03	无法计算 ⁴	3.1056E-03	3.1050E-03

注1: IAPWS-IF97部分计算结果为通过 <http://www.iapws.org> 网站上 Main Thermodynamic Formulations 模块手动选择分区、手动输入参数进行计算;

注2: 软件3无相应函数;

注3: 由于各软件分区或处理方式的不同,部分软件包含饱和和线两侧的计算结果,新函数通过 $xTag$ 标记调整计算结果,第一行为 $xTag=0$ 结果,第二行为 $xTag=1$ 结果,其他与此对应;

注4: 计算时出现“Invalid floating point operation”错误提示。

由表 5 可以看出:

(1) 在 1/2/3/4 区间内, 由于分区明确, 除部分软件缺乏相应函数无法计算外, 各软件计算结果类似, 均具有较高精度。

(2) 在 4 区紧邻区域, 由于分区判断方式的不同, 计算结果也有较大差别:

a. IAPWS-IF97 模型由于严格按照模型中公式计算, 计算精度过高, 导致部分计算结果难以与工程实际结合。比如 $t_{\text{sat}}(20 \text{ MPa}) = 3.657\ 459\ 115E + 02 \text{ } ^\circ\text{C}$ 时, 在工程中, 很难根据测量温度 $t = 365.7 \text{ } ^\circ\text{C}$ 确定物性所处状态。同时, 由于拟合模型误差, 部分点同时被确定处于 2 个区域, 出现 2 个计算结果;

b. 新函数可以自动判断区域, 针对 4 区附近允差区间会提示采用 $xTag$ 标记, 通过实际需要调整 $xTag$ 值, 可以得出需要的计算结果。由于各子区函数均采用 IAPWS-IF97 模型的形式, 因此在分区判断无误时, 新函数计算结果与 IAPWS-IF97 完全一致;

c. 软件 1 可以自动判断区域, 针对饱和线附近无法准确确定区域的情况, 其同时给出 2 个区域的计算结果。此外, 软件 1 虽然与 IAPWS-IF97 计算结果存在一定差别, 但仍具有较高计算精度;

d. 软件 2 可以自动判断区域, 也具有较高计算精度, 但在饱和线附近区域, 处理方式略显简单, 可能会导致结果失真;

e. 软件 3 需要手动选择计算区域及函数, 且其

符号说明:

T —绝对温度, K	p —压力, MPa	ρ —密度, kg/m^3	R —比气体常数, $\text{kJ}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
h —比焓, kJ/kg	s —比熵, $\text{kJ}/(\text{kg} \cdot \text{K})$	u —比内能, kJ/kg	c_p —比等压热容, $\text{kJ}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
w —音速, m/s	ν —比体积, m^3/kg	x —蒸汽干度	c_v —比等容热容, $\text{kJ}/(\text{kg} \cdot \text{K})$

下标说明:

c —临界点	t —三相点	0 —零点	sat—饱和状态
max—最大值	min—最小值	1/2/3/5—分区	s —B13/B23 与饱和线交点

上标说明:

'—饱和水状态 “—饱和蒸汽状态

在 3 区饱和线周围时, 计算结果出现较大误差。

(3) 在临界点附近区域, 除软件 1 出现错误无法计算外, 新函数计算结果与软件 3 非常接近, 与软件 2 也在部分点接近, 但均与 IAPWS-IF97 计算结果不符。由于本文在此区域采用了迭代算法, 而 IAPWS-IF97 模型则使用拟合公式, 根据文献[17]计算验证, 本文计算结果具有更高的计算精度。

同时, 由于多数常用水和水蒸气物性计算软件均为查询软件, 需人工手动输入参数, 而新函数在 Excel 表中可以像内部函数一样自由调用, 在自动计算方面具有较大优势。

4 结论

在 IAPWS-IF97 基本模型及其补充方程的基础上, 提供了一种 4 区允差范围的分区判断方法, 并据此用 VBA 编制了相应计算函数, 结果表明:

(1) 新函数针对 4 区紧邻区域允差范围的分区判断方法, 具有较简单的结构形式及较高的准确性, 同时保留了人工调整接口, 提高了应用过程中的灵活性;

(2) 新函数在临界点附近根据参数 δ 确定采用迭代算法范围, 在提高了临界点附近计算精度同时, 使计算量不会提高过多;

(3) 新函数在 Excel 中计算时, 减少了人工查询时间, 应用中具有较大优势。

参考文献

[1] 王晶. p-T 和 p-s 热力学面上水和水蒸气热力性质的快速计算 [D]. 北京: 华北电力大学, 2014: 1-5.
[2] 张倩, 陈锐. 水和水蒸气性质公式与 Excel 联合应用 [J]. 化学工程与装备, 2015 (2): 41-43+47.

