

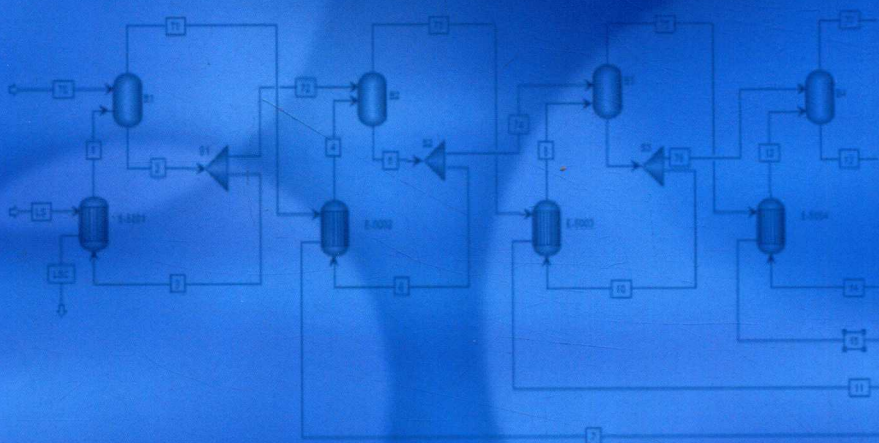
高等教育规划教材

卓越 工程师教育培养计划系列教材
ZHUOYUE GONGCHENGSHI
JIAOYU PEIYANG JIHUA XILIE JIAOCAI

包宗宏 武文良 ◎ 主编

化工计算与软件应用

HUAGONG JISUAN
YU RUANJIAN YINGYONG



化学工业出版社

高等教育规划教材

卓越工程师教育培养计划系列教材

包宗宏 武文良 ◎ 主编

化工计算与软件应用

第二版



化学工业出版社

· 北京 ·

《化工计算与软件应用》(第二版)以 Aspen Plus 及其系列软件为计算工具,以实例为线索,介绍化工计算过程中的基本原理、计算方法与解题技巧。全书共分 6 章,第 1 章介绍模拟软件用于物性数据的查询与估算、相平衡模拟、实验相平衡数据处理;第 2 章介绍稳态条件下各种化工过程的模拟方法;第 3 章介绍节能技术在化工分离过程中的应用;第 4 章介绍化工设备的工艺计算;第 5 章介绍化工过程的动态控制模拟;第 6 章介绍间歇反应、间歇精馏、吸附过程、色谱过程和模拟移动床吸附的间歇过程模拟;案例部分介绍了 4 个综合化工过程的工业装置流程模拟。部分例题可通过扫描二维码阅读。书后附录中有综合过程数据包“Datapkg”和电解质过程数据包“Elecins”中的物性数据文件简介,供读者参考。

《化工计算与软件应用》(第二版)可作为高等学校化工类专业本科生与研究生的教学参考书,也可供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

化工计算与软件应用/包宗宏,武文良主编.—2 版.—北京:化学工业出版社,2018.3
高等教育规划教材 卓越工程师教育培养计划系列教材
ISBN 978-7-122-31528-1

I. ①化… II. ①包…②武… III. ①化工计算-应用软件-高等学校-教材 IV. ①TQ015.9
中国版本图书馆 CIP 数据核字(2018)第 031443 号

责任编辑:杜进祥 何 丽
责任校对:边 涛

文字编辑:丁建华 马泽林
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:三河市双峰印刷装订有限公司

787mm×1092mm 1/16 印张 24½ 字数 645 千字 2018 年 8 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:56.00 元

版权所有 违者必究

前言

本书自第一版发行以来,受到许多高校本科生、研究生和企业工程技术人员的欢迎,许多读者对本教材表达了肯定。随着 AspenOne 工程套装软件在化工专业课程教学、课程设计以及设计竞赛活动中应用的普及与深入,对模拟软件在应用范围和应用深度方面的需求也日益显现。

为顺应这一需求,在保持编写风格一致的基础上,对第一版教材的各章内容进行了一定的改写,把第一版教材的第 5 章内容改为“工业装置流程模拟案例”放第 6 章后,新增加了第 5 章“过程的动态控制”和第 6 章“间歇过程”。同时,根据行业进展情况,对第一版教材的部分内容进行了适当调整,配有二维码,部分例题及案例可通过扫描二维码阅读。

本书共分 6 章,第 1 章介绍 Aspen Plus 软件和热力学数据搜索引擎 NIST-TDE 工具软件用于化工物性数据查询、基础热力学性质估算与应用、实验相平衡数据处理。第 2 章介绍稳态条件下各种化工过程的模拟方法,包括简单物理过程、含化学反应过程、含循环物流过程和分离复杂组成混合物的流程模拟。第 3 章介绍节能技术在化工分离过程中的应用,包括 Aspen Energy Analyzer 软件在热集成网络分析过程的应用、蒸汽优化配置、多效蒸发过程、各种节能精馏过程等。第 4 章介绍化工设备的工艺计算,包括采用 Aspen Plus 软件进行塔设备、反应器、流体输送设备的工艺设计,采用 Aspen EDR 软件进行管壳式换热器设计,采用 Aspen MUSE 软件进行板翅式换热器设计。第 5 章介绍了 Aspen Plus Dynamics 软件在化工过程动态控制中的应用方法,包括储罐的液位控制、反应器的换热控制、单一精馏塔和耦合精馏塔的控制、动态换热器与精馏塔联合控制等。第 6 章介绍了 3 个 Aspen 系列软件的使用方法,包括 Aspen Batch Modeler 软件在间歇反应、间歇精馏过程中的应用,Aspen Adsorption 软件在吸附过程中的应用,Aspen Chromatography 软件在色谱过程和模拟移动床吸附过程中的应用。案例部分介绍了 4 个综合化工过程的工业装置流程模拟,包括环己烷-环己酮-环己醇混合物的高效分离过程、丙烯腈工艺废水四效蒸发浓缩过程、硫黄制酸过程和从醚后 C₄ 烃中提取高纯异丁烯过程。

