

高等学校“十三五”规划教材

第二版

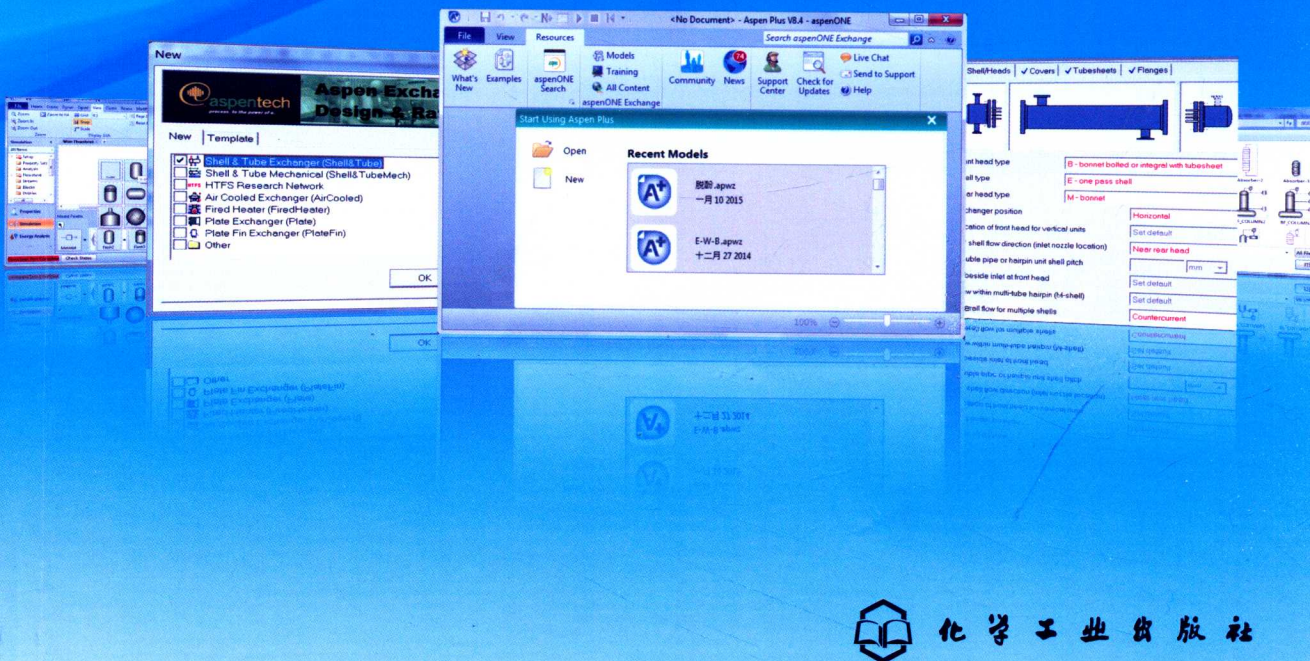
Second Edition

# 化工流程模拟

# Aspen Plus

## 实例教程

● 熊杰明 李江保 主编  
● 彭晓希 杨索和 副主编



化学工业出版社

高等学校“十三五”规划教材

# 化工流程模拟 Aspen Plus 实例教程

(第二版)

熊杰明 李江保 主编  
彭晓希 杨索和 副主编



化学工业出版社

·北京·

《化工流程模拟 Aspen Plus 实例教程》(第二版)基于 Aspen Plus 新界面,通过典型问题的求解方法、步骤和技巧的展示,由浅入深地介绍了化工过程模拟软件 Aspen Plus 及其与 EDR、Energy Analyzer、Economic Evaluation、Batch Modeler、Dynamics、Polymers、Excel 等专业软件的连接和联合使用,解决化工过程中的模拟、设计与优化问题。内容包括:Aspen Plus 简介、入门(闪蒸)、精馏与吸收、物性、过程分析与优化、间歇过程、换热器、反应器、复杂精馏、动态过程、联立方程法、换热网络、经济分析、煤化工过程、聚合过程、与 Excel 的连接等,第二版增加了不少扩展内容,如换热网络夹点和经济分析等,对从事化工过程的研究、开发、设计、技术改造或过程优化等工作,有参考价值。

《化工流程模拟 Aspen Plus 实例教程》(第二版)可作为高等学校化工与制药、材料、环境、生物等专业本科生及研究生教材,也可供石油、化工、轻工等行业工程技术人员参考,尤其适合有一定 Aspen Plus 使用经验的初学者自学以提高应用水平。

## 图书在版编目(CIP)数据

化工流程模拟 Aspen Plus 实例教程 / 熊杰明, 李江保主编. —2 版. —北京: 化学工业出版社, 2015.12

ISBN 978-7-122-25436-8

I. ①化… II. ①熊… ②李… III. ①化工过程-流程模拟-应用软件-教材 IV. ①TQ02-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2015)第 250124 号

---

责任编辑: 杜进祥

文字编辑: 孙凤英

责任校对: 王素芹

装帧设计: 韩 飞

---

出版发行: 化学工业出版社(北京市东城区青年湖南街 13 号 邮政编码 100011)

印 刷: 北京永鑫印刷有限责任公司

装 订: 三河市宇新装订厂

787mm×1092mm 1/16 印张 20 字数 534 千字 2016 年 1 月北京第 2 版第 1 次印刷

---

购书咨询: 010-64518888 (传真: 010-64519686)

售后服务: 010-64518899

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书, 如有缺损质量问题, 本社销售中心负责调换。

---

定 价: 45.00 元

版权所有 违者必究

化工流程模拟软件在我国经过近 30 多年的引进和推广, 由最初的设计院使用, 到现在已经普及到设计、工程、生产、科研等各类单位, 从高校学生, 到工程技术人员、企业领导, 都在不同程度使用流程模拟软件。流程模拟软件的使用, 解决了许多实际问题, 节省了大量的实验时间, 使人们对工艺过程的因果关系了解得非常深入。流程模拟软件成为化工行业不可缺少的工具。和其他流程模拟软件相比, Aspen Plus 的物性数据多, 物性方法多, 能算固体和聚合物, 各模块的功能非常完善, 和 Aspen 公司的许多其他软件可以在内部集成, 或通过内部数据传递来实现集成。

