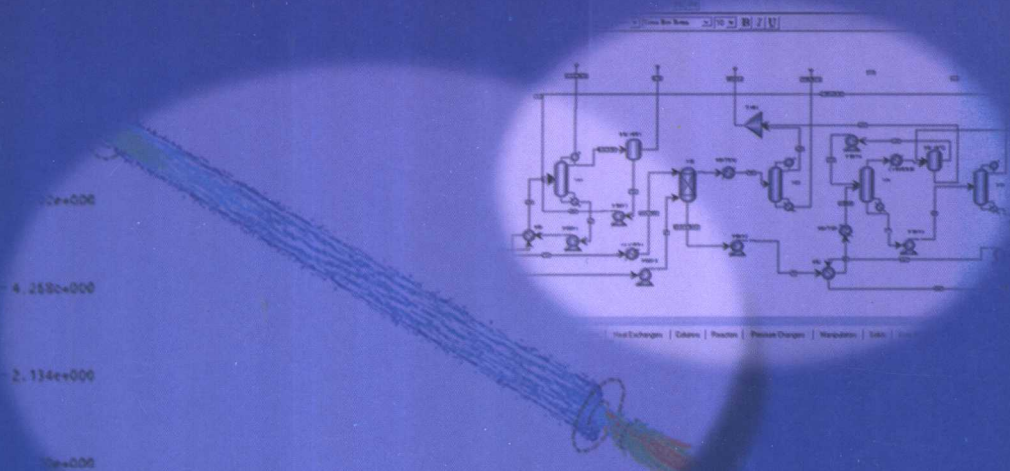


高 等 学 校 教 材

化工过程数值模拟 及软件

■ 屈一新 主编



化学工业出版社
高等教育教材出版中心

高等学校教材

化工过程数值模拟及软件

屈一新 主 编



化学工业出版社
高等教育教材出版中心

· 北 京 ·

本书介绍了化工流程模拟和单元模拟过程中常见的大型应用软件及其实际应用实例。全书共 3 章, 第 1 章主要介绍化工模拟的基本概念, 第 2 章讲述化工流程模拟的基本知识, 并结合 Aspen Plus 软件介绍化工流程模拟的具体方法和步骤。给出了空气压缩、闪蒸分离、石油精馏、苯的高温分解等大量典型化工过程的利用 Aspen Plus 进行流程模拟的应用实例。第 3 章重点介绍化工单元模拟的概念、过程和方法, 详细介绍了单元模拟软件 CFX 和 Fluent 的应用实例, 并给出了具体示例的操作过程。

本书可作为高等学校应用化学、化学及化工类专业本科生和研究生的教材, 也可供石油与化工、轻工等行业从事开发的工程技术人员参考。

图书在版编目 (CIP) 数据

化工过程数值模拟及软件 / 屈一新主编. —北京: 化学工业出版社, 2006.5

高等学校教材

ISBN 7-5025-8844-2

I. 化… II. 屈… III. 化工过程-数值模拟-应用软件 IV. TQ02-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2006) 第 058689 号

高等学校教材 化工过程数值模拟及软件

屈一新 主编

责任编辑: 于 卉

文字编辑: 朱 磊

责任校对: 郑 捷

封面设计: 韩 飞

*

化学工业出版社 出版发行
高等教育教材出版中心

(北京市朝阳区惠新里 3 号 邮政编码 100029)

购书咨询: (010) 64982530

(010) 64918013

购书传真: (010) 64982630

http: // www.cip.com.cn

*

新华书店北京发行所经销

化学工业出版社印刷厂印装

开本 787mm×1092mm 1/16 印张 11 字数 264 千字

2006 年 7 月第 1 版 2006 年 7 月北京第 1 次印刷

ISBN 7-5025-8844-2

定 价: 19.00 元

版权所有 违者必究

该书如有缺页、倒页、脱页者, 本社发行部负责退换

前 言

化学工程是研究化学工业和其他过程工业 (process industry) 生产中所进行的化学过程和物理过程共同规律的一门工程学科。化学工程的研究对象通常是非常复杂的, 解析方法在化学工程研究中往往失效。从 20 世纪 50 年代开始, 人们就利用计算机解算化工过程的数学模型, 使研究方法出现了一个革新。经过 40 多年的发展, 化工过程模拟已成为普遍采用的常规手段, 广泛应用于化工过程的研究开发、设计、生产操作的控制与优化、操作培训和技术改造。本书旨在介绍化工过程模拟的基本概念和方法, 提供利用相关模拟软件进行实际化工过程的模拟的步骤和技巧。

