

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。

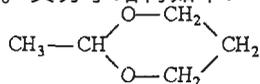
关键词: Aspen Plus 物性估算; 模拟; 1,3- 丙二醇

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^[1,2]中的重要中间产物 2- 甲基- 1,3- 二噁烷^[3](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/m³; 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。

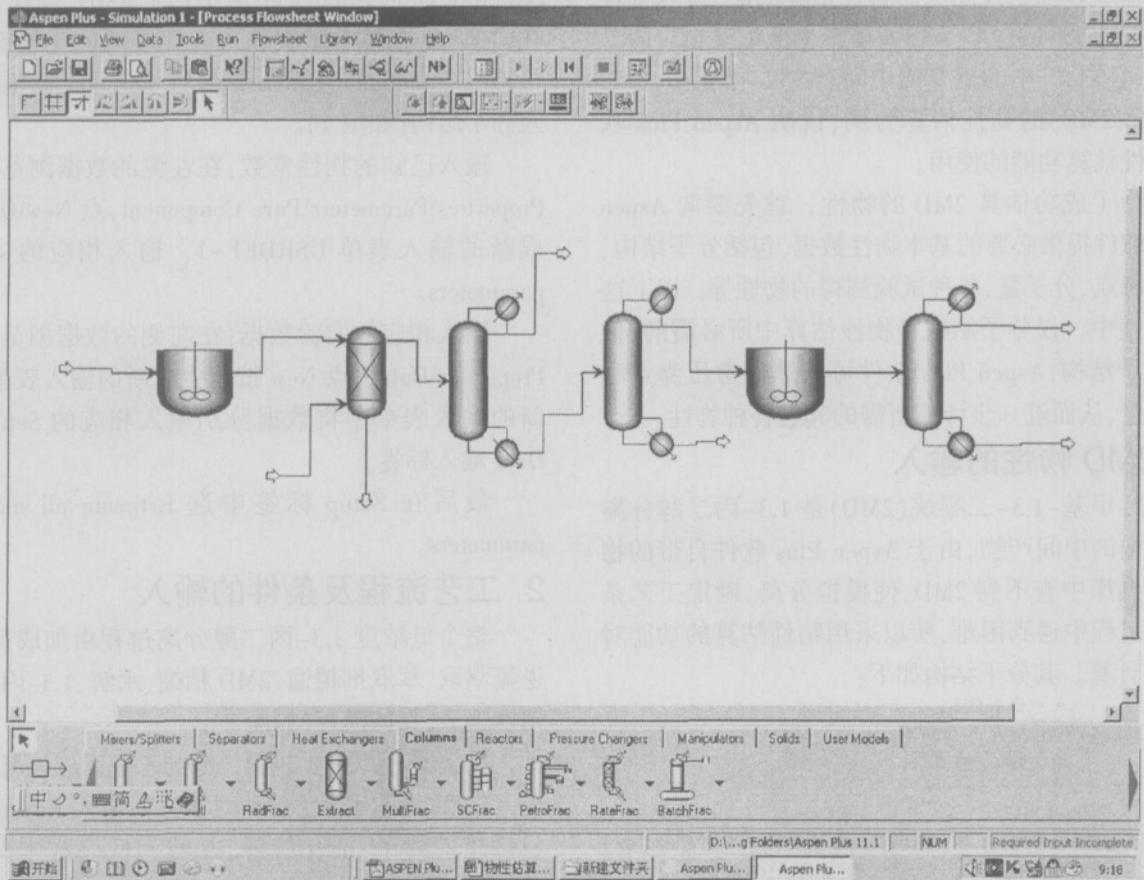
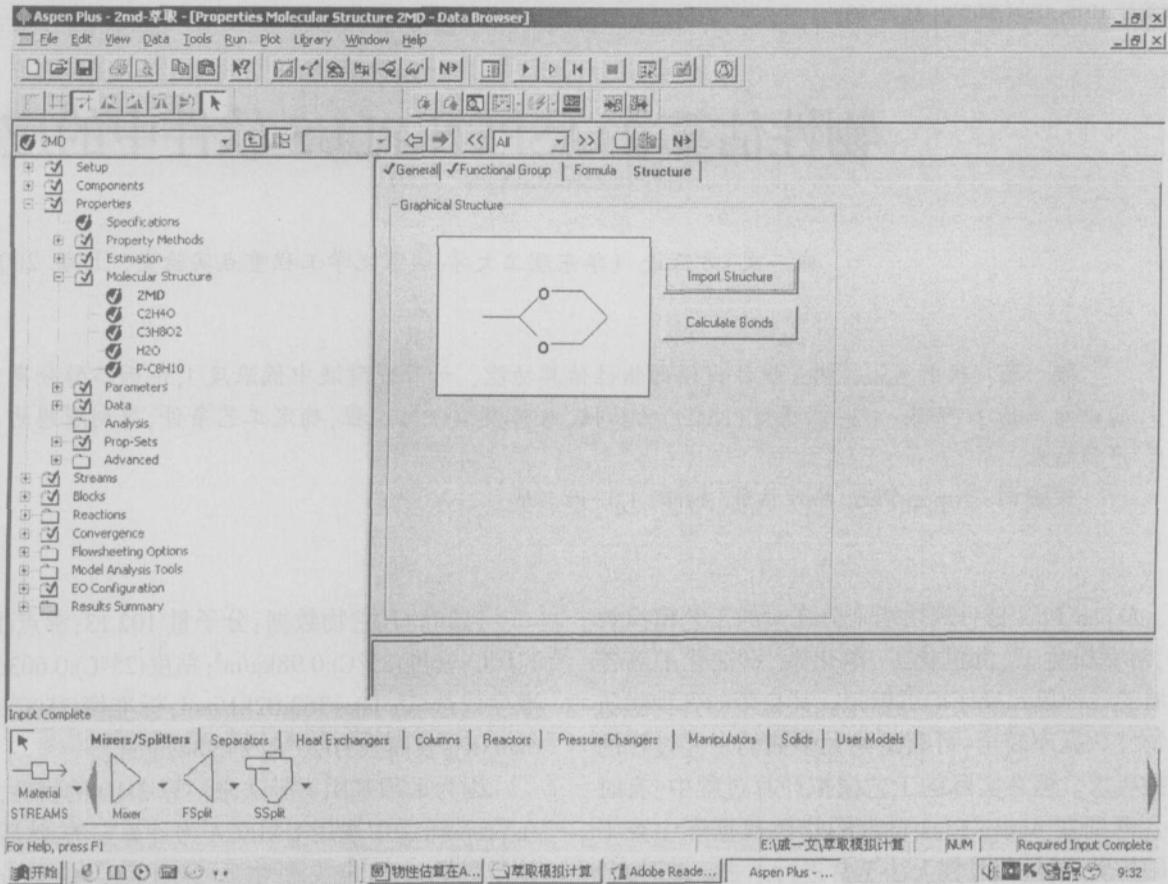
输入相应的实验数据: 在左侧的数据浏览区点 Properties\Data, 点 New 按钮生成新的输入表单; 在新的输入表单中将数据分别填入相应的 Setup 和 Data 输入标签。

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



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.