

WILEY

# 无师自通

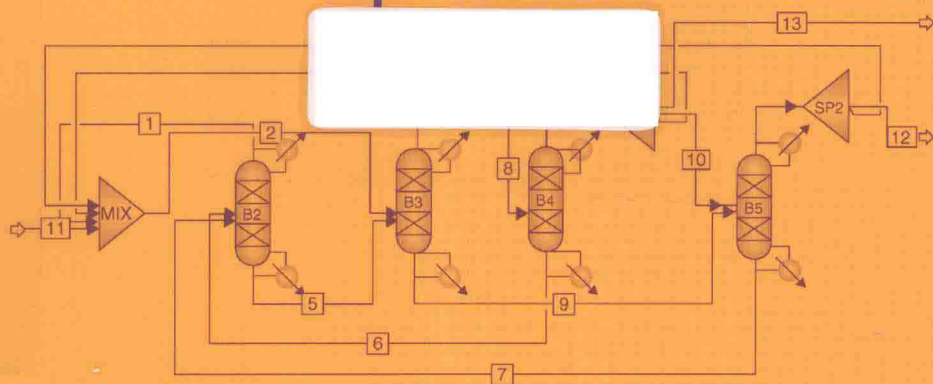
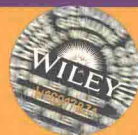
# Aspen Plus

## 基础

Aspen Plus软件  
零基础教程

[美] 拉尔夫·舍弗兰 (Ralph Schefflan) 著  
宋永吉 杨索和 何广湘 译

Teach Yourself  
the Basics of  
Aspen Plus



化学工业出版社

WILEY

Teach Yourself  
the Basics of  
Aspen Plus

**无师自通**

---

**Aspen Plus**

---

**基础**

[美] 拉尔夫·舍弗兰 (Ralph Schefflan) 著  
宋永吉 杨索和 何广湘 译



化学工业出版社

· 北京 ·

## 图书在版编目 (CIP) 数据

无师自通 Aspen Plus 基础/ [美] 拉尔夫·舍弗兰 (Ralph Schefflan) 著;  
宋永吉, 杨索和, 何广湘译. —北京: 化学工业出版社, 2015. 6

书名原文: Teach Yourself the Basics of Aspen Plus  
ISBN 978-7-122-23643-2

I. ①无… II. ①舍… ②宋… ③杨… ④何… III. ①化工过程-流程模拟-  
应用软件 IV. ①TQ02-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 075156 号

Teach Yourself the Basics of Aspen Plus, 1<sup>st</sup> edition/by Ralph Schefflan  
ISBN 978-0-470-56795-1

Copyright© 2011 by John Wiley & Sons, Inc. All rights reserved.

Authorized translation from the English language edition published by John  
Wiley & Sons, Inc.

本书中文简体字版由 John Wiley & Sons, Inc. 授权化学工业出版社独家出  
版发行。

未经许可, 不得以任何方式复制或抄袭本书的任何部分, 违者必究。

北京市版权局著作权合同登记号: 01-2014-0627

---

责任编辑: 徐雅妮 高 震  
责任校对: 边 涛

文字编辑: 刘志茹  
装帧设计: 王晓宇

---

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

710mm×1000mm 1/16 印张 12½ 字数 211 千字 2015 年 9 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: 45.00 元

版权所有 违者必究

首次接触《Teach Yourself the Basics of Aspen Plus》一书是在一次访问美国哥伦布州立大学 (Columbus State University) 期间, 该校一位教授推荐了此书, 仔细拜读后感觉该书确实有自己的特点, 非常适合化工类专业学生初学 Aspen Plus 软件使用。本书可供没有工程经验和 Aspen Plus 软件零基础的读者自学使用。

本书的特点是只讲解 Aspen Plus 最基本、最重要的知识点, 比如如何启动 Aspen Plus 软件、如何输入数据等, 对一些最基本的模块, 本书以案例为载体对一个主题设置了多个经常遇到的问题进行循序渐进地练习, 这种习题的组织方式特别适合初学者解决在 Aspen Plus 应用中经常遇到的疑问。本书对每道练习题还提供了简洁的注释, 并给出了解决问题的方案和解答步骤, 标记  的示例可通过网址 <http://download.cip.com.cn/html/20150714/316100442.html> 下载使用。