全书共分 3 章。

第 1 章: 绪论, 主要介绍化工模拟的基本概念。

第 2 章: 化工流程模拟, 介绍化工流程模拟的基本知识, 并结合 Aspen Plus 软件介绍化工流程模拟的具体方法和步骤。

第 3 章: 化工单元模拟, 重点介绍化工单元模拟的概念、过程和方法, 详细介绍了单元模拟软件 CFX 和 Fluent 的应用实例, 并给出了具体示例的操作过程。

第 1 章由任慧编写, 第 2 章由屈一新、任慧编写, 第 3 章由车耀坤编写, 全书由屈一新统稿。

实际化工模拟中, 不仅需要掌握有关的理论概念、公式和方法, 更为关键的是提高分析解决实际问题的能力。因此, 本书介绍了大量典型化工过程的模拟实例, 并给出了具体方法和步骤, 以便于读者自学。

本书在编写过程中, 参考了大量的文献资料, 在此表示感谢。由于作者水平有限, 本书不足之处在所难免, 恳请同行及读者批评指正。

编 者
2006 年 3 月

目 录

第 1 章 绪论	1
1.1 化工模拟	1
1.2 流程模拟	2
1.3 单元模拟	3
1.4 单元模拟与流程模拟的关系	4
第 2 章 流程模拟技术	6
2.1 流程模拟的步骤	6
2.1.1 流程的建立	6
2.1.2 变量的设置	6
2.1.3 程序的运行	6
2.2 Aspen Plus 流程模拟商业软件	6
2.2.1 Aspen Plus 流程模拟软件介绍	6
2.2.2 Aspen Plus 安装及运行环境	8
2.2.2.1 Aspen Plus 的安装	8
2.2.2.2 Aspen Plus 的启动	9
2.2.2.3 Aspen Plus 用户界面	10
2.2.2.4 数据浏览器 (Data Browser)	12
2.2.2.5 Next 按钮的使用	13
2.2.2.6 Aspen Plus 帮助系统的调用	14
2.2.2.7 Aspen Plus 常用快捷键	14
2.2.3 Aspen Plus 的单元操作模块	14
2.2.3.1 混合器/分流器 (Mixers/Splitters)	15
2.2.3.2 分离器 (Separators)	16
2.2.3.3 换热器 (Heat Exchangers)	18
2.2.3.4 塔 (Columns)	22
2.2.3.5 反应器 (Reactors)	27
2.2.3.6 压力变送设备 (Pressure Changers)	29
2.2.3.7 固体 (Solids)	31
2.2.3.8 控制器 (Manipulators)	35
2.2.3.9 用户模型 (User Models)	35

2.2.3.10	泄压 (Pres-Relief)	36
2.2.4	流程的建立	36
2.2.4.1	定义一个流程	36
2.2.4.2	浏览一个流程, 检查流程的完整性	36
2.2.4.3	修改一个流程	37
2.2.4.4	使用流程工段	37
2.2.4.5	打印流程	37
2.2.5	模拟变量的设置	37
2.2.5.1	全局变量的设定	38
2.2.5.2	物性方法及物性参数的设置	39
2.2.5.3	数据包的使用	39
2.2.5.4	物流和能量流的设定	40
2.2.6	模拟程序的运行	41
2.2.7	Aspen 公司其他模拟软件	41
2.2.7.1	Aspen Dynamics——动态过程模拟软件	41
2.2.7.2	Aspen Custom Modeler ——动态模型开发软件	42
2.2.7.3	Aspen Pinch ——系统节能软件	42
2.2.7.4	Split ——精馏系统优化软件	42
2.2.7.5	Batch Plus ——间歇过程模拟软件	43
2.2.7.6	Polymers Plus ——聚合物过程模拟软件	43
2.2.7.7	B-JAC ——换热器设计软件	43
2.2.7.8	Aspen ZYQAD——工艺设计平台	44
2.2.7.9	Aspen Online ——在线实施模型的应用工具	44
2.2.7.10	DMC Plus ——动态矩阵控制软件	44
2.2.7.11	RT-OPT ——在线实时优化软件	44
2.2.7.12	Aspen IQ ——推理传感器建模和实施软件包	44
2.2.7.13	Info Plus.21 ——实时数据库	45
2.2.7.14	Aspen Advisor ——工厂性能控制和收率统计应用软件	45
2.2.7.15	Aspen Advisor TM 专家系统——数据校正模块	45
2.2.7.16	Aspen Pims ——工厂计划优化管理系统	46
2.3	其他流程模拟软件简介	46
2.3.1	ChemCAD 流程模拟软件简介	46
2.3.2	PRO/II 流程模拟软件简介	47
2.3.3	Hysis 流程模拟软件简介	48
2.3.4	DESIGN II 流程模拟软件简介	48
2.3.5	ECSS 工程化学模拟系统	48
2.4	Aspen Plus 例题	49
2.4.1	例题 1 ——空气压缩机的模拟	49
2.4.1.1	例题 1 的条件	49