《Aspen Plus 实例教程》发行 3 年以来, 受到许多读者的青睐, 不少读者还提出了非常宝贵的意见, 在此特别感谢各位读者的关心。第一版内容涵盖了闪蒸(入门)、精馏与吸收、物性、过程分析与优化、换热器、反应器等典型内容。考虑到 Aspen Plus 从 V7.3.2 版开始, 界面有了很大变化, 许多老用户不太适应; 再加上大量新的模拟课题、新的模拟需求, 在现有的各种培训材料中难以找到。为此, 第二版以 V8.4 版为平台编写, 书名变更为《化工流程模拟 Aspen Plus 实例教程》。与第一版相比, 第二版增加了大约 1 倍的内容, 案例难度、实用性等有明显增加。第二版教材的编写注重两方面: 对使用频率较高的典型模块, 如精馏(普通精馏、复杂精馏等)、反应器、换热器等, 进行了较为详细、深入的解析; 对一些专业性问题, 如换热网络、经济分析、煤化工过程、间歇化工过程、联立方程法、动态过程、聚合过程、与 Excel 连接等, 则侧重于软件的基本功能、实用性和技巧的介绍。相信这些内容对广大使用 Aspen Plus 的用户、爱好者会很有帮助。

本书由熊杰明、李江保任主编, 彭晓希、杨索和任副主编。曹前明、宋云艳、岳辉、秦飞飞参加编写。其中第 1、8 章由熊杰明、李江保共同编写, 第 2、4、5、7 章由熊杰明编写, 第 3、9 章由彭晓希、熊杰明、李江保共同编写, 第 6 章由杨索和编写, 第 10~16 章由李江保编写。另外, 曹前明完成 1~8 章的验证, 彭晓希完成了第 9~16 章的验证, 宋云艳、岳辉、秦飞飞参加了整理工作, 全书由熊杰明负责审理。

由于编者水平有限, 加上时间非常仓促, 不足、疏漏之处在所难免, 希望读者批评指正。如果有读者在阅读本书的过程中发现问题, 特别希望读者能把问题反映到邮箱 [xjm@bipt.edu.cn](mailto:xjm@bipt.edu.cn), 以便于后续修订。

另外, 编者对不少化工过程进行过全过程的模拟, 如炼油过程的常减压、催化、重整、焦化、加氢、气体分离等, 化工过程的乙烯裂解、聚丙烯、聚乙烯、氯乙烯过程等, 煤化工过程的煤气化、变换、低温甲醇洗、甲醇合成和精馏、MTO、合成氨和尿素、空气分离等, 经验丰富, 读者如有需要, 或者有新的较复杂的工艺模拟需求, 也可以回复 [lijiangbao@126.com](mailto:lijiangbao@126.com) 或 [xjm@bipt.edu.cn](mailto:xjm@bipt.edu.cn), 相互探讨。

编者  
2015年9月

## 第一版前言

化工领域的研究开发、设计、技术改造、过程优化等，所涉及的知识面非常广，面对任何一个实际问题，其模拟或设计计算往往非常复杂，工程技术人员单凭自己的力量难以完成。为此，有实力的研究单位、设计院、高校等，会引进一些先进的化工模拟软件，将烦琐的计算过程留给计算机和软件解决，而工程技术人员则集中精力做好决策工作，这样就可以成倍提高工作效率，大大缩短新产品研发、工程设计或技术改造的周期。

在众多化工过程模拟软件中，目前功能最完善、应用最普遍的软件之一，就是 Aspen Plus。Aspen Plus 是美国麻省理工学院（MIT）开发的第三代流程模拟软件。该软件经过 20 多年来不断地改进、扩充和提高，成为举世公认的标准大型流程模拟软件，应用案例数以百万计，全球各大化工、石化、炼油等过程工业制造企业及著名的工程公司都是 Aspen Plus 的用户。Aspen Plus 目前已先后推出了十多个版本，最新版本为 V7.3。

本书详细介绍了 Aspen Plus 软件中使用频率最高的闪蒸过程模拟、灵敏度分析、精馏过程模拟、设计规定应用、过程优化、物性方法选择及物性估算、吸收/汽提过程及精馏模块的收敛算法、换热器模拟与设计、反应器模拟等主要模块。

本书的服务对象主要包括三类，一类是没有工程实践经验，也没有化工模拟软件的使用经验的高校本科生和研究生，需要进行系统的学习，特别是学习 Aspen Plus 实际应用；另一类是有很高的学术水平或丰富实践经验的工程技术人员，也知道模拟软件能帮助自己解决很多实际问题，却苦于不会使用这些软件或相关模块，或者没有时间和精力去参加这些培训，或者因遇到一个新问题需要用一個自己不熟悉的模块或算法来解决而着急，希望能马上解决实际问题；还有一类是原来会使用 PRO/II、HYSYS、ChemCAD 或其他软件的用户，因某种原因需要用到 Aspen Plus。为此，全书通过典型案例的详细求解过程，展示 Aspen Plus 的主要功能和应用，过程简单明了，读者很容易领会。另外，在内容安排上，一方面尽量做到由浅入深，便于读者系统地学习和掌握；另一方面，也尽量照顾各章节的独立性和完整性，便于有一定经验的读者跳过一些已经掌握的模块或章节，集中精力学习不熟悉的模块，以节约时间。

读者可以借助本书作为入门性或提高用的参考教材。众所周知，Aspen Plus 功能非常强大、应用领域非常广泛，本书不可能面面俱到。读者在实际应用过程中必然会遇到新的或更专业的问题。为了解决这些问题，建议读者一方面要充分利用 Aspen Plus 系统中的帮助信息或案例，另一方面参考相关领域的专业图书，或者参加相关领域的讲座。

