

文章编号:1006-4184(2007)01-0009-03

# 物性估算在 ASPEN PLUS 软件中的应用

戚一文, 方云进(华东理工大学 国家化学工程重点实验室, 上海 200237)

**摘 要:** 利用 Aspen Plus 软件提供的物性估算功能, 计算发酵液中低浓度 1,3- 丙二醇分离的中间产物 2- 甲基- 1,3- 二噁烷(2MD) 的物性, 从而模拟分离过程, 确定工艺条件, 得到理想的产物结果。

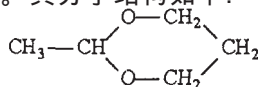
**关键词:** Aspen Plus 物性估算; 模拟; 1,3- 丙二醇

Aspen Plus 是一款功能十分强大的工艺模拟软件, 对有机化工、无机化工、电化学、石油化工等各个领域的各种单元操作均可模拟。其自带的各种物质的物性数据库较全, 可满足绝大多数的工艺过程的模拟要求。但在实际的工艺模拟计算过程中, 有时也会遇到在 Aspen Plus 自带的物性数据库中查不到的物质, 使模拟过程无法正常进行下去。此时, 利用 Aspen Plus 软件提供的物性估算功能, 可以很好地解决此类问题。以下以发酵液中低浓度 1,3- 丙二醇分离项目<sup>[1,2]</sup>中的重要中间产物 2- 甲基- 1,3- 二噁烷<sup>[3]</sup>(2MD) 的物性估算为例, 说明 Aspen Plus 软件物性估算功能的使用。

为了成功估算 2MD 的物性, 首先要向 Aspen Plus 软件提供必要的基本物性数据, 包括分子结构、常压沸点、分子量、各种试验测得的物性等。以上这些物性中, 仅分子结构是物性估算中所必需的, 依据分子结构, Aspen Plus 软件可计算出常压沸点和分子量, 从而进一步计算所需的其它各种物性。

## 1 2MD 物性的输入

2- 甲基- 1,3- 二噁烷(2MD) 是 1,3- 丙二醇分离项目中的中间产物, 由于 Aspen Plus 软件自带的物性数据库中查不到 2MD, 使模拟分离、确定工艺条件的过程中遇到困难, 所以采用物性估算的功能对 2MD 计算。其分子结构如下:



收稿日期: 2006-10-12

作者简介: 戚一文(1981-), 男, 浙江富阳人, 现就读于上海市华东理工大学化工学院, 硕士研究生。方云进, 男, 浙江人, 上海市华东理工大学化工学院副教授, 博士, 高级工程师。

已知的其它物数据: 分子量 102.13; 沸点(1atm): 110 °C; 密度(25 °C): 0.98 kg/m<sup>3</sup>; 粘度(25 °C): 0.603 cp; 标准生成热(25 °C): -363.02 kJ/mol; 标准熵(25 °C): 303 J/(mol · K); 表面张力(25 °C): 24.93 dyn/cm。

因为采用基团贡献法来估算 2MD 的物性, 所以在 properties 中选用 UNIFAC 为计算方法, 然后输入分子结构。自定义新物质 2MD 后, 在 Molecular Structure Object Manager 区中选定 2MD, 再点 Edit; 在 General 标签中依次输入各原子间的化学键, 也可以在 Functional Group 标签或 Formula 标签中输入分子结构(如图 1)。

输入已知的物性常数: 在左侧的数据浏览区点 Properties\Parameters\Pure Component, 点 New\OK 生成新的输入表单 USRDEF-1, 输入相应的 scalar parameters。

输入相应的实验数据: 在左侧的数据浏览区点 Properties\Data, 点 New 按钮生成新的输入表单; 在新的输入表单中将数据分别填入相应的 Setup 和 Data 输入标签。

最后在 Setup 标签中选 Estimate all missing parameters。

## 2 工艺流程及条件的输入

整个低浓度 1,3- 丙二醇分离过程由加成反应、逆流萃取、萃取剂精馏、2MD 精馏、水解、1,3- 丙二醇精馏组成, 具体流程(如图 2)。

反应器 B-1 中 1,3- 丙二醇与乙醛反应为可逆反应, 把实验得出的经验动力学方程输入 Reactions, 包括指前因子、活化能等, 并输入反应器体积、温度; 反应器 B-2 为水解反应, 同样输入经验动力学

