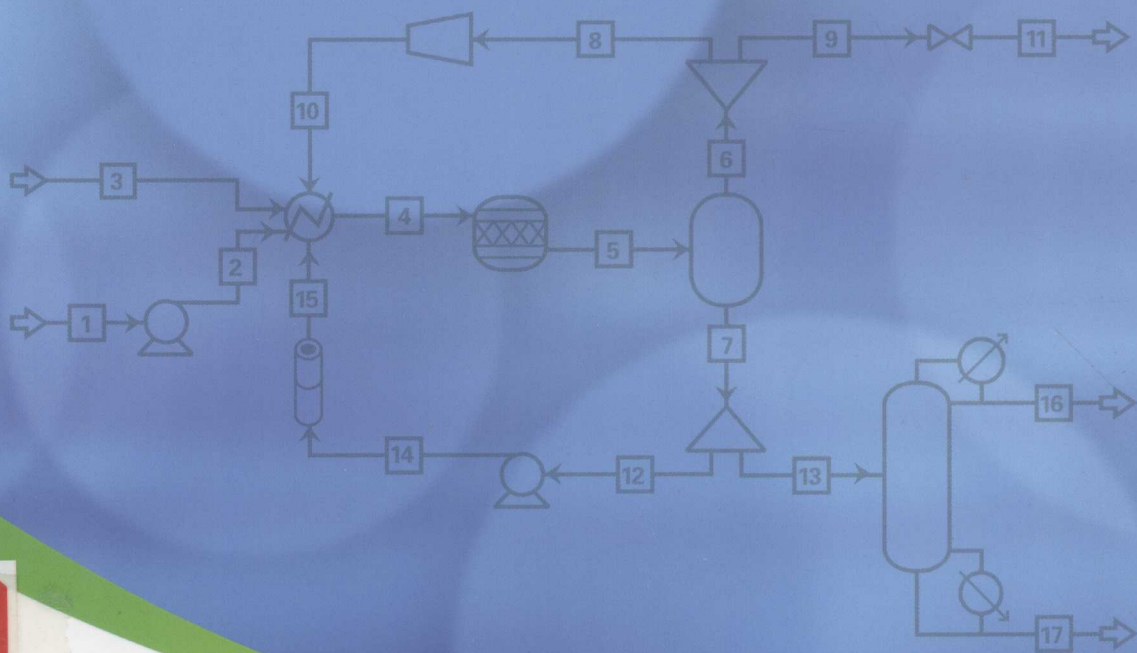


孙兰义 主编

# 化工流程模拟实训 —— Aspen Plus 教程

Chemical Engineering  
Process Simulation using  
Aspen Plus



化学工业出版社

孙兰义 主编

# 化工流程模拟实训 ——Aspen Plus 教程

## Chemical Engineering Process Simulation using Aspen Plus

I. ①化... II. ①孙... III. ①化工流程-应用软件  
教材 IV. ①TQ02-39

中国图书馆书号 CIP 数据核字 (2012) 第 127893 号

责任编辑  
关 文

责任编辑  
关 文

（110001）

出版发行

印 刷

787mm×109

5 年 10 月北京第 1 版第 1 次印刷

010-64218888 (转真) 010-64218889 (转分) 010-64218899 (转总)



化学工业出版社

网 址: <http://www.cip.com.cn>

凡购买本书，如有质量问题，可向各书店退货或换书，调换书费自理。

北京

元 00.00 价 宝

本书结合工业生产和设计的实际,系统介绍了 Aspen Plus 软件的操作步骤以及应用技巧。本书内容共分 14 章,第 1 章介绍化工过程模拟的基本知识;第 2 章介绍流程建立的基本操作方法和步骤;第 3 章介绍流程模拟中物性方法的选择;第 4~8 章介绍 Aspen Plus 中各个模块的应用方法和技巧;第 9 章介绍 Aspen Plus 中基本的流程选项和模型分析工具;第 10 章介绍流程模拟的步骤和经验;第 11 章介绍运用 Aspen Plus 进行原油蒸馏模拟;第 12 章简单介绍复杂精馏过程的模拟;第 13 章介绍流程以及 RadFrac 模块的收敛技巧和策略;第 14 章介绍 Aspen Plus 和其他 Windows 程序协同使用的方法。为了方便本书的学习以及扩展读者的学习内容,本书还配有书中例题与习题的 Aspen Plus bkp 文件、Aspen Energy Analyzer、化工过程经济分析与评价、Aspen Plus 与外部换热器软件联用以及塔内件设计软件 CUP-Tower 等内容,可登录 [www.cipedu.com.cn](http://www.cipedu.com.cn) 下载。

本书可作为高等学校化工类专业本科生和研究生的教学参考书,也可供石油与化工等领域从事化工过程开发与设计的工程技术人员参考。

### 图书在版编目(CIP)数据

化工流程模拟实训——Aspen Plus 教程 / 孙兰义主编.  
北京:化学工业出版社,2012.8  
(卓越工程师教育培养计划系列教材)  
ISBN 978-7-122-14553-6

I. ①化… II. ①孙… III. ①化工过程-应用软件-  
教材 IV. ①TQ02-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2012)第 127893 号

责任编辑:徐雅妮 杜进祥  
责任校对:边涛

文字编辑:刘志茹  
装帧设计:关飞

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)

印装:大厂聚鑫印刷有限责任公司

787mm×1092mm 1/16 印张 21 字数 536 千字 2012 年 10 月北京第 1 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: 39.00 元

版权所有 违者必究

## 编写人员

主 编 孙兰义  
编写人员（按姓氏笔画排序）

丁 雪	于英民	王 俊	王丁丁
毕欣欣	全本军	沈 琳	武 佳
侯影飞	赫佩军		

从20世纪80年代开始,人们开始利用计算机解决化工过程的数学问题,目前化工过程模拟已成为化工工程技术人员普遍采用的技术手段。随着计算机计算能力的快速提高以及软件技术的迅速发展,模拟计算的准确性和可靠性大大增强,应用范围不断拓宽,在化工过程开发、设计、生产操作的控制与优化、操作培训和技术改造等方面均有应用。Aspen Plus是基于稳态化工模拟、优化、灵敏度分析和经济评价的大型化工流程模拟软件,由美国 Aspen Tech 公司研发,是唯一能处理带有固体、电解质、生物质和常规物料等复杂体系的流程模拟系统。