全书由熊杰明负责第 2~9 章的编写，杨索和负责第 1 章、第 10 章的编写工作。葛明兰、迟姚玲、孙锦昌、何广湘、易玉峰等老师，以及彭晓希、李梦晨等研究生为本书的编辑出版付出了努力，在此深表感谢！由于编者水平有限，不足之处在所难免，希望读者批评指正。

编者  
2012年9月

## 第 1 章 Aspen Plus 简介 1

|       |                    |   |
|-------|--------------------|---|
| 1.1   | Aspen Plus 简介      | 1 |
| 1.1.1 | Aspen Plus 的主要功能   | 1 |
| 1.1.2 | Aspen Plus 主要特点    | 1 |
| 1.1.3 | Aspen Plus 运行环境及安装 | 2 |
| 1.1.4 | Aspen Plus 平台      | 3 |
| 1.2   | Aspen Plus 用户界面    | 3 |

## 第 2 章 入门示例——闪蒸过程模拟 6

## 第 3 章 物性方法选择及物性估算 20

|       |             |    |
|-------|-------------|----|
| 3.1   | 物性方法选择      | 20 |
| 3.1.1 | 理想体系与非理想体系  | 20 |
| 3.1.2 | 状态方程和活度系数模型 | 20 |
| 3.1.3 | 亨利定律        | 20 |
| 3.1.4 | 选择物性方法的原则   | 21 |
| 3.2   | 物性分析        | 22 |
| 3.3   | 物性估算        | 27 |
| 3.4   | 汽液相平衡数据回归   | 31 |
| 3.5   | 电解质组分       | 35 |

## 第 4 章 精馏与吸收过程模拟 39

|       |             |    |
|-------|-------------|----|
| 4.1   | 精馏塔简捷计算     | 40 |
| 4.1.1 | 计算精馏塔理论板数   | 41 |
| 4.1.2 | 回流比与理论板数的关系 | 43 |
| 4.2   | 精馏塔严格计算     | 45 |
| 4.2.1 | 精馏塔操作模拟     | 46 |
| 4.2.2 | 设计规定        | 48 |
| 4.2.3 | 最佳进料位置      | 52 |
| 4.2.4 | 填料塔径计算      | 55 |
| 4.2.5 | 板式塔径计算      | 56 |
| 4.2.6 | NQ 曲线       | 58 |

|                       |    |
|-----------------------|----|
| 4.2.7 板效率设定           | 61 |
| 4.2.8 RadFrac 收敛策略及其他 | 62 |
| 4.3 吸收过程              | 65 |

## 第 5 章 过程分析与优化 70

|            |    |
|------------|----|
| 5.1 灵敏度分析  | 70 |
| 5.2 设计规定应用 | 76 |
| 5.3 过程优化   | 81 |

## 第 6 章 反应器模拟 86

|                      |     |
|----------------------|-----|
| 6.1 化学计量反应器 (RStoic) | 86  |
| 6.2 产率反应器 (RYield)   | 88  |
| 6.3 平衡反应器 (REquil)   | 91  |
| 6.4 吉布斯反应器 (RGibbs)  | 92  |
| 6.5 全混釜反应器 (RCSTR)   | 94  |
| 6.6 平推流反应器 (RPlug)   | 100 |
| 6.7 间歇釜反应器 (RBatch)  | 103 |

## 第 7 章 间歇化工过程 109

|            |     |
|------------|-----|
| 7.1 间歇精馏示例 | 110 |
| 7.2 间歇反应示例 | 122 |

## 第 8 章 换热器模拟与设计 130

|                       |     |
|-----------------------|-----|
| 8.1 Heater            | 130 |
| 8.2 HeatX             | 135 |
| 8.2.1 换热器基本结构         | 135 |
| 8.2.2 Shortcut (简捷算法) | 137 |
| 8.2.3 Detailed (详细算法) | 140 |
| 8.2.4 Rigorous (严格算法) | 141 |
| 8.3 EDR               | 144 |
| 8.4 再沸器设计             | 155 |
| 8.4.1 釜式再沸器           | 155 |
| 8.4.2 热虹吸再沸器          | 161 |
| 8.5 冷凝器设计             | 164 |

## 第 9 章 复杂精馏模拟过程解析 170

|          |     |
|----------|-----|
| 9.1 萃取精馏 | 170 |
| 9.2 共沸精馏 | 178 |

|       |                |     |
|-------|----------------|-----|
| 9.3   | 反应精馏           | 188 |
| 9.4   | 速率精馏           | 193 |
| 9.4.1 | 平衡精馏与速率精馏      | 193 |
| 9.4.2 | Rate-Based 的应用 | 195 |
| 9.4.3 | Rate-Based 例子  | 196 |

## 第 10 章 动态过程模拟 205

|      |                                  |     |
|------|----------------------------------|-----|
| 10.1 | 动态模拟的概念                          | 205 |
| 10.2 | Aspen Plus 到 Aspen Plus Dynamics | 207 |
| 10.3 | 动态模拟实例                           | 208 |

## 第 11 章 联立方程法 (EO) 217

|        |            |     |
|--------|------------|-----|
| 11.1   | EO 的特点及应用  | 217 |
| 11.1.1 | EO 界面      | 218 |
| 11.1.2 | EO 运行模式    | 219 |
| 11.1.3 | EO 支持的模块   | 219 |
| 11.1.4 | OOMF 脚本语言  | 221 |
| 11.1.5 | EO 步骤      | 223 |
| 11.2   | EO 模拟模式的例子 | 224 |
| 11.3   | EO 优化模式例子  | 227 |

