

ASPEN物性方法

1物性方法

2从数据库中检索纯物质的物性参数

3定义物性集（查看各流股物性）

4物性估计Property estimation

5物性分析Property analysis

6参数拟合

1 物性方法

Aspen 提供的物性参数

物性	代号	物性	代号
分子量	MW	临界压缩因子	ZC
临界温度	TC	偏心因子	OMEGA
临界压力	PC	偶极距	MUP
临界体积	VC	回转半径	RGYR

1 物性方法

Aspen 提供的物性参数

物性	代号	参数个数
ANTOIN蒸汽压关联式参数	PLXANT	9
理想气体热容关联式参数	CPIG	11
WASTON关联式参数	DHVLWT	5
RACKETT液体容积方程关联式	RKTZRA	1
CAVETT综合方程参数	DHLCAT	1
CAVETT综合关联式参数	PLCAVT	4
SEALCHASD-HILDEBRNUD方程参数	VLCVT1	1
标准液体容积方程参数	VLSTD	3
水溶解度方程参数	WATSOL	5
AUDRADE液体粘度关联式参数	MULAND	5

1 物性方法

Aspen 提供的物性参数

物性	代号	物性	代号
生成热	DHFORM	API重度	API
生成自由能	DGFORM	溶解度参数	DELTA
沸点	TB	等张比容	PARC
标准沸点下的 摩尔体积	VB	气体粘度	MUVDIP
汽化热	DHVLB	液体粘度	MULAND
凝固点	TEP	导热系数	KVDIP
相对密度	SG	表面张力	SIGDIP

1 物性方法

Aspen提供的物性预测模型

理想模型

状态方程模型

活度系数模型

特殊模型

1 物性方法

在一个模拟中，所执行的主要热力学性质计算是相平衡。在一个平衡的系统的汽液相中，对于每个组分*i* 最基本的关系是：

$$f_i^v = f_i^l \quad (1)$$

其中：

f_i^v = 组分*i*在汽相中的逸度

f_i^l = 组分*i*在液相中的逸度

1 物性方法

应用热力学提供了两种通过相平衡关系根据可测量的状态变量来描述逸度的方法，即状态方程方法和活度系数方法。

在状态方程方法中：

$$f_i^v = \phi_i^v y_i p \quad (2)$$

$$f_i^l = \phi_i^l x_i p \quad (3)$$

同时：

$$\ln \phi_i^\alpha = -\frac{1}{RT} \int_{\infty}^{V^\alpha} \left[\left(\frac{\partial P}{\partial n_i} \right)_{T,V,n_{ij}} - \frac{RT}{V} \right] dV - \ln Z_m^\alpha \quad (4)$$

1 物性方法

在活度系数方法中:

$$f_i^v = \phi_i^v y_i p \quad (5)$$

$$f_i^l = x_i \gamma_i f_i^{*,l} \quad (6)$$

其中: ϕ_i^v 依照方程4计算,

γ_i = 组分i的液相活度系数。

$f_i^{*,l}$ = 纯组分i在混合物温度下的液相逸度。

1 物性方法

对于溶剂: 一个溶剂的参考状态被定义为在系统的温度和压力下液态的纯组分。根据这个定义, 当 x_i 接近1时, γ_i 接近1。

液相参考逸度 f_i^{*l} 被计算为:

$$f_i^{*l} = \varphi_i^{*v}(T, P_i^{*l}) P_i^{*l} \theta_i^{*l} \quad (28)$$

1 物性方法

其中:

$\phi_i^{*,v}$ = 纯组分i在系统温度和汽相压力下的逸度系数, 由汽相状态方程计算

$p_i^{*,l}$ = 纯组分i在系统温度下的液体蒸汽压力

$\theta_i^{*,l}$ = 压力的Poynting 校正系数

$$= \exp\left(\frac{1}{RT} \int_{p_i^{*,l}}^p V_i^{*,l} dp\right)$$

在低压下, Poynting 校正系数接近1, 可被忽略。

1 物性方法

理想物性方法

IDEAL

SYSOP0

1 物性方法

状态方程

基于Lee方程的物性方法

基于PR方程的物性方法

基于RK方程物性方法

1 物性方法

活度系数模型

基于NRTL的物性方法

基于UNIFAC的物性方法

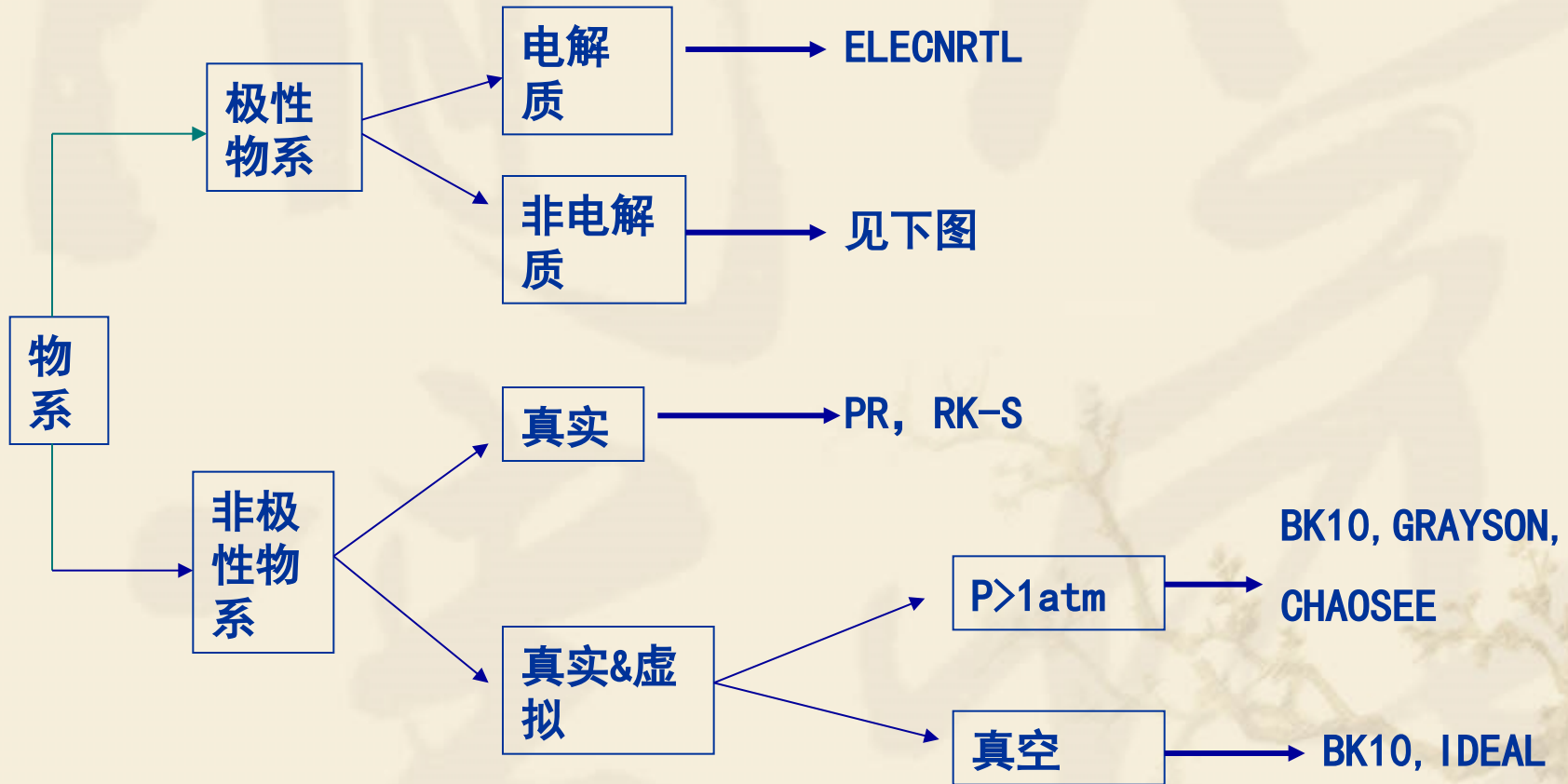
基于UNIQUAC的物性方法

基于WILSON的物性方法

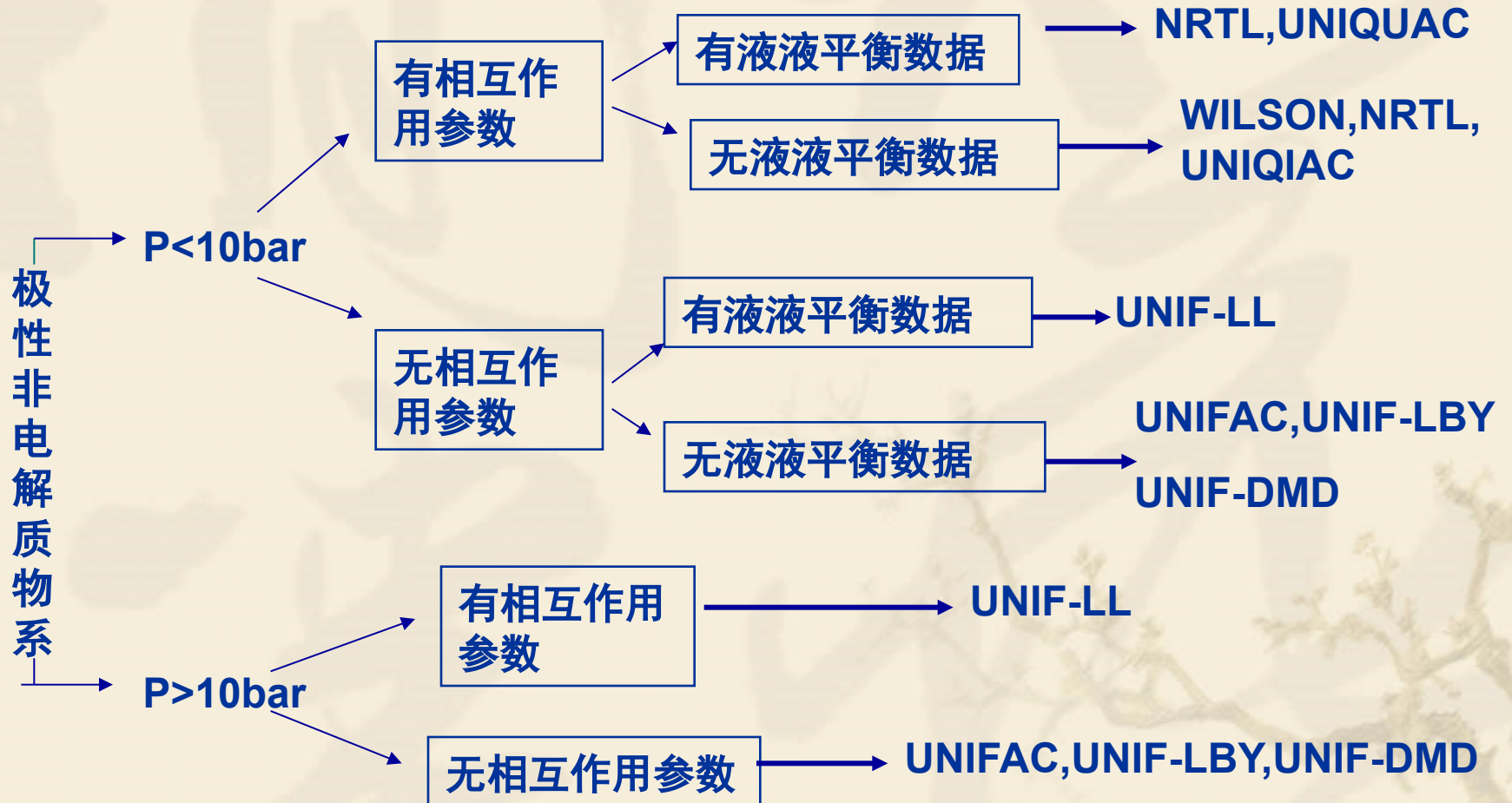
1 物性方法

- ❖ 物性方法选择
- ❖ 经验选取

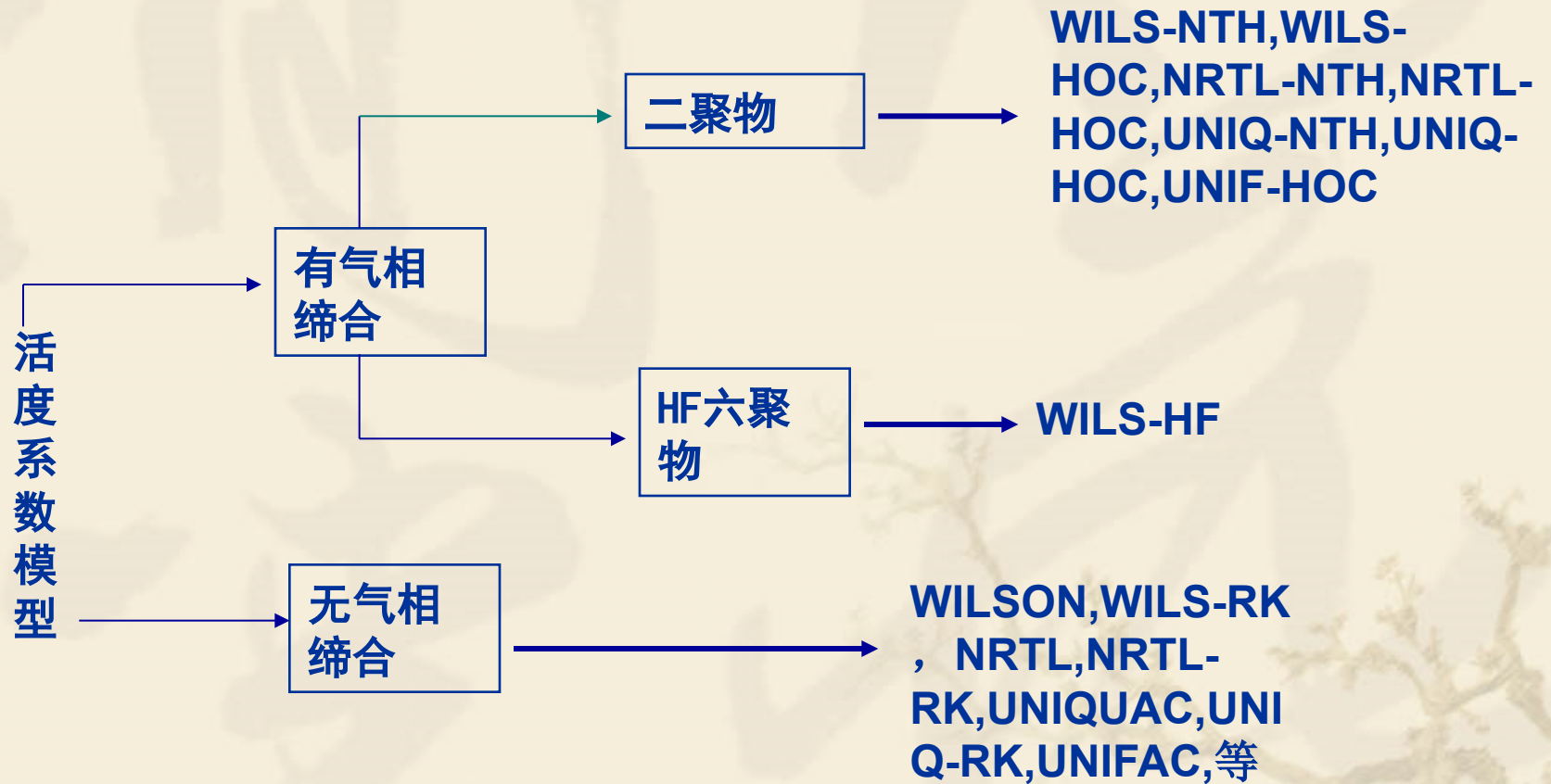
1 物性方法



1 物性方法



1 物性方法



2从数据库中检索纯物质的物性参数

对于许多组分，ASPEN PLUS数据库储存了所有必需的参数。由于内置的纯组分参数是和模拟引擎结合在一起，页面上不能自动出现可用的参数

2从数据库中检索纯物质的物性参数

欲观察各组分的物性，可采用如下两种方法：

- 1 将计算结果以*.rep的形式输出，在此报告中可观察组分物性参数。
- 2采用工具栏中（Tool）的检索参数结果（Retrieve Parameters results）功能