本书详细介绍了 Aspen Plus 软件的操作步骤以及应用技巧,注重其应用与原理的结合。内容共分 14 章,主要包括化工过程模拟的基本知识,流程建立的基本操作方法和步骤, Aspen Plus 中各个模块的应用方法和技巧,流程模拟的步骤和经验,原油蒸馏过程的模拟,几种复杂精馏过程的模拟,流程以及 RadFrac 模块的收敛技巧和策略, Aspen Plus 和其他 Windows 程序协同使用的方法。为了方便本书的学习以及扩展读者的学习内容,本书还配有书中例题与习题的 Aspen Plus bkp 文件、Aspen Energy Analyzer、化工过程经济分析与评价、Aspen Plus 与外部换热器软件联用以及塔内件设计软件 CUP-Tower 等内容,可登录 [www.cipedu.com.cn](http://www.cipedu.com.cn) 下载。通过对本书的学习,可以提升读者对 Aspen Plus 的认识,并能用其进行化工系统的流程模拟及优化。

本书所有例题均以 Aspen Plus V7.2 版本为例,不同版本的 Aspen Plus 在界面和内容上可能有所差异,请各位读者朋友注意。同时,尽管化工过程有诸多相同的单元操作,但具体实现过程不尽相同,甚至相差甚远。在应用 Aspen Plus 进行模拟时,要充分考虑到每个过程的特殊性,具体问题具体分析,选用合理的模块组合,找出最佳的流程设计。

本书由孙兰义主编,第 1、2、3、9 章由毕欣欣编写,第 4、8 章由王俊编写,第 5、10 章由王丁丁编写,第 6、11 章由全本军编写,第 7、13 章由武佳编写,第 12 章由毕欣欣、王丁丁、王俊、武佳、沈琳共同编写,第 14 章由沈琳编写,丁雪、赫佩军、侯影飞、于英民参与修改工作,全书由孙兰义修改定稿。

由于作者水平有限,书中不妥之处在所难免,恳请读者批评指正。

编 者  
2012 年 3 月

# 前言

从 20 世纪 50 年代开始,人们就开始利用计算机解决化工过程的数学问题,目前化工过程模拟已成为化学工程技术人员普遍采用的技术手段。随着计算机计算能力的快速提高以及软件技术的迅速发展,模拟计算的准确性和可靠性大大增强,应用范围不断拓宽,在化工过程开发、设计、生产操作的控制与优化、操作培训和技术改造等方面均有应用。Aspen Plus 是基于稳态化工模拟、优化、灵敏度分析和经济评价的大型化工流程模拟软件,由美国 Aspen Tech 公司研发,是唯一能处理带有固体、电解质、生物质和常规物料等复杂体系的流程模拟系统。

本书详细介绍了 Aspen Plus 软件的操作步骤以及应用技巧,注重其应用与原理的结合。内容共分 14 章,主要包括化工过程模拟的基本知识,流程建立的基本操作方法和步骤,Aspen Plus 中各个模块的应用方法和技巧,流程模拟的步骤和经验,原油蒸馏过程的模拟,几种复杂精馏过程的模拟,流程以及 RadFrac 模块的收敛技巧和策略,Aspen Plus 和其他 Windows 程序协同使用的方法。为了方便本书的学习以及扩展读者的学习内容,本书还配有书中例题与习题的 Aspen Plus bkp 文件、Aspen Energy Analyzer、化工过程经济分析与评价、Aspen Plus 与外部换热器软件联用以及塔内件设计软件 CUP-Tower 等内容,可登录 [www.cipedu.com.cn](http://www.cipedu.com.cn) 下载。通过对本书的学习,可以提升读者对 Aspen Plus 的认识,并能用其进行化工系统的流程模拟及优化。

本书所有例题均以 Aspen Plus V7.2 版本为例,不同版本的 Aspen Plus 在界面和内容上可能有所差异,请各位读者朋友注意。同时,尽管化工过程有诸多相同的单元操作,但具体实现过程不尽相同,甚至相差甚远。在应用 Aspen Plus 进行模拟时,要充分考虑到每个过程的特殊性,具体问题具体分析,选用合理的模块组合,找出最佳的流程设计。

本书由孙兰义主编,第 1、2、3、9 章由毕欣欣编写,第 4、8 章由王俊编写,第 5、10 章由王丁丁编写,第 6、11 章由全本军编写,第 7、13 章由武佳编写,第 12 章由毕欣欣、王丁丁、王俊、武佳、沈琳共同编写,第 14 章由沈琳编写,丁雪、赫佩军、侯影飞、于英民参与修改工作,全书由孙兰义修改定稿。

由于作者水平有限,书中不妥之处在所难免,恳请读者批评指正。

## 第 5 章 液体输送单元模拟 / 63

5.1 概述	63
5.2 泵 Pump	63
5.3 压缩机 Compr	67
5.4 多级压缩机 MCompr	69

8.6 化学反应对象	131
8.7 全混釜反应器 RCSTR	136
8.8 平推流反应器 RPlug	137
8.9 间歇式反应器 RBatch	142
习题	148

编者  
2012 年 3 月

# 目 录

## 第1章 绪论 / 1

- 1.1 化工过程模拟 ..... 1
- 1.2 Aspen Plus 软件 ..... 2

## 第2章 图形界面与流程建立 / 4

- 2.1 图形界面 ..... 4
- 2.2 建立流程模拟 ..... 5
- 2.3 输入数据 ..... 9
- 2.4 运行模拟 ..... 14
- 2.5 查看结果 ..... 15
- 习题 ..... 15

## 第3章 物性方法 / 17

- 3.1 Aspen Plus 数据库 ..... 17
- 3.2 Aspen Plus 中的主要物性模型 ..... 17
- 3.3 物性方法的选择 ..... 19
- 3.4 定义物性集 ..... 23
- 3.5 物性分析 ..... 25
- 3.6 物性估算 ..... 31
- 3.7 物性数据回归 ..... 35
- 3.8 电解质组分 ..... 38
- 习题 ..... 46

## 第4章 简单单元模拟 / 47

- 4.1 混合器/分流器 ..... 47
- 4.2 两种调节器 ..... 52
- 4.3 简单分离器 ..... 54
- 习题 ..... 62

## 第5章 流体输送单元模拟 / 63

- 5.1 概述 ..... 63
- 5.2 泵 Pump ..... 63
- 5.3 压缩机 Compr ..... 67
- 5.4 多级压缩机 MCompr ..... 69

- 5.5 阀门 Valve ..... 70
- 5.6 管段 Pipe ..... 72
- 5.7 管线系统 Pipeline ..... 74
- 习题 ..... 77

