

"十三五"国家重点图书
经典化工高等教育译丛

Aspen Plus

热力学计算简明教程

USING ASPEN PLUS[®] IN THERMODYNAMICS INSTRUCTION

— A Step-by-Step Guide

[美] Stanley I. Sandler 著 马后炮化工网 译



华东理工大学出版社
East China University of Science and Technology Press

“十三五”国家重点图书
经典化工高等教育译丛

Aspen Plus 热力学计算简明教程

USING ASPEN PLUS® IN THERMODYNAMICS INSTRUCTION
A Step-by-Step Guide

[美] Stanley I. Sandler 著
马后炮化工网 译

 华东理工大学出版社
EAST CHINA UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY PRESS

· 上海 ·

图书在版编目(CIP)数据

Aspen Plus 热力学计算简明教程/(美) 斯坦利 I. 桑德勒(Stanley I. Sandler)著;马后炮化工网译.

—上海:华东理工大学出版社,2016.8

(经典化工高等教育译丛)

书名原文:Using Aspen Plus® in Thermodynamics
Instruction — A Step-by-Step Guide

ISBN 978-7-5628-4729-8

I. ①A… II. ①斯… ②马… 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(2016)第 157633 号

策划编辑 / 周 颖

责任编辑 / 陈新征

出版发行 / 华东理工大学出版社有限公司

地址:上海市梅陇路 130 号,200237

电话:021-64250306

网址:www.ecustpress.cn

邮箱:zongbianban@ecustpress.cn

印 刷 / 江苏苏中印刷有限公司

开 本 / 710 mm×1000 mm 1/16

印 张 / 22.75

字 数 / 469 千字

版 次 / 2016 年 8 月第 1 版

印 次 / 2016 年 8 月第 1 次

定 价 / 98.00 元

版权所有 侵权必究

中译本前言

本书是马后炮化工团队翻译的第二本书,第一本《Aspen 模拟软件在精馏设计和控制中的应用》自 2015 年 6 月份出版后获得业内同行的一致好评。与此同时,我们也将更多的目标投向 Aspen Plus 软件学习的基础教程,希望找到一本最适合 Aspen Plus 新手入门的优秀书籍,能快速地让新手入门和掌握软件的使用和技巧。因此我们选择了翻译出版 Stanley I. Sandler 教授的 Using Aspen Plus® in Thermodynamics Instruction A Step-by-Step Guide,本书通过实际的工艺计算案例手把手地指导新手快速掌握 Aspen Plus 工艺计算中最难的热力学计算。

本书全面地讲述了如何利用 Aspen Plus 进行热力学的计算,目前国内外尚无同类书籍。热力学是化学工程学科的重要组成部分,也是 Aspen Plus 模拟软件的核心内容。在我们翻译的前一本书的序言中,公子小白(仲庆)对于学习 Aspen Plus 有如下评论:“夫化工模拟计算,若天有四时,地有四方,人有四体,必有四维。四维者何?曰肇因乎化工热力学之平衡,得益于单元操作之实际,归纳以数学模拟之方程,解算以数值计算之策略。天道渺渺,不可言喻,模拟之道,上应造化之理,下具知著之行。此四维缺一而不得与论化工模拟计算之堂奥矣!”对于 Aspen Plus 软件的掌握和精通,化工热力学是最重要的理论基础,因此本书具有较高的学术价值和应用价值。选择将本书介绍给国内的相关读者是非常有意义的。本书的主要特色是内容全面,阐述详细,易于自学,对于初学者来说,不失为一本非常不错的教材。

本书作者 Stanley I. Sandler 是美国 Delaware 大学杜邦讲席教授,美国工程院院士,世界著名的化工专家,化工热力学和流体相平衡研究的国际权威学者,AIChE 和 IChemE 资深会员,多所国际著名大学的荣誉教授和访问教授,曾获得 ACS、IUPAC、AIChE、洪堡基金会、ASEE 等机构授予的诸多奖项,发表论文 400 多篇,长期任多种国际权威期刊主编、编委和顾问。该作者编写的 *Chemical and Engineering Thermodynamics* 已在 Wiley 出版社推出第四版,成为许多著名大学的经典热力学教材。

