

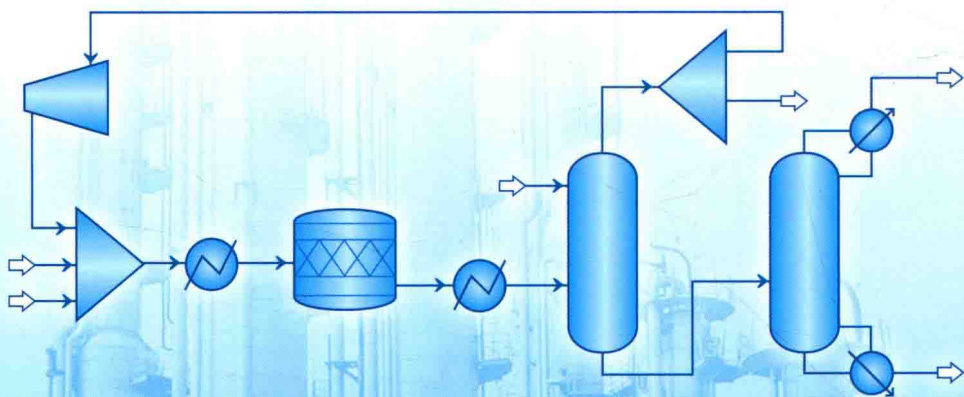


“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材

# 化工过程模拟实训 —— Aspen Plus 教程

第二版

孙兰义 主编



化学工业出版社



“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材

# 化工过程模拟实训 —— Aspen Plus 教程

第二版

孙兰义 主编



化学工业出版社

· 北京 ·

《化工过程模拟实训——Aspen Plus 教程》(第二版)以 Aspen Plus V8.4 为模拟软件,结合过程实例系统介绍了 Aspen Plus 的操作步骤以及应用技巧。本书内容相较第一版更加完善。全书共分为 14 章,第 1 章介绍化工过程模拟的基础知识;第 2 章介绍流程建立的基本操作步骤;第 3 章介绍物性方法;第 4~8 章介绍 Aspen Plus 中各单元操作模块应用方法和技巧;第 9 章介绍 Aspen Plus 中基本的流程选项和模型分析工具;第 10 章介绍复杂精馏过程模拟;第 11 章介绍工艺流程模拟的步骤和经验;第 12 章介绍流程以及 RadFrac 模块的收敛技巧和策略;第 13 章介绍石油蒸馏过程模拟;第 14 章介绍简单动态模拟。附录部分介绍了 Activated Energy Analysis、Column Analysis 以及 CUP-Tower 的功能与应用。每章节中的例题均有具体的说明与详尽的解题步骤,读者按书中的说明与步骤进行学习即可逐步掌握 Aspen Plus 软件的使用方法和技巧。本书中的典型例题配有演示视频,可通过扫描二维码观看。

本书可作为高等学校化工相关专业本科生和研究生的教学参考书,也可为石油与化工等领域从事过程开发、设计与生产管理的工程技术人员提供参考。

#### 图书在版编目(CIP)数据

化工过程模拟实训——Aspen Plus 教程/孙兰义主编.  
2 版. —北京:化学工业出版社,2017.9  
“十二五”普通高等教育本科国家级规划教材  
ISBN 978-7-122-30251-9

I. ①化… II. ①孙… III. ①化工过程-流程模拟-  
应用软件-高等学校-教材 IV. ①TQ02-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2017)第 173421 号

责任编辑:徐雅妮  
责任校对:宋 玮

文字编辑:丁建华 任睿婷  
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 36¼ 字数 936 千字 2017 年 10 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:79.00 元

版权所有 违者必究

# 《化工过程模拟实训——Aspen Plus教程》

## 编写人员

主 编 孙兰义

编写人员 (按姓氏笔画排序)

