

"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

Aspen Plus

热力学计算简明教程

USING ASPEN PLUS[®] IN
THERMODYNAMICS
INSTRUCTION

— A Step-by-Step Guide

本书为学生和教师在热力学课程中使用Aspen软件提供手把手的指导!

Aspen Plus软件作为一款模拟工具,可以完成许多重要的工程任务,可用于化工过程的概念设计、优化和性能监测。经过20多年的发展,Aspen仍然是工业界和学术界最流行、最强大的化学工程模拟程序之一。

本书介绍了Aspen Plus在热力学课程中的应用,针对如何在Aspen Plus(版本8.x)中进行热力学计算,为读者提供了自学式的、手把手的指导。书中含有大量的应用Aspen Plus软件求解不同类型的示例问题时的界面截图,这些问题包括汽液、液液、汽液液平衡和化学反应平衡以及液化、精馏、液液萃取等简单的应用过程。本书的特色如下:

- 方便的现代计算技术为热力学课程的教学提供了新的前景;
- 在采用最新的方法来预测和计算热力学性质和相行为方面,Aspen Plus具有广泛的应用;
- 专门为课外自学而设计的手把手式的计算和应用示例。

本书是更复杂的过程模拟课程的入门,为本科生热力学课程引入Aspen Plus软件提供了合理的方法。本书非常适合于学生在课外自学使用,同时,本书更强调的是热力学在实际问题中的应用,而非讲述热力学的基本原理。

作者简介

Stanley I. Sandler: 美国特拉华大学化学和生物分子工程系的化工杜邦讲席教授,也是该系分子和工程热力学中心的创立负责人。他发表期刊论文约400篇,论文大部分是关于热力学的,还有少数是关于教育的;曾出版独著教材《Chemical and Engineering Thermodynamics》(前3版)和《Chemical, Biochemical, and Engineering Thermodynamics》(第4版),同时还是其他7本书的作者或编者;曾为AIChE Journal杂志的编辑,美国国家工程院院士,AIChE和IChemE的会员;此外,还曾获得沃伦 K.刘易斯专业进步奖、AIChE创始人奖和其他许多国际奖项。

华东理工大学出版社



www.ecupress.com.cn

华东理工大学出版社



扫描关注官方微信



ISBN 978-7-5628-4729-8



9 787562 847298 >

销售分类建议

科技 化工模拟、化工计算

教材 本科、研究生教材 化工模拟、化工计算

定价:98.00元

“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

v

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