本书的工艺案例由汤磊全部重新进行计算,采用与原书同样的 Aspen Plus 8.0 软件版本,本书的截图是在 Aspen 软件里面重新截图,可能部分图片与原书存在细微差异,但尽量保持与原书数据一致。本书全部的工艺计算案例源文件将在马后炮化工论坛和马后炮化工微信平台提供下载和学习交流。

感谢所有无偿参与本书翻译的马后炮化工网的马友们,感谢所有关注我们马

后炮化工网发展的朋友们。有了你们的支持和理解,我们所有的努力都是值得的。

译者水平有限,不妥之处望读者指正。

本书各章节参与翻译人员名单如下,谨致以最诚挚的感谢。

前言和致学生翻译校对:汤磊 王广全

第 1 章	翻译	王稳先	校核	程巍 李日翔
第 2 章	翻译	王将永	校核	陶荣 马永刚 李日翔
第 3 章	翻译	陶荣	校核	汤磊 汪斌 李日翔
第 4 章	翻译	汤磊	校核	王广全 李日翔
第 5 章	翻译	周送粮	校核	叶超群 李日翔
第 6 章	翻译	杨声	校核	周送粮 张皓荐 李日翔
第 7 章	翻译	麦子豪	校核	杨声 刘剑 李日翔
第 8 章	翻译	胡松	校核	汤磊 王广全 杨婷婷
第 9 章	翻译	蔡连国 杜越	校核	杨声 余玲 杨婷婷
第 10 章	翻译	付国垒	校核	王广全 余中杰 杨婷婷
第 11 章	翻译	付国垒	校核	王广全 吴成双 杨婷婷
第 12 章	翻译	丛山	校核	王喆 杨婷婷
第 13 章	翻译	丛山	校核	邱永宁 宋辉 杨婷婷
第 14 章	翻译	王广全	校核	汤磊 杨婷婷

最后特别感谢山东豪迈化工技术有限公司丁全有总经理对本书校核工作的大力支持,安排了李日翔和杨婷婷两位对全文进行精心地校核;特别感谢马永刚、汤磊、王广全老师对整个翻译文稿的通篇校阅;特别感谢汤磊把全书的所有案例用 Aspen Plus 重新计算。非常感谢你们的大力支持。

陈赞柳 马后炮化工网创始人

2016 年 3 月

关于马后炮化工网

马后炮化工网(bbs. mahoupao. net)是一家专注于化工行业技术交流和信息共享的互动新媒体,是目前国内在化工工程设计以及工艺流程模拟计算领域最专业的交流网站。自2009年建立以来马后炮化工网便以其“专业、专注、专心”的服务态度和开放、包容的特色,获得了大量化工同行的青睐。六年内一跃而成为行业内名列前茅的技术交流平台。作为化工行业的专业技术网站,马后炮化工网汇聚了一批出色的化工行业人才,包括化工设计院、工程公司、高校化工相关专业以及化工生产企业等专业人士,实时从多方面,多角度关注化工行业动态和技术发展趋势。

马后炮工程威客平台(www. mahoupao. net)是化工行业首创的工程研发设计服务交易平台。依托马后炮化工网多年以来积累的技术资源,让企业可以充分利用互联网的工程师资源,解决企业自身的人才需求和技术需求。让企业可以少花钱、少养人却能有效进行工程研发设计。对于专家工程师,可以通过工程威客平台实现自身智慧价值最大化,智慧(知识、技能、经验、技巧等)快速、有效变现。



扫一扫关注马后炮化工官方微信平台

中译本符号说明

书稿中图表内变量为与原著统一沿用正体。图表内变量单位与软件统一,而其相对应的国际单位制单位如下所示。

书中变量单位	国际单位制单位
bar	1 bar = 10^5 Pa
hr	h
cal	1 cal = 4.186 8 J
sec	s
Mole	mol
C	°C
cc	cm ³
gm	g
cal/gm	cal/g
cal/gm - K	cal/(g · K)
cal/mol - K	cal/(mol · K)
gm/cc	g/cm ³
cal/sec	cal/s
kg/hr	kg/h
mol/cc	mol/cm ³
kmol/sec	kmol/s
N/sqm	N/m ²
mmHg	1 mmHg = 133.322 Pa
psia	1 psia = 6 894.76 Pa
atm	1 atm = 101 325 Pa