## 第 12 章 换热网络夹点分析 233

|        |                        |     |
|--------|------------------------|-----|
| 12.1   | 换热网络夹点问题               | 233 |
| 12.2   | 在 Aspen Plus 内直接进行夹点计算 | 234 |
| 12.3   | 用夹点软件从 Aspen Plus 抽取数据 | 241 |
| 12.3.1 | 从 Aspen Plus 抽取数据      | 241 |
| 12.3.2 | 手动设计换热网络               | 246 |
| 12.3.3 | 自动设计换热网络               | 255 |

## 第 13 章 经济分析 258

## 第 14 章 煤化工过程模拟 266

|      |                    |     |
|------|--------------------|-----|
| 14.1 | 煤的评价和分析            | 266 |
| 14.2 | 煤在 Aspen Plus 内的表述 | 268 |
| 14.3 | 用 Gibbs 反应器模拟气化炉   | 273 |

## 第 15 章 聚合过程模拟 Aspen Polymers 282

|      |                   |     |
|------|-------------------|-----|
| 15.1 | Aspen Polymers 介绍 | 282 |
|------|-------------------|-----|



|      |                  |     |
|------|------------------|-----|
| 15.2 | 组分和物性定义 .....    | 284 |
| 15.3 | 定义反应方程和动力学 ..... | 288 |
| 15.4 | 建立流程模拟 .....     | 293 |

**第 16 章 Aspen Plus 与 Excel 连接 (ASW) 298**

|      |                |     |
|------|----------------|-----|
| 16.1 | ASW 简介 .....   | 298 |
| 16.2 | ASW 操作界面 ..... | 299 |
| 16.3 | ASW 操作 .....   | 300 |

**参考文献 311**

# Aspen Plus 简介

## 1.1 Aspen Plus 简介

Aspen Plus 是生产装置设计、稳态模拟和优化的大型通用流程模拟系统，可用于医药、化工等多种工程领域的工艺流程模拟、工程性能监控、优化等贯穿于整个生命周期的过程行为。该软件源于美国能源部 20 世纪 70 年代后期在麻省理工学院（MIT）组织开发的新型第三代流程模拟软件，项目称为“过程工程的先进系统”（Advanced System for Process Engineering, ASPEN），并于 1981 年年底完成。1982 年为了将其商品化，成立了 Aspen Tech 公司，并称之为 Aspen Plus。

该软件经过近 30 年来不断地改进、扩充和提高，已先后推出了十多个版本，成为举世公认的标准大型流程模拟软件。全球各大化工、石化、炼油等过程工业制造企业及著名的工程公司都是 Aspen Plus 的用户。

Aspen Plus 可广泛地应用于新工艺开发、装置设计优化，以及脱瓶颈分析与改造。此稳态模拟工具具有丰富的物性数据库，可以处理非理想、极性高的复杂物系；并独具联立方程法和序贯模块法相结合的解算方法，以及一系列拓展的单元模型库。此外还具有灵敏度分析、自动排序、多种收敛方法，以及报告输出等功能。

### 1.1.1 Aspen Plus 的主要功能

Aspen Plus 横跨整个工艺生命周期，可以用来：① 利用详细的设备模型进行工艺过程严格的能量和质量平衡计算；② 预测物流的流率、组成和性质；③ 预测操作条件、设备尺寸；④ 减少装置的设计时间并进行各种装置的设计方案比较；⑤ 在线优化完整的工艺装置；⑥ 回归试验数据。

Aspen Plus 根据模型的复杂程度支持规模工作流，可以从简单的、单一的装置流程到巨大的、多个工程师开发和维护的整厂流程。分级模块和模板功能使模型的开发和维护变得更加简单。

### 1.1.2 Aspen Plus 主要特点

(1) Aspen Plus 具有最完备的物性系统

物性模型和数据是得到精确可靠的模拟结果的关键。人们普遍认为 Aspen Plus 具有最适用于工业且最完备的物性系统。许多公司为了使其物性计算方法标准化而采用 Aspen Plus 的

物性系统，并与其自身的工程计算软件相结合。

Aspen Plus 拥有一套完整的基于状态方程和活度系数方法的物性模型。其数据库除了包括 6000 多种纯组分的物性数据外，还包含完善的固体数据库（含 3314 种固体）和电解质数据库（含 900 种离子和分子）。加上 NIST 的物性库，组分数为（2~3）万，但其中有重复的。

Aspen Plus 与 DECHEMA 数据库有软件接口，该数据库收集了世界上最完备的气液平衡和液液平衡数据，共计 25 万多套数据。用户也可以把自己的物性数据与 Aspen Plus 系统连接。

有高度灵活的数据回归系统（DRS），此系统可使用实验数据求取物性参数，可以回归实际应用中任何类型的数据，计算任何模型参数，包括用户自编的模型；可以使用面积式或点测试方法自动检查汽液平衡数据的热力学一致性。性质常数估算系统（PCES）能够通过输入分子结构和易测性质（例如沸点）来估算短缺的物性参数。

### （2）集成能力强

以 Aspen Plus 的严格机理模型为基础，形成了针对不同用途、不同层次的 Aspen Technology 家族产品，并为这些软件提供一致的物性支持。

### （3）结构完整

除组分、物性、状态方程外，Aspen Plus 有一套完整的单元操作模型，可以模拟各种操作过程：由单个原油蒸馏塔的计算到整个合成氨厂的模拟。单元操作模型库约由 50 种单元操作模型构成，所有模型都可以处理固体和电解质。用户可将自身的专用单元操作模型通过用户模型（USER MODEL）加入到 Aspen Plus 系统之中，这为用户提供了极大的方便性和灵活性。