2.4.1.2	例题 1 的步骤说明	49
2.4.2	例题 2——闪蒸分离的模拟	58
2.4.2.1	例题 2 的条件	58
2.4.2.2	例题 2 的步骤说明	58
2.4.3	例题 3——RadFrac 的模拟	66
2.4.3.1	RadFrac 模拟简介	66
2.4.3.2	例题 3 的条件	69
2.4.3.3	例题 3 步骤说明	70
2.4.4	例题 4——怎样绘制组成曲线?	72
2.4.5	例题 5——设计规定和尺寸	72
2.4.6	例题 6——灵敏度分析	78
2.4.7	例题 7——一个原油蒸馏塔的模拟	85
2.4.8	例题 8——苯的高温分解	89
2.4.8.1	例题 8 的条件	89
2.4.8.2	例题 8 步骤说明	91
2.4.9	例题 9——Aspen Plus 聚合物项目	106
2.4.10	例题 10——蒸馏塔	114
2.4.10.1	例题 10 的条件	114
2.4.10.2	例题 10 的步骤说明	115

第 3 章 单元模拟技术..... 122

3.1	单元模拟的步骤	122
3.1.1	前处理	122
3.1.2	求解计算	123
3.1.3	后处理	123
3.2	CFD 商业软件	123
3.2.1	CFX	123
3.2.1.1	CFX 简介	123
3.2.1.2	CFX 的体系结构	123
3.2.1.3	CFX 的模块功能	124
3.2.1.4	CFX 的技术优势	126
3.2.1.5	CFX 的硬件配置要求及安装	126
3.2.1.6	CFX 的操作界面	128
3.2.2	Fluent	148
3.2.2.1	Fluent 简介	148
3.2.2.2	Fluent 的体系结构	148
3.2.2.3	Fluent 的模块功能	148
3.2.2.4	Fluent 的技术优势	149
3.2.2.5	Fluent 的安装	149

3.2.2.6	Fluent 的操作界面	149
3.2.3	其他软件简介	153
3.2.3.1	PHOENICS	153
3.2.3.2	STAR-CD	154
3.3	单元模拟软件的应用及操作示例	154
3.3.1	单元模拟软件的应用	154
3.3.1.1	CFX 的应用	154
3.3.1.2	Fluent 的应用	155
3.3.2	单元模拟软件的操作示例	155
3.3.2.1	CFX 操作示例	155
3.3.2.2	Fluent 操作示例	161
	参考文献	165

第 1 章 绪 论

化学工程是研究化学工业和其他过程工业（process industry）生产中所进行的化学过程和物理过程共同规律的一门工程学科。化学过程是指物质发生化学变化的反应过程，如柴油的催化裂化制备高辛烷值汽油是一个化学反应过程。物理过程是指物质不经化学反应而发生的组成、性质、状态、能量的变化过程，如原油经过蒸馏的分离而得到汽油、柴油、煤油等产品。实际的工业生产中，虽然很多过程的表现形式多种多样，但均可以分解为上述化学过程和物理过程。实际上，化学过程往往和物理过程同时发生。例如催化裂化是一个典型的化学过程，但辅有加热、冷却和分离，并且在反应进行过程中，也必伴随有流动、传热和传质。所有这些过程，都可通过化学工程的研究，认识和阐释其规律性，并使之应用于生产过程和装置的开发、设计、操作，以达到优化和提高效率的目的。

1.1 化工模拟

化学工程的研究对象通常是非常复杂的，主要表现在：①过程本身的复杂性——既有化学的，又有物理的，并且两者时常同时发生，相互影响；②物系的复杂性——既有流体（气体和液体），又有固体，时常多相共存，流体性质可有大幅度变化，如低黏度和高黏度、牛顿型和非牛顿型等，有时，在过程进行中有物性显著改变，如聚合过程中反应物系从低黏度向高黏度的转变；③物系流动时边界的复杂性——由于设备（如塔板、搅拌桨、挡板等）的几何形状是多变的，填充物（如催化剂、填料等）的外形也是多变的，使流动边界复杂且难以确定和描述。