序 言

vii^①

Aspen Plus[®] 是一款非常强大的过程模拟软件,是用于化工过程,甚至是整个化工、制药和炼油工厂建模的工具。因此,它需要准确的热力学性质和相行为模型。

本书旨在向读者介绍 Aspen Plus 在热力学课程中的应用,因此,该软件过程模拟方面的功能考虑较少。对于化学工程的本科教育,过程模拟在综合设计课程中被大量运用,通常会在这类课程中详细讲授。本书可以作为复杂过程模拟教学的基础,同时为本科热力学课程中引入 Aspen Plus 模拟软件提供一连串的方法。希望通过本书的学习,学生可以利用 Aspen Plus 软件完成那些繁琐的实际过程计算,使热力学课程更加有趣和有意义。应用计算机进行这类计算的一个优势是可以快速获得改变参数后的计算结果,因此可以使学生积累不同输入如何影响输出方面的经验,以便于培养学生工程方面的洞察力。任何老师都知道,让学生重复进行手工计算,必将引起一片抱怨声。对某个工况做一次手工计算是重要的学习活动,而做很多同工况下的手工计算相对于学生的时间投入来说教学效果会差很多。

本书为读者提供自学式的、手把手式的 Aspen Plus 热力学计算教程,给出了应用 Aspen Plus 软件求解各种类型问题时的界面截图,这些问题包括汽液、液液、汽液液平衡和化学反应平衡,以及简单液化工艺应用、精馏和液液萃取单元操作。举例说明是本书的一个重要特点,本书不讲通用的规则,而是讲述具体的例子,目的是鼓励读者从这些例题中归纳总结并将其所学运用到某个特定的问题中。本书主要是面向自学,因此不应作为教科书而应作为课外参考书。但是,其中某些内容可以为学习热力学基本原理提供参考。为方便起见,在这些地方我引用了我的热力学教科书 *Chemical, Biochemical, and Engineering Thermodynamics, 4th ed.* 然而,在其他标准的热力学教科书中都可以找到相同的内容,所以本书可以与其他任何热力学教科书一起使用。

再次强调,虽然 Aspen Plus 是过程模拟软件,但是本书的重点不是过程模拟。书中包含了一些流程模拟的例子,但仅仅是因为一些热力学计算需要通过流程模拟来实现。流程模拟的例子包括汽液和汽液液闪蒸,特别是绝热闪蒸(即 J-T 节流膨胀)计算以及化学反应平衡计算。谨记,Aspen Plus 软件的功能远超过本书所介绍的内容。

① 边栏数字为原版图书页码,与索引中的页码对应。

本书旨在给予自学者手把手的指导,正因如此,书中包含了大量的屏幕截图图片。这些图片都来自于 Aspen Plus[®] 并由 Aspen Technology 股份有限公司授权使用。AspenTech[®], aspenONE[®], Aspen Plus[®] 以及树叶标志均为 Aspen Technology 股份有限公司注册商标。版权所有。

读者在阅读中有任何改善的建议,请电邮 sandler@udel.edu, 对此表示不胜感激。

最后,非常感谢 Aspen Technology 股份有限公司的大力支持,并提供 Aspen Plus[®] 个人授权证书,使得我可以在家中照顾重病的妻子的同时撰写书稿。特别感谢 Aspen Technology 股份有限公司的前雇员陈超群博士,他促成了本书的出版并对书稿提供了许多有用的建议。Suphat Watanasiri 同样也给予了很多帮助。