本书工业装置流程模拟案例中案例一由南京中图数码科技有限公司范会芳编写,其余章节由南京工业大学包宗宏、武文良编写。南京英斯派工程技术有限公司的谢佳华为第 1 章纯物质热力学性质估算提供了新的案例与模拟方法,已毕业研究生汤磊为第 5 章过程的动态控

制提供了参考资料，南京凯通粮食生化研究设计有限公司的吴鹏对第 6 章的“6.5 节模拟移动床吸附”提供了编写建议。本书在修订过程中，许多使用本教材的高校教师、阅读本教材的学生和企业工程设计人员以不同方式、通过不同途径对教材内容提出了宝贵的修改建议。在此对以上人员致以衷心的感谢。

本书可以作为化学化工类专业高校本科生的化工计算、化工软件课程或相近课程的教材，也可作为化工课程设计、化工本科毕业设计、化工设计竞赛培训等的参考用书以及化工类研究生相关课程的选修教材。本书作为中高级 Aspen Plus 及其系列软件的学习教材，对从事化工过程开发与设计的工程技术人员也有一定参考价值。

由于编者的水平所限，书中疏漏难免，敬请读者批评指正。

编者
2018 年 3 月

第一版前言

化工计算是化学工程与工艺专业学生的一门专业技术课程，一般包括物性数据的查询与估算、物料衡算和热量衡算、设备工艺计算、稳态过程的物料与能量联合衡算等。化工计算的目的，一是取得设备设计所需要的数据，二是为流程单元操作的调节和生产过程的控制提供依据，三是掌握原材料消耗量，中间产品和产品的生成量，估计能量以及水、电、蒸汽等动力消耗以及对生产操作进行经济分析。在化工厂设计时，化工计算是工厂或车间设计由定性规划转入定量计算的第一步；在现有装置进行技术改造时，对存在问题进行评价和对生产流程的经济性评价也是必不可少的。开设化工计算课程，可以训练学生的运算能力以及将化工专业理论知识运用于工程实际的能力。

化工过程涉及的计算问题大多较繁杂，求解大型非线性方程组、常微分方程组或偏微分方程组、大型矩阵等司空见惯。例如，对含 C 个组分的混合物进行绝热闪蒸计算时，涉及的 Jacobian 偏导数矩阵共有 $(2C+2)^2$ 个元素，每个元素都要进行超越函数的偏导数计算。又比如用 Naphtali-Sandholm 同时校正法计算含 C 个组分、 N 块理论板的精馏塔时，需要求解 $N(2C+3)$ 维非线性方程组。这些计算工作量巨大，手工难以完成。

根据计算工具的发展沿革，化工计算课程的发展可以划分为三个阶段：20 世纪 70 年代以前，化工计算的工具是计算尺，借助于这些原始计算工具，人们可以对一些简化、理想的数学模型进行求解，再借助于实际工作经验，工程师们进行化工厂的设计计算；20 世纪 70 年代以后，小型、微型数字计算机开始普及，人们可以自己动手编制一些小型的、独立的汇编语言程序，求解一些复杂一点的、手工难以计算的化工计算问题，比如固定床反应器的温度分布、泡点法精馏塔核算等。在此阶段，编制计算程序往往依赖个人的知识与经验，编制的程序也缺乏普遍性，只适用于个例；20 世纪 80 年代以后，美国、加拿大、英国的一些公司开发了基于流程图的过程稳态、动态模拟软件，这些软件经过不断的发展、更新、融合，功能越来越强大，应用范围越来越广泛，准确性、实用性越来越好，其中最具代表性的软件是美国 AspenTech 公司的 Aspen Plus 化工流程模拟软件。

古人说，“工欲善其事，必先利其器”。化工流程模拟软件就是化工计算的有力利器，它用严格和最新的计算方法，提供近似准确的单元操作模型，进行单元和全过程的计算，还可以评估已有装置的优化操作或新建、改建装置的优化设计。软件系统功能齐全，规模庞大，可应用于化工、炼油、石油化工、气体加工、煤炭、医药、冶金、环境保护、动力、节能、食品等许多工业领域。可以毫不夸张地说，使用模拟软件的水平，反映了一个人化工计算能力的高低。

化学工程与工艺专业的大四年级本科生、参加卓越工程师教育培养计划的学生已经学完

了专业基础课程和部分专业课程,对化学工程的基础理论知识已有一定的掌握,但综合应用各门课程的知识去研究、分析实际化工问题仍需要一定训练,化工计算是一个很好的训练途径,同时又是一项实用的专业技能。针对此背景,本书以 Aspen Plus 及其系列软件为计算工具,以实例为线索,侧重于介绍如何应用化工专业知识结合软件求解化工计算中的一般问题,包括化工物性数据、相平衡数据的查询与估算、物料衡算与能量衡算、节能分离技术应用、设备工艺计算、综合流程模拟等内容。

书中的例题与习题部分来源于编者为本科生、研究生讲授化工原理、化工分离工程、化工设计等课程准备的例题与习题,部分取材于编者指导本科生、研究生毕业论文的课题,部分取材于编者指导在校生参加全国大学生化工设计大赛提交的作品。这些例题与习题涵盖了化工设计过程中常见的一般计算问题,读者可以在学习例题、完成习题的基础上举一反三,以解决化工设计、技术改造中的其他问题,提高自己的化工工艺设计能力。

本书编写过程中,注意把物理化学、化工原理、化工热力学、化学反应工程、分离工程、化工设计等先修课程的专业知识与软件解题过程相结合,灵活应用这些知识对软件解题过程中、解题完成后的数据进行分析,以提高读者分析问题与解决问题的能力。学习一个软件的操作并不难,而正确使用软件并不容易。把所学的化工专业知识用于软件的操作过程、对软件中间计算数据分析、对计算结果正确性的评判,这才是难点所在。

本书以 Aspen Plus 及其系列软件为计算工具,以化工过程实例为线索,介绍化工计算中的基本原理、计算方法与解题技巧。全书共分 5 章,第 1 章介绍化工物性数据、相平衡数据的查询、估算与数据处理方法;第 2 章介绍化工过程物料衡算与能量衡算方法;第 3 章介绍节能技术在化工分离过程中的应用;第 4 章介绍化工设备的工艺计算;第 5 章介绍工业装置流程模拟方法。书后附录中有 Aspen Plus 物性术语对照表、综合过程数据包“Datapkg”和电解质过程数据包“Elecins”中的物性数据文件简介,以供读者在解题或在扩展学习中查询、应用。本书第 5 章的 5.2 节由南京中图数码科技有限公司范会芳编写,其余章节由南京工业大学包宗宏、武文良编写,在读研究生张少石、张杰等编译了附录 1,在读研究生汤磊对书稿进行了校验。