丁 雪	于 娜	于英民	王建新
朱 毅	朱敏燕	刘育良	李 伟
李 军	李 杰	李 源	李鲁闽
陈梦琪	林世强	柳士开	钟 旺
侯亚飞	侯影飞	赫佩军	

# 前言

化工过程模拟是化学工程技术人员解决化工过程问题时普遍采用的技术手段，Aspen Plus 作为化工过程模拟的重要软件之一，经过 30 多年的不断发展和改进，得到了越来越广泛的应用。很多工程公司、设计院和高校都是 Aspen Plus 的用户，其已成为公认的标准化化工过程模拟软件之一。Aspen Plus 具有庞大的数据库和完备的单元操作模块，能够处理多种复杂体系，并对模拟过程中的物料和能量衡算、各单元操作模块参数、物流性质等进行严格计算，为工业过程的模拟与优化提供相对可靠的参考。

《化工流程模拟实训——Aspen Plus 教程》(第一版)详细介绍了 Aspen Plus 软件的操作步骤以及应用技巧，注重应用与原理的结合。第一版自出版以来便受到广大化工科研与设计人员、高校师生的欢迎。第一版中的所有例题均以 Aspen Plus V7.2 为模拟软件，但是随着 Aspen Plus 软件的不断更新，其操作界面已经发生较大变化，给初学者的学习与应用带来不便，特对其进行改编。第二版书名由《化工流程模拟实训》改为《化工过程模拟实训》，所有例题均采用 Aspen Plus V8.4 进行模拟介绍。针对第一版的问题与不足，已在本书中进行修改，内容更加充实，能够满足广大读者的需求。

考虑到物性方法的重要性，本书对第 3 章内容进行了较大改动，重点介绍物性方法的应用、物性分析、估算与回归。第 10 章复杂精馏过程模拟新增变压精馏、热泵精馏以及内部热耦合精馏三节。第 11 章工艺流程模拟新增模拟实例——甲苯甲醇侧链烷基化制苯乙烯一节，进一步介绍了过程模拟中的经验和技巧。鉴于读者对动态控制模拟的学习需求，新增第 14 章动态模拟入门，介绍 Aspen Plus Dynamics 在过程控制中的应用，以便读者掌握动态控制的基本操作过程。本书中的典型例题配有演示视频，可通过扫描例题附近的二维码观看。此外，本书附录对 Activated Energy Analysis、Column Analysis 以及 CUP-Tower 进行了简单介绍，可增强读者对相关软件的了解并掌握使用方法。

读者可以发送邮件到 [sunlanyi\\_cuptower@126.com](mailto:sunlanyi_cuptower@126.com) 获取本书例题和习题模拟源文件。通过学习本书，初学者可以快速熟悉 Aspen Plus 的各项功能，具有一定软件应用基础的读者能够进一步提升对 Aspen Plus 和相关软件的认识。

由于编者水平有限，书中不妥之处，恳请读者批评指正。

编者

2017 年 5 月

# 第一版前言

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。

编者

2012 年 3 月

# 目 录

## 第 1 章 绪论

### 1.1 化工过程模拟 / 1

- 1.1.1 化工过程模拟简介 / 1
- 1.1.2 化工过程模拟的功能 / 1
- 1.1.3 化工过程模拟系统构成 / 2

### 1.2 Aspen Plus 软件 / 2

- 1.2.1 Aspen Plus 简介 / 2
- 1.2.2 Aspen Plus 主要功能 / 3

## 第 2 章 Aspen Plus 入门

### 2.1 图形界面 / 4

- 2.1.1 Aspen Plus 界面主窗口 / 4
- 2.1.2 主要图标功能 / 5
- 2.1.3 状态指示符号 / 5
- 2.1.4 Aspen Plus 专家系统(Next) / 5

