Aspen Plus 物性估算技巧

编者按

1）这篇中文技术支持文章将会告诉我们 Aspen Plus 物性估算技巧。

2）您也可以从 AspenTech 技术支持网站链接中找到对应的中/英文版技术支持文章。

3）欢迎您点击下方 AspenTech 培训中心链接，查看 AspenTech 中文公开课程安排：

北京公开课程安排

上海公开课程安排

中国其他地区 / 网络虚拟课程安排

4）在您使用我们的软件，或者查看我们的技术支持文章时，遇到任何问题，欢迎联系 AspenTech 技术支持：

邮箱：esupport@aspentech.com

网址：esupport.aspentech.com

电话：(86) 10 53875867

5）言归正传，请您欣赏我们的中文技术支持文章：

Aspen Plus 物性估算技巧

问题描述

Aspen Plus 物性估算技巧

解决办法

基本估算技巧如下：：

A. 相似物质代替

如果某个物质的部分或全部物性都缺少，可以使用和该物质化学性质相似的物质物性代替。

© 2019 Aspen Technology, Inc. All rights reserved.

1. 缺少某一个物质的全部物性参数

1. 在 Aspen 数据库中找到一个化学性质相似的物质。
2. 将该物质的化学式填写在缺少物性的物质 ID 上。
3. 在物性参数输入表单换上准确的分子量。

2. 缺少某一个物质的部分物性参数

1. 在 Aspen 数据库中找到一个化学性质相似的物质。
2. 用工具菜单中的调取物性参数，将结果表单中缺少的物质物性显示出来。
3. 在物性参数输入表单中输入缺少的物性。

B. 同系物质

该方法是基于碳原子数量和基准性质的关联由外推法获得（通常情况下），例如：需要估算一个有 20 个碳的饱和烃的临界温度，我们外推同系小分子烃临界温度对碳原子数的关联性。该方法比基团贡献外推法（Joback, Ambrose 等）更适用，因为这些方法的计算结构中没有考虑原子数目。

C. 基于基团贡献方法估算物性

1. 参考文献

- Danner, R.P., and T.E. Daubert, Manual for Predicting Chemical Process Design Data}, DIPPR (AIChE), New York, 1983 extant

- Reid, R.C., J.M. Prausnitz, and B.E. Poling, The Properties of Gases and Liquids}, 4th ed. McGraw-Hill, New York (1987)

2. 纯物质物性预测方法

- 沸点
- 临界性质
- 蒸气压和偏心因子
- 汽化热
- 生成热、生成熵、生成自由能
- 理想气体、液体和固体热容
- 气体和液体密度
- 传递性质
- 范德华体积和面积

3. 二元交互参数预测方法

- UNIFAC：预测活度系数方法（有几种不同方法：UNIFAC, UNIFAC-Larsen, 和 UNIFAC-Dortmund）
- ASOG： 另一种可以预测活度的基团贡献法，目前已被 UNIFAC 家族方法取代。

关键词

物性估算、基团贡献法、缺失参数

© 2019 Aspen Technology, Inc. All rights reserved.