由于化学工程对象的这些特点，使得解析方法在化学工程研究中往往失效。也从而形成了自己的研究方法（化学工程研究方法），其中有些方法并非首创，而是由别的领域移植而来。化学工程初期的主要方法是经验放大，通过多层次的、逐级扩大的试验，探索放大的规律。这种经验方法耗资大、费时长、效果差，人们一直努力试图摆脱这种处境。但是时至今日，对于一些特别复杂，人们迄今尚知之甚少的过程，还不得不求助于或部分求助于此法。到 20 世纪初，相当盛行的是相似论和量纲分析，其特点是将影响过程的众多变量通过相似变换或因次分析归纳成为数较少的无量纲数（无因次）群形式，然后设计模型试验，求得这些数群的关系。用这两种方法归纳实验结果，甚为有效。而对于反应过程，逐级的经验方法沿用了很长时间。由于不可能在满足几何相似和物理量相似的同时满足化学相似条件，用无量纲数群关联实验结果以获得反应过程规律的思路归于无效。直至 20 世纪 50 年代，才在化学反应工程领域中广泛应用数学模型方法。这一方法的影响波及到化学工

程的其他分支，使研究方法出现了一个革新。在上述方法的应用中，多方面体现了过程分解（将一个复杂过程分解为两个或几个较简单过程）、过程简化（较复杂过程忽略次要因素而以较简单过程简化处理）和过程综合（在分别处理分解了的过程后，再将这些过程综合为一）的思想。

早在 20 世纪 50 年代，人们就利用计算机解算化工过程的数学模型，以模拟化工过程系统的性能，这是最早的化工过程模拟技术。经过 40 年的发展，化工过程模拟已成为普遍采用的常规手段，广泛应用于化工过程的研究开发、设计、生产操作的控制与优化，操作工的培训和老厂的技术改造。随着计算机产业的发展，计算机硬件的性价比不断提高，软件环境日益改善丰富，使过程模拟技术发展的势头有增无减。目前，过程模拟的发展趋势是将单纯过程模拟与其他应用软件结合在一起，集成化、网络化，成为整个企业创新、管理和应用的工具，创造着巨大的商业价值。

对化工过程模拟而言，有不同层次的过程模拟，一个工厂的流程模拟的对象在十几米甚至上百米的规模范围，而其单元过程子系统则为几厘米至几米大小。进一步深入模拟每个单元过程设备的内部传递过程和反应过程，则模拟对象小到毫米亚微米级。而在计算分子物性或研制新的药品时，要模拟分子的性能，模拟的对象甚至小到纳米级。典型的化工模拟的层次如图 1.1 所示。

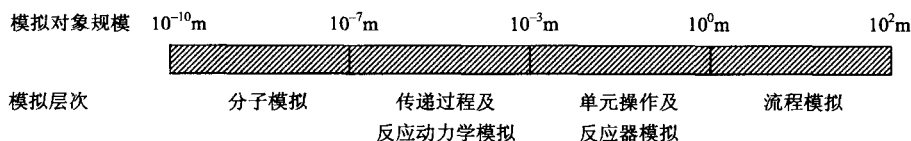


图 1.1 化工过程模拟层次

1.2 流程模拟

化工过程模拟或流程模拟是根据化工过程的数据，诸如物料的压力、温度、流量、组成和有关的工艺操作条件、工艺规定、产品规格以及一定的设备参数，如蒸馏塔的板数、进料位置等，采用适当的模拟软件，将一个由许多个单元过程组成的化工流程用数学模型描述，用计算机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。其中包括人们最为关心的原材料消耗、公用工程消耗和产品、副产品的产量和质量等重要数据。简言之，化工过程模拟就是在计算机上“再现”实际的生产过程。由于这一“再现”过程并不涉及到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，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。这一方法是计算机技术在化工方面最重要的应用之一。流程规模系统的迅速与准确不仅可节省时间，也可节省大量资金和操作费用，提高产品质量和产量，降低消耗。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、研究和开发及技术可靠性作出分析。同时流程模拟系统的快速准确对多种流程方案的分析和对比提供了保证。随着计算机技术的发展及应用软件技术的开发，化工过程模

拟技术日趋成熟和实用,商业化软件广泛出现于化工过程模拟中,其主要的代表有 Aspen Plus 系统和 PRO/E 系统。

国外已经有多年的开发流程模拟软件产品的经验,已经开发的流程模拟软件也很多。Aspen Tech 公司的模型从诞生到现在已经有 30 多年的历史,国外软件公司在化工过程领域推出的专用和通用的流程模拟软件也已经达到 60 多种。在我国,经过多年的研究和技术储备,在单元设备的建模、控制和优化上已经取得了丰富的成果,在一些关键技术已经达到了国际先进水平。但遗憾的是,我国在商品化和产业化方面与国外相比存在的差距非常大,至今还没有出现若干个可与国外产品抗衡的具有市场竞争力的石油化工流程模拟的软件产品。