Stanley I. Sandler

January 2015

致 学 生

在你所学的课程中会看到,除理想气体之外的热力学计算都是非常耗时的。同时,课堂上你们可能会考虑某一个装置,比如节流阀,而在液化过程中可能会考虑几个装置,例如压缩机、换热器、节流阀和分离器。对于每一个单元操作来说,其计算往往需要多次地迭代,如压缩机的状态方程的计算,如果像 Linde 过程那样存在循环物流,则整个过程的计算更是如此。你可以想象对整个化工厂或炼油厂来说,这些计算是多么困难和耗时,这些工厂具有非常多的不同过程设备和复杂的循环物流网络。那么,在工业中这些计算是如何完成的,在课程设计中,特别是需要考察许多不同的设计方案时,你又如何能有效地进行这些计算呢?答案就是采用复杂的计算机程序,即过程模拟软件。用户可以根据所考虑的过程中的设备利用这些程序建立一个流程图,其中所有的设备通过物流进行连接(对于换热器或其他设备,可能通过热流连接)。接下来,用户在指定了物质组分、进料组成、操作条件、约束条件和所采用的热力学模型之后,将能计算出流程中所有物流的流量和组成。查看结果之后,用户可以很容易地对进料物流和操作条件(比如流程中各点的温度和/或压力)作出改变,重新进行模拟计算。这样一来,工程师便可以了解操作条件改变时过程的响应特性,进而可以对过程进行优化达到各种指标,比如利润、二氧化碳或其他废物排放最少、能耗最低等。

为什么在热力学课程中要引入过程模拟呢?这里有几个充分的理由。首先,随着热力学课程的学习,你会发现涉及的计算越来越复杂,这足以说明使用某种计算机软件是必要的。第二,虽然某个特定条件下的计算可使学生理解计算的基本原理,但是一组设定条件下的计算却是令人厌倦的。不过,理解计算原理很重要,但是却无法让学生或工程师获知变量变化时过程的响应或当前的条件是否为最优。这些信息只能来自于另一组其他操作条件下的计算,这些计算可以通过过程模拟软件很快地完成,让用户更好地理解过程的行为。这样,可以培养无法从单次计算中获得的工程直觉。第三,在过程模拟中,要获得有意义的结果,选择正确的热力学模型是至关重要的。因此,热力学和过程模拟是紧密联系在一起。

这里要强调最后一点,因为最后一点是非常重要的。例如,假定要模拟的过程包含液体,但是我们让过程模拟软件使用理想气体定律来描述该体系,那会发生什么情况?虽然过程模拟软件也会给出答案,但是这些结果是荒谬的。过程模拟软件只能严格按照指定的条件进行计算,但无法确定计算结果是否有意义,而后者正是工程师要做的工作。在计算机行业中有个习语,GIGO(garbage in, garbage

out),意思是“垃圾输入,垃圾输出”。借用到这里的意思就是,热力学选择不正确,结果就是错误的。然而,不幸的是,在我的工程咨询经历中也遇到了 GIGO (garbage in, gospel out)的另一个应用场合,意思是“垃圾进,福音出”。也就是说,过程模拟软件的使用者不加批判地接受软件给出的结果。这通常是因为,工程师要使与其完全不相关的过程模拟计算收敛(或收敛到一个合理的解)是比较困难的,便开始尝试使用不同的热力学模型直至得到一个合理的答案。于是,工程师便倾向于将该模型用于其他过程中,甚至该模型完全不合适的一些过程中。这种工程判断是严重错误的,如果化工厂是根据那些错误的条件建立的,那将是很危险的,纠正错误的代价是昂贵的。

最重要的一点是,使用过程模拟软件可以减少繁重的过程计算工作,只要用户对热力学和热力学模型有足够的理解并作出了正确的选择,计算结果就是有意义的。过程模拟软件(或者其他用于计算的任何计算机工具)的使用者都要根据自己的工程直觉、经验和热力学知识对结果进行仔细检查。例如,在化学反应章节中,Le Chatelier 和 Braun 原理可以为压力改变后化学反应体系的平衡态如何移动提供指导。如果过程模拟的结果刚好与此相反,使用者应该核实过程的输入和过程的某些选择是否正确。同样,如果过程温度的改变导致了与直觉相反的结果,则需要进一步的分析。总之,这里主要说的是,不应该盲目地接受计算机给出的任何结果。相反,必须对所有的因素进行分析,以确定这些结果是否合理。