本书作者 Ralph Schefflan 一直是史蒂文斯理工学院 (Stevens Institute of Technology) 的兼职教授, 从事化工热力学、过程模拟等教学长达三十多年, 在其工作的霍夫曼·罗氏有限公司 (Hoffmann-LaRoche Ltd.), 他也一直致力于将过程模拟应用于工程实际, 作者丰富的工程实践经验也融入了本书。

本书第 1~10 章、第 12 章及第 14 章由宋永吉翻译, 第 11 章由宋永吉、何广湘翻译, 第 13 章由宋永吉、杨索和翻译, 全书由宋永吉统稿。很高兴能将本书翻译介绍给国内化工专业的学生和相关工业界同行, 鉴于译者对 Aspen Plus 的理解深度有限, 译著中难免会有不当之处, 请同行专家指教。

宋永吉

2015 年 3 月

作为化学工程师，在多年的实验室开发、工艺过程集成及装置开车和操作技术支持工作过程中，我最常使用的文件资料就是工艺流程图（PFD），它包含了物料和能量平衡以及基本的工艺过程设计信息。同样重要的是工艺和仪表流程图（P&ID），它包含了所有设备、控制、仪表和管线的详细信息（即工艺、仪表及应用）。过程模拟软件是一种能做出高质量工艺流程图（PFD）的软件，当其与计算机辅助设计软件结合时，很容易就会得到工艺和仪表流程图（P&ID）。在化工领域有几款过程模拟软件系统，其中 Aspen Plus 是公认最流行的。

《Teach Yourself the Basics of Aspen Plus》是我过去 20 多年在史蒂文斯理工学院教授两门研究生课程时逐渐形成的。第一门课程是稳态化工过程模拟导论，是研究生的选修课程，这门课程的组织形式是围绕着一系列的习题而开展的对 Aspen Plus 功能介绍，偶尔也会有本科生注册选修，但由于本科生知识的限制，在课程中经常会面临热力学相平衡和参数估算的困难。第二门课程涉及复杂平衡级过程设计及分析，其中包含诸如萃取精馏系统等难以应付的多塔问题。随着时间的过去，这门课程从采用单一的两相或三相的闪蒸、液液两相分离及两相精馏软件，逐渐演化到以 Fortran 编制的相应模块，直至发展到现在的 Aspen Plus。

编写本书的初衷源于我对学生学习这些课程的观察。我注意到经过初始阶段的努力学习，学生们如何一步一步启动软件、确定物料及给 Aspen Plus 输入数据后，在习题中靠自己就能通过练习继续地学习下去。对于每一个主题的学习，我只给他们讲一节基础课，举一些例子，然后在习题上对有需要的学生进行个别指导。整个课程中极少有不能完成所有习题的学生，本书就是以这种方式组织的。

如果你期望通过阅读本书自学来完全掌握 Aspen Plus，你也许会失望。Aspen Plus 是一个复杂的工艺过程模拟工具，以我的建议，学习的最好方法是通过经验传递，即努力完成每一个习题中的每一个练习，当遇到困难时就参考与本书配套的 examples and workshops，以及每章结尾所附习题部分的注释。

本书配套的 examples and workshops 包含了所有例题和习题的输入和答案。每章有一个根文件夹，其中的子文件夹命名为“例题（Examples）”和

“习题 (Workshops)”，每一个例题和习题提供了 Aspen Plus 格式文件 “.bkp” 和文本格式文件 “.txt”。“ .bkp” 文件按输入文件设置，可查看细节并且可以执行。“ .txt” 文件为答案且可以用 Notepad 查看而不需要借助 Aspen Plus。书中每章的参考材料以“子目录/文件名”方式命名，如 Chapter Four/Examples/Rubin，有些习题是采用较早版本的 Aspen Plus 开发的，运行时会出现提示信息，但是它们均在 7.0 版本的 Aspen Plus 成功执行过，并且都存储在史蒂文斯理工学院的服务器上。我建议在阅读本书时同时运行 Aspen Plus 来执行和查看每个例题。如果无条件运行 Aspen Plus，可以查看 “.txt” 文件的答案。