随着国内外市场竞争日趋激烈,要求石油化工企业对市场和生产环境的变化做出快速而有效的响应,以获得最大的经济效益。对我国石油化工企业而言,深化改革企业的运行机制和管理体制,运用信息技术改造和提升传统产业,使其保持可持续发展,对于增强企业在国内外市场的竞争能力具有十分重要的意义。世界各国的经验表明,流程模拟、先进控制与过程优化技术是提高企业的经济效益、降低生产成本、提高其在国际市场中的创新力、应变力、适应力和综合竞争力的主要技术手段之一。所以,开展石油化工过程流程模拟结合实际生产过程中先进控制与过程优化技术的研究与应用具有十分重要的现实意义,是当前国内外石油化工行业广泛关注的问题。开发具有我国自主知识产权的流程模拟技术及其产品不仅具有广阔的市场前景和巨大的经济效益,而且可以打破国外产品在技术和市场上的垄断局面,对于我国石油化工行业的健康发展具有十分重要的意义。

1.3 单元模拟

过程工业的处理过程是以质量、动量和能量的连续流动为特征。传统手段对这一过程的处理在很大程度上是依靠经验以及一些宏观参数表达的经验关系式。现代过程工业普遍使用的流程模拟技术尽管更系统化和普遍地描述这一过程,使工艺工程师更深入地了解工艺链中的关联关系,但在流程模拟技术中,绝大部分单元过程仍被处理为“黑箱”模型。对流动、传质、热、反应比较敏感的单元过程的设计、放大,需要了解有关质量、动量、能量流更多微观和深入的信息,单元模拟技术即是为了解决这一问题而产生的。

在单元模拟中,用 N-S 方程这个高度复杂的非线性偏微分方程组来描述质量、动量、能量之间的关系。为求解该方程组,采用离散原理,将单元设备划分为许多微元,并在微元上用代数方程近似偏微分方程,然后联立求解所有微元代数方程以及边界方程,得到各个微元上的参数,如速度、温度、压力、浓度等。当划分的微元无限小时,计算结果也就无限逼近实际问题的解。

在实际过程中,单元内部的介质基本是多组分或多相的,传质、传热、反应过程相互耦合。为模拟这些复杂过程,可以对介质的每一相或每一组分分别求解 N-S 方程、各相或各组分通过各组 N-S 方程之间质量、力、热量的相互传递、相互影响。例如化学反应,反应物质量方程的一个消失量对应着生成物质量方程中的一个生成量,反应热对应着能量方程中的一个生成或消失量。同样,单元模拟技术通过离散方法求解这一耦合体系,以获得

空间和时间的速度分布、温度分布、压力分布、浓度分布、相分数分布等。

单元模拟技术可以提供传统手段难以获得的大量信息，如单元过程内部所有参数的空间分布和动态变化，通过这些信息可以深入理解单元过程内部的机理，在发生异常时亦有助于分析原因。因此，它是一种低成本的调优手段，当结构形式或结构参数变化后，单元过程内部随工艺参数和操作参数而变化的过程，可以在计算机上很方便地进行试验，直接用于优化和改造手段。而且单元模拟的计算不是经验性的，比较可靠。

单元模拟主要有以下四方面的应用。

(1) 工程放大 由于单元模拟技术采用机理性模型，原则上不限制结构形式、结构尺寸、工艺参数、操作参数，因此通过单元模拟技术可以跳过“实验室→小试→中试→工业”传统放大过程的某些环节，例如经过小试后直接进行工业装置放大验证。单元模拟技术作为一种工程放大手段，可以大量节省资金和时间，而且由于掌握了大量数据，放大的可靠性也较高。

(2) 技术创新，优化设计 在传统开发环境中，大量的创新思路或创新设想无法或难以验证，而在单元模拟技术辅助的开发环境中，新设想的验证变得容易，因此有助于进行技术创新，此外，由于极低的重复成本，单元模拟技术使包含大量设计循环的优化设计成为可能。

(3) 诊断及扩能改造 通过单元模拟技术不仅可获得对过程机理的深入理解，而且可判断过程的故障原因、关键部分以及扩能潜力，进一步可验证各种改造和扩能方案的效能。

(4) 生产调优以及控制 用单元模拟技术建立核心装置仿真模型，用于操作调优验证或用于控制系统数据采集，可有效降低运行风险，提高装置效能。

1.4 单元模拟与流程模拟的关系

单元模拟和流程模拟两者既有不同，又是相互联系的。两者的不同主要表现在以下几点。

(1) 流程模拟的处理对象是全工艺流程，本质上计算系统各单元过程之间的相互影响关系，其结果主要用于流程参数调优，提高生产效率。单元模拟的对象是单元过程，本质上是计算单元过程的内部状态，其结果主要有助于理解过程机理、设备调优以及故障诊断。

