

## ASPEN PLUS 培训理论考试

一、填空题：（每题 3 分 共 48 分）

1、在精馏塔的模拟计算中用（**芬斯克方程**）求最小平衡级数（全回流）、用（**恩德伍德方程**）求最小回流比（平衡级数无穷大）、利用（**吉利兰关联式**）求出在一定回流比时对应的平衡级数；

2、物性模型分为：(1)、**理想、状态方程(EOS)模型**，写出其中常用的两个 **PENG-ROB、RK-SOAVE**，该模型用到范德华方程，其表达式为： $(P+a/V^2)(V-b) = RT$

$$a = \frac{27 R^2 T_c^2}{64 P_c} \quad b = \frac{RT_c}{8P_c}$$

(2)**活度系数模型**，写出其中常用的三个 **NRTL、UNIFAC、UNIQUAC**

(3) **特殊模型**，如要处理液相中的轻气体或超临界组分，需要采用**亨利定律**。

3、对于物性方法的选择，要知道物系的理想行为是指**符合理想气体定律和拉乌尔定律**；想物系是指**大小和形状相似的非极性组分**；非理想程度是指**分子相互作用**，例如，分子的大小、**形状和极性**；而选择物性方法的基本原则：**考虑因素包括物系中是否有极性组分，操作条件是否在临界区，体系中有无轻气体或超临界组分等**；

应用亨利定律的步骤分为：**定义亨利组分、调用亨利参数、在物性定义表选择亨利组分**。

5、在做板式塔的设计计算时，需要提供**计算范围、塔板类型、液流数、直径、板间距**；同时也要运用到其约束条件，主要包括**液泛因子、起泡因子、过设计分数**等；

6、在精馏塔 RADFRAC 严格核算模型，对于塔的收敛算法有三种，主要是**外循环即计算相平衡、中循环即计算设计规定、内循环即计算质量、能量平衡**。而计算塔的收敛技巧主要有：**检查所给的操作条件是否确实合理、增加迭代次数、增加进料闪蒸计算次数、增加计算的阻尼性、改变算法**。

7、精馏塔的水力学计算包括：①**塔板类型：Glitsch BALLAST、Koch Flexitray、Nutter Floatvalve、Bubble Cap、Sieve**。②**填料类型**；③**板式塔的设计计算**；④**填料塔的设计计算**；⑤**板式塔的核算**；⑥**填料塔的核算**；⑦**冷凝器/再沸器曲线**。

8、在反应器的模块中 RGIBBS 反应器的特点是：①**当发生的反应未知，或由于有许多组分参与反应，致使反应数量很多时，该功能十分有用**；②**通过吉布斯自由能最小化来确定在产品吉布斯自由能最小时的产品组成**；③**唯一能处理固-液-汽相平衡的模块**。但是在操作时必须提供下列条件之一：**停止条件、循环时间、结束时间**；必须定义**动力学**。

9、对于灵敏度分析的应用范围主要有：**研究输入变量的变化对过程（模型）的影响**；**用图表表示输入变量的影响**；**核实设计规定的解是否可行**；**初步优化**；**用准稳态方法研究时间变化变量**；

10、如果要用 EOS 模型计算逸度，其计算公式为：

$$f_i^v = \phi_i^v y_i P \quad f_i^l = \phi_i^l x_i P \quad \text{气液平衡: } \phi_i^v y_i = \phi_i^l x_i$$

11、在定义分子结构时，定义方式主要分为**以通用格式定义分子结构**；**以官能团为单位定义分子结构**。

12、我们知道在溶液中，自由能是  $G = G^I + G^E$  ( $G^I$ : 理想状态自由能、 $G^E$ : 过剩吉布斯自由能、 $G^E = RT \ln \gamma_i$ ) 当活度系数等于 1、过剩吉布斯自由能等于 0 的溶液称为常规溶液（理想溶液、正规溶液）。那正规溶液的活度系数的计算式为：

$$\ln \gamma_i = \frac{V_i^L}{RT} \left[ \delta_i - \sum_{i=1}^c \phi_i \delta_i \right]^2$$

$\delta_i$ : 溶解度系数       $\Phi_i$ : 体积分数

13、在单元操作用到一些物性，请补充下列表格：

物性	计算	举例
K 气液平衡常数	气-液平衡，液-液平衡	蒸馏、萃取
焓	能量平衡、热平衡	换热器、反应器
熵	功、功率	泵、压缩机
吉布斯自由能	化学平衡、液-液平衡	反应器、去水槽
摩尔体积（密度）	流率、停留时间	管线、反应器
粘度	压降	换热器

14、建立灵敏度分析的步骤有 ①定义被测量(采集)变量；②定义被操作(改变的)变量；③定义被操作(改变的)变量范围；④规定要计算的或要制成表的参量。

15、在计算精馏塔时，要涉及到到精馏塔的全塔效率，全塔效率是指气化效率（基于组分）、默弗里效率（单板效率）。

16、在做反应器时，要用到反应模型，反应模型主要分为三类，分别是基于物料平衡反应器:RSTOIC、RYIELD；基于化学平衡反应器: REQUIL、RGIBBS；基于动力学的反应奇: RCSTR、RPLUG、RBATCH。