本书适用于本科生、研究生和化学工程师使用。本书的第一部分介绍软件的基本结构并引导学生了解软件的各种特性，目的是使学生能处理简单问题的输入设置，并介绍了“只有物料衡算选项”、“通过 Help 进入 Aspen Plus 说明文件”、“Next 按钮”、“菜单导航”和“报告功能”等特性。本书余下的部分按章节介绍各种特定类型的操作，例如两相闪蒸，每章附带相应的教学材料，包括描述求解方程、各种限制范围、潜在的错误来源和一套使学生练习特定科目并获得经验的习题，一些练习故意设置产生一些错误，学生需要分析才能完成。本书一些内容因为学生还没有学过的课程可能会受到影响（如涉及相平衡热力学的内容），但本书大部分适用于本科生，本科生可以不学习第 6 章和第 14 章的内容。第 6 章的内容涉及相平衡问题，其中用到许多常用的热力学方程，还有参数拟合知识，第 14 章涉及高级精馏问题。研究生和化学工程师遇到这些部分时，因为已有了本科时的平衡级操作知识和研究生的热力学课程基础，学习时就不会存在困难了。

本书的目的不是作为一本自学 Aspen Plus 所有功能的指导书，例如，关于一些反应器模块、间歇模块和电解质热力学的的内容，本书并没有覆盖到，许多没有述及的主题可以通过选择 Aspen Plus 一级显示窗口中的“帮助 (Help)”按钮找到。本书的原则是基于这样的思想：一旦一名化学工程师能熟练地使用这个软件并对基本模块有了深刻的理解，他（或她）就能学会按着课本中已经介绍的原则来使用许多没有述及的功能。也就是说，只要学习了化学工程教科书中描述有关问题的相应章节，你就能够通过阅读 Aspen Plus 的帮助文件，使自己熟悉相应功能并尝试解决相应的问题。例如，要理解 Aspen Plus 的电解质方法，就应该学习“Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibria”中的电解质平衡一节和 Aspen Plus 的帮助中相关内容，接着就是学习标题为“创建电解质组分 (Generating Electrolyte Components)”部分。

我已努力尽可能提供大多数模块的描述方程并提供了功能描述，如果没有提供则是因为软件的专有特点。大家知道，Aspen Plus 是专有软件，其源代码和执行细节是无法得到的，此外，通常有几种方法求解描述模块的方程，由于 Aspen Plus 不提供这方面的资料，所以没有办法弄清这些细节。

我要感谢 Aspen 技术支持小组提供的帮助，特别是 Aspen 工程部出借的单机版使用许可，使我不在美国时也能进入史蒂文斯理工学院服务器。

拉尔夫·舍弗兰

# | 目录 |                      | CONTENTS |

<b>第 1 章 Aspen Plus 介绍</b> .....	1
1.1 启动 Aspen Plus .....	2
1.2 图形用户界面 .....	3
1.3 “Next” 按钮 .....	4
1.4 设置规定显示 .....	4
1.5 模拟选项 .....	6
1.6 单位 .....	7
1.7 组分 .....	8
1.8 物性 .....	11
1.9 流股 .....	13
1.10 模块 .....	14
1.11 查看结果 .....	15
1.12 对象管理器 .....	16
1.13 结果绘图 .....	17
参考文献 .....	18
<b>第 2 章 物性</b> .....	19
2.1 纯组分数据库 .....	20
2.2 性质分析 .....	22
2.3 物性估算 .....	27
2.4 练习 .....	31
参考文献 .....	32
<b>第 3 章 简单模块</b> .....	33
3.1 混合器/分割器模块 .....	33
3.1.1 混合器模块 .....	33
3.1.2 分割器模块 .....	34
3.2 简单分离器模块 .....	35
3.2.1 Sep 模块 .....	35
3.2.2 Sep2 模块 .....	36
3.3 调节器模块 .....	38



3.3.1	复制器模块 .....	38
3.3.2	倍增器模块 .....	40
3.4	练习 .....	40
<b>第4章</b>	<b>循环过程 .....</b>	<b>44</b>
4.1	带有循环的模块 .....	45
4.2	启示 .....	48
4.3	练习 .....	48
	参考文献 .....	53
<b>第5章</b>	<b>流程与模型分析工具 .....</b>	<b>54</b>
5.1	Aspen Plus 中的 Fortran 简介 .....	55
5.2	Fortran 的基本功能 .....	55
5.2.1	基本 Fortran 算子 .....	55
5.2.2	计算优先权 .....	56
5.2.3	语句格式 .....	57
5.2.4	程序逻辑控制 .....	57
5.3	灵敏度功能 .....	57
5.4	设计规定 .....	60
5.5	计算器功能 .....	61
5.6	传递功能 .....	64
5.7	练习 .....	65
	参考文献 .....	67
<b>第6章</b>	<b>数据回归系统 .....</b>	<b>68</b>
6.1	状态方程参数 .....	69
6.2	活度系数方程参数 .....	70
6.3	回归的基本思路 .....	72
6.4	回归的数学方法 .....	74
6.4.1	求解非线性方程的牛顿-拉夫逊法 .....	74
6.4.2	目标函数的直接优化 .....	75
6.5	汽液相平衡和液液相平衡数据回归实例 .....	76
6.5.1	汽液相平衡数据回归 .....	77
6.5.2	液液相平衡数据回归 .....	79
6.6	练习 .....	82