(2) 流程模拟本质上是半经验性的，因此需要一个具有各种单元过程模型的数据库，所能处理的单元过程类型以及工艺参数范围仅限于数据库中的已有数据，对于新型过程，或超出正常操作范围的工艺参数，流程模拟不能通过自身解决。单元模拟是机理性的，原则上不限制单元过程的类型，也不限制工艺参数的范围，因此可以用于研究新型单元过程，以及异常工艺、操作参数的影响。

(3) 流程模拟基本上是一维模拟，可以得到参数沿流程的变化，但不能获得参数的空间分布。单元模拟是三维动态模拟，不仅获得诸如速度、温度、压力、浓度在三维空间的分布，而且可获知这些参数的动态变化过程。

在实际工业应用中，流程模拟和单元模拟是互补的。通过流程模拟得到的工艺参数可以作为单元模拟的输入参数或边界条件。通过单元模拟检验单元过程的状态，反过来可以

用于修正流程模拟的参数。对于流程模拟不能处理的新型单元过程或超常工艺、操作参数，通过单元模拟检验或建模后可以扩充流程模拟的数据库。用流程模拟优化全流程参数以及确定全流程关键单元过程后，可用单元模拟对关键单元过程进一步优化。用流程模拟诊断系统故障部位后，可用单元模拟详细分析故障机理以及确定改造方案。因此，单元模拟与流程模拟是互补的两种基本工程手段，只是单元模拟实际工业应用的时间晚于流程模拟。

第 2 章 流程模拟技术

2.1 流程模拟的步骤

2.1.1 流程的建立

化工流程模拟就是在计算机上“再现”实际的生产过程，因此流程模拟的第一步就是要在计算机上建立需要模拟的流程。在这个过程中，用户根据需要模拟的实际过程，选择合适的模型去描述每一个单元操作过程；根据实际流程中的物流走向将单元操作的模块连接起来，形成完整的模拟所需要的工艺流程。

现行的流程模拟软件都给用户提供了交互式图形界面用于流程的定义，同时还提供了多种单元操作的模型库可供用户选择。用户只需在模型库中选择所需的模型，并在流程图窗口绘制整个流程图就可以完成流程的建立。同时还可以根据需要在该窗口中对建立的流程进行修改。

2.1.2 变量的设置

流程建立后，用户应该选择所需要进行的流程模拟的类型。根据模拟的需要完成必须的和可选的变量的输入。这其中包括模拟的名称、所用单位等变量的输入；也包括设计的物流的组分和组成的定义，热力学模型的选择，物性相关变量的输入及选择；还包括设备的尺寸以及操作的温度压力等操作参数的确定；用户也可以根据自己的需要选择输入报告的输出及格式。

2.1.3 程序的运行

流程的定义和变量的设置完成后，用户就可以根据需要采用合适的方式运行流程模拟了。

2.2 Aspen Plus 流程模拟商业软件

2.2.1 Aspen Plus 流程模拟软件介绍

Aspen Plus 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, ASPEN）。这一大型项目于 1981 年底完成，1982 年 Aspen Tech 公司成立并将其商品化，称为 Aspen Plus。

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软件。

它为用户提供了一套完整的单元操作模型，用于模拟各种操作过程，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；DIPPR——美国化工协会物性数据设计院设计的数据库。另外还有多个专用的数据库，如电解质、固体、燃料产品，这些数据库结合拥有的一些专用状态方程和专用单元操作模块，使得 Aspen Plus 软件可用于固体加工电解质等特需的领域，极大地拓宽了 Aspen Plus 的应用范围。

Aspen Plus 具有工业上最适用而完备的物性系统。其包含 1773 种有机物、2450 种无机物、3314 种固体物、900 种水溶电解质的基本物性参数。主要有：分子量、Pitzer 偏心因子、临界因子、标准生成自由能、标准生成热、正常沸点下的汽化潜热、回转半径、凝固点、偶极矩、密度等。对 UNIQUAC 和 UNIFAC 方程的参数也收集在数据库中。计算时可自动从数据库中调用基础物性进行传递物性和热力学性质的计算。

同时，Aspen Plus 还提供了几十种用于计算传递物性和热力学性质模型的方法，主要有：计算理想混合物汽-液平衡的拉乌尔定律、烃类混合物的 Chao-Seader、非极性和弱极性混合物的 Redlich-Kwong-Soave、BWR-Lee-Staring、Peng-Robinson。对于强的非理想液态混合物的活度系数模型主要有 UNIFAC、Wilson、NRTL、UNIQUAC。Aspen Plus 还提供灵活的数据回归系统 (DRS)，使用实验数据来求物性参数，可以回归实际应用中的任何类型的数据，计算任何模型参数，包括用户自编的模型。

此外，Aspen Plus 中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短缺的物性参数。当模拟流程中含有缺少的实验数据的新化学产品时，PCES 特别有用。