### 2.2 Aspen Plus 自带示例文件 / 6

### 2.3 物性环境 / 7

### 2.4 模拟环境 / 11

- 2.4.1 设置全局规定 / 11
- 2.4.2 建立流程图 / 12
- 2.4.3 输入物流数据 / 15
- 2.4.4 输入模块数据 / 16

### 2.5 运行模拟 / 18

### 2.6 查看结果 / 19

## 第 3 章 物性方法

### 3.1 Aspen 数据库 / 21

### 3.2 物性方法简介 / 26

- 3.2.1 理想气体和理想液体 / 26
- 3.2.2 REFPROP 和 GERG2008 / 27
- 3.2.3 状态方程法 / 27
- 3.2.4 活度系数法 / 35

3.2.5 亨利定律 / 37

3.2.6 电解质物性方法 / 41

3.2.7 固体物性方法 / 42

3.2.8 蒸汽表 / 42

3.2.9 传递性质模型 / 43

### 3.3 物性方法选择 / 44

- 3.3.1 状态方程法和活度系数法比较 / 44
- 3.3.2 常见体系物性方法推荐 / 45
- 3.3.3 经验选取 / 47
- 3.3.4 使用帮助系统进行选择 / 48

### 3.4 物性方法和路线 / 49

### 3.5 游离水、污水和严格三相计算 / 51

### 3.6 物性参数和数据 / 56

### 3.7 物性集 / 57

### 3.8 物性分析 / 60

### 3.9 物性参数估算 / 78

- 3.9.1 纯组份物性参数估算 / 79
- 3.9.2 与温度相关的物性模型参数估算 / 85
- 3.9.3 二元交互作用参数估算 / 86
- 3.9.4 UNIFAC 官能团参数估算 / 92

### 3.10 物性数据回归 / 92

### 3.11 TDE 简介 / 105

### 3.12 焓值计算 / 116

### 3.13 体积流量 / 119

### 3.14 电解质组分 / 119

## 第 4 章 简单单元模拟

### 4.1 混合器/分流器 / 130

- 4.1.1 混合器 / 130
- 4.1.2 分流器 / 133

### 4.2 倍增器/复制器 / 135

- 4.2.1 倍增器 / 135
- 4.2.2 复制器 / 137

- 4.3 简单分离器 / 138
  - 4.3.1 两出口闪蒸器 / 138
  - 4.3.2 三出口闪蒸器 / 140
  - 4.3.3 液-液分相器 / 142
  - 4.3.4 组分分离器 / 144
  - 4.3.5 两出口组分分离器 / 145

## 第5章 流体输送单元模拟

- 5.1 概述 / 148
- 5.2 泵 / 148
- 5.3 压缩机 / 153
- 5.4 多级压缩机 / 155
- 5.5 阀门 / 159
- 5.6 管道 / 161
- 5.7 管线 / 163

## 第6章 换热器单元模拟

- 6.1 概述 / 170
- 6.2 加热器/冷却器 / 170
- 6.3 两股物流换热器 / 180
- 6.4 多股物流换热器 / 194

## 第7章 塔单元模拟

- 7.1 概述 / 198
- 7.2 精馏塔简捷设计 / 199
- 7.3 精馏塔简捷校核 / 204
- 7.4 精馏塔严格计算 / 205
- 7.5 气体吸收模拟 / 221
- 7.6 塔板和填料的设计与校核 / 224
  - 7.6.1 塔效率 / 224
  - 7.6.2 塔板和填料的设计与校核 / 226
- 7.7 溶剂萃取模拟 / 231
- 7.8 电解质模拟 / 235

## 第8章 反应器单元模拟

- 8.1 概述 / 242
- 8.2 化学计量反应器 / 243
- 8.3 产率反应器 / 248
- 8.4 平衡反应器 / 250
- 8.5 吉布斯反应器 / 252

- 8.6 化学反应 / 254
- 8.7 全混釜反应器 / 257
- 8.8 平推流反应器 / 260
- 8.9 间歇反应器 / 264

## 第9章 过程模拟工具

- 9.1 流程变量 / 271
- 9.2 设计规定 / 273
- 9.3 计算器与 Fortran / 276
- 9.4 传递模块 / 278
- 9.5 平衡模块 / 282
- 9.6 灵敏度分析 / 285
- 9.7 优化与约束条件 / 291
- 9.8 数据拟合 / 296