### （4）强大的模型/流程分析功能

主要工具包括：

计算器（calculator）——包含 FORTRAN 和 Excel 选项；

灵敏度分析——考察工艺参数随设备规定和操作条件的变化而变化的趋势；

设计规定——计算满足工艺目标或设计要求的操作条件或设备参数；

数据拟合——将工艺模型预测结果与真实装置数据进行拟合，确保符合工厂实际状况；

优化功能——确定装置操作条件，最大化任何规定的目标，如收率、能耗、物料纯度和工艺经济条件等。

## 1.1.3 Aspen Plus 运行环境及安装

Aspen Plus V8.4 版本对计算机硬件的最低配置要求为：CPU Intel® 1.00GHz 或更高，硬盘 40G，内存 2GB，带 DVD ROM。建议：CPU Intel® Core™2 Duo 2.00GHz 或更高，硬盘 250G，内存 3GB，带 DVD ROM。Aspen Plus 安装约占硬盘 3G 空间，Aspen One V8.4 全安装，占硬盘 5G 空间。

支持的桌面操作系统为 Windows 8 x64 Professional、Windows 8 x64 Enterprise、Windows 7 Enterprise SP1 x86、Windows 7 Enterprise SP1 x64、Windows 7 Professional SP1 x86、Windows 7 Professional SP1 x64、Windows Server 2008 R2（64-bit）、Windows Server 2012（64-bit）。不支持 Windows XP。

需要的软件有：Microsoft SQL Server 2008 R2 SP2（Express）、Microsoft SQL Server 2012 SP1（Express Edition），其中 SQL Server 2008 在 Aspen 安装盘里有，在\3rd Party redistributables\Microsoft SQL Express 2008 R2 SP2 里；Microsoft Office 2013、Microsoft Office 2010 SP1，低版本的 Office 也支持；.NET Framework 4.x（最小 4.0，最大 4.5）、.NET Framework 3.5 SP1。其中 .NET Framework and SQL Server 必须先安装。



## 1.1.4 Aspen Plus 平台

Aspen Plus 本身是一个功能强大的流程模拟软件，同时，由于与其连接的软件很多，实际上是一个平台。其中，通过 ASW，可以和 Aspen 公司所有模拟软件连接，见表 1-1。

表 1-1 Aspen Plus 平台架构

| Aspen Plus 平台  |  |   |   |
|--|--|---|---|
| Aspen Plus (Aspen Plus 许可 License, 包含的内容)  | 插于 Aspen Plus 内, 必须依赖于 Aspen Plus 才能运行的软件, 需要 Aspen Plus License 再加另外的 License   | 在 Aspen Plus 内能运行、也能脱离 Aspen Plus 单独运行的软件, 如果在 Aspen Plus 内运行, 则需要 Aspen Plus License 再加另外的 License   | 和 Aspen Plus 紧密结合的软件  |
| <ul style="list-style-type: none"> <li>Aspen Properties 物性</li> <li>混合器、分配器</li> <li>分离器</li> <li>换热器</li> <li>塔</li> <li>反应器</li> <li>变压设备</li> <li>操纵器</li> <li>固体</li> <li>固体分离器</li> <li>用户模型</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>Aspen Distillation Synthesis 精馏合成</li> <li>Aspen Plus<sup>®</sup> CatCracker 催化裂化</li> <li>Aspen Plus<sup>®</sup> Hydrocracker 加氢裂化</li> <li>Aspen Plus<sup>®</sup> Hydrotreater 加氢精制</li> <li>Aspen Plus<sup>®</sup> Reformer 重整</li> <li>Aspen Polymers 聚合物</li> <li>Aspen Rate-based Distillation 基于速率的精馏</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>Aspen Process Economic Analyzer 经济分析</li> <li>Aspen Energy Analyzer 热夹点</li> <li>Heat Exchanger Design &amp; Rating 换热器</li> </ul> | <ul style="list-style-type: none"> <li>Aspen Simulation Workbook<sup>™</sup></li> <li>Aspen Plus<sup>®</sup> Dynamics 动态</li> </ul> |

## 1.2 Aspen Plus 用户界面

按「开始」菜单/程序/AspenTech/Process Modeling V8.4/Aspen Plus/Aspen Plus V8.4 顺序, 打开 Aspen Plus User Interface, 选择 New (新建)/Create (创建), 首先进入组分输入和物性选择界面 Properties, 见图 1-1。在左下侧有三个选项: Properties (当前页面)、Simulation (流程界面)、Energy Analysis (能量分析界面)。

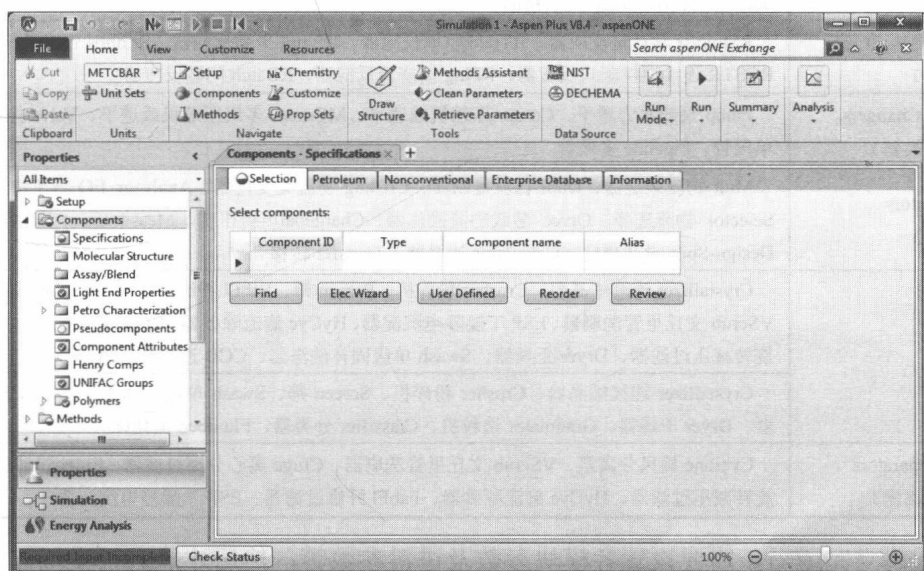


图 1-1 组分输入界面

流程模拟中至少要输入一种组分,具体步骤见第 2 章实例。这里需要说明的是,Aspen Plus 有多个物性库,每个库包含许多组分。在上面的界面中,点 Enterprise Database,即可看到所有的库,见图 1-2。