本书不仅可以作为高校本科生、参加卓越工程师教育培养计划学生的化工计算教材,也可作为化工类研究生的选修教材,还可作为中级 Aspen Plus 及其系列软件的学习教材,对从事化工过程开发与设计的工程技术人员也有一定参考价值。由于编者的水平所限,书中错误难免,敬请读者批评指正。

编 者

2013 年 3 月于南京

目 录

第1章 物性数据和相平衡数据的查询与估算 / 1

1.1 化工物性数据的查询	1
1.1.1 从文献中查找	1
1.1.2 从 Aspen Plus 软件数据库中查找	2
1.1.3 用 NIST-TDE 热力学数据搜索引擎 查找	3
1.1.4 物性查询举例	4
1.2 纯物质的物性估算	7
1.2.1 基础物性常数	7
1.2.2 与温度相关的热力学性质	8
1.2.3 与温度相关的迁移性质	8
1.2.4 纯物质物性估算举例	9
1.3 混合物的物性估算	17
1.3.1 估算热力学性质的模型	17
1.3.2 估算传递性质模型	18
1.3.3 混合物的物性估算举例	18
1.4 相平衡数据查询、计算与参数 估算	23
1.4.1 从相平衡数据手册中查询	23
1.4.2 从 NIST-TRC 软件数据库中查询	24
1.4.3 用软件计算相平衡数据与绘制 相图	27
1.4.4 溶液活度系数方程参数估算	39
习题	50
参考文献	52

第2章 稳态过程的物料衡算与能量 衡算 / 54

2.1 衡算方法	54
----------------	----

2.1.1 基本概念	54
2.1.2 衡算方程式	54
2.1.3 衡算的基本步骤	55
2.1.4 用软件进行物料衡算与能量衡算的 要点	56
2.2 简单物理过程	59
2.2.1 混合过程	59
2.2.2 汽化过程	62
2.2.3 单级相平衡过程	63
2.2.4 机械分离过程	74
2.3 设备组合过程	76
2.4 含化学反应过程	79
2.4.1 含反应器的组合流程	79
2.4.2 反应精馏过程	83
2.4.3 化学吸收与解吸过程	87
2.5 含循环流过程	90
2.5.1 萃取精馏	91
2.5.2 变压精馏	96
2.5.3 非均相共沸精馏	101
2.5.4 反应器与精馏塔的组合流程	105
2.5.5 吸收塔、解吸塔与换热器的组合 流程	107
2.6 分离复杂组成混合物	111
习题	115
参考文献	121

第3章 节能分离过程 / 123

3.1 流体换热与热集成网络	123
3.1.1 冷热流体换热	123
3.1.2 热集成网络分析	125

3.2 蒸汽优化配置136

3.3 多效蒸发139

3.4 精馏过程143

3.4.1 多效精馏.....143

3.4.2 热泵精馏.....147

3.4.3 热耦精馏.....151

3.4.4 中段换热精馏.....157

习题166

参考文献.....173

第4章 设备工艺计算 / 174

4.1 塔设备174

4.2 换热器180

4.2.1 管壳式换热器.....180

4.2.2 板翅式换热器.....196

4.3 反应器.....202

4.3.1 釜式反应器.....202

4.3.2 管式反应器.....206

4.4 流体输送设备211

习题213

参考文献.....217

第5章 过程的动态控制 / 218

5.1 常用控制器模块219

5.2 储罐的液位控制220

5.2.1 常规液位控制结构.....220

5.2.2 越权液位控制结构.....232

5.2.3 含外部复位反馈功能的越权液位控制结构.....235

5.3 反应器的换热控制.....237

5.3.1 全混流反应器.....238

5.3.2 平推流反应器.....246

5.4 单一精馏塔控制258

5.4.1 判断灵敏板位置.....258

5.4.2 确定设备尺寸.....260

5.4.3 安装独立作用控制器.....261

5.4.4 安装串级作用控制器.....267

5.4.5 安装比例作用控制器.....270

5.4.6 几种控制结构的比较.....274

5.4.7 压差控制.....276

5.5 耦合精馏塔控制279

5.6 动态换热器与精馏塔联合控制.....287

习题298

参考文献302

第6章 间歇过程模拟 / 304

6.1 间歇反应304

6.1.1 釜式反应器.....305

6.1.2 反应动力学模型参数拟合311

6.2 间歇精馏.....313

6.2.1 恒定回流比操作.....314

6.2.2 变回流比操作.....322

6.2.3 均相共沸精馏.....329

6.2.4 非均相共沸精馏.....334

6.3 吸附过程.....338

6.3.1 固定床的吸附波、浓度波与透过曲线.....339

6.3.2 吸附实验数据拟合350

6.3.3 固定床变压吸附过程.....351

6.4 色谱过程.....358

6.4.1 色谱柱的流出曲线.....358

6.4.2 制备色谱分离.....362

6.5 模拟移动床吸附367

习题373

参考文献379

工业装置流程模拟案例/380

案例一 环己烷-环己酮-环己醇混合物的高效分离过程380

案例二 75t/h 丙烯腈工艺废水四效蒸发浓缩过程381

案例三 300kt/a 规模硫黄制酸过程381

案例四 从醚后 C₄ 烃中提取高纯异丁烯过程.....381

参考文献381

附录/383

附录 1 综合过程数据包 “Datapkg” 中物性数据文件简介383

附录 2 电解质过程数据包 “Elecins” 中物性数据文件简介384

第1章

物性数据和相平衡数据的查询与估算

化工物性数据与相平衡数据是化工计算的依据。在化工设计过程中,物性数据与相平衡数据的查询与估算是耗时最多的工作。能够熟练地查找、分析、处理、应用所需数据是化工专业人员的基本功之一。在实际化工计算中,涉及物性数据和相平衡数据的计算占有相当大的比重,有时甚至是整个计算过程的关键步骤。