## 第10章 复杂精馏过程模拟

- 10.1 萃取精馏 / 309
- 10.2 共沸精馏 / 317
- 10.3 变压精馏 / 329
- 10.4 反应精馏 / 333
- 10.5 三相精馏 / 341
  - 10.5.1 简单三相精馏 / 341
  - 10.5.2 三相反应精馏 / 343
- 10.6 多效精馏 / 347
- 10.7 隔壁塔 / 357
- 10.8 热泵精馏 / 366
- 10.9 内部热耦合精馏 / 377
- 10.10 精馏塔热力学分析和水力学分析 / 384
- 10.11 塔板数-热负荷(NQ)曲线 / 393

## 第11章 工艺流程模拟

- 11.1 带有循环的工艺流程 / 397
  - 11.2 工艺流程模拟经验总结 / 403
  - 11.3 模拟实例——乙苯催化脱氢制苯乙烯 / 404
  - 11.4 模拟实例——甲苯甲醇侧链烷基化制苯乙烯 / 412
- 习题 / 424



## 第12章 收敛和故障诊断

习题 / 513

### 12.1 序贯模块法流程收敛 / 432

- 12.1.1 流程循环与设计规定 / 432
- 12.1.2 收敛选项 / 434
- 12.1.3 断裂物流 / 440
- 12.1.4 收敛模块 / 440
- 12.1.5 收敛嵌套顺序 / 440
- 12.1.6 计算顺序 / 446
- 12.1.7 流程排序 / 446
- 12.1.8 查看结果 / 447
- 12.1.9 控制面板信息 / 448

### 12.2 流程收敛故障诊断 / 451

- 12.2.1 影响流程收敛的主要因素 / 451
- 12.2.2 流程收敛策略 / 451
- 12.2.3 断裂物流收敛问题 / 452
- 12.2.4 设计规定收敛问题 / 453
- 12.2.5 计算器模块收敛问题 / 454
- 12.2.6 优化模块收敛问题 / 454
- 12.2.7 计算顺序和收敛问题 / 454

### 12.3 RadFrac 模块收敛 / 459

- 12.3.1 RadFrac 模块求解策略 / 459
- 12.3.2 RadFrac 模块收敛问题 / 463
- 12.3.3 RadFrac 模块收敛故障排除建议 / 465
- 12.3.4 自定义收敛方法 / 468

## 第13章 石油蒸馏过程模拟

### 13.1 石油及油品的物理性质 / 472

- 13.1.1 密度和 API 重度 / 472
- 13.1.2 特性因数 / 473
- 13.1.3 其他性质 / 473

### 13.2 石油蒸馏类型 / 474

### 13.3 原油评价数据库 / 476

### 13.4 石油馏分物性估算方法 / 476

### 13.5 石油馏分在模拟中的处理方法 / 477

- 13.5.1 逐一定义虚拟组分 / 478
- 13.5.2 通过石油蒸馏曲线生成虚拟组分 / 478
- 13.5.3 石油馏分的混合 / 487

### 13.6 石油蒸馏模拟示例 / 493

- 13.6.1 预闪蒸塔设定与模拟 / 495
- 13.6.2 常压塔模拟 / 502

## 第14章 动态模拟入门

### 14.1 概述 / 515

### 14.2 稳态模型导入动态模拟 / 518

### 14.3 闪蒸罐动态模拟 / 523

### 14.4 反应器动态模拟 / 530

- 14.4.1 利用反应器热负荷控制反应温度 / 531
- 14.4.2 利用冷却介质温度控制反应温度 / 535
- 14.4.3 利用冷却介质流量控制反应温度 / 536