(2) 单元操作模块 Aspen Plus 中有五十多种单元操作模型，如混合、分割、换热、闪蒸、精馏、反应等，通过这些模型和模块的组合，能模拟用户所需要的流程。除此之外，Aspen Plus 还提供了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几种操作工况进行运行分析。

(3) 系统实现策略 (数据输入—解算—结果输出) Aspen Plus 提供了操作方便、灵活的用户界面——Model Manager，以交互式图形界面 (GUI) 来定义问题、控制计算和灵活地检查结果。用户在窗口环境中可使用 MOUSE 鼠标器和键盘操作，并提供多种菜单、包括一般文本菜单、下拉菜单 (Pull-down)、弹出菜单 (Pop-up)、对话框 (Dialogue box) 等，用户可以根据屏幕提示以填充式的表格方式填入数据，产生报告，定义图表和流程。另外还提供了各种图形、文本操作和编辑功能，如放大、移动、翻页，图形和文本的删除、修改、插入等，以帮助和指导用户进行流程模拟。用户通过 Model Manager 完成数据输入后，即可进行模拟计算，以交互方式分析计算结果，按模拟要求修改数据，调整流程，或修改或调整输入文件中的任何语句或参数。GUI 支持 Windows 及 Motif 的标准。提供了包括拷贝、粘贴等目标管理功能，能方便地处理复杂的流程图。图例符号编辑器使用户能够建立新的设备及 PFD 图例符号，修改已存在的图例符号。DXF 格式接口可以将 Model Manager 中的流程图按 DXF 标准格式输出，再转换成其他 CAD 系统如 AUTOCAD 所能调用的图形文件。

Aspen Plus 解算方法为序贯模块方法，对流程的计算顺序可以由用户自己定义，也可以由程序自动产生。对于有循环回路和设计规定的流程必须迭代收敛。所谓设计规定是指用户希望规定某处的变量值达到一定的要求。Aspen Plus 采用先进的数值计算方法，能使循环物料和设计规定迅速而准确地收敛。这些方法包括直接迭代法、正割法、拟牛顿法、Broyde 法等。这些方法均经 AspenTech 进行了修正。Aspen Plus 可以同时收敛多股断裂 (tear) 流通股，多个设计规定，甚至收敛有设计规定的断裂流通股。应用 Aspen Plus 的优化功能，可寻求工厂操作条件的最优值以达到任何目标函数的最大值。可以将任何工程和技术经济变量作为目标函数，对约束条件和可变参数的数目没有限制。

Aspen Plus 是目前应用最为广泛的化工大型通用流程模拟系统，是世界上唯一能处理带有固体、电解质及煤、生物物质和常规物料等复杂物质的流程模拟系统，其相平衡及多塔精馏计算体现了目前工艺技术水平的重要进展。

2.2.2 Aspen Plus 安装及运行环境

2.2.2.1 Aspen Plus 的安装

Aspen Plus 安装过程很容易，以 Aspen Plus 10.2 的 WINDOWS 版本为例，先在硬盘上建立一个目录，运行 CD1 内的 Setup.exe 程序进行安装，会出现如图 2.1 所示画面，单击 Aspen Engineering Suite 选项，则开始进行安装，单击 Next。

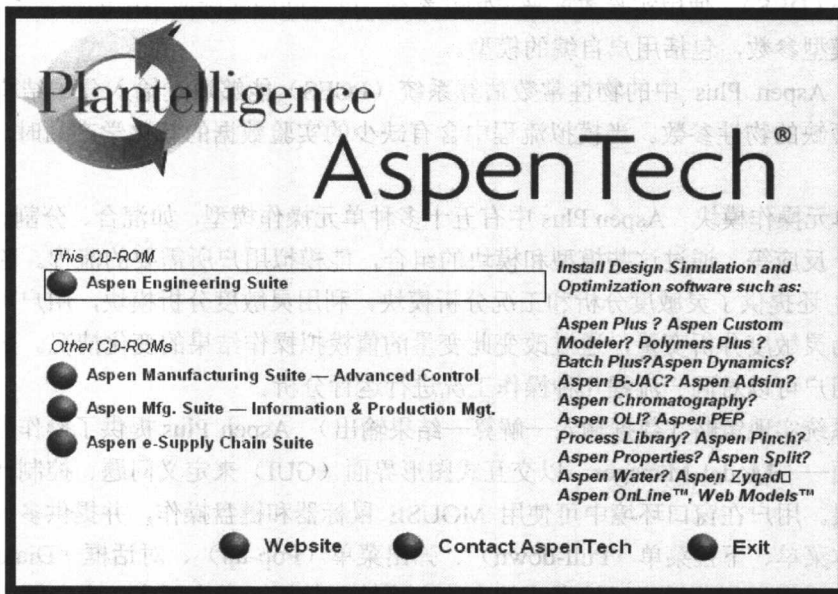


图 2.1 Aspen Plus 安装界面

选项直到出现如图 2.2 所示画面，如果在个人 PC 上直接使用 Aspen Plus，选择 All Products 选项 [如果选择 Licensed products on，则要先安装 ALM (aspen licensed manager)]。