化工物性数据内容很多,数量庞大,纯物质的物性数据一般可以归纳为以下5类:

- ① 基础物性,如沸点、临界常数、偏心因子、三相点、凝固点等不随温度变化的性质;
- ② 参考状态性质,如标准生成自由焓、标准生成自由能;
- ③ 与温度相关的热力学性质,如蒸气压、汽化热、液体摩尔体积、焓、熵、热容等;
- ④ 化学反应与热化学数据,如反应热、生成热、燃烧热、反应速率常数、活化能、化学平衡常数等;
- ⑤ 与温度相关的传递性质,如等张比容、液体黏度、液体热导率、表面张力、扩散系数等。

以上②~⑤类数据必须知道系统的温度、压力,然后通过计算(函数关系式)或插值(表列数据)才能得到。混合物的物性数据往往需要在纯物质物性数据的基础上由合适的混合规则计算得到。

相平衡数据有两个来源,一是通过相平衡实验获得数据,经过上百年的积累,已经有了相当数量的气(汽)液、液液、固液、气固等相平衡的实验数据,一般都以数据列表的形式存在;二是通过合适的状态方程进行计算,状态方程的参数一般由相平衡实验数据回归得到,且各种状态方程对物系类型有一定的适应性,需要使用者能够正确选择使用。

1.1 化工物性数据的查询

1.1.1 从文献中查找

前人对各种常见物质的物性数据已经进行了系统的归纳总结,一般以公式、表格或图形的形式表示,可以从有关化学化工物性数据的专著、手册、百科全书等工具书中查询。

1.1.1.1 中文工具书

(1)《化工辞典》 王箴主编,化学工业出版社出版。中型化工工具书,1969年首次出版,目前最新版本是2014年的第5版,改由姚虎卿、管国锋主编,共收词16000余条。正文词条按汉语拼音字母顺序排列,有英文名称和英文索引。

(2)《石油化工基础数据手册》 卢焕章主编,化学工业出版社1984年出版。共两篇,第一篇介绍各种化工介质物理、化学性质和数据的计算方法,第二篇将387个化合物的各种

数据列成表格，以供查阅。这些数据包括临界参数及其在一定温度压力范围内的饱和蒸气压、汽化热、热容、密度、黏度、热导率、表面张力、压缩因子、偏心因子等 16 个物理参数。

1993 年化学工业出版社出版了由马沛生主编的《石油化工基础数据手册（续编）》，续编包括 552 个新化合物的 21 项物性。

(3)《化学工程手册》 《化学工程手册》编辑委员会编，化学工业出版社出版。第 1 版共 26 篇，于 1980~1989 年按篇分册出版，1989 年又分 6 卷合订出版。第 2 版由时钧、汪家鼎、余国琮、陈敏恒主编，分上、下两册于 1996 年出版，篇幅较第 1 版做了压缩，共 29 篇，另有附录及索引。

(4)《化工百科全书》 化学工业出版社 1991~1998 年出版，正文 19 卷，索引 1 卷，全书 4800 多万字，是一套全面介绍化学工艺各分支的主要理论知识和实践成果，并反映化学工业及其相关工业的技术现状与发展趋势的大型专业性百科全书，由陈冠荣等 4 位院士主编。收录主词条达 800 余条，按条目标题的汉语拼音顺序编排，方便读者检索。

1.1.1.2 外文工具书

(1)“Perry’s Chemical Engineer’s Handbook” 美国 McGraw-Hill 公司 1934 年首次出版后，至 2008 年已出版了 8 个版本。手册中包含大量的化工信息和数据，包括化工基本原理、基础数据、化工工艺、化工设备和计算机应用。在基础数据部分，包含各种物质的物理和化学数据、临界常数、热力学性质、传递性质、热学性质、安全性质等各种数据表和图。

(2)“CRC Handbook of Chemistry and Physics” 美国 CRC Press 公司 1913 年首次出版，含有约 20000 种物质的准确可靠和最新的化学物理数据。几乎逐年进行修订再版，后来又改为每两年再版一次，内容不断扩充更新。目前最新的版本为 2017 年出版的第 98 版。

(3)“Lange’s Chemistry Handbook” 美国 McGraw-Hill 公司 1934 年首次出版，目前最新版本是 2004 年出版的第 16 版，由 J G Speight 主编。本书是供化学及相关学科使用的单卷式化学数据手册，第 16 版中包含约 4400 种有机化合物、1400 种无机化合物的物性数据。

(4)“Kirk-Othmer Encyclopedia of Chemical Technology” 美国 John Wiley & Sons Inc 公司出版，第 1 版于 1947~1960 年间出版，含正编 15 卷加 2 个补编。此后版本不断更新，目前最新版为第 5 版，2004~2007 年出版，共 26 卷加 1 卷补编。该书主要介绍各种化工产品的性质、制法、较新的经济资料、分析与规格、毒性与安全以及用途等有关内容。

(5)“DECHEMA Chemistry Data Series” 德国化工与生物技术学会（DECHEMA）编辑出版的系列化学化工数据手册。该系列手册中数据重点是化合物和混合物，尤其是流体相态的热物理性质数据，涵盖了 36500 个化合物和 124000 个混合物，且这些数据均经过分析、评估。该系列手册从 1977 年开始出版，目前已经出版了 13 卷，各卷内容见表 1-1。

表 1-1 DECHEMA 系列化学化工数据手册卷名

卷号	卷名	卷号	卷名
I	汽液平衡数据大全	IX	无限稀溶液的活度系数
II	纯物质的临界数据	X	流体混合物的热导率与黏度数据
III	混合热数据大全	XI	电解质溶液的相平衡与相图
IV	化合物和二元混合物推荐数据	XII	电解质数据大全
V	液液平衡数据大全	X IV	聚合物溶液数据大全
VI	低沸点混合物的汽液平衡数据大全	X V	复杂化学品的溶解度和相关性质
VIII	固液平衡数据大全		