2从数据库中检索纯物质的物性参数

1在component specification输入需检索的物质名称

2从数据库中检索纯物质的物性参数

Specifications

Selection Petroleum Nonconventional Databanks

Define components

Component ID	Type	Component name	Formula
CCL4	Conventional	CARBON-TETRAC	CCL4
CH2CL4	Conventional	DICHLOROMETHA	CH2CL2
CHCL3	Conventional	CHLOROFORM	CHCL3
*			

Setup

- Specifications
- Simulation Options
- Stream Class
- Substreams
- Units-Sets
- Custom Units
- Report Options
- Components**
- Specifications
- Assay/Blend
- Light-End Properties
- Petro Characterization

2从数据库中检索纯物质的物性参数

2 在工具菜单栏上点击Tool，并选Retrieve Parameter results（检索参数结果）

2从数据库中检索纯物质的物性参数

The screenshot shows the Aspen Plus software interface. The 'Tools' menu is open, and the 'Retrieve Parameter Results...' option is highlighted with a red circle. The 'Specifications' tree on the left shows the following structure:

- Specifications
 - Setup
 - Specification
 - Simulation O
 - Stream Class
 - Substreams
 - Units-Sets
 - Custom Units
 - Report Options
 - Components
 - Specifications
 - Assay/Blend
 - Light-End Properties

The main window displays a table with the following data:

	Component name	Formula
	CARBON-TETRAC	CCL4
	DICHLOROMETHA	CH2CL2
	CHLOROFORM	CHCL3
*		

2从数据库中检索纯物质的物性参数

- 3 在弹出的对话框中单击“OK”，数据浏览器自动打开Properties Parameters results（检索参数结果）文件夹

2从数据库中检索纯物质的物性参数

The screenshot displays the Aspen Plus Specifications dialog box. The left pane shows a tree view with 'Specifications' selected under 'Components'. The right pane shows the 'Selection' tab with 'Petroleum', 'Nonconventional', and 'Databanks' checked. A table titled 'Define components' lists several components, with 'CCL4' selected. A 'Retrieve Parameter Results' dialog box is overlaid on top, containing a warning message and three buttons: 'OK', 'Cancel', and 'Help'. A red arrow points to the 'OK' button.

Specifications

- Setup
 - Specifications
 - Simulation Options
 - Stream Class
 - Substreams
 - Units-Sets
 - Custom Units
 - Report Options
- Components
 - Specifications**
 - Assay/Blend
 - Light-End Properties
 - Petro Characterization
 - Pseudocomponents
 - Attr-Comps
 - Henry Comps
 - UNIFAC Groups
 - Comp-Groups
 - Comp-Lists
 - Properties
 - Specifications
 - Property Methods

Selection | Petroleum | Nonconventional | **Databanks**

Define components

Component ID	Type	Component name	Formula
CCL4	Conventional	CARBON-TETRAC	CCL4
CH2CL4	Conventional	DICHLOROMETHA	CH2CL2
CHCL3	Conventional	CHLOROFORM	CHCL3
*			

Retrieve Parameter Results

Aspen Plus does not display all property parameters on the parameters forms. Click OK to retrieve all available parameters for the components and property methods defined in the simulation.