二、简答题：

1、在用 ASPEN PLUS 进行模拟计算时，我们为什么要采用物性集？（9 分）

答: 采用物性集的原因是①物性集 (Prop-Set) 是把一个或几个物性放到一个集合里作为一个用户给定名的对象来访问的一种方法。当在一个应用中使用物性时只引用物性集名。

②用物性集可以报告热力学性质、传递性质和其它性质值。

③因为目前的物性集应用包括: 设计规定、Fortran 模块、灵敏度，物流报告，物性表 (Property Analysis)，塔盘性质 (RadFrac, MultiFrac, 等.); 加热/冷却曲线 (Flash2, MHeatX, 等.);

④物性集中通常包括的物性有: 物流气体摩尔分率 (VFRAC)、在第二液相中的液体分率 (BETA)、混合物恒压热容 (CPMX)、混合物粘度 (MUMX)。

⑤在物性集中可以运用到如下的性质: 混合物中组分的热力学性质、纯组分热力学性质、传递性质、电解质性质、与石油有关的性质。

2、在用物性集时，需要考虑用什么方法去定义物性集，请说出定义物性集的方法？（8 分）

答: ①用 *Properties Prop-Sets* 表来指定一个物性集中的物性；②用 Search 按钮可以查找一个物性；③将所有所指定的限定符都应用于每一个所指定的物性；④用户可以在 *Properties Advanced User-Properties* 表中通过提供 Fortran 子程序定义新的物性。

3、请解释为什么要用数据回归、目的以及其方法、步骤？（12 分）

答: (1)用数据回归的的原因是当参数丢失时或参数不能准确描述该过程时；

(2)其目的是为了准确描述在温度、压力和组成范围内的重要物性；

(3)要用到数据回归的方法有数理统计即最小二乘法；

目标函数最小化: 
$$Q = \sum_i W_i \left[ \sum_j \sum_k \left( \frac{Z_{jk}^m - Z_{jk}^c}{\delta_{jk}} \right)^2 \right]$$

约束与限制: LVE  $f_i^I = \phi_i^I(T^c, P^c, X^{c,i}, \theta) X_i^{c,I} P^c$

LLE  $f_i^1 = f_i^2$

性质  $PROP(T^c, P^c, X^c, \theta) = PROP^c$

参数边界:  $\theta_{LB} \leq \theta \leq \theta_{OB}$

(4)建立数据回归的步骤: ①定义运行模式 Data Regression; ②定义组分; ③选择物性方法; ④输入实验数据; ⑤输入一些已知的参数; ⑥定义回归工况;

I 要注意选择物性方法; II 定义回归或模型参数; III 输入数据 ID; IV 一致性测试; V 确定要回归的参数; 可以选择: 回归、固定、不回归(去除); VI 定义初值和上、下限;

4、我们学习过严格精馏模型内部的设计规定, 对于流程范围内的设计规定应该如何做, 并请说出设计规定的注意事项、当设计规定不能收敛时应该采取的措施? (13 分)

答: 1、建立设计规定的步骤有①标识被测量(采集)变量; ②规定目标函数(Spec)和目标(Target); ③设置目标函数允差; ④定义被操作(改变的)变量; ⑤定义被操作(改变的)变量范围。

2、设计规定注意事项有①只有被输入到流程中的参量才能被改变; ②设计规定迭代执行计算。为被改变变量提供一个好的估值将有利于设计规定收敛。这对于带有几个相互关联的规定的大流程尤其重要; ③设计规定结果能够在 Data/Convergence/Convergence 下面找到。打开相应的求解模块并选择 Results 表, 可以在相应的 Stream/Block 结果表中直接查看被操作变量和/或被采集变量的最终值; ④如果设计规定不收敛时, 应该采取的措施是: a. 检查被操作变量是否在它的上限或下限上;

b. 核实在指定的被操作变量范围内是否存在解, 可以通过执行灵敏度分析来完成;

c. 检查被操作变量是否真正影响被采集变量;

d. 对被操作变量提供一个更好的初值;

e. 尝试改变与设计规定相关的收敛模块特性(迭代数和步长, 运算法则等);

f. 尝试把被操作变量范围变小, 或放宽目标函数允差以有利于收敛;

g. 确保目标函数在被操作变量变化范围内有平直曲线区间;

⑤变量的单位是设计规定声明的 Units Set 所规定的变量类型的单位;

5、我们常用到的状态方程和活度系数模型主要有那些, 请举例说明? (10 分)

答: ①活度系数模型: NRTL、NRTL-RK、UNIFAC、UNIQUAC、WILSON;

NRTL: 推荐使用, VLE、VLLE、LLE, 需要二元参数很多;

LLE:  $\alpha_{12}=0.2$ ;

WILSON: VLE 比较好, 二元交互作用参数少; 不能算 LLE;

UNIFAC: 不需要二元交互作用参数;

②状态方程模型: BWR-LS、LK-PLOCK PENG-ROB、RK-SOAVE;

③亨利定律的应用:  $y_i = \left( \frac{H_i}{P} \right) \frac{\gamma_i^*}{\phi_i^v} x_i$

结合活度系数模型使用;

描述超临界气体或轻气体在液相中的溶解度。