1.1.2 从 Aspen Plus 软件数据库中查找

图书馆内关于化工物性数据的专著、手册、图册、教材琳琅满目，对于新加入化工领域

的学生来说, 查找物性数据往往耗时很多, 而使用化工过程模拟软件查找、计算、估算化工物性数据, 则为他们提供一条查找物性数据的快捷通道。即使是经验丰富的工程师, 掌握软件的物性数据查找、估算、计算功能, 也会对他们的设计工作提供一个事半功倍的利器, 大大提高工作效率, 成为他们设计工作中爱不释手的有力工具。

Aspen Plus 软件中的化工物性数据库, 若按数据库来源分类, 可以大致分为两类, 一类是由 AspenTech 公司自己开发应用, 另一类是根据一项长期战略合作协议, 由美国国家标准技术研究院 (NIST) 开发并提供给 Aspen Plus 软件用户使用。若按数据库中数据的性质分类, Aspen Plus 软件中的化工物性数据库也可以大致分为两类, 一类是纯组分物性数据库, 另一类是混合物物性数据库。

AspenTech 公司开发的数据库称为系统数据库, 其中含有大量的纯物质和混合物的物性数据, 可被方便地查询、调用。一般而言, 从软件中查询得到的物性数据与手册中的数据基本一致, 如果有差异, 应以手册中的数据为准。

系统数据库是 Aspen Plus 软件的一部分, 并与 Aspen Plus 软件一起同时被安装。系统数据库适用于每一个 Aspen Plus 程序的运行, 物性参数会自动从四个子数据库中检索出来, 以满足大部分化工过程模拟的需要。这四个子数据库分别是纯组分物性数据库 (PURE), 固体组分数据库 (SOLIDS)、水溶液组分数据库 (AQUEOUS)、无机物组分数据库 (INORGANIC)。如果需要从其他子数据库中导出数据, 则需要人工操作, 调用目标数据库参与运算。

Aspen Plus 软件的系统数据库由若干个子数据库构成, 每个子数据库都具有自己的专业特点。随着软件版本的不断升级, 子数据库数量也不断增加, 且子数据库中的数据内容不断更新、扩展和改进。因此 Aspen Plus 软件新版本的某个子数据库中参数值可能改变。新版本的 Aspen Plus 软件数据库具有向上兼容性, 如果使用更新的数据库进行模拟计算, 可能会引起模拟结果的差异。纯组分物性数据库以版本号命名, 使用者可以采用新版本 Aspen Plus 软件中保留的旧版本数据库进行模拟计算, 以得到与旧版本相同的模拟结果。

1.1.3 用 NIST-TDE 热力学数据搜索引擎查找

“NIST” 是美国国家标准技术研究院 (National Institute of Standards and Technology) 的简称。NIST 从事物理、生物和工程方面的基础和应用研究, 以及测量技术和测试方法方面的研究, 提供标准、标准参考数据及有关服务。NIST 的标准参考数据库系列包括 50 多个子数据库, 根据学科可分为: 分析化学, 原子和分子物理, 生物技术, 化学与晶体结构, 化学动力学, 工业流体与化工, 材料性能, 热力学与热化学以及 NIST 的其他数据库。

Aspen Plus V7.0 以后的版本中, 均包含了 NIST 数据库的查询功能, 称为热力学数据搜索引擎 (Thermo Data Engine, TDE)。TDE 是由 NIST 开发, 通过 Aspen Plus 软件提供给用户使用的一个大型数据查询工具。NIST 热力学研究中心 (TRC) 的源数据库收集存储了超过 3 百万个热化学和热物理的化合物物性实验数据点, 化合物的数量超过 1.7 万种, 且该数据库在不断更新中, 为 TDE 软件提供了充分的源数据。TDE 软件对 TRC 存储的原始热力学实验数据进行关联、评价和预测, 然后再提供给用户使用。TDE 软件提供的热力学数据和传递性质数据均是在实验数据基础上, 经过 TRC 数据评价系统用热力学和动力学原理严格评价后才给出, 因此具有相对的可靠性。

TDE 软件在 Aspen Plus 的用户界面提供了两种数据查询功能, 分别是纯物质和二元混合物的性质查询。TDE 软件给出的纯组分主要单点物性由基于化合物分子结构的各种基团贡献方法估算得到, 纯组分与温度相关的主要物性估算方法由对比状态方法计算得到。如果一种物性可以由几种不同的估算方法得到, 则在实验数据的基础上, 按照估算方法的准确性高低

排列估算方法模型名称，但仅提供准确性最高估算方法的计算值，同时给出该数据的误差范围。

1.1.4 物性查询举例

例 1-1 查询硫化氢和硫黄的基础物性。
解 ① 选择计量单位集、计算模式 双击 Aspen Plus 软件用户界面图标，软件弹出开启模式询问窗口，选择“Template”模板开启，进入计量单位集、计算模式选择窗口，如图 1-1 所示。选择“General with Metric Units”公制计量单位模板，默认计算模式（“Run type”）为“Flowsheet”。

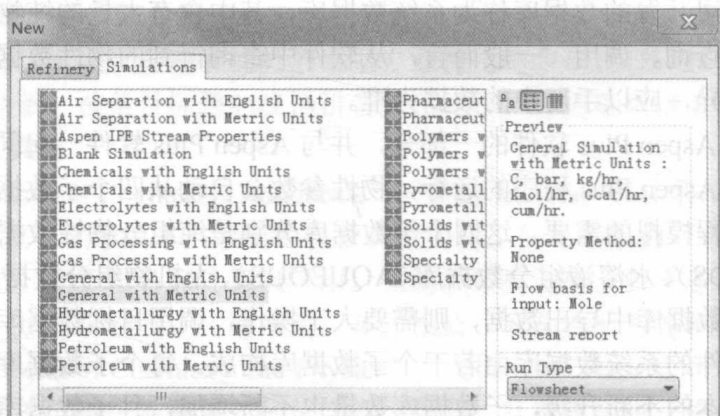


图 1-1 选择公制计量单位集

② 全局性参数设置 点击工具栏数据浏览器图标，在“Global”页面，填入程序名称，选择“SI-CBAR”计量单位集，如图 1-2 所示。

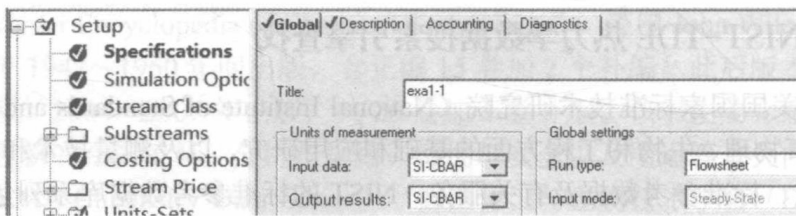


图 1-2 设置计算程序的计量单位

③ 定义化学组分 在“Components”文件夹的“Specifications|Selection”页面，输入组分硫化氢和硫黄的化学结构式，如图 1-3 所示。