单击 Next 继续会出现图 2.3 所示画面，选择 Standard Install 单击 Next，接着出现图 2.4 所示画面。

选择要安装的模块，Aspen Plus 必选，第一次安装时和 Online, Web (网络组件) 相关的模块不要选择。单击 Next 会出现图 2.5 所示画面。

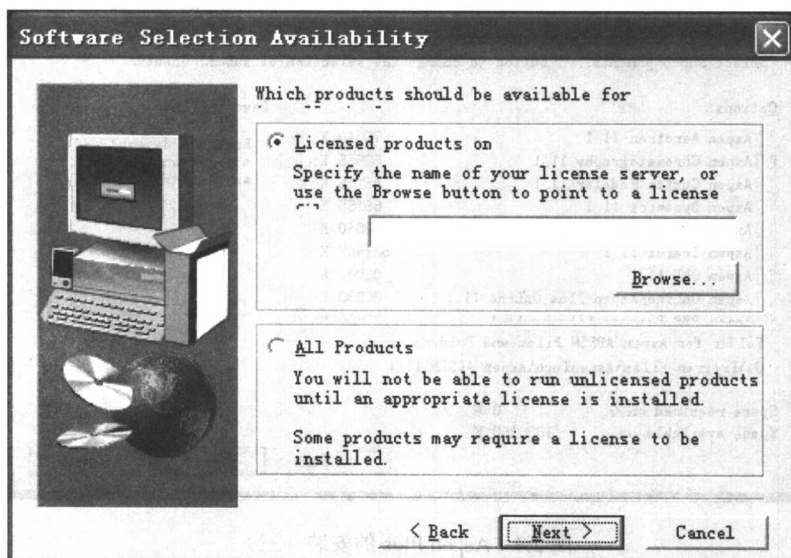


图 2.2 Aspen Plus 的安装 (一)

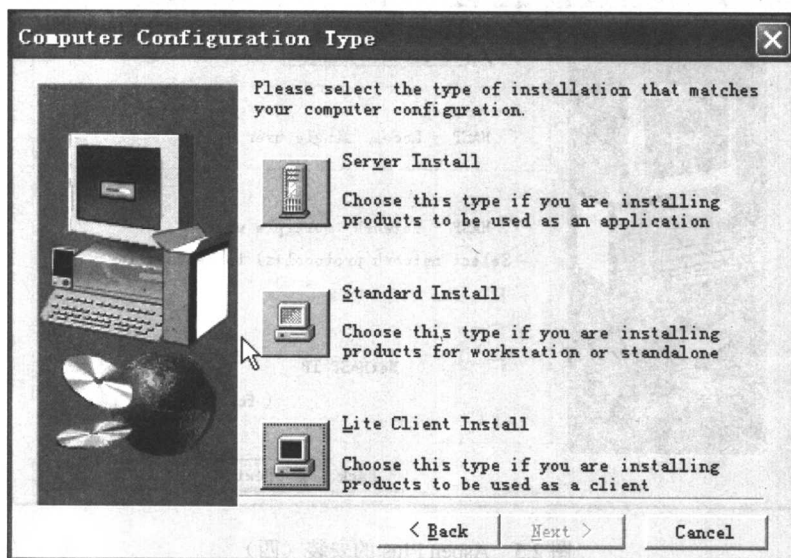


图 2.3 Aspen Plus 的安装 (二)

选择 Aspen License Manager 单击 Next 进行安装。出现插入 CD2 选项框时，选择 CD2 内文件所在的位置或插入 CD2 继续安装。安装完成后重新启动计算机，指定 license.dat 文件的位置，完成整个软件的安装。

2.2.2.2 Aspen Plus 的启动

Aspen Plus 安装完成以后，就可以利用它来进行流程模拟的工作了。在 WINDOWS 操作界面下，用鼠标左键点击“开始”，然后指向 Programs 中的 Aspen Tech，指向 Aspen Plus 然后点击 Aspen Plus 用户界面 (Aspen Properties User)，在弹出的启动对话框中 (见图 2.6) 选择是使用一个空白模拟 (Blank Simulation)、用模板建立一个新的模拟 (Template) 或者打开一个已经存在的模拟 (Open an Existing Simulation)。如果选择通过模板建立一个新运