### 14.5 精馏塔动态模拟 / 538

- 14.5.1 温度控制结构 / 538
- 14.5.2 浓度控制结构 / 545

### 14.6 隔壁塔动态模拟 / 547

## 附录

### 附录1 Activated Energy Analysis 示例 / 551

### 附录2 Column Analysis 示例 / 560

### 附录3 CUP-Tower 简介 / 567

## 参考文献 / 571

## 例题演示视频

(扫二维码观看, 建议在 WiFi 环境下使用)

- 例 2.1 演示视频 / 7
- 例 3.7 演示视频 / 65
- 例 3.11 演示视频 / 80
- 例 3.15 演示视频 / 97
- 例 4.5 演示视频 / 139
- 例 5.1 演示视频 / 149
- 例 6.2 演示视频 / 173
- 例 6.4 演示视频 / 181
- 例 7.1 演示视频 / 199
- 例 7.3(1)~(4) 演示视频 / 206
- 例 8.6 演示视频 / 261
- 例 9.1 演示视频 / 274
- 例 9.5 演示视频 / 286
- 例 10.1 视频演示 / 309

# 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多指稳态模拟，本书介绍如何运用 Aspen Plus 进行稳态模拟以及动态模拟入门。

过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。模拟涉及的化工过程中的数据一般包括进料的温度、压力、流量、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，因而给了化工过程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，过程模拟不仅可节省时间，也可节省大量资金和操作费用；同时过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流程的开发研究、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过程模拟软件，高等院校也纷纷引进化工过程模拟软件，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)生产装置调优、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，通过过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输入，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、化工单元模块库、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模块库和热力学方法库，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过程模拟软件。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过程模拟软件，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过程模拟软件。

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过程模拟软件, 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。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。

Aspen Plus 主要由三部分组成, 简述如下。

### (1) 物性数据库

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热力学性质和传递性质的计算。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, 如灵敏度分析模块。利用灵敏度分析模块, 用户可以设置某一操纵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。

### (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。

## 1.2.2 Aspen Plus 主要功能

Aspen Plus 可用于多种化工过程的模拟, 其主要的功能具体有以下几种:

① 对工艺过程进行严格的质量和能量平衡计算;

② 可以预测物流的流量、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

## Aspen Plus入门

### 2.1 图形界面

#### 2.1.1 Aspen Plus 界面主窗口

Aspen Plus V8.0 及以上版本采用新的通用的“壳”用户界面，这种结构已被 Aspen Tech 公司的其他许多产品采用。“壳”组件提供了一个交互式的工作环境，方便用户控制显示界面。Aspen Plus 的模拟环境界面如图 2-1 所示。