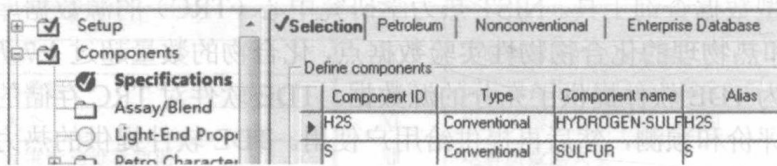


图 1-3 更改组分的“Componet ID”名称

在“Components”文件夹的“Enterprise Database”页面，可看到软件可用数据库名称和已调用数据库名称，如图 1-4 所示。点击“Selection”页面下方的“Review”按钮，软件显示数据库中硫化氢和硫黄的纯组分基础物性，如图 1-5 所示。若把软件查询数据与相

关手册数据比较，可以看到两者是基本一致的。

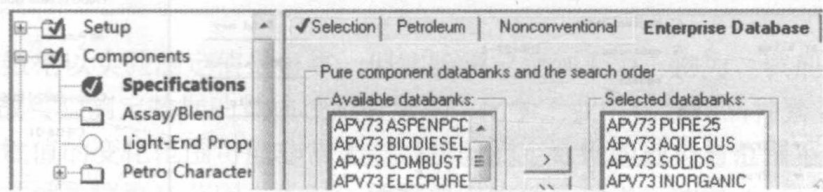


图 1-4 调用的数据库名称

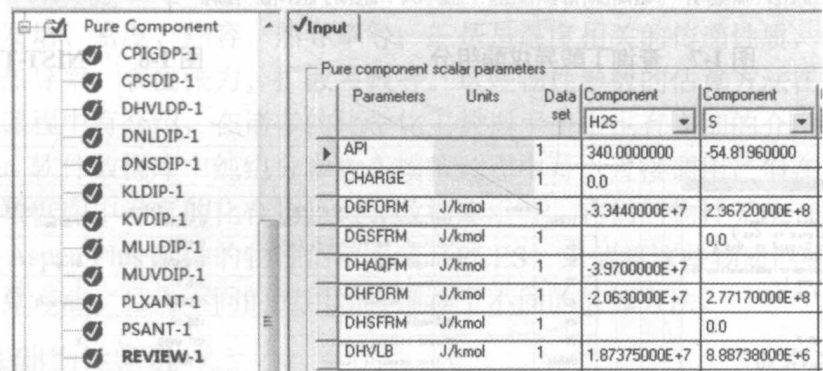


图 1-5 硫化氢和硫黄的纯组分基础物性

例 1-2 查询丁酸异戊酯的基础物性。

丁酸异戊酯是一种常用的有机合成试剂与溶剂，CAS 号106-27-4，试查询其全部基础物性。

解 ① 全局性参数设置 打开软件，选择公制计量模板，选择“SI-CBAR”计量单位集，默认计算模式“Flowsheet”。

② 输入组分 在组分输入页面，点击左下方的“Find”按钮，在弹出对话框的“Components”页面中填入丁酸异戊酯 CAS 号“106-27-4”并回车，软件显示 Aspen Plus V7.3 系统数据库中并没有丁酸异戊酯这个组分。

在“Specifications|Enterprise Database”页面，把子数据库“NIST-TRC”从可用区域“Available databanks”调用到选用区域“Selected databanks”，见图 1-6。重新检索丁酸异戊酯，软件显示已经找到，见图 1-7，双击其名称将其选入模拟程序。

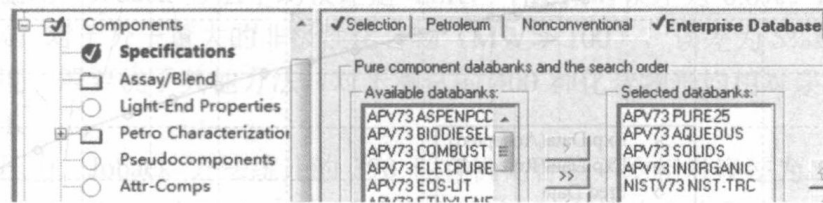


图 1-6 调用“NIST-TRC”数据库

③ 查询丁酸异戊酯物性 简单物性可以在点击“Review”按钮后出现，更详细的物性则需要通过“NIST-TDE”软件查询获得。在下拉菜单“Tools”中点击“NIST Thermo Data Engine (TDE)...”，启动“NIST-TDE”数据评价软件。待评价的数据是纯组分丁酸异戊酯的物性，在“NIST-TDE”数据查询窗口填写见图 1-8，点击“Evaluate now”按钮开始评价数据，数据输出界面见图 1-9。

Compounds

Databank

Search criteria

Compound name or alias

☐ begins with
 ☒ contains
 ☐ equals

106-27-4

Find now

New search

Help

Compound class

MW

From

To

TB

From

To

K

Compounds found matching the specified criteria: 1

Compound name	Alias	Alternate name	CAS no	Databank	Compo
ISOPENTYL-BUTANOATE	C9H18O2-N1	3-METHYLBUTYL BUTANOATE	106-27-4	NISTV73, NIST-TRC	PROP1

图 1-7 查询丁酸异戊酯组分

Property data type

☒ Pure
 ☐ Binary mixt

Component(s) to evaluate

C9H18-01

Enter additional data ...