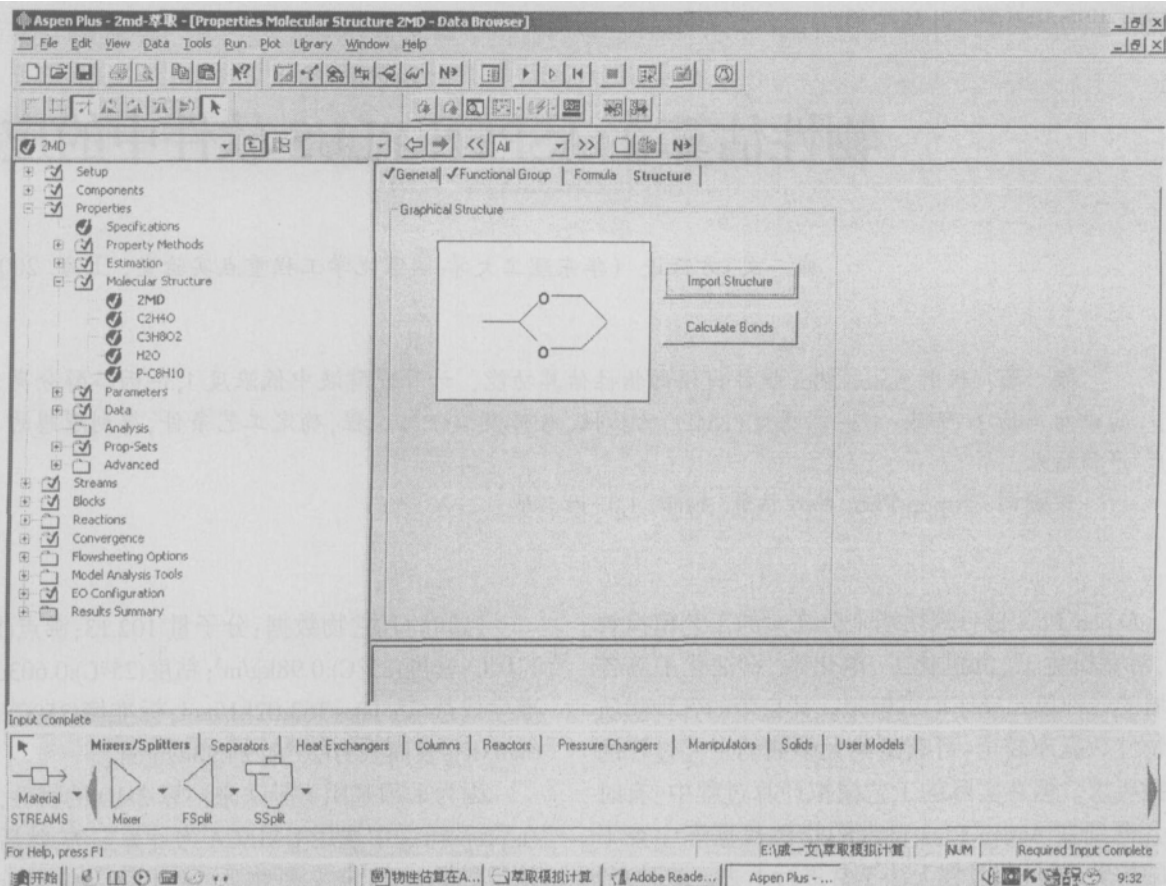


图 1

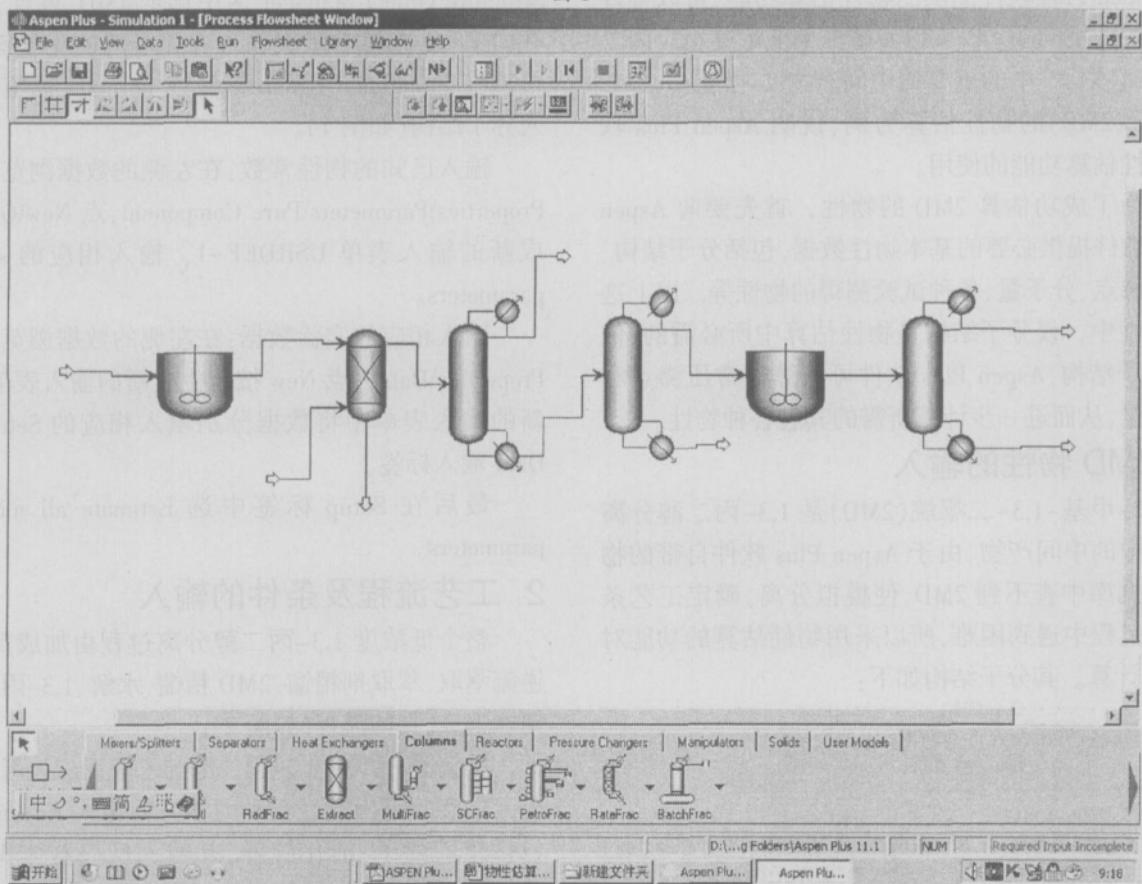


图 2

塔性能及操作参数

序号	塔型	塔板数	进料位置(由上向下)	温度分布/	压力分布/mmHg	关键操作参数(质量分数)
B-2	萃取塔	9	有机相: 1 水相: 9	塔顶: 39.5 塔釜: 40.2	塔顶: 760 塔釜: 778	塔釜 2MD<0.1%
B-3	萃取剂精馏塔	12	6	塔顶: 22.4 塔釜: 119.4	塔顶: 760 塔釜: 784	塔釜乙醛<0.1%
B-4	2MD 精馏塔	40	20	塔顶: 110.0 塔釜: 138.3	塔顶: 760 塔釜: 840	塔釜 2MD<0.1%
B-6	1,3- 丙二醇精馏塔	10	5	塔顶: 41.6 塔釜: 214.1	塔顶: 760 塔釜: 780	塔釜 1,3- 丙二醇<0.1%

方程、反应器体积和温度。

这样就定义好了所有需要的输入值,再定义好各单元操作模块的输入后,即可进行工艺模拟计算。

### 3 物性估算和流程计算结果

估算得到 2MD 的沸点为 110.4,与实验得出的沸点 110 非常接近,可以满足设计计算的需要。同时估算得到 2MD 的扩展安托尼蒸汽压因子(Extended Antoine vapor pressure),从而可以在没有汽-液平衡数据的条件下,进行 2MD 的精馏计算。

由于有关的物性是估算出来的,可能与实际值有些出入,对计算的结果应做进一步分析,或与已知的结果做比较,以验证物性估算的可靠性。

模拟计算结果:发酵液进料中含有 1,3- 丙二醇 5%(质量分数),经过反应、萃取、精馏、水解、精馏等过程,可以达到纯度 99.9%以上。1,3- 丙二醇的进料流量为 98.7kmol/h,出料流量为 97.4kmol/h,收率可达 98.7%以上。

### 4 结论

## Application of Properties Estimation in ASPEN PLUS Software

QI Yi-wen, FANG Yun-jin