参考文献 .....	85
<b>第 7 章 闪蒸与分水器 ( 倾析器 )</b> .....	<b>86</b>
7.1 Flash2 模块 .....	86
7.2 Flash3 模块 .....	90
7.3 分水器模块 .....	91
7.4 练习 .....	94
参考文献 .....	95
<b>第 8 章 压强变化</b> .....	<b>96</b>
8.1 泵模块 .....	96
8.2 压缩机模块 .....	97
8.3 多级压缩机模块 .....	98
8.4 管线与管件 .....	99
8.5 练习 .....	99
参考文献 .....	100
<b>第 9 章 换热器</b> .....	<b>101</b>
9.1 加热器模块 .....	102
9.2 换热器模块 .....	105
9.3 Mheatx 模块 .....	108
9.4 练习 .....	108
参考文献 .....	110
<b>第 10 章 反应器</b> .....	<b>111</b>
10.1 计量化学反应器模块 .....	111
10.2 产率反应器模块 .....	113
10.3 平衡反应器模块 .....	114
10.4 吉布斯反应器模块 .....	116
10.5 严格模型反应 .....	117
10.5.1 平衡类 .....	118
10.5.2 幂定律类 .....	118
10.5.3 朗缪尔-谢尔伍德-赫根-沃森类 .....	120
10.5.4 通用朗缪尔-谢尔伍德-赫根-沃森类 .....	121
10.6 全混釜式反应器模块 .....	122
10.7 平推流反应器模块 .....	122

10.8 间歇反应器模块	124
10.9 练习	126
参考文献	129
<b>第 11 章 多级平衡分离</b>	<b>130</b>
11.1 基本方程	130
11.2 设计问题	133
11.3 三个产品的精馏塔示例	137
11.4 初步设计和校核(评估)模型	139
11.4.1 简捷计算模块	139
11.4.2 Distl 模块	141
11.5 严格模型	141
11.5.1 严格精馏模块	142
11.5.2 萃取模块	149
11.6 间歇精馏模块	150
11.7 练习	153
参考文献	155
<b>第 12 章 工艺流程开发</b>	<b>156</b>
12.1 启示	156
12.2 示例: 苯乙烯的生产	157
12.3 基于基本模块的模型	158
12.4 性质	158
12.5 严格闪蒸和分水器	160
12.6 严格精馏分析	161
12.7 将严格精馏集成进流程图	162
12.7.1 撕裂流股的选择	162
12.7.2 计算顺序	164
12.8 反应器进料	165
12.9 其它考虑	165
12.10 练习	165
参考文献	169
<b>第 13 章 优化</b>	<b>170</b>
13.1 优化示例	171

13.2 练习 .....	173
参考文献 .....	176
<b>第 14 章 复杂平衡级分离 .....</b>	<b>177</b>
14.1 能量集成应用 .....	177
14.2 均相共沸精馏 .....	179
14.3 萃取精馏 .....	180
14.4 非均相操作 .....	183
14.5 练习 .....	184
参考文献 .....	188

# 第 1 章

## Aspen Plus 介绍

---

Aspen Plus 是基于多年前化学工程师采用的解决流程图方法，当时计算机程序刚刚被采用，而且解决的是单一变量，通常只用于设计单个装置。即使是最简单而且没有循环的流程图的求解，工程师也只能一次设计一个单元，然后人工将前一个装置的设计结果作为流程图中下一装置的输入值。当需要处理循环问题时，在开始计算时需要给出循环的一个假设值，当循环中最后一个单元的计算值与假设值一致时计算结束，这一过程涉及许多重复性工作并且不能保证收敛。上述过程通过对单元装置建立校核（评估）模型（而不是设计模型）得到不断改进，这些校核模型可以通过软件相互连接起来，软件仿效前面的步骤并且采用强大的数学方法使过程循环参数收敛。这类系统称为序贯模块模拟器（sequential modular simulator），这类软件中一个极好的例子就是孟山都公司的 Flowtran（1974），实际上 Aspen Plus 就是以此为内核发展起来的。