Evaluate now

Help

图 1-8 “NIST-TDE” 查询窗口

Results

Properties

Acentric Factor
 Critical compressibility factor
 Critical density (Liquid vs. Gas)
 Critical pressure (Liquid vs. Gas)
 Critical temperature (Liquid vs. Gas)
 Density (Liquid vs. Gas)
 Enthalpy of vaporization or sublimation (Li)
 Heat capacity (Ideal gas)
 Heat capacity (Liquid vs. Gas)
 Molecular weight
 Normal boiling point
 Solubility parameter
 Specific gravity at 60 F
 Standard liquid molar volume at 60 F
 Surface tension (Liquid vs. Gas)
 Thermal conductivity (Gas)
 Thermal conductivity (Liquid vs. Gas)
 Vapor pressure (Liquid vs. Gas)
 Viscosity (Gas)
 Viscosity (Liquid vs. Gas)

Parameters

Name	Description	Value	Units	Uncertainty
VLSTD	API standard liquid molar volume	0.182473	cm ³ /mol	0.000186
ZC	Critical compressibility factor	0.1953		0.033
PC	Critical pressure	1692470.9	N/m ²	283687.2
TC	Critical temperature	618.87	K	6
VC	Critical volume	0.59391	cm ³ /mol	-0.00982
MW	Molecular weight	158.24		
TB	Normal boiling point	457.9469	K	0.0563
OMEGA	Pitzer acentric factor	0.50608		
DELTA	Solubility parameter @ 25 C	16527.7	(J/cm ³) ^{0.5}	16527.7
SG	Specific gravity	0.868078		0.000885
CP1ALEE	TDE Aly-Lee ideal gas Cp	+	J/mol-K	
CP1LDECS	TDE equation for liquid Co	+	J/mol-K	

图 1-9 丁酸异戊酯组分物性查询总输出界面

图 1-9 左侧是输出物性数据项目的条目，右侧是具体详细数据。对于单点物性数据，右侧包括数据名称、数据描述、数值、单位、误差。对于与温度相关的物性数据，右侧由若干个页面给出具体详细数据，包括物性计算关联式系数、物性实验值和数据来源文献、预测值与评价值。点击数据下方的“Plot”按钮，可以把数据绘图；点击“Save”按钮，可以把需要的数据保存在本模拟文件的“Properties|Data”文件夹中，方便下次直接使用数据。

图 1-10 是丁酸异戊酯液相密度与温度的关系曲线，图中标注了经过评价后采纳的实验值、拒绝的实验值、预测值，连续曲线是评价值。

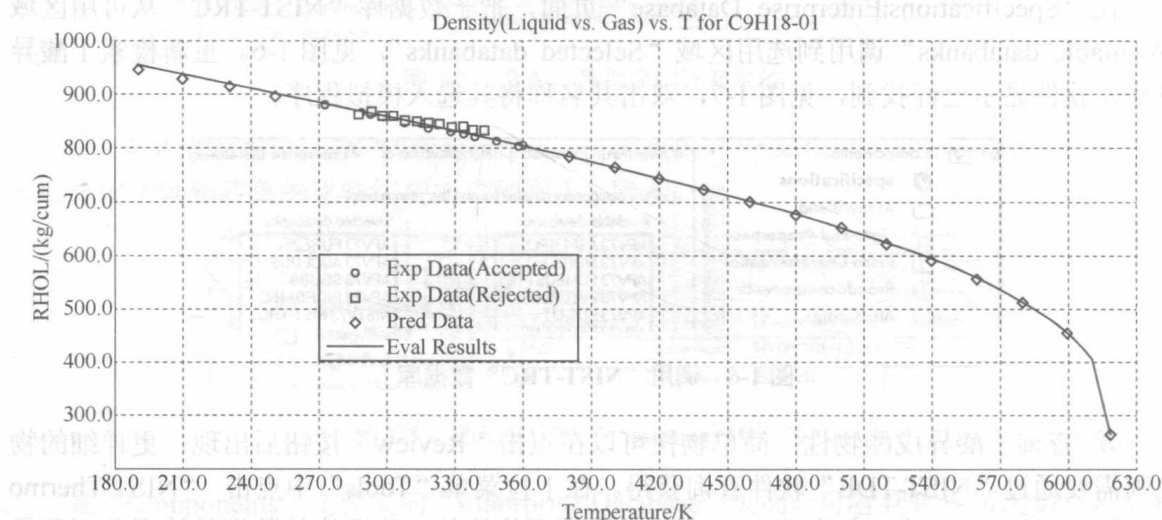


图 1-10 丁酸异戊酯液相密度与温度的关系曲线

1.2 纯物质的物性估算

化工物性数据以实验测定值最可靠，但实验测定受到人力、物力、试剂来源、实验条件等诸多限制，故实验测定数据的量往往是有限的。化学工业中化合物品种繁多，且不同温度、不同压力下物性值的变化范围可能非常大，当实验测定数据的种类与范围不能满足需要、文献中没有或在文献数据测定范围之外时，就需要对物性数据进行估算。

对纯物质物性估算内容一般包括 3 个方面：一是基础物性，如沸点、熔点、临界常数、偏心因子、偶极矩等；二是与温度相关的热力学性质，如气体的热容、黏度、热导率，液体的蒸气压、蒸发焓、密度、热容、热导率等；三是与温度相关的传递性质，如等张比容、液体黏度、液体热导率、表面张力、扩散系数等。这些物性参数的估算方法在物理化学、化工热力学等先修课程中有介绍，在诸多的化学化工数据手册中也有详细的介绍。

Aspen Plus 软件数据库中纯组分参数在模拟过程中可以直接调用，但在实际工艺设计中经常遇见软件数据库中没有的化合物，即非数据库组分，它们的物性无法直接调用，需要人工添加或采用 Aspen Plus 软件的物性估算系统（PCES）来估算这些物质的物性。PCES 提供了很多物性估算方法，且为不同的应用场合推荐了不同的估算方法。

1.2.1 基础物性常数

基础物性常数有沸点（TB）、临界常数（TC、PC、VC、ZC）、偏心因子（OMEGA）等。前四种参数的估算方法见表 1-2。沸点是参数估计最重要的信息之一，是估计很多其他参数的基本数据。如果有沸点的实验值，应该尽量输入软件中，以提高软件对其他参数估算的精确度。