[3] 汪国山, 朱晓星, 谭锐, 等. 水和水蒸气热力性质国际工业标准 IAPWS-IF97 和计算程序编制 [J]. 汽轮机技术, 2005, 47 (3): 161-164+167.
[4] 周艳明, 李继庚, 刘焕彬, 等. 水和水蒸气热力性质 IAPWS-IF97 计算模型分析及算法设计 [J]. 热能动力工程, 2010, 25 (2): 166-171.
[5] 李少华, 宋东辉, 姚亮, 等. 基于 IAPWS-IF97 及补充方

- 程的水和水蒸气焓值计算程序的编制 [J]. 动力工程学报, 2011, 31 (11): 851-854+868.
- [6] 尹锐佳. 基于 IAPWS-IF97 的水和水蒸气热力性质计算在智能手机中的应用 [J]. 企业技术开发, 2013, 32 (13): 84-86.
- [7] 徐建良. 基于 Excel VBA 的水与水蒸气热力学性质自定义函数的开发 [J]. 电脑与信息技术, 2010, 18 (2): 53-56.
- [8] 赵金峰, 吴立峰, 张荣欣, 等. IAPWS-IF97 水和水蒸汽热力性质计算程序的研制 [J]. 东北电力大学学报, 2008, 28 (1): 32-35.
- [9] IAPWS. Revised release on the IAPWS industrial formulation 1997 for the thermodynamic properties of water and steam (The revision only relates to the extension of region 5 to 50 MPa) [R]. Charlotte NC: The International Association for the Properties of Water and Steam, 2007.
- [10] IAPWS. Revised supplementary release on backward equations for pressure as a function of enthalpy and entropy $p(h, s)$ for regions 1 and 2 of the IAPWS industrial formulation 1997 for the thermodynamic properties of water and steam [R]. Charlotte NC: The International Association for the Properties of Water and Steam, 2014.
- [11] IAPWS. Revised supplementary release on backward equations for the functions $T(p, h)$, $v(p, h)$ and $T(p, s)$, $v(p, s)$ for region 3 of the IAPWS industrial formulation 1997 for the thermodynamic properties of water and steam [R]. Charlotte NC: The International Association for the Properties of Water and Steam, 2014.
- [12] IAPWS. Revised supplementary release on backward equations $p(h, s)$ for region 3, equations as a function of h and s for the region boundaries, and an equation $T_{sat}(h, s)$ for region 4 of the IAPWS industrial formulation 1997 for the thermodynamic properties of water and steam [R]. Charlotte NC: The International Association for the Properties of Water and Steam, 2014.
- [13] IAPWS. Revised supplementary release on backward equations for specific volume as a function of pressure and temperature $v(p, T)$ for region 3 of the IAPWS industrial formulation 1997 for the thermodynamic properties of water and steam [R]. Charlotte NC: The International Association for the Properties of Water and Steam, 2014.
- [14] 祁海涛, 胡念苏, 陈波. 水和水蒸汽热力性质 IAPWS-IF97 公式及通用计算模型 [J]. 热力透平, 2003, 32 (4): 240-244+239.
- [15] IAPWS. IAPWS release on the values of temperature, pressure and density of ordinary and heavy water substances at their respective critical points [R]. Charlotte NC: The International Association for the Properties of Water and Steam, 1992.
- [16] 吴燕玲, 钟崑, 童水光, 等. IAPWS-IF97 水和水蒸气性质计算方法的补充模型及应用 [J]. 热力发电, 2008, 37 (3): 30-34.
- [17] IAPWS. Revised release on the IAPWS Formulation 1995 for the thermodynamic properties of ordinary water substance for general and scientific use [R]. Charlotte NC: The International Association for the Properties of Water and Steam, 2018.