## 第6章 换热器单元模拟 / 79

- 6.1 概述 ..... 79
- 6.2 换热器 Heater ..... 79
- 6.3 换热器 HeatX ..... 82
- 6.4 换热器 MHeatX ..... 87
- 习题 ..... 87

## 第7章 分离单元模拟 / 88

- 7.1 概述 ..... 88
- 7.2 精馏塔的简捷设计模块 DSTWU ..... 88
- 7.3 精馏塔的简捷校核模块 Distl ..... 92
- 7.4 精馏塔严格计算模块 RadFrac ..... 93
- 7.5 塔板和填料的设计与校核 ..... 106
- 7.6 连续萃取模块 Extract ..... 111
- 7.7 吸收示例 ..... 115
- 习题 ..... 117

## 第8章 反应器单元模拟 / 120

- 8.1 概述 ..... 120
- 8.2 化学计量反应器 RStoic ..... 120
- 8.3 产率反应器 RYield ..... 125
- 8.4 平衡反应器 REquil ..... 127
- 8.5 吉布斯反应器 RGibbs ..... 129
- 8.6 化学反应对象 ..... 131
- 8.7 全混釜反应器 RCSTR ..... 135
- 8.8 平推流反应器 RPlug ..... 137
- 8.9 间歇式反应器 RBatch ..... 142
- 习题 ..... 148

## 第9章 流程选项和模型分

### 析工具 / 150

- 9.1 流程选项 ..... 150
- 9.2 模型分析工具 ..... 162
- 习题 ..... 179

## 第10章 工艺流程模拟 / 181

- 10.1 带循环的工艺流程 ..... 181
- 10.2 工艺流程模拟 ..... 186
- 习题 ..... 194

## 第11章 原油蒸馏过程模拟 / 196

- 11.1 油品的性质 ..... 196
- 11.2 石油馏分在模拟中的处理方法 ..... 199
- 11.3 石油蒸馏模块 PetroFrac ..... 208
- 习题 ..... 225

## 第12章 复杂精馏模拟 / 227

- 12.1 反应精馏 ..... 227
- 12.2 三相精馏 ..... 232
- 12.3 萃取精馏 ..... 239

- 12.4 共沸精馏 ..... 246
- 12.5 多效精馏 ..... 253
- 12.6 隔壁塔 ..... 263
- 12.7 精馏塔的热力学分析和水力学分析 ..... 269
- 12.8 塔板数-热负荷 (NQ) 曲线 ..... 277

## 第13章 收敛 / 280

- 13.1 流程收敛 ..... 280
- 13.2 RadFrac 模块的收敛 ..... 300

## 第14章 和其他 Windows 程序 协同工作 / 310

- 14.1 复制和粘贴 ..... 310
- 14.2 创建活动链接 ..... 316
- 14.3 使用嵌入对象 ..... 318

## Aspen Plus 常用词汇中英文对照表 / 320

### 参考文献 / 327

82	.....	器热蒸
87	.....	器热蒸 MHeatx
87	.....	习题
88	.....	7.1 蒸馏塔
88	.....	7.2 精馏塔的主要特性模型 DSTWU
92	.....	7.3 精馏塔的主要特性模型 Distl
93	.....	7.4 精馏塔的气液平衡模型 RadFrac
101	.....	7.5 塔板效率模型
111	.....	7.6 连续萃取模型 Extract
115	.....	7.7 吸收模型
117	.....	习题
120	.....	8.1 蒸馏塔
120	.....	8.2 化学计量反应器 RStoic
125	.....	8.3 气液反应器 RYield
127	.....	8.4 平衡反应器 REquil
129	.....	8.5 吉布斯反应器 RGibbs
131	.....	8.6 化学平衡模型
135	.....	8.7 全混釜反应器 RCSTR
137	.....	8.8 平推流反应器 RPlug
142	.....	8.9 间歇反应器 RBatch
148	.....	习题

14	.....	运行设置
15	.....	2.5 查看设置
15	.....	习题
17	.....	3.1 Aspen Plus 数据库
17	.....	3.2 Aspen Plus 中的主要特性模型
19	.....	3.3 物性方法的选择
23	.....	3.4 定义物性方法
25	.....	3.5 物性方法
31	.....	3.6 物性方法
35	.....	3.7 物性方法
38	.....	3.8 物性方法
46	.....	习题
47	.....	4.1 混合器
52	.....	4.2 两相分离器
54	.....	4.3 简单分离器
55	.....	习题
59	.....	5.1 蒸馏塔
59	.....	5.2 泵 Pump
57	.....	5.3 压缩机 Compr
58	.....	5.4 多级压缩机 MCompr

# 第1章

## 绪论

### 1.1 化工过程模拟

#### 1.1.1 化工过程模拟简介

化工过程模拟可分为稳态模拟和动态模拟两类。通常所说的化工过程模拟或流程模拟多指稳态模拟，本书主要介绍如何运用 Aspen Plus 进行稳态模拟。

流程模拟实际上就是使用计算机程序定量计算一个化学过程中的特性方程。其主要过程是根据化工过程的数据，采用适当的模拟软件，将由多个单元操作组成的化工流程用数学模型描述，模拟实际的生产过程，并在计算机上通过改变各种有效条件得到所需要的结果。模拟过程中涉及的化工过程中的数据一般包括进料的温度、压力、流率、组成，有关的工艺操作条件、工艺规定、产品规格以及相关的设备参数。

化工过程模拟是在计算机上“再现”实际的生产过程。但是这一“再现”过程并不涉及实际装置的任何管线、设备以及能源的变动，因而给了化工模拟人员最大的自由度，使其可以在计算机上“为所欲为”地进行不同方案和工艺条件的探讨、分析。因此，流程模拟不仅可节省时间，也可节省大量资金和操作费用；同时流程模拟系统还可对经济效益、过程优化、环境评价进行全面的分析和精确评估；并可对化工过程的规划、研究与开发及技术可靠性做出分析。

化工过程模拟可以用来进行新工艺的开发研究、新装置设计、旧装置改造、生产调优以及故障诊断，同时过程模拟还可以为企业装置的生产管理提供可靠的理论依据，是企业生产管理从经验型走向科学型的有力工具。

#### 1.1.2 化工过程模拟的功能

##### (1) 科学研究、开发新工艺

20 世纪 60~70 年代以前，炼油、化工行业新流程的开发研究，需要依靠各种不同规模的小试、中试。随着过程模拟技术的不断发展，工艺开发已经逐渐转变为完全或部分利用模拟技术，仅在某些必要环节进行个别的试验研究和验证。