表 1-2 Aspen Plus 软件中通用常数估算方法

参 数	估 算 方 法
TB	Joback, Ogata-Tsuchida, Gani, Mani
TC	Joback, Lydersen, Ambrose, Fedors, Simple, Gani, Mani
PC	Joback, Lydersen, Ambrose, Gani
VC	Joback, Lydersen, Ambrose, Riedel, Fedors, Gani

表 1-2 中各种估算方法都是基于官能团贡献法。对于沸点，用 Joback 方法计算了 400 种有机化合物，绝对平均误差是 12.9K。Ogata-Tsuchida 方法优于 Joback 方法，统计了 600 种单官能团化合物，80%的误差在 2K 以内。Gani 方法的估计误差大约是 Joback 方法的 40%。

对于临界温度，Joback 方法平均误差是 4.8K，平均相对误差为 0.8%。Lydersen 方法误差通常小于 2%，对于分子量大的非极性化合物（MW≫100），误差为 5%或更高。Gani 方法估计的精确度一般要优于其他方法，对于测试的 400 种化合物平均相对误差为 0.85%，平均误差为 4.85 K。

对于临界压力，Joback 方法统计的 390 种有机化合物平均相对误差为 5.2%，平均误差为 2.1bar（1bar=0.1MPa）。Gani 方法对于被测试的 390 种有机化合物平均相对误差为 2.89%，平均误差为 1.13bar。

对于临界体积，Joback 方法对于被测试的 310 种有机化合物平均相对误差为 2.3%，平均误差为 7.5cm³/mol。Gani 方法的精确度一般优于其他方法，对于被测试的 310 种有机物，平均相对误差为 1.79%，平均误差为 6.0cm³/mol。

临界压缩因子和偏心因子通过基本定义式计算。对于烃类组分，偏心因子还可用 Lee-Kesler 方法估算，该方法依赖于 TB、TC 和 PC 的值。

参考状态性质, 如理想气体标准摩尔生成自由焓 (DHFORM)、理想气体标准摩尔生成自由能 (DGFORM), PCES 给出了三种估算方法, 分别是 Joback、Benson 和 Gani 方法。所有方法都是适用于较广范围的化合物官能团贡献法, Joback 方法的平均误差是 (5~10) kJ/mol, Benson 方法和 Gani 方法平均误差都为 3.7kJ/mol, 推荐使用 Benson 方法。

1.2.2 与温度相关的热力学性质

与温度相关的热力学性质包括理想气体热容 (CPIG)、液体热容 (CPLDIP)、液体摩尔体积 (RKTZRA)、液体蒸气压 (PLXANT)、汽化潜热 (DHVLWT) 等。

PCES 用理想气体热容多项式、Benson 方法和 Joback 方法计算理想气体热容, 后两种方法是基于化合物官能团贡献法, 使用的温度范围 280~1100K, 误差 1%~2%。用理想气体热容多项式保存 ASPENPCD、AQUEOUS 和 SOLIDS 子数据库中组分的性质。在 PCES 中, 这些模型也用于计算理想气体焓、熵和 Gibbs 自由能。

PCES 用 DIPPR、PPDS、IK-CAPE、NIST 等液体热容关联式计算临界温度以下纯组分液体热容和液体焓。对于非数据库组分, 采用基于基团贡献法的 Ruzicka 方法估计 DIPPR 液体热容关联式的参数。该方法对 970 多种化合物的液体热容测试表明, 非极性和极性化合物的液体热容估算平均误差分别为 1.9%和 2.9%。

PCES 用带有 RKTZRA 参数的 Rackett 模型方程计算液体摩尔体积。对于非数据库组分, PCES 采用以 Rackett 方程为基础的 Gunna-Yamada 和 Le Bas 方法进行液体摩尔体积估算, 前者用于非极性和轻微极性的化合物 (对比温度<0.99 时), 准确度好于后者。Le Bas 方法对于 29 种不同的化合物报告的平均误差为 3.9%。

Aspen Plus 纯组分数据库中有许多扩展的 Antoine 方程参数 (PLXANT), 可用于计算液体饱和蒸气压。对于非数据库组分, PCES 采用 Riedel、Li-Ma、Mani 三种方法来估计液体蒸气压。Riedel 方法通过 Riedel 参数、沸点下蒸气压是 1atm、在临界点的 Plank-Riedel 约束条件等来估计 PLXANT。Riedel 方法对于非极性化合物是精确的, 但对于极性化合物不是很精确。Li-Ma 方法对于极性和非极性化合物都是精确的, 对于 28 个不同的化合物估算的平均误差为 0.61%。

汽化潜热用 Clausius-Clapeyron 方程和 Watson 方程进行估算。对于非数据库组分, PCES 采用以 Watson 方程为基础的 Vetere、Gani、Ducros、Li-Ma 等化合物官能团贡献方法进行汽化潜热估算, Vetere 方法的平均误差为 1.6%, Li-Ma 方法平均误差为 1.05%。

1.2.3 与温度相关的迁移性质

与温度相关的迁移性质有等张比容 (PARC)、液体黏度 (MULAND)、液体热导率 (KLDIP)、表面张力 (SIGDIP) 等。

PCES 采用官能团贡献法 Parachor 估计 PARC 值。液体黏度用 Andrade 方程估算。对于非数据库组分, PCES 采用以 Andrade 方程为基础、依赖于液体摩尔体积的官能团贡献法 Orrick-Erbar 和 Letsou-Stiel 方程估算。Orrick-Erbar 方法适用于冰点以上到对比温度 0.75, 对于 188 种有机液体报告的平均误差为 15%。Letsou-Stiel 方法适合于高温和对比温度 0.76~0.92 的范围, 对于 14 种液体的平均误差为 3%。汽相黏度用基于基团贡献法的 Reichenberg 方法估算, 对于非极性化合物预期的误差范围为 1%~3%, 对于极性化合物误差高一些, 但通常小于 4%。

液体热导率使用 DIPPR 方程进行估算。对于非数据库组分, PCES 采用 Sato-Riedel 方法估算液体热导率, 误差变化范围为 1%~20%, 对于轻烃和支链烃类精确度比较差。