后来，Aspen Plus 迅速发展起来并具有许多先进功能，尽管它仍旧基于序贯模块模拟器法，但是它把各种专用软件连接起来，如换热器设计、动态模拟、间歇过程模拟以及许多其它功能。对于某些模块它使用基于公式的方法，这使过程模拟中使用设计规定更加方便。

Aspen 工程套件（Aspen Engineering Suite）与 Aspen Plus 配合，可以通过多种方式进行网络服务器安装或单机安装。安装可以由用户借助 Aspen 公司提供的安装工具自己来完成，也可以由 Aspen 公司的信息技术部负责安装。这种服务是一次性的，在未来有新版本发布时，通常每年维护一次。用户安装无论是通过网络下载还是通过安装盘完成，都应该选择必要的模块来进行 Aspen Plus 的最小安装，并且安装需要的附件和相关文件，其它的模块没有必要安装。

## 1.1 启动 Aspen Plus

当点击桌面上 Aspen Plus 用户界面图标，或者从开始菜单依次点击“所有程序/Aspen Tech/Process Modeling V7.0/Aspen Plus/ Aspen Plus User Interface”时，就会显示如图 1.1 所示的 Aspen Plus 的启动显示界面。

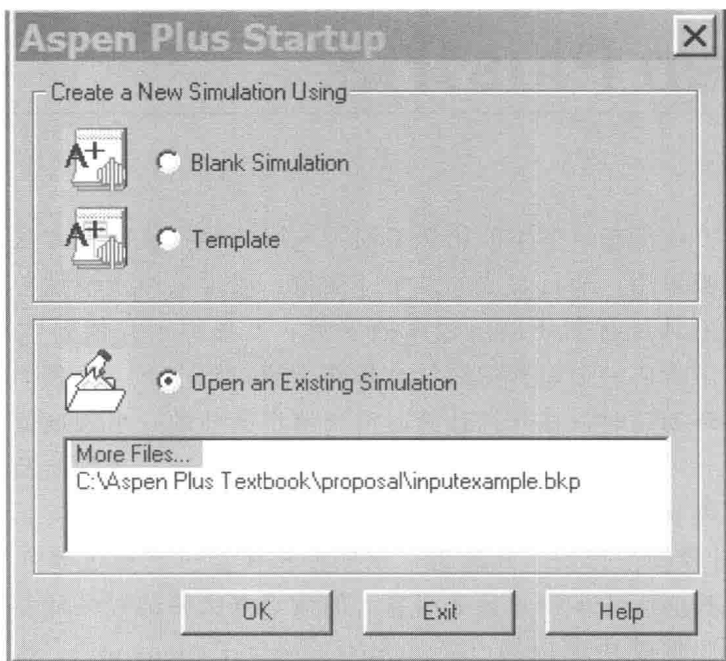


图 1.1 启动 Aspen Plus

也可以从已有的应用列表中做出选择，或者通过选择相应的单选按钮来选择已经存储的文件。如果选择了“模板 (Template)”按钮，会出现一个面向应用的选项列表 (见图 1.2)，在显示界面的右下角的“运行类型 (Run Type)”选项框内出现流程图选项，也可以从其下拉菜单中得到其它选项。

如果选择“空白模拟 (Blank Simulation)”，用户可以自行设置相应的应用。当选择了希望的选项并点击“OK”后，就会出现“Connect to Engine”屏幕，选择“OK”后，如果选择的是“Flowsheet”就会出现一个空白的图形用户界面，如果选择的是其它选项，就会出现首先需要输入的表格。