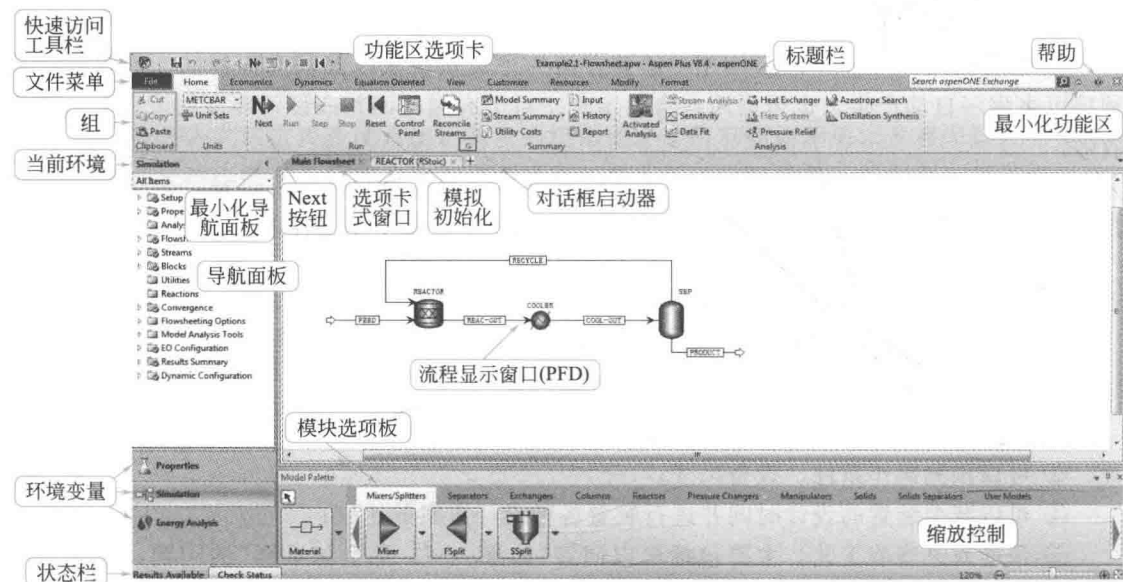


图 2-1 Aspen Plus 模拟环境界面

功能区(Ribbon)包括一些显示不同功能命令集合的选项卡，还包括文件菜单和快捷访

问工具栏。文件菜单包括打开、保存、导入和导出文件等相关命令。快捷访问工具栏包括其他常用命令，如取消、恢复和下一步。无论激活哪一个功能区选项卡，文件菜单和快捷访问工具栏总是可以使用的。

导航面板(Navigation Pane)为一个层次树，可以查看流程的输入、结果和已被定义的对象。导航面板总是显示在主窗口的左侧。

Aspen Plus 包含三个环境：物性环境、模拟环境和能量分析环境。其中，物性环境包含所有模拟所需的化学系统窗体，用户可定义组分、物性方法、化学集、物性集，并可进行数据回归、物性估算和物性分析；模拟环境包含流程和流程模拟所需的窗体和特有功能；能量分析环境包含用于优化工艺流程以降低能耗的窗体。

## 2.1.2 主要图标功能

Aspen Plus 界面主窗口中主要图标功能介绍见表 2-1。


图标	说 明	功 能
	下一步(专家系统)(Next)	指导用户进行下一步的输入
	开始运行(Run)	输入完成后,开始计算
	控制面板(Control Panel)	显示运行过程,并进行控制
	初始化(Reset)	不使用上次的计算结果,采用初值重新计算
	物流调谐(Reconcile Stream)	使输入变量与计算结果一致

## 2.1.3 状态指示符号

在整个流程模拟过程中，左侧的导航面板会出现不同的状态指示符号，其意义列于表 2-2。


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

## 2.1.4 Aspen Plus 专家系统 (Next)

Aspen Plus 中 Next()是一个非常有用的工具，其作用有：

- ① 通过显示信息，指导用户完成模拟所需的或可选的输入；

- ② 指导用户下一步需要做什么；
- ③ 确保用户参数输入的完整和一致。

表 2-3 所列为在不同情况下点击  的结果。

如果	使用“Next”
所在工作表输入不完整	提示所在工作表下用户未完成的输入信息
所在工作表输入完整	进入当前对象下的下一个需要输入的工作表
选择一个已经完成的对象	进入下一个对象或者运行的下一步
选择一个未完成的对象	进入下一个必须完成的工作表