(State Key Laboratory of Chemical Engineering, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

**Abstract:** Compute the properties of intermediate product 2-methyl-1,3-dioxane (2MD) separated from the low concentration of 1,3-propanediol in fermentation broth using the function of properties of matter estimate provided by Aspen Plus software, and then simulate separation process, ascertain process condition, obtain the ideal product result.

**Keywords:** Aspen Plus; properties estimation; simulation; 1,3-propanediol

通过 2MD 物性估算,可以得到未知的物性数据,这样就能对整个工艺流程进行模拟计算。从低浓度的 1,3- 丙二醇通过反应、萃取、精馏、水解等过程,得到高浓度的 1,3- 丙二醇,从而得到理想的工艺条件和数据结果。

对于 Aspen 软件中没有物性的物质,物性估算不失为一种可行的方法,在无法购买商用物性数据库的情况下,利用 Aspen 软件本身的物性估算与已知的实验数据校验后,其可靠性有一定的保证,计算精度完全可以满足工程设计的需要。

**参考文献:**

- [1] 赵红英,程可可,向波涛,等.微生物发酵法生产 1,3- 丙二醇[J].精细与专用化学品,2002,10(13),21~24.
- [2] 周鹏,方云进.发酵液中低浓度 1,3- 丙二醇浓缩提纯工艺研究进展[J].化学与生物工程,2005,(2),4~6.
- [3] 张慧敏,李彦,钱倩,等.反应萃取耦合分离 1,3- 丙二醇中缩醛反应的研究[J].化学反应工程与工艺,2005,6(21),551~555.