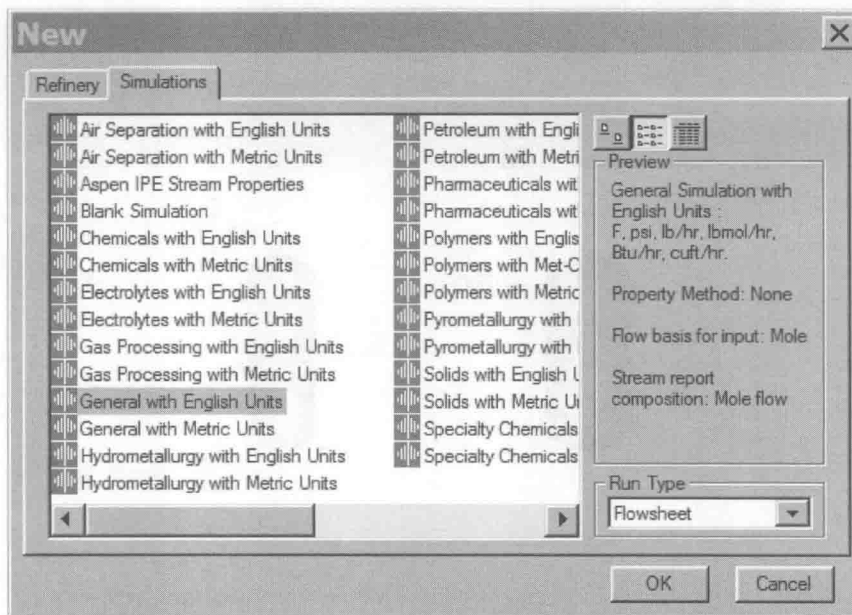


图 1.2 预置选项

## 1.2 图形用户界面

图形用户界面 (GUI) 是一种定义流程图的方法, 其过程是在工作空间放置模块和物流流股并将它们连接起来。Aspen Plus 给每个模块分配一个属性名称, 如 B1, 用户可以通过右击相应的单元并利用出现的菜单来改变这些名称。可以通过模型库的目录标签来选择模块, 例如要选择“Mixers/Splitter”, 就点击代表目标模块的图标, 点击后在打开的显示区域出现一个可移动的“+”号, 当将其在屏幕上定位后左击即可放置这个模块, 这时“+”号还会保留, 可以通过移动再插入另一个相同的模块, 当选择左下方的箭头按钮时这个功能就停止了。用同样的方式可以在流程图上放置流股, 可选择的流股包括物流、热流和功流。当选择了一个流股的输入并将箭头移进工作空间后, 就会出现连接这个流股的接口, 通过移动活动的箭头到打开的接口并点击就可以进行连接, 图 1.3 是一个将流股连接到接口上的示例。

所有的图标、模块名和流股名都可以用标准的窗口技术来选择和移动, 类似地, 流股可以移动、变更路径、拆解和再连接。选择并右击任何一个目标就会出现一个菜单, 它提供了许多处理图形的有用功能, 其中包括改变图标、旋转物体、重命名、删除和排列图形。