##### (2) 设计

化工过程模拟的主要应用之一是进行新装置的设计。随着科学技术的进步，在石油化工和炼油领域，绝大多数过程模拟的结果可以直接运用于工业装置的设计，而无需小试或中试。国外从 20 世纪 60 年代末开始，已经在工程设计中应用过程模拟技术，而国内开始较晚，到



80年代才开始广泛应用。进入21世纪以来,相关设计单位开始大量使用化工模拟软件,高等院校也纷纷引进模拟软件,用于科学研究和教学工作。

### (3) 改造

化工过程模拟也是旧装置改造必不可少的工具,旧装置的改造既涉及已有设备的利用,也可能需要增添新设备,其计算往往比设计还要复杂。改造过程中,由于产品分布和处理量发生了改变,所以现有的塔、换热器、泵、管线等旧设备能否仍旧适用是一个很大的问题,这些问题都必须在过程模拟的基础上才能得到解决。

### (4) 生产调优、故障诊断

在生产装置调优以及故障诊断的问题上,过程模拟起着不可替代的作用,通过流程模拟可以寻求最佳工艺条件,从而达到节能、降耗、增效的目的;通过全系统的总体调优,以经济效益为目标函数,可求得关键工艺参数的最佳匹配,革新了传统观念。

## 1.1.3 化工过程模拟系统的构成

化工过程模拟系统主要包括输入系统、数据检查系统、调度系统以及数据库。

现代模拟系统既可以采用图形界面,也可采用数据文件的方式输入,并且这两种方式之间可以相互转换。图形输入简单直观,需要先作出所需计算的模拟流程图,然后再输入相关数据。由于图形输入无需记忆输入格式和关键字,比较方便,现已成为主要的输入方式。

数据输入完成后,由数据检查系统进行流程拓扑分析和数据检查,这一阶段的检查只分析数据的合理性、完整性,而不涉及正确性。若发现错误或是数据输入不完整,则返回输入系统,提示用户进行修改。

数据检查完之后进入调度系统,调度系统是程序中所有模块调用以及程序运行的指挥中心。调度系统的考虑是否完善,编制是否灵活,是否为用户提供最大的方便,对于模拟软件的性能至关重要。

任何一个通用的化工过程模拟系统都需要物性数据库、热力学方法库、化工单元过程库、功能模块库、收敛方法库、经济评价库等。其中最重要的是化工单元过程库和热力学方法库,化工单元过程库关系着能否进行计算,热力学方法库关系着计算结果的准确性。

## 1.2 Aspen Plus 软件

### 1.2.1 Aspen Plus 简介

Aspen Plus 是一款功能强大的集化工设计、动态模拟等计算于一体的大型通用流程模拟软件。它起源于20世纪70年代后期,当时美国能源部在麻省理工学院(MIT)组织会战,要求开发新型第三代流程模拟软件,这个项目称为“先进过程工程系统”(Advanced System for Process Engineering),简称 ASPEN。这一大型项目于1981年底完成。1982年 Aspen Tech 公司成立,将其商品化,称为 Aspen Plus。这一软件经过历次的不断改进、扩充和提高,成为全世界公认的标准大型化工流程模拟软件。

Aspen Plus 是基于稳态化工模拟、优化、灵敏度分析和经济评价的大型化工流程模拟软件,为用户提供了一套完整的单元操作模块,可用于各种操作过程的模拟及从单个操作单元到整个工艺流程的模拟。

Aspen Plus 主要由三部分组成,简述如下。

### (1) 物性数据库

Aspen Plus 自身拥有两个通用的数据库 Aspen CD (Aspen Tech 公司自己开发的数据库) 和 DIPPR (美国化工协会物性数据设计院的数据库), 还有多个专用的数据库。这些专用的数据库结合一些专用的状态方程和专用的单元操作模块, 使得 Aspen Plus 软件可应用于固体加工、电解质等特殊领域, 拓宽了软件的适用范围。

Aspen Plus 具有工业上最适用且完备的物性系统, 其中包含多种有机物、无机物、固体、水溶液电解质的基本物性参数。Aspen Plus 计算时可自动从数据库中调用基础物性进行传递性质和热力学性质的计算。此外, Aspen Plus 还提供了几十种用于计算传递性质和热力学性质的模型方法, 其含有的物性常数估算系统 PCES 能够通过输入分子结构和易测性质来估算缺少的物性参数。

### (2) 单元操作模块

Aspen Plus 拥有 50 多种单元操作模块, 通过这些模块和模型的组合, 可以模拟用户所需要的流程。除此之外, Aspen Plus 还提供了多种模型分析工具, 如灵敏度分析和工况分析模块。利用灵敏度分析模块, 用户可以设置某一变量作为灵敏度分析变量, 通过改变此变量的值模拟操作结果的变化情况。采用工况分析模块, 用户可以对同一流程的几种操作工况进行分析。

### (3) 系统实现策略

对于完整的模拟系统软件, 除数据库和单元模块外, 还应包括以下几部分。

① 数据输入 Aspen Plus 的数据输入是由命令方式进行的, 即通过三级命令关键字书写的语段、语句及输入数据对各种流程数据进行输入。输入文件中还可包括注解和插入的 Fortran 语句, 输入文件命令解释程序可转化成用于模拟计算的各种信息, 这种输入方式使得用户使用软件特别方便。

② 解算策略 Aspen Plus 所用的解算方法为序贯模块法以及联立方程法, 流程的计算顺序可由程序自动产生, 也可由用户自己定义。对于有循环回路或设计规定的流程必须迭代收敛。

③ 结果输出 可把各种输入数据及模拟结果存放在报告文件中, 可通过命令控制输出报告文件的形式及报告文件的内容, 并可在某些情况下对输出结果作图。

全世界各大化工、石化生产厂家及著名工程公司都是 Aspen Plus 的用户。它以严格的机理模型和先进的技术赢得广大用户的信赖, 它具有以下特性:

- ① Aspen Plus 具有最完备的物性系统, 可以处理固体以及电解质系统;
- ② Aspen Plus 具有完整的单元操作模型库, 可以模拟各种操作过程, 可以完成单塔至整个工艺装置的模拟;
- ③ Aspen Plus 具有快速可靠的流程模拟功能;
- ④ Aspen Plus 具有先进的计算方法, 具有最先进的流程方法, 同时还可以进行过程优化计算。

## 1.2.2 Aspen Plus 的主要功能

Aspen Plus 可以用于多种化工过程的模拟, 其主要的功能有以下几种:

- ① 对工艺过程进行严格的质量和能量平衡计算;
- ② 可以预测物流的流率、组成以及性质;
- ③ 可以预测操作条件、设备尺寸;
- ④ 可以减少装置的设计时间并进行装置各种设计方案的比较;
- ⑤ 帮助改进当前工艺, 主要包括可以回答“如果……, 那会怎么样”的问题, 在给定的约束内优化工艺条件, 辅助确定一个工艺的约束部位, 即消除瓶颈。

## 第2章

# 图形界面与流程建立

## 2.1 图形界面

### 2.1.1 Aspen Plus 界面主窗口

Aspen Plus 具有友好的用户界面，以方便用户建立流程模拟，Aspen Plus 的界面主窗口如图 2-1 所示。

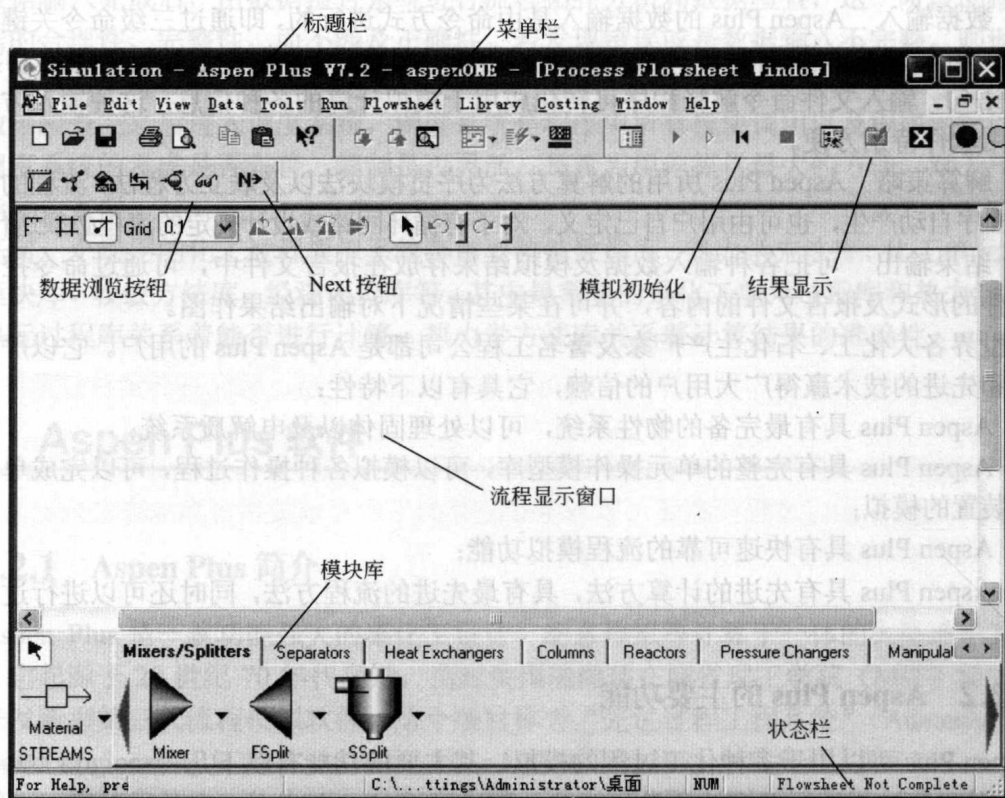


图 2-1 Aspen Plus 界面主窗口

### 2.1.2 主要图标功能介绍

Aspen Plus 界面主窗口中主要图标的介绍见表 2-1。

表 2-1 Aspen Plus 中主要图标的功能介绍

图标	说明	功能
	下一步 Next	指导用户进行下一步的输入
	数据浏览 Data Browser	浏览、编辑表和页面
	控制面板 Run Control Panel	显示运行过程, 并进行控制
	重新初始化 Reinitialize	使用初值重新计算, 不使用上次的计算结果
	开始运行 Start	输入完成后, 开始计算
	结果显示 Check results	显示模拟计算的结果

### 2.1.3 状态指示符号

在整个流程模拟过程中, 左侧的数据浏览窗口会出现不同的状态指示符号, 其指示意义列于表 2-2。

表 2-2 状态指示符号及其意义

符号	意义
	该表输入未完成
	该表输入完成
	该表中没有输入, 是可选项
	对于该表有计算结果
	对于该表有计算结果, 但有计算错误
	对于该表有计算结果, 但有计算警告
	对于该表有计算结果, 但生成结果后输入发生改变

## 2.2 建立流程模拟

下面以苯和丙烯反应生成异丙苯为例, 介绍流程模拟的建立步骤。

**例 2.1** 含苯 (BENZENE,  $C_6H_6$ ) 和丙烯 (PROPENE,  $C_3H_6$ ) 的原料物流 FEED 进入反应器 REACTOR, 经反应生成异丙苯 (PRO-BEN,  $C_9H_{12}$ ), 反应后的混合物经冷凝器 COOLER 冷凝, 再进入分离器 SEP, 分离器 SEP 顶部物流 RECYCLE 循环回反应器 REACTOR, 分离器 SEP 底部物流作为产品 PRODUCT 流出, 流程如图 2-2 所示, 求产品 PRODUCT 中异丙苯的摩尔流率。

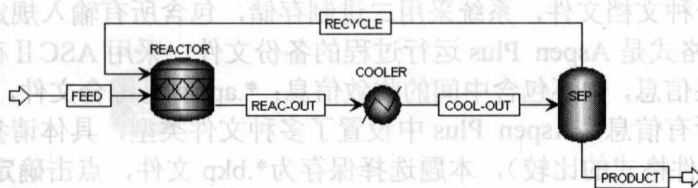
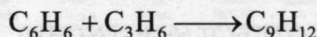


图 2-2 流程示意

原料物流 FEED 温度为  $105^{\circ}C$ , 压力为  $0.25MPa$ , 苯和丙烯的摩尔流率均为  $18kmol/h$ <sup>①</sup>。反应器 REACTOR 绝热操作, 压力为  $0.1MPa$ , 反应方程式为:



① Aspen Plus 软件中时间单位小时用符号 hr 表示。

其中丙烯的转化率为 90%。

冷凝器 COOLER 的出口温度为 54℃，压降为 0.7kPa；分离器 SEP 绝热操作，压降为 0。

## 2.2.1 启动 Aspen Plus

依次点击开始→程序→所有程序→Aspen Tech→Process Modeling V7.2→Aspen Plus→Aspen Plus User Interface，系统会提示用户进行选择建立空白模拟（Blank Simulation）、使用系统模板（Template）或是打开已有文件（Open an Existing Simulation），如图 2-3 所示。