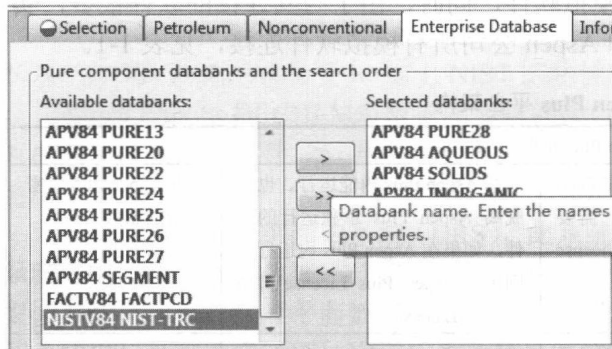


图 1-2 物性库

这里看出,缺省的库(被选上了的库 Selected databanks)有四个,即 PURE28、AQUEOUS、SOLIDS、INORGANIC。一般情况这四个库够用了,但如果在这四个库找不到组分,可以在 Available databanks 选上 NISTV84 NIST-TRC。

选上 NISTV84 NIST-TRC 后,按 [ > ] 即可。该库包含两万多个组分,一般能满足用户。

足用户。

在用户完成组分输入和物性方法选择之后,点 Simulation 进入流程界面,完成建立流程和过程模拟。

Aspen Plus 提供了 9 类单元操作模型和 1 个用户自定义模型供用户选择使用,各类单元操作模型所包含的模块见表 1-2。

表 1-2 Aspen 中的单元操作模型

| 分 类                           | 模 型   |
|-------------------------------|---|
| Mixers/Splitters<br>(混合器/分流器) | Mixer (物流混合器)、Fsplit (物流分离器)、Ssplit (子物流分离器)  |
| Separators<br>(分离器)           | Flash2 两股出料闪蒸、Flash3 三股出料闪蒸、Decanter 液液倾析器、Sep 组分分离器、Sep2 两股出料组分分离器   |
| Heat Exchangers<br>(换热器)      | Heater 加热器或冷却器、HeatX 两物流换热器、NheatX 多物流换热器、HxFlux 传热计算   |
| Columns<br>(塔)                | DSTWU 简捷法蒸馏设计、Distl 简捷法蒸馏核算、RadFrac 严格分馏、Extract 液液萃取、MultiFrac 复杂塔严格分馏、SCFrac 石油馏分的简捷法蒸馏、PetroFrac 石油炼制分馏、ConSep 精馏合成的简洁精馏、BatchSep 间歇精馏                               |
| Reactors<br>(反应器)             | RStoic 化学计量反应器、RYield 收率反应器、REquil 平衡反应器、RGibbs 吉布斯平衡反应器、RCSTR 连续搅拌釜式反应器、RPlug 活塞流反应器、RBatch 间歇反应器  |
| Pressure Changers<br>(压力变换器)  | Pump 泵或水力透平、Compr 压缩机或透平、MCompr 多级压缩机或透平、Valve 控制阀、Pipe 单段管、Pipeline 多段管  |
| Manipulators<br>(操作器)         | Mult 物流乘法器、Dupl 物流复制器、CICng 物流类变化器、Analyzer EO 物流物性计算器、Selector 物流选择、Qtvec 装载物流操作器、Chargebal 电荷平衡、Measurement 工厂数据测量、Design-Spec 设计规定、Calculator 计算器、Transfer 转移        |
| Solids<br>(固体)                | Crystallizer 连续结晶器、Crusher 粉碎机、Screen 筛、FabFl 纤维过滤器、Cycione 旋风分离器、VScrub 文丘里管洗刷器、ESP 干燥静电沉淀器、HyCyc 旋流除砂器、Cfuge 离心分离过滤器、Filter 旋转减压过滤器、Dryer 干燥器、Swash 单级固体洗涤器、CCD 逆流倾析器 |
|                               | Crystallizer 连续结晶器、Crusher 粉碎机、Screen 筛、Swash 单级固体洗涤器、CCD 逆流倾析器、Dryer 干燥器、Granulator 造粒机、Classifier 分类器、Fluidbed 流化床  |
| Solids Separators<br>(固体分离器)  | Cycione 旋风分离器、VScrub 文丘里管洗刷器、Cfuge 离心分离过滤器、Filter 过滤器、CfFilter 旋转减压过滤器、HyCyc 旋流除砂器、FabFl 纤维过滤器、ESP 干燥静电沉淀器  |

当流程建立完成后,需要设置各模块参数及进料参数等,然后才能进行模拟计算。在 Simulation 页面左侧的目录树中各图标及颜色都代表不同的意义,见表 1-3。



表 1-3 目录树图标及意义

| 符 号 | 所 属      | 表示的意义                 |
|-----|----------|-----------------------|
|     | 输入表格     | 输入完成, 或查看过无需输入的数据     |
|     | 输入表格     | 必需的数据输入未完成            |
|     | 输入表格     | 未输入                   |
|     | 混合表格     | 输入和结果                 |
|     | 结果表格     | 无结果                   |
|     | 结果表格     | 结果正确有效                |
|     | 结果表格或流程图 | 结果有效但有警告              |
|     | 结果表格或流程图 | 结果错误无效                |
|     | 结果表格     | 结果和当前的输入不一致 (输入发生了改变) |
|     | 输入文件夹    | 数据未输入                 |
|     | 输入文件夹    | 所需数据未输入完整             |
|     | 输入文件夹    | 输入完成, 或查看过无需输入的数据     |
|     | 结果文件夹    | 无结果                   |
|     | 结果文件夹    | 结果正确有效                |
|     | 结果文件夹    | 结果有效但有警告              |
|     | 结果文件夹    | 结果错误无效                |
|     | 结果文件夹    | 结果和当前的输入不一致 (输入发生了改变) |
|     | 文件夹或表    | 目标无效                  |