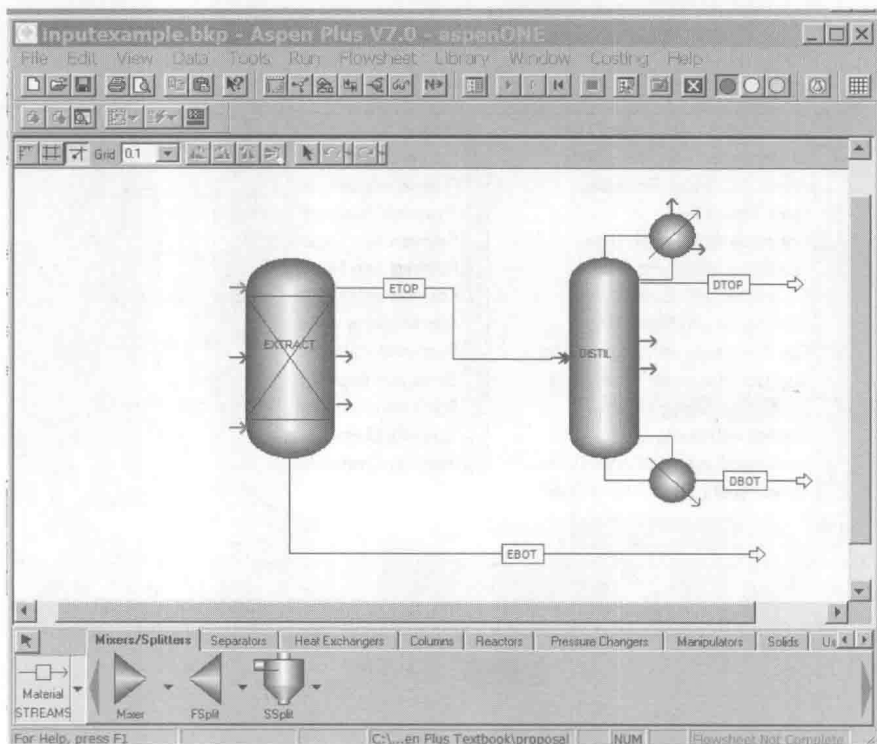


图 1.3 连接流股

### 1.3 “Next” 按钮

Aspen Plus 为用户提供一种按顺序填报表格的机制，在任一点当流程图在图形用户界面（GUI）充分定义后，用户都可以选择“Next”按钮，在所有表格上它都显示成“N→”。要移动到下一表格就需要用到“Next”按钮，有时当使用了“Next”按钮后，Aspen Plus 会提示用户选择要执行的动作。“Next”按钮只提供需要的最小输入，例如，在模拟中如果选择了一个活度系数方程，Aspen Plus 会采用一个缺省的数据源，如汽-液相平衡（VLE）数据源，但是如果模拟涉及的是液-液相平衡（LLE），这就需要用户自己来选择相应的数据源，Aspen Plus 不会通过“Next”按钮自动打开相应的显示。

### 1.4 设置规定显示

通过图形用户界面（GUI）定义了流程图以后，点击“Next”按钮会出现“设置规定-数据浏览器（Setup Specification-Data Browser）”显示窗口，数据浏览器显



示面板会出现各种可选择的目录列表并可以输入相应的数据。如果在显示窗口的左侧面板没有出现设置信息，选择上部菜单中的“Data/Setup”就会出现数据浏览器面板，见图 1.4。如果在图 1.4 的底部没有出现过程模型图标列表，点击“View”菜单并勾选“模型库 (Model Library)”选项，就会出现模型图标显示。

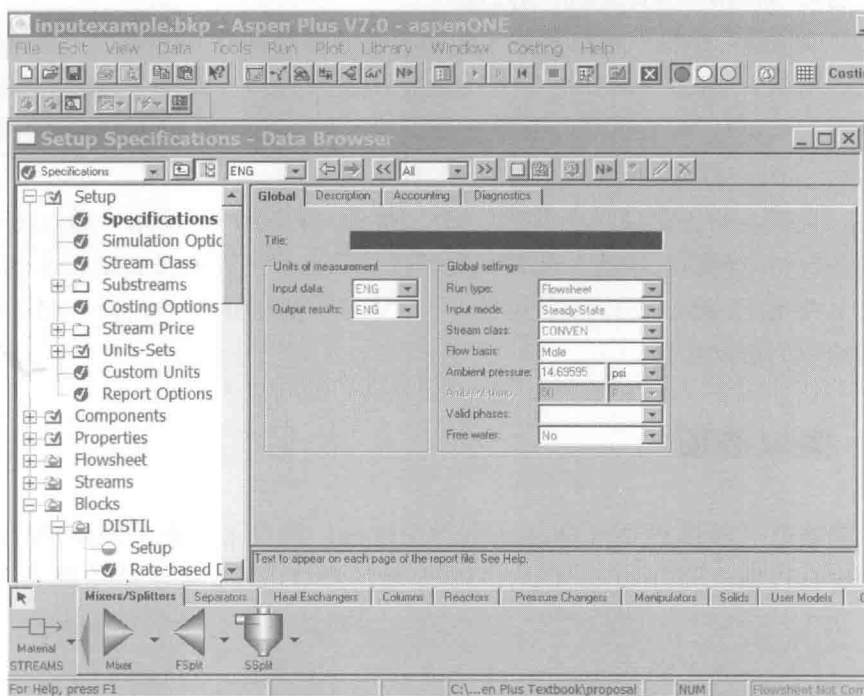


图 1.4 数据浏览器的设置规定

当启动一个问题时，“设置规定 (Setup Specification)”会显示一个下拉菜单及相应的“运行 (Run) 类型”选择框，其中给出了 Aspen Plus 的 6 个基本功能：

- ① 数据回归：将数据拟合成模型。
- ② 流程图：过程模拟。
- ③ 物性显示：显示 Aspen Plus 数据库中一个组分的物性。
- ④ 物性分析：估算物性和热力学性质。
- ⑤ 化验数据分析。
- ⑥ 物性扩展功能。

最后两个功能在此不予考虑。对于特定的需求，用户要选择相应的功能来初始化数据输入。

需要注意的是，“数据浏览器 (Data Browser)”面板中，紧挨着每个项