起初,虽然大多数的化工和石油公司都开发了自己的过程模拟软件,但是这些软件的维护、热力学和设备模型的扩充、用户服务等费用使其难以为继。因此,目前过程模拟领域被少数几个商用供应商的软件以及一些符合 CAPE - OPEN 标准的免费软件所占领。互联网搜索可以发现许多可用的过程模拟软件。这里我们仅仅考虑其中的一个,Aspen Plus——它是一款拥有最多的用户,而且以很实惠的价格提供给大学的软件。

Aspen Plus 的主要用途是过程模拟,已有许多书籍和课程来指导学生如何使用它,因此这不是本书的目的。我们只对 Aspen Plus 如何用于本科生的热力学课程感兴趣。因此,尽管 Aspen Plus 具有很多的功能,但我们只考虑以下几点。

1. 基本的过程模拟;
2. 相平衡(汽液,液液,汽液液);
3. 热力学数据回归功能;
4. Property Analysis(纯流体和混合物);
5. 热力学数据引擎;
6. 物性方法选择助手;
7. 简单的精馏和萃取。

注:本书正文中的粗体字词代表了 Aspen Plus 模拟软件中由这些字词所定义的某种功能或者某个特定内容。读者在使用 Aspen Plus 模拟软件完成书中的例子时,应当通过点击以粗体形式表示的相关字词进行操作。

目 录



第 1 章 开始使用 Aspen Plus®	1
习题	9
第 2 章 两个简单模拟案例	10
习题	34
第 3 章 纯组合物性分析	36
习题	56
第 4 章 NIST ThermoData Engine (TDE)	57
习题	66
第 5 章 基于活度系数模型的汽液平衡计算	67
5.1 物性分析法	70
5.2 流程模拟法	81
5.3 应用二元组分 VLE 数据回归活度系数模型	90
习题	116
第 6 章 基于状态方程的汽液平衡计算	121
6.1 物性分析法	121
6.2 流程模拟法	124
6.3 利用状态方程回归二元组分的汽液相平衡数据	131
习题	146
第 7 章 液液平衡 (LLE) 数据回归以及汽液液平衡 (VLLE) 的预测	148
7.1 液液平衡数据的回归	148
7.2 液液平衡和汽液液平衡的预测	162
7.3 高压下的汽液液平衡	172
习题	179

第 8 章 热力学方法助手和物性估算	180
8.1 热力学方法助手	180
8.2 物性估算	188
8.3 回归无限稀释活度系数数据	194
习题	205
第 9 章 Aspen Plus [®] 中的化学反应平衡	207
习题	233
第 10 章 简捷法精馏计算	236
习题	253
第 11 章 严格法精馏计算：RadFrac	254
习题	273
第 12 章 液液萃取	274
习题	287
第 13 章 灵敏度分析：一种重复性计算工具	289
习题	307
第 14 章 电解质溶液	308
习题	342
索引	344

第 1 章

开始使用 Aspen Plus®

Aspen Plus® 是一款工艺模拟软件,同时它也可以用于多种类型的热力学计算、检索和关联热力学及传递过程数据。本书主要涉及 Aspen Plus 在热力学计算中的应用,例如:计算相平衡和回归热力学模型中的参数,同时会涉及一些非常简单的流程模拟,但仅限于概念性地介绍,不做深入。

首先,打开 Aspen Plus 8.0 以上版本。根据电脑设定的差异,你有可能需要手动寻找它。(它一般在你的桌面上,也可以通过以下路径 **All Programs > Aspen Tech > Process Modeling V8. x > Aspen Plus > Aspen Plus V8. x** 找到。在此过程中你会看到大量细化的 Aspen Plus 模组,但在此不予讨论。)8.0 版本和 8.2 及更高版本在界面上有些许差异。图 1-1a 为 8.0 版本截图,8.2 及以上版本请参照图 1-2a。

图 1-1a 和本书中所有的屏幕截图都来自于 Aspen Plus®,并由 Aspen Technology 股份有限公司授权使用。AspenTech®, aspenONE®, Aspen Plus® 以及树叶标志均为 Aspen Technology 股份有限公司注册商标。版权所有。