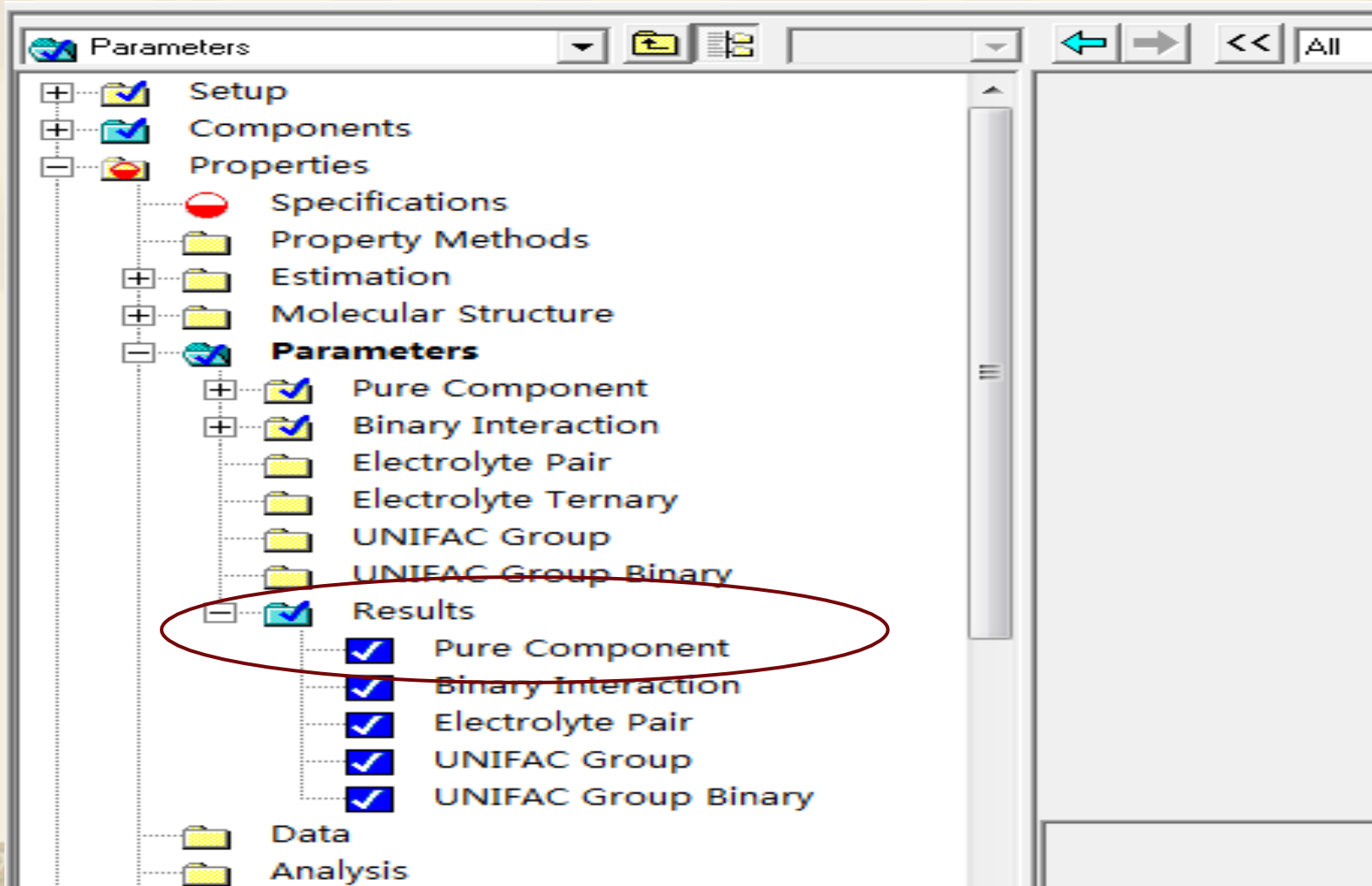
You will lose any results that are currently loaded. You can regenerate them by running the simulation again.

You can view the results on the Properties Parameters Results form.

OK Cancel Help

Component ID. If data are to be retrieved from databanks, enter either Component Name or Formula.

2从数据库中检索纯物质的物性参数



2从数据库中检索纯物质的物性参数

- 4 在数据浏览器的树目录中，从results文件夹中选择Pure component子（纯组分表），存有一个所有标量参数页面和一个温度相关参数页面

2从数据库中检索纯物质的物性参数

The screenshot displays a software interface for property estimation. On the left is a tree view with the following structure:

- Setup
- Components
- Properties
 - Specifications
 - Property Methods
 - Estimation
 - Molecular Structure
 - Parameters
 - Pure Component
 - Binary Interaction
 - Electrolyte Pair
 - Electrolyte Ternary
 - UNIFAC Group
 - UNIFAC Group Binary
 - Results
 - Pure Component
 - Binary Interaction
 - Electrolyte Pair
 - UNIFAC Group
 - UNIFAC Group Binary
- Data

The main window shows the 'Scalar' tab with 'Pure component scalar parameters' displayed. The view is set to 'Parameters'. The table below shows the data for three components: CCL4, CH2CL4, and CHCL3.