完成组分和物性方法设置、流程建立、物流参数设置 (Streams)、模块参数设置 (Blocks) 等之后, 方可运行模拟及查看结果, 详细步骤见后续章节。这里特别推荐初学者把第 2 章作为必读章节, 其他章节则根据需要选读。

# 入门示例——闪蒸过程模拟

本章为入门性内容，介绍如何进入 Aspen Plus 用户界面、建立流程、完成组分输入、物性选择、闪蒸模拟等基本过程，为学习后续其他单元模块打下基础，为初学者必读章节。

闪蒸过程是化工生产过程中最常见，也是最简单的单元过程之一。在 Aspen Plus 中，闪蒸模块位于 Model Palette（模型调色板）的 Separators（分离器）标签下，见图 2-1。

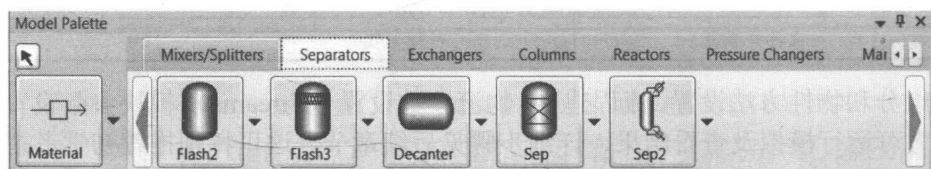


图 2-1 分离器页面

除了闪蒸器之外，分离器页面还包括其他模块，其功能见表 2-1。

表 2-1 分离器各模块功能

| 模 块      | 描 述      | 目 的                           | 应 用                        |
|----------|----------|-------------------------------|----------------------------|
| Flash2   | 双出口闪蒸    | 基于严格的汽液或汽液液平衡，将入口物流分离为两个出口物流  | 闪蒸器、蒸发器、分离罐、单级分离器等         |
| Flash3   | 三出口闪蒸    | 基于严格的汽液液平衡，将入口物流分离为三个出口物流     | 倾析器、双液相的单级分离器              |
| Decanter | 液液倾析器    | 将入口物流分离为两个液相出口物流              | 倾析器、无汽相的双液相单级分离器           |
| Sep      | 组分分离器    | 基于指定的流程或分割比，将入口物流分离为多个出口物流    | 组分分离操作，如蒸馏或吸收，当分离细节不详或不重要时 |
| Sep2     | 双出口组分分离器 | 基于指定的流程、分割比或纯度，将入口物流分离为两个出口物流 | 组分分离操作，如蒸馏或吸收，当分离细节不详或不重要时 |

其中 Flash2、Flash3 和 Decanter 模块可以生成加热或冷却曲线和表。

本章以 Flash2 为代表介绍闪蒸模块。作为最简单的分离模块之一，Flash2 可模拟闪蒸器、蒸发器、分离罐或其他单级分离器，进行绝热、恒温、恒压、露点或泡点闪蒸计算，包括汽液或汽液液平衡过程。在指定出口条件之后，Flash2 可确定一股或多股混合物的热状态和相条件。

通常需要规定入口物流的热力学状态，并规定出口物流温度、压力、热负荷、汽相摩尔



分数中的任意两项。在输入指定表单中，如果用户只给温度或压力中的一个指定，Flash2 会用输入热流之和作为热负荷指定。此外，Flash2 输入热流只用于计算净热负荷。净热负荷就是输入热流之和减去实际的（计算的）热负荷。对于净热负荷，用户可以用一股可选的输出热流代表。

在输入指定表单上，还需要指定有效的相态。对于有效的相态，用户可根据表 2-2 选择。

表 2-2 Flash2 的相态选择

| 选项      | 有无固体 | 相数 | 有无自由水 |
|---------|------|----|-------|
| 汽-液     | 有或无  | 2  | 无     |
| 汽-液-液   | 有或无  | 3  | 无     |
| 汽-液-自由水 | 有或无  | 2  | 有     |
| 汽-液-污水  | 有或无  | 3  | 无     |

此外，用户可用 Flash Options 表指定温度和压力估计闪蒸收敛参数；用 Entrainment 表指定汽相中的液体或固体夹带；用 Hcurves 表指定可选的加热或冷却曲线。

闪蒸模拟过程中经常用到露点/泡点的概念。其中，露点对应的物流的汽相摩尔分数为 1，泡点对应的汽相摩尔分数为 0，汽-液混合物的汽相摩尔分数介于 0~1 之间。

可通过 Help 详细了解 Separator 中各模块（如 Flash3）特点和应用，方法是：进入 Aspen Plus 界面之后（过程见后），点击窗口顶部菜单 Resources/Help/搜索，输入 Flash3 关键字并回车，即可得到 Flash3 的各种信息，过程从略。

**例 2-1** 甲醇/水混合溶液，其质量组成为：水 60% 和甲醇 40%，进料温度 40℃，压力 1atm (1atm=101325Pa)，流量 1000kg/h。①计算该物流的泡点温度；②计算物流的露点温度；③该物流在 85℃ 和 1atm 下闪蒸，求闪蒸后汽相分数。热力学模型采用 NRTL-RK（液相用 NRTL 活度系数模型，汽相用 RK 状态方程）。

首先确定其泡点温度。从“开始→程序→Aspentech→Process Modelling V8.4→Aspen Plus→Aspen Plus V8.4”进入 Aspen Plus 开始界面，见图 2-2。