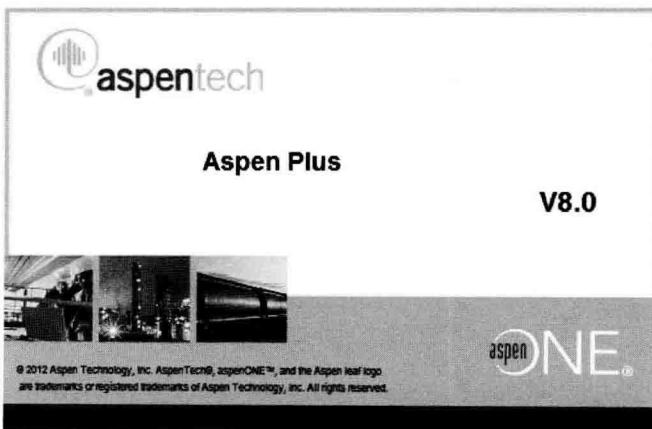


图 1-1a Aspen Plus V8.0 启动

启动 Aspen Plus V8.0 版本时,你会短暂看到图 1-1a 中所示的 Aspen 商标。程序会尝试连接服务器并造成短暂的延迟,此后会出现如图 1-1b 所示的 **Get Started** 界面。在那里,你会看到一系列 **Product News**(定期更新后会有改变)。在这个窗口中,你可以建立一个新的 **Simulation** 或者在 **Recent Cases** 中打开之前的模拟。

2

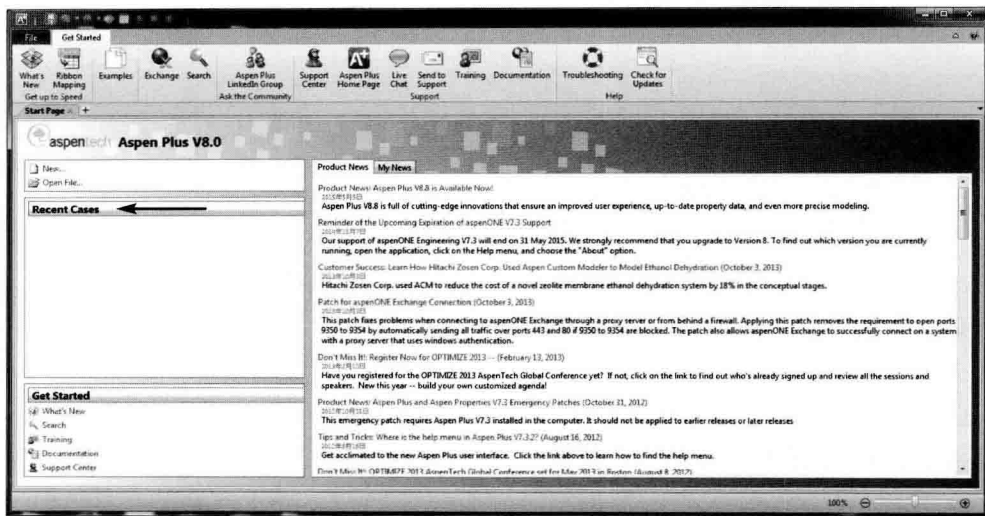


图 1-1b Aspen Plus V8.0 启动

点击 **New...** 继续,显示如图 1-3 所示。

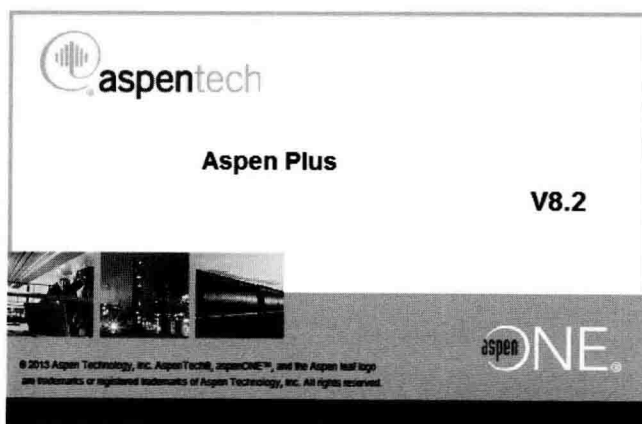


图 1-2a Aspen Plus V8.2 启动

当你打开 Aspen Plus 8.2 版本时,你会短暂看到 Aspen 商标,如图 1-2a 所示。程序会连接服务器并造成短暂的延迟,在此之后会出现如图 1-2b 所示的 **Exchange** 界面。