一般选择使用系统模板（Template），点击 OK，出现如图 2-4 所示对话框，模板设定了工程计算通常使用的缺省项。

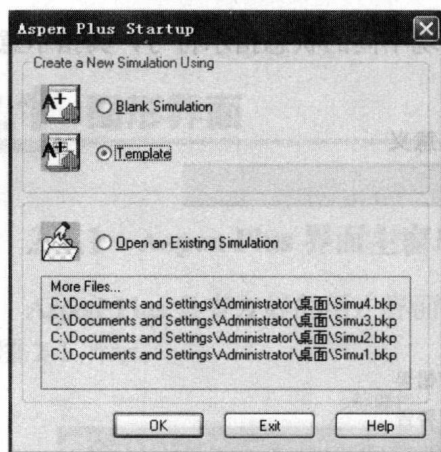


图 2-3 启动选项对话框

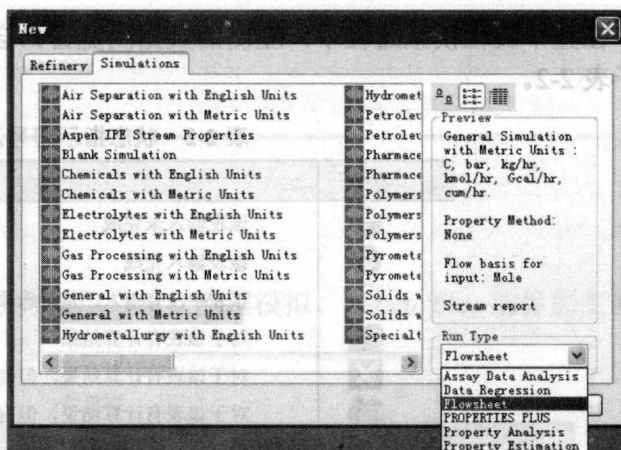


图 2-4 模板选择对话框

这些缺省项一般包括测量单位、所要报告的物流组成信息和性质、物流报告格式以及其他特定的应用缺省。对于每个模板，用户可以选择使用公制或英制单位，也可以自行设定常用的单位，本题中选择模板 General with Metric Units。

右下方的运行类型（Run Type）为用户提供了多种选择，本题选择 Flowsheet 选项，点击确定后即可进入 Aspen Plus 界面主窗口。

## 2.2.2 保存文件

建立流程之前，为防止文件丢失，一般先将文件保存。点击菜单栏 **Tools | Options**，在 **General** 页面下的 **Save options** 中设置文件的保存类型，系统设置了三种默认保存类型，如图 2-5 所示。

\*.apw 格式是一种文档文件，系统采用二进制存储，包含所有输入规定、模拟结果和中间收敛信息；\*.bkp 格式是 Aspen Plus 运行过程的备份文件，采用 ASC II 存储，包含模拟的所有输入规定和结果信息，但不包含中间的收敛信息；\*.apwz 是综合文件，采用二进制存储，包含模拟过程中的所有信息。Aspen Plus 中设置了多种文件类型，具体请参考网上的补充资料（Aspen Plus 中文件格式的比较），本题选择保存为\*.bkp 文件，点击确定。

点击 **File | Save As**，选择存储位置，给文件命名，点击确定即可，如本题文件保存为 Example2.1-Flowsheet.bkp。

## 2.2.3 建立流程图

在完成前述的准备工作后，用户即可开始建立流程图。点击菜单栏 **Tools | Options**，在 **Flowsheet** 页面下的 **Stream and Block labels** 中，将复选框的第一项和第三项去掉，如图 2-6 所

示, 即对于物流和模块, 用户自行定义标识名称, 不采用系统生成的默认标识, 点击确定。

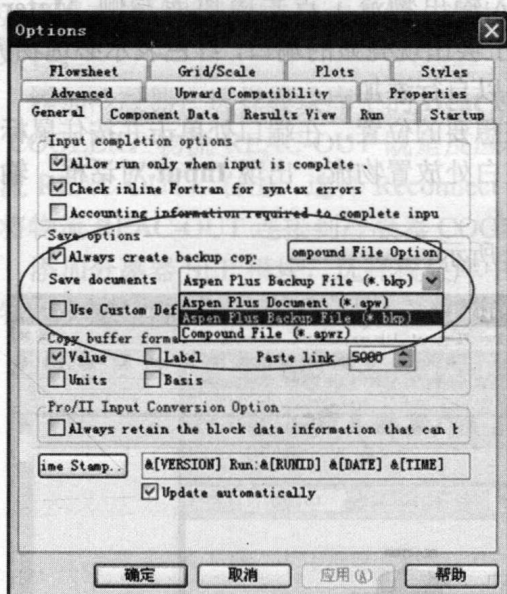


图 2-5 工具选项下的 General 页面

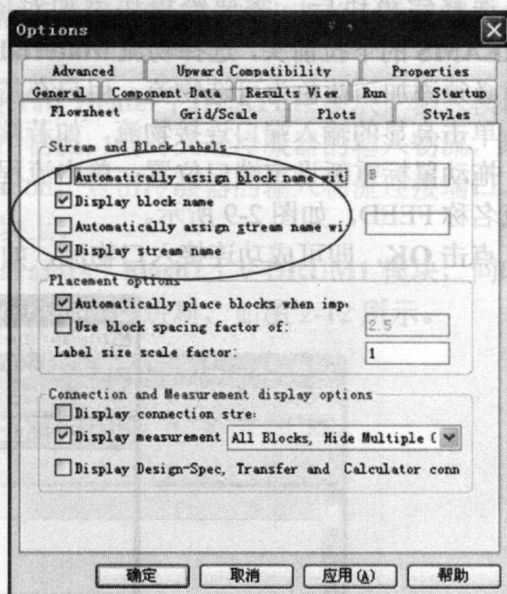


图 2-6 工具选项下的 Flowsheet 页面

### (1) 放置模块

首先从界面主窗口下端的模块库 **Model Library** 中点击 **Reactors | RStoic** 右侧的下拉箭头, 选择 **ICON1** 模块 (各种反应器模块将在第 8 章中讲述), 然后移动鼠标至窗口空白处, 待鼠标显示为十字形, 单击, 出现 **Input** 对话框。在 **Input** 对话框中输入模块名称 **REACTOR**, 如图 2-7 所示。如果模块库没有出现在界面主窗口上, 可以使用快捷键 **F10**, 或由菜单栏选择 **View | Model Library**, 调出模块库。