## 2.2 Aspen Plus 自带示例文件

Aspen Plus 提供了多种不同类型的示例文件，可以帮助用户开发流程或学习如何使用 Aspen Plus 的功能。

当打开或导入一个文件时，点击窗口左侧 Aspen Plus V8.4 收藏夹，如图 2-2 所示，将出现几种示例文件夹，如表 2-4 所示。

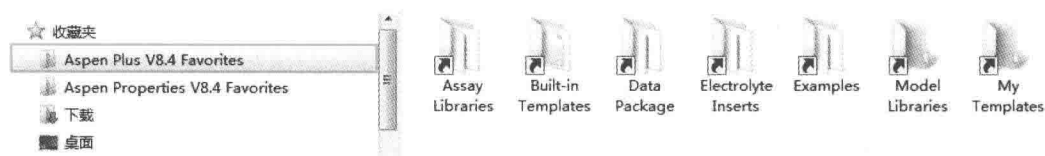


图 2-2 打开 Aspen Plus V8.4 收藏夹

表 2-4 示例文件夹

文件夹	描述
原油评价数据库 (Assay Libraries)	原油评价数据库包含来自世界各地的典型原油的评价数据,这些数据可用于原油模拟
内置模板 (Built-in Templates)	当启动 Aspen Plus 并选择从模板中建立一个新的流程,以及使用 <b>File   New</b> 命令时,模板都是可用的。模板已经设置了单位、流量基准、物流报告选项和其他全局设置,也可以包括组分、物性方法和其他规定
物性数据包 (Data Package)	将物性数据包导入到模拟中用于添加组分、物性方法、数据以及在某些工业过程中涉及的与化学组分相关的电解质化学或反应
电解质嵌入包 (Electrolyte Inserts)	电解质嵌入包与物性数据包相同,但强调电解质系统
案例 (Examples)	案例库包含了一些模拟文件,用于展示如何利用 Aspen Plus 解决过程工业中遇到的问题
测试文件 (Testprob. bkp)	该备份文件直接在收藏夹中生成,用于验证 Aspen Plus 已被正确安装
模型库 (Model Libraries)	应用该文件夹储存用户创建的模型库
我的模板 (My Templates)	应用该文件夹储存用户创建的模板文件

## 2.3 物性环境

下面以苯和丙烯反应合成异丙苯为例，介绍流程模拟的搭建步骤。

### 例 2.1



例 2.1  
演示视频

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,如图 2-3 所示。求产品(PRODUCT)中异丙苯的摩尔流量。物性方法选择 RK-SOAVE。

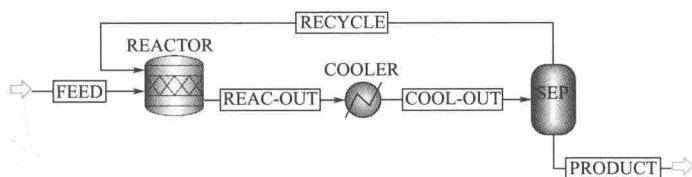


图 2-3 流程示意

原料物流 FEED 温度  $105^{\circ}C$ , 压力  $0.25MPa$ , 苯和丙烯的摩尔流量均为  $18kmol/h$ 。反应器 REACTOR 绝热操作, 压力  $0.1MPa$ , 反应方程式为  $C_6H_6 + C_3H_6 \rightarrow C_9H_{12}$ , 丙烯的转化率为  $90\%$ 。

冷凝器 COOLER 的出口温度  $54^{\circ}C$ , 压降  $0.7kPa$ ; 分离器 SEP 绝热操作, 压降为  $0$ 。本例模拟步骤如下:

#### 1. 启动 Aspen Plus

依次点击开始→程序→所有程序→Aspen Tech→Process Modeling V8.4→Aspen Plus→Aspen Plus 8.4, 点击 File | New 或者使用快捷键  $Ctrl+N$  新建模拟, 如图 2-4 所示。进入到模板选择对话框中, 系统会提示用户建立空白模拟(Blank Simulation)、使用系统模板(Installed Templates)或者用户自定义模板(My Templates...)

