

# 第11讲 Aspen物性分析估计

田文德

青岛科技大学化工学院

TEL: 0532-84022026

Email: [tianwd@qust.edu.cn](mailto:tianwd@qust.edu.cn)

# 本节主要内容

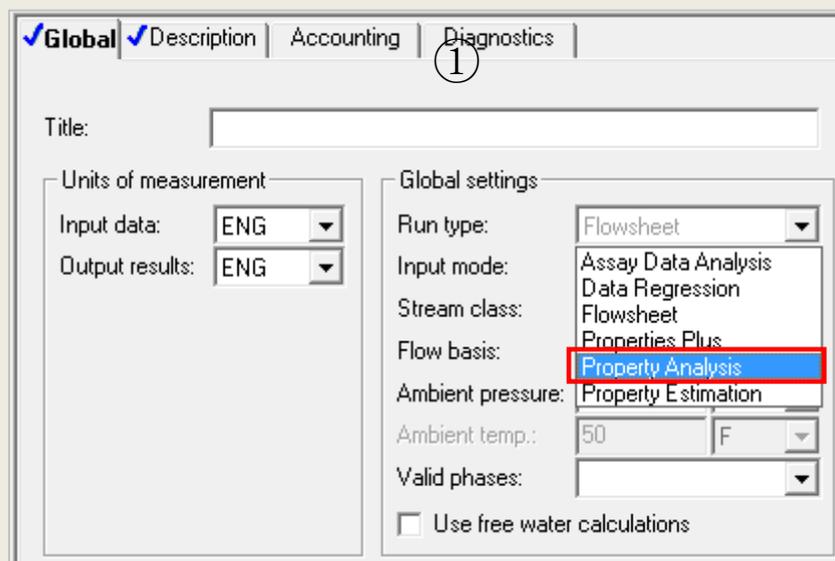
2

- ❖ 纯组分的物性分析
- ❖ 混合物相图的绘制
- ❖ 估计非数据库组分的物性
- ❖ 模拟实例

# 物性分析与物性估计①

3

❖流体的物理性质，可在数据浏览器的  
**Setup/Specifications/Global/Global settings/Run  
type**中的下拉菜单进行设置如图：



## 物性分析与物性估计②

4

❖ **性质分析**功能显示诸如**临界压缩因子**、**比热容**、**密度**、**粘度**、**热导率**的**纯组分数值**以及取自各种资料库的**混合物**特性。对于**用户定义的组分**，物性估计的功能能为用户提供相对**可靠的估计数据**。

# 纯组分的物性分析

5

❖ **Aspen物性系统**主要数据库是**pure22**，其中包括物质的各种性质：**①普适常数**，比如临界温度与临界压力；**②温度与过渡性质**，比如沸点与三联点；**③参考态性质**，比如焓与吉布斯自由能；**④热力学性质**，比如液体-蒸汽压；**⑤传输性质**，比如液体粘度；**⑥安全性质**，比如闪点与燃烧极限；**⑦Unifac模型的官能团信息**；**⑧Soave-Redlich-Kwong与Peng-Robinson状态方程的参数**；**⑨石油相关的性质**，如**API**相对密度、芳烃含量、氢含量与硫含量；**⑩具体到模型的参数**，比如**Rackett**与**Uniquac**参数。