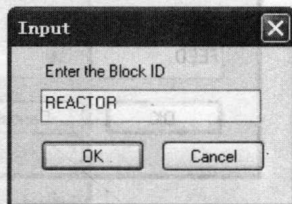


图 2-7 输入模块名称

点击 **OK**, 回到主窗口, 如图 2-8 所示。

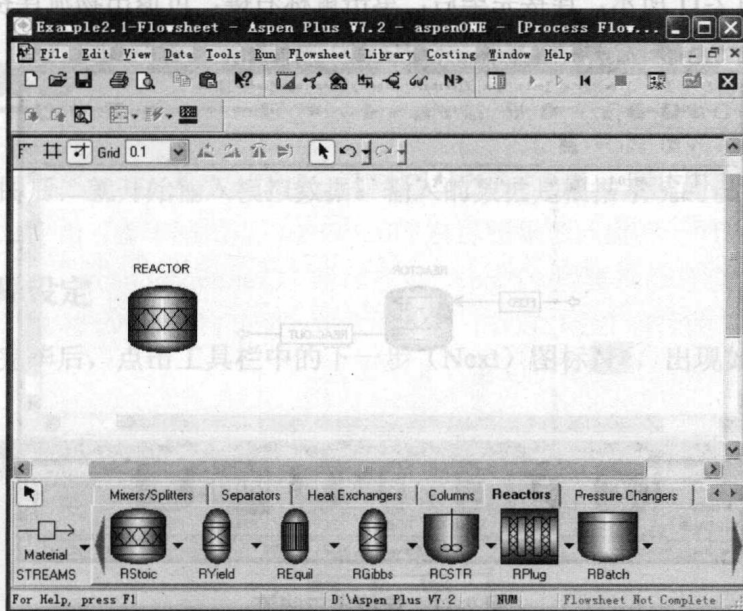


图 2-8 流程窗口模块选择示意

## 2.2.2 添加物流和连接模块

选择完模块后，需要给模块添加对应的输入输出物流，点击模块库左侧 **Material STREAMS** 的下拉箭头，选择物流 **Material**，模块上会出现亮显的端口，红色表示必选物流，用户必须添加，蓝色为可选物流，用户在需要时可以自行添加。

单击亮显的输入端口连接物流，如若端口不在想要的位置，在端口处单击并按住鼠标左键，拖动鼠标重新设定端口位置；单击流程窗口空白处放置物流，出现 **Input** 对话框，输入物流名称 **FEED**，如图 2-9 所示。

点击 **OK**，即可成功连接入口物流，如图 2-10 所示。

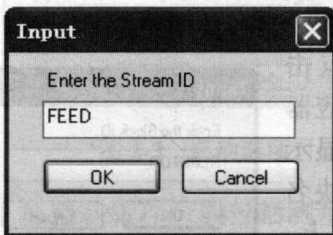


图 2-9 输入物流名称

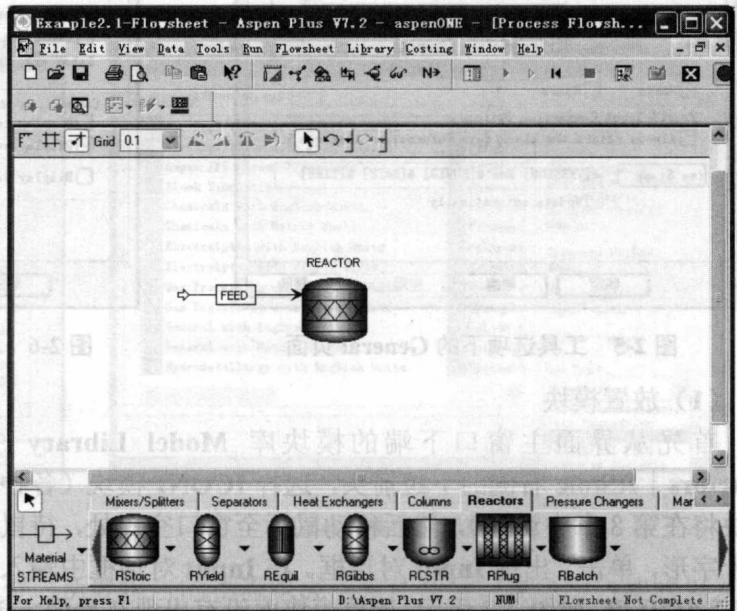


图 2-10 连接入口物流

同上述操作，单击亮显的输出物流端口，然后单击流程窗口的空白处，连接输出物流 **REAC-OUT**，如图 2-11 所示，连接完毕后，单击鼠标右键，可退出物流连接模式。

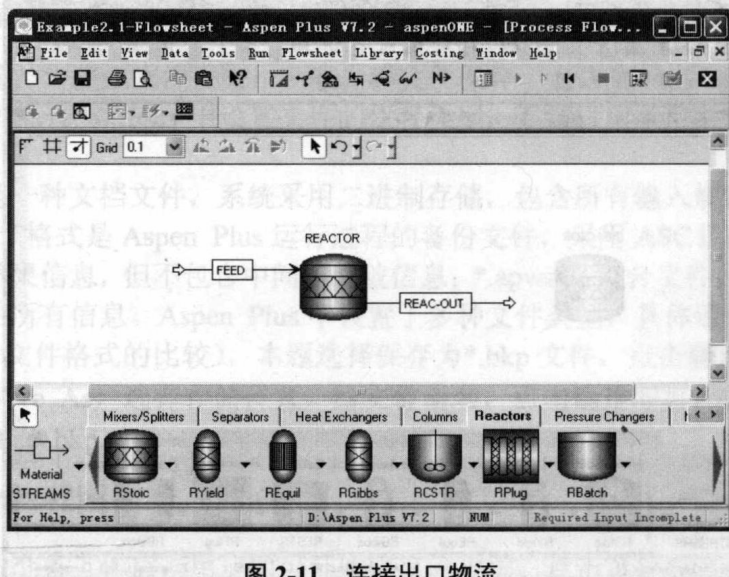


图 2-11 连接出口物流

若需要对单元模块或物流进行更改名称、删除、更换图标、输入数据、输出结果等操作时，可以在模块或物流上单击左键，选中对象，然后单击右键，在弹出菜单中选择相应的菜单项目。

添加冷凝器，选择模块库中的 **Heat Exchangers | Heater | HEATER** 模块，输入模块名称 COOLER。物流 REAC-OUT 既是反应器的输出物流，同时又是冷凝器的输入物流，选中物流 REAC-OUT，右击，选择 **Reconnect Destination**，点击冷凝器的输入物流连接端口，即可将物流 REAC-OUT 连接到冷凝器 COOLER 模块上。