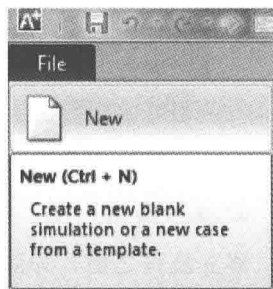


图 2-4 新建模拟

模板设定了工程计算通常使用的缺省项, 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、自由水选项默认设置、物性方法以及其他特定的应用。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。

表 2-5 列出了内置模板可供选择的单位集, 其中, ENG 和 METCBAR 分别为英制单位模板和公制单位模板默认的单位集。

选择 Chemical Processes | Chemicals with Metric Units 或者选择 Chemical Processes | Specialty Chemicals with Metric Units, 在右侧“Preview”窗口会显示两种模板的不同物流报告基准和不同压力、体积流量和能量单位, 如图 2-5 所示。



表 2-5 可供选择的单位集

单位集	温度	压力	质量流量	摩尔流量	焓流	体积流量
ENG	F	psia	lb/hr	lbmol/hr	Btu/hr	Cuft/hr
MET	K	atm	kg/hr	kmol/hr	Cal/sec	l/min
METCBAR	C	bar	kg/hr	kmol/hr	MMkcal/hr	cum/hr
METCKGGM	C	kg/sqcm	kg/hr	kmol/hr	MMkcal/hr	cum/hr
SI	K	n/sqm	kg/sec	kmol/hr	watt	cum/sec
SI-CBAR	C	bar	kg/hr	kmol/hr	watt	cum/hr

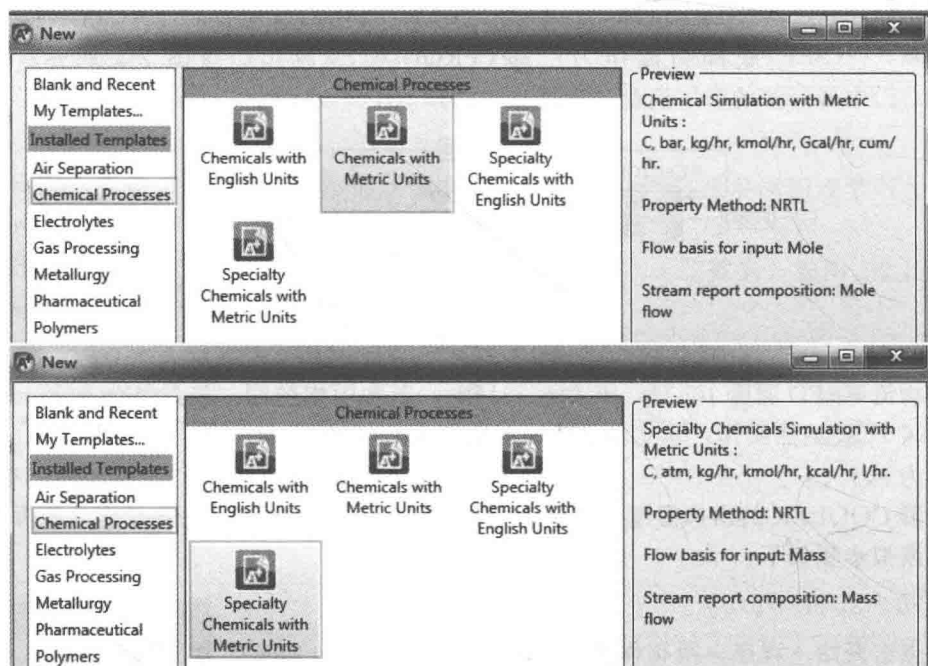


图 2-5 选择不同模板

本例选择空白模拟(Blank Simulation)，然后单击 **Create** 按钮，如图 2-6 所示。

## 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。单击 **File | Save As**，选择保存文件类型、存储位置，命名文件，单击**保存**即可，如本题文件保存为 Example2.1-Flowsheet.bkp。

系统设置了三种文件保存类型，其中 \*.apw(Aspen Plus Document)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(Aspen Plus Backup)格式是 Aspen Plus 运行过程的备份文件，采用 ASCII 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(Compound File)是综合文件，采用二进制存储，包含模拟过程中的所有信息。本题选择保存为 \*.bkp 文件。

系统默认保存文件类型是 \*.apwz，可在 **File | Options | Files** 页面进行修改，如图 2-7 所示。