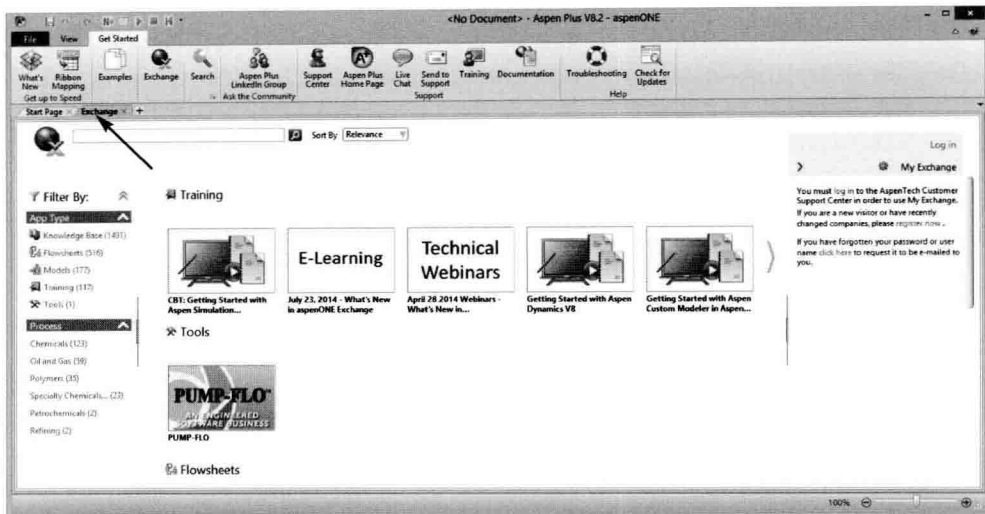


图 1-2b

这个窗口中包含一些工艺过程、流程图、培训信息、为特殊的单元操作所准备的预设模型和一些其他项目。因为本书强调的是热力学模拟，所以以上内容在此不做赘述。点击 **Start Page** 标签(如图 1-2b 所示)后便会出现如图 1-2c 所示的 **Start Page** 界面。在那里，你会看到一系列 **Product News**(定期更新后会有新的内容)。在这个窗口中，你可以建立一个新的 **Simulation** 或者在 **Recent Cases** 中打开之前的模拟。