添加分离器 SEP 模块，选择模块库中的 **Separators | Flash2 | V-DRUM1** 模块，同时连接物流，注意塔顶的物流作为循环物流，即反应器的另一股进料，如图 2-12 所示。

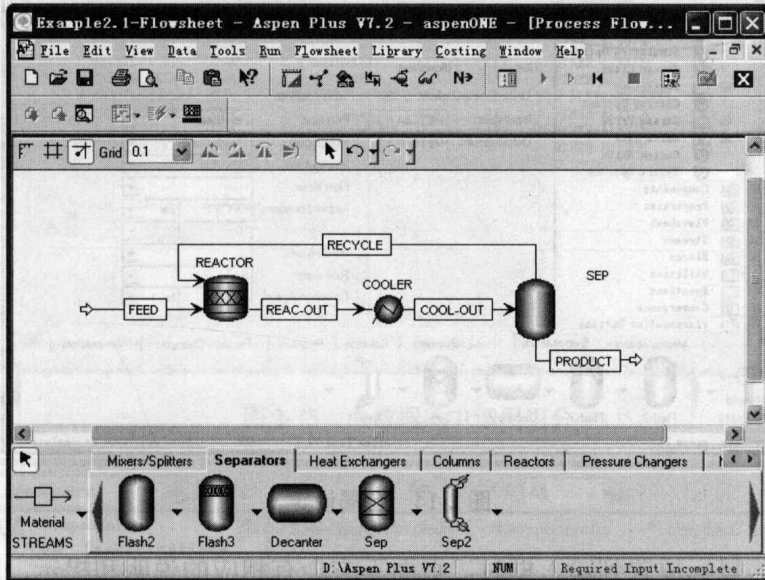


图 2-12 完整的流程

至此，流程图建立完毕。

## 2.3 输入数据

建立完流程图后，就开始输入模拟数据。输入的数据是根据系统的设计变量来确定的，下面逐步介绍。

### 2.3.1 全局设定

流程图绘制完毕后，点击工具栏中的下一步 (Next) 图标 **N**，出现如图 2-13 所示的对话框。

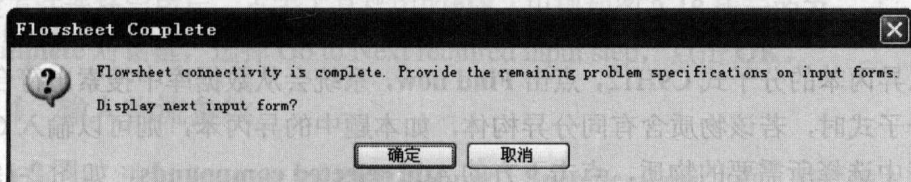




图 2-13 信息提示对话框



点击确定，进入 **Setup | Specifications | Global** 页面，进行全局设定。也可以点击工具栏中的数据浏览图标 ，由左侧数据浏览窗口进入 **Setup | Specifications | Global** 页面，或是直接点击工具栏中的 **Setup** 图标 ，直接进入全局设定页面，用户可以在全局设定页面中的名称 (Title) 框中为模拟命名，本题输入 flowsheet，用户还可以在此页面重设运行类型、选择输入输出数据的单位制等，本题采用默认设置，不作修改，如图 2-14 所示。

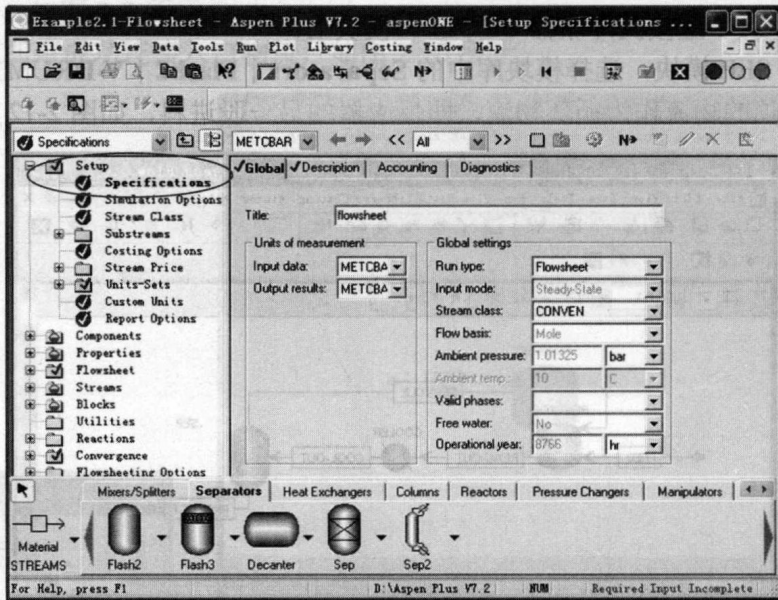




图 2-14 全局设定

输入过程中，鼠标放置到输入框时，页面下方会有相应的说明和提示，用户也可以通过 F1 键打开帮助文件寻求帮助。

### 2.3.2 输入组分

完成全局设定后，点击工具栏中的 **N** ，进入 **Components | Specifications | Selection** 页面，输入组分。用户也可以直接点击工具栏中的 **Components** 图标 ，进入组分输入页面。熟悉软件之后，用户可以直接由左侧的数据浏览窗口点击 **Components**，进入组分输入页面。数据浏览窗口中各项与输入界面一一对应。

在 **Component ID** 一栏输入丙烯的名称 PROPENE，点击回车键；由于这是系统可识别的组分 ID，所以系统会自动将类型 (Type)、组分名称 (Component name) 和分子式 (Formula) 栏输入；同样输入苯的名称 BENZENE，点击回车键，也可自动录入。注意，在 **Component ID** 一栏中设置物质的标识时，最多可以输入 8 个字符。

在第三行 **Component ID** 中输入 PRO-BEN 作为异丙苯的标识，点击回车后，系统并不识别，这时需要用到查找 (Find) 功能。首先选中第三行，然后点击左下角的 **Find**，在 **Find** 页面上输入异丙苯的分子式 C<sub>9</sub>H<sub>12</sub>，点击 **Find now**，系统会从数据库中搜索出符合条件的物质。输入分子式时，若该物质含有同分异构体，如本题中的异丙苯，则可以输入 C<sub>9</sub>H<sub>12</sub>-。

从列表中选择所需要的物质，点击下方的 **Add selected compounds**，如图 2-15 所示。点击 **Close**，回到 **Components | Specifications | Selection** 页面，如图 2-16 所示。