如何在 Aspen Plus 中定义非数据库组分?

编者按

1）这篇中文技术支持文章将会告诉我们如何在 Aspen Plus 中定义非数据库组分。

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：

如何在 Aspen Plus 中定义非数据库组分？

问题描述

如何在Aspen Plus中定义非数据库组分？

问题背景

如果用户检索了Aspen Plus的所有数据库，仍然找不到某种组分，那么此组分就是非数据库组分。用户在实际生产或实验中可能会用到数据库中没有的组分（non-databank component），为了进行模拟，需要将该组分定义到软件中。

解决方案

© 2018 Aspen Technology, Inc. All rights reserved.

1. 定义非数据库组分。在 **Components | Specifications** 表单，定义组分的 ID 号，将分子式和组分名称栏保持为空。
2. 决定模拟所需要的参数。

对于所有的模拟，都需要分子量（MW），扩展的安托因常数（PLXANT），理想气体热容参数（CPIG 或者 CPIGDP），汽化热参数（DHVLWT 或者 DHVLDP）。这个表格可以在帮助菜单 **Using the Properties Environment | Physical Property Parameters and Data | Determining Property Parameter Requirements** 目录下找到。

其他所需要的参数视所选用的物性方法的而定。关于物性方法所需参数的信息，请在帮助菜单 **Aspen Plus Reference | Physical Property Methods and Models | Physical Property Methods | Property Method Descriptions** 目录下找到。

3. 您可以通过查文献、做实验、参数估计（Property Constant Estimation，PCES）或参数回归（Data Regression，DRS）以获取所需的参数。

关于物性参数估计和参数回归的详细信息，请参考帮助菜单 **Using the Properties Environment** 目录下的 **Estimating Property Parameters** 和 **Regressing Property Data**。

4. 输入所需的参数。在 **Properties | Methods | Parameters** 表单中输入一元、二元或三元交互作用参数。

此外，您还可以使用 **User-Defined Component Wizard**（用户自定义组分向导）来定义组分，而且您可以随时通过 **User-Defined Component Wizard** 或者去到相应的表单，来修改填入的参数。

使用此向导可以定义纯组分数据库中未包含的组分。您可以定义常规组分（conventional components）、固体组分（solid components）或非常规组分（nonconventional components）。通过向导可以输入一些常规数据，比如分子量、常压沸点、蒸汽压和比热。

请点击 **Components | Specifications | Selection** 页面的 **User Defined** 按钮来打开用户自定义组分向导。

关键词

Non-databank component, 非数据库组分, PCES, 参数估计, DRS, 参数回归, Parameter, 参数, Estimation, 估计, Regression, 回归, Chinese, 中文

© 2018 Aspen Technology, Inc. All rights reserved.