Parameter	Unit	Data set	Component CCL4	Component CH2CL4	Component CHCL3
DHAQFM	KCAL/MOL	1	0	0	0
DHFORM	KCAL/MOL	1	-22.883825	-22.81456	-24.577243
DHFVK	KCAL/MOL	1	0	0	0
DHSFRM	KCAL/MOL	1	0	0	0
DHVLB	KCAL/MOL	1	7.11134996	6.77586701	7.04628833
DLWC		1	1	1	1
DVBLNC		1	1	1	1
HCOM	KCAL/MOL	1	-63.365816	-122.73813	-90.761441
MUP	DEBYE	1	0	1.60089358	1.01030344
MW		1	153.8218	84.93228	119.37704
OMEGA		1	0.192552	0.198622	0.221902

2从数据库中检索纯物质的物性参数

The screenshot displays a software interface for property estimation. The left pane shows a tree view under 'Properties' with 'Parameters' expanded to show 'Pure Component' selected. The right pane shows the 'T-Dependent' tab for the 'CPIGDP-1' parameter, displaying a table of temperature-dependent correlation parameters for three components: CCL4, CH2CL4, and CHCL3.

Component	CCL4	CH2CL4	CHCL3
Temperature	K	K	K
Source	PURE11	PURE11	PURE11
Property units	CAL/MOL-K	CAL/MOL-K	CAL/MOL-K
Element 1	8.97630649	8.66532913	9.41530525
Element 2	16.8481895	16.2510748	15.6993408
Element 3	512.1	1256	928
Element 4	11.584026	10.2106621	11.7751027
Element 5	236.1	548	399.6
Element 6	100	100	100
Element 7	1500	1500	1500

2从数据库中检索纯物质的物性参数 应用示例1

- 1 利用Aspen plus 检索物性参数功能，检索 CCL₄ CHCl₃ CH₂Cl₂上述三种物质的沸点、临界温度、生成热等物性数据

3定义物性集

目的：需了解物流的输出性质时，可以定义一个物性集，将使用的物性引入物性集中。

步骤：

1在Properties中点击 Prop-Set

2点击New,

3输入新物性集名

4选择“OK”

3定义物性集

1选中

2点击

3输入名称

4点击

Prop-Sets

Object manager

Name	Status
HXDESIGN	Input Complete
THERMAL	Input Complete
TXPORT	Input Complete
VLE	Input Complete
VLLE	Input Complete

Create new ID

Enter ID:

PS-1

OK Cancel

New... Edit

Rename Hide Reveal Paste

3定义物性集

5在新物性集中选所需物性

6在Set-Up /report Option/ Stream

7点击Property-set

8 将新定义物性集移入被选物性集中

9重新运行，计算结果可列出新物性

3 定义物性集

Substream: MIXED

Physical properties	Units
CP	
* CP	
CPCV	
CPCVMX	
CPIG	
CPIGMX	
CPMX	
CPMX-M	
CSATMX	
CUTS-E	
CUTS-M	
CV	
CVMX	
D1160CRV	
D1160CVW	
D1160LV	
D1160T	
D1160TWT	
D1160WT	

Constant pressure heat capacity for a pure component.

新物性集

选择所需物性

3定义物性集

The image shows the 'Report Options' dialog box in Aspen Plus, with the 'Stream' tab selected. The 'Report Options' dialog box has a tree view on the left with 'Report Options' highlighted (1). The 'Stream' tab contains options for generating a standard stream report and including stream descriptions. The 'Items to be included in stream report' section has checkboxes for 'Flow basis' (Mole, Mass, Std.liq. volume) and 'Fraction basis' (Mole, Mass, Std.liq. volume). The 'Stream format' section has a dropdown for 'TFF' set to 'GEN_M' and radio buttons for 'Standard (80 column)' and 'Wide (132 column)', with 'Sort streams alphanumerically' checked. The 'Property Sets' dialog box is overlaid on top, showing 'Available property sets' (2) with 'PS-1' selected (4). The 'Selected property sets' list is empty. The 'Property Sets' button is highlighted (3). The 'Close' button is at the bottom. The background shows the 'General' and 'Flowsheet' tabs of the 'Stream' dialog box.