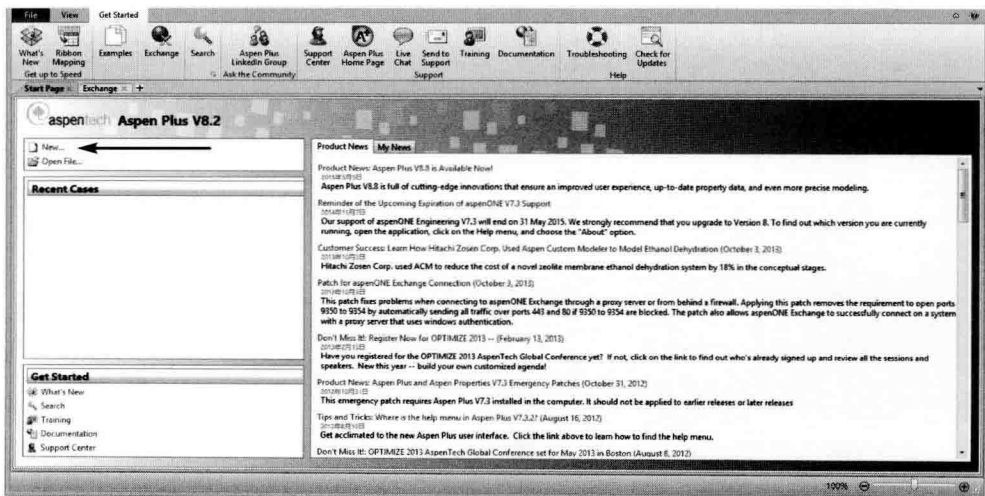


图 1-2c

点击 **New...** 继续，你会看到如图 1-3 所示的窗口。从这里开始，8.0 以上所有版本操作基本相同。

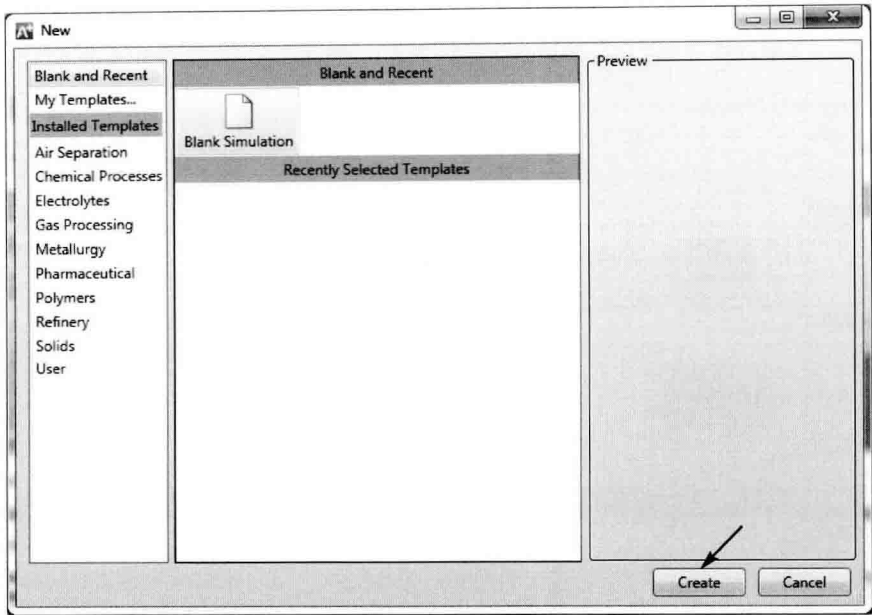


图 1-3

先点击 **Blank Simulation**, 然后点击 **Create**, 之后会显示如图 1-4 所示的窗口。

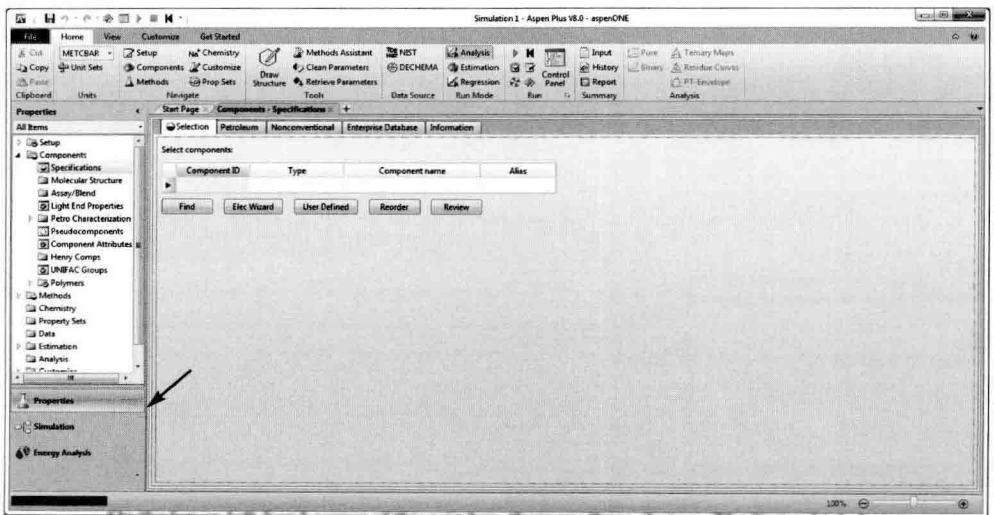


图 1-4

在窗口的左下角有三个选项。首先, Aspen Plus 自动打开的那个, 叫作 **Properties**; 在 **Components > Specifications** 的下拉菜单中, 选择需要计算的组分; 在 **Methods** 的下拉菜单中, 选择计算所使用的热力学模型和参数。第二大区域: **Simulation** 用来编辑工艺流程图, 在之后章节中再做讨论。第三大区域: **Energy**