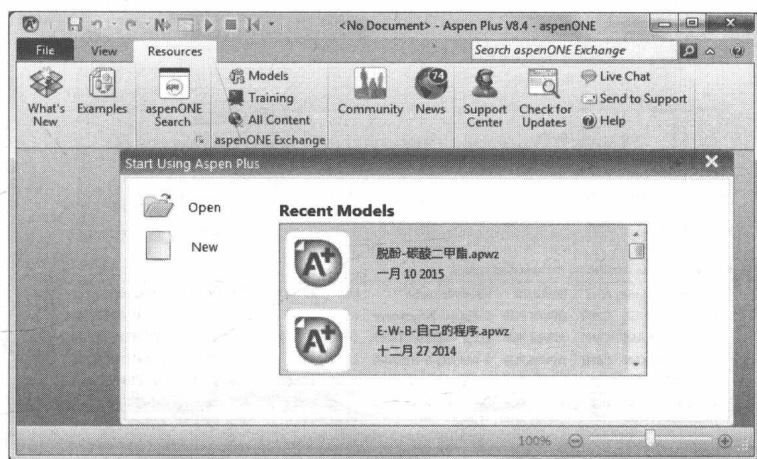


图 2-2 选择 Aspen Plus 界面

如果是打开已有的文件，直接点击右边文件名；如果所要打开的文件没有出现在列表中，可选择 Open 查找。本题选择 New 新建，弹出如图 2-3 所示的窗口。

系统默认顶部 Blank and Recent（空白和最近）的选项。如果用户要进行特殊体系的模拟，如电解质、固体等，可用鼠标在左侧单击选中相应的选项。本题默认 Blank and Recent，点击



右下角 Create 进入 Aspen Plus V8.4/Properties (物性) 界面, 见图 2-4。

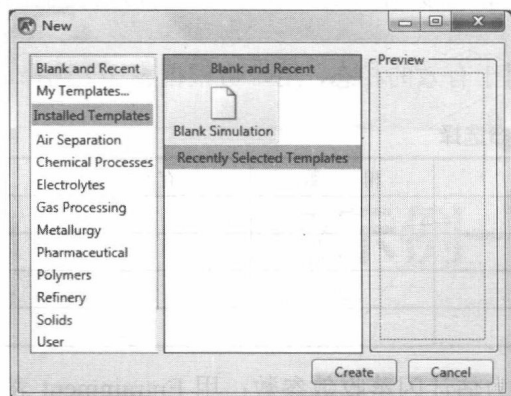


图 2-3 模板的选项窗口

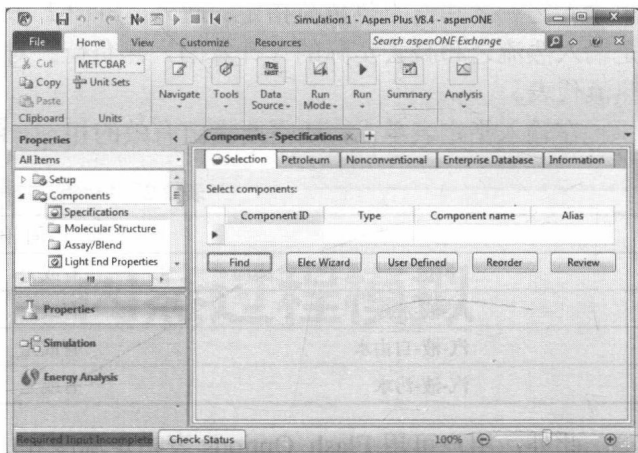


图 2-4 Aspen Plus V8.4 物性界面

窗口左侧为数据信息标签, 顶部为各种菜单, 中部为填写数据的表格等, 左下角有 3 个选项: Properties (物性)、Simulation (模拟)、Energy Analysis (能量分析), 分别代表不同的界面, 其中默认的是 Properties, 也就是当前界面, 表示当前需要填入物性方面的信息, 完成之后再点击进入 Simulation 流程模拟界面。

页面左侧 Component/Specifications (组分/指定) 标签为红色, 表示该项目需要填入信息; 左下角状态显示 Required Input Incomplete 为红色, 表明物性项目所需要数据没有填完。Aspen Plus 的特点是: 需要把图中所有红色标签填写完毕, 全部变为蓝色之后, 才能进行模拟计算。

现需输入组分, 图 2-4 中部有空白的组分列表。单击该列表下面的 Find (查找) 进入组分查找界面, 见图 2-5。

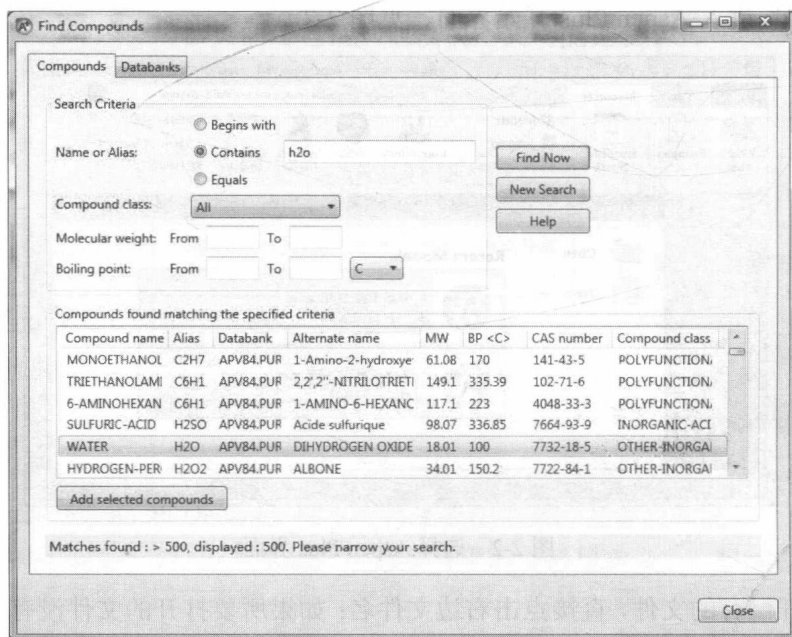


图 2-5 组分查找界面

然后输入 h2o (或 H2O, 不分大小写), 选定默认选项 Contains (表示查找包含 h2o 信息