1. Report Options

2. Stream

3. Property Sets

4. PS-1

5. >

Define property sets for use in reports, tables, plots, & design specifications

3定义物性集

The screenshot shows a software interface with a file tree on the left and a data table on the right. The file tree includes folders like 'Electrolyte', 'UNIFAC Group', 'Results', 'Data', 'Analysis', 'Prop-Sets', 'Advanced', 'CAPE-OPEN Package', 'Flowsheet', and 'Streams'. Under 'Streams', there are sub-items '1' and '2'. Under '1', there are 'Input', 'Results', 'EQ Variables', and 'Custom Strea'. The 'Results' item is circled in red. The data table on the right has columns for 'Material', 'Vol. % Curves', 'Wt. % Curves', 'Petro. Curves', and 'Poly. C'. The 'Material' column is selected. The table shows various properties for 'ACETO-01', including Temperature (K), Pressure (N/sqm), Vapor Frac, Mole Flow (kmol/sec), Mass Flow (kg/sec), Volume Flow (cum/sec), Enthalpy (Gcal/hr), and CP (cal/mol-K). The value for CP is 29.443. A red arrow points from the text '显示结果' to the 'ACETO-01' row.

Material	Vol. % Curves	Wt. % Curves	Petro. Curves	Poly. C
		1		
Temperature K		293.1		
Pressure N/sqm		200000.000		
Vapor Frac		0.000		
Mole Flow kmol/sec		< 0.001		
Mass Flow kg/sec		0.028		
Volume Flow cum/sec		< 0.001		
Enthalpy Gcal/hr		-0.102		
Mole Flow kmol/sec				
ACETO-01		< 0.001		
CP cal/mol-K				
ACETO-01		29.443		

3定义物性集

应用示例2

建立新物性集，在计算结果中显示CCL₄、
CHCl₃、CH₂Cl₂混合物0℃的比热（C_{pMX}）

4物性估计Property estimation

纯组分物性常数的名称及估计方法

如在ASPEN PLUS 数据库中无所需物性参数
则可以：

- ❖ 直接将已有的物性数据输入AspenPlus中
- ❖ 用Property Estimation (性质估计) 进行估计
- ❖ 从实验数据中回归，使用Data Regression (数据回归)

4物性估计Property estimation

纯组分物性常数的名称及估计方法

❖ 参数估计所需最少信息如下

标准沸点温度 T_B

分子量 MW

分子结构[最好用General (通用) 方法输入]

4物性估计Property estimation

纯组分物性常数的名称及估计方法

Property Estimation (性质估计) 使用标准沸点和分子量来估计许多物性，使用TB 实验值可以大大减少在估计其它参数中的错误的传播，如果不提供TB 和MW 但输入一般分子结构，Property Estimation (性质估计) 可以估计TB 和MW。

4物性估计Property estimation

纯组分的物性常数的名称及估计方法

使用通用General方法确定分子结构

当使用通用General方法描述化合物的原子和键时，
ASPEN PLUS 自动生成用于特殊运行估计方法的所需的官能团

4物性估计Property estimation

首先将运行类型设置为Property Estimation

<input checked="" type="checkbox"/> Global	<input checked="" type="checkbox"/> Description	Accounting	Diagnostics
--	---	------------	-------------

Title:

Units of measurement		Global settings	
Input data:	METCBA	Run type:	Property Estimation
Output results:	METCBA	Input mode:	Steady-State
		Stream class:	CONVEN
		Flow basis:	Mole
		Ambient pressure:	1.01325 bar
		Ambient temp.:	10 C
		Valid phases:	
		Free water:	No
		Operational year:	8766 hr

4物性估计Property estimation

在Components输入自定义物质名称

The screenshot shows a software interface with a tree view on the left and a main panel on the right. The tree view has a folder named 'Components' which is expanded. The main panel has a tab labeled 'Selection' and a table titled 'Define components'.

Component ID	Type	Component name	Alias
DINXI	Conventional		
*			

以上内容仅为本文档的试下载部分，为可阅读页数的一半内容。如要下载或阅读全文，请访问：<https://d.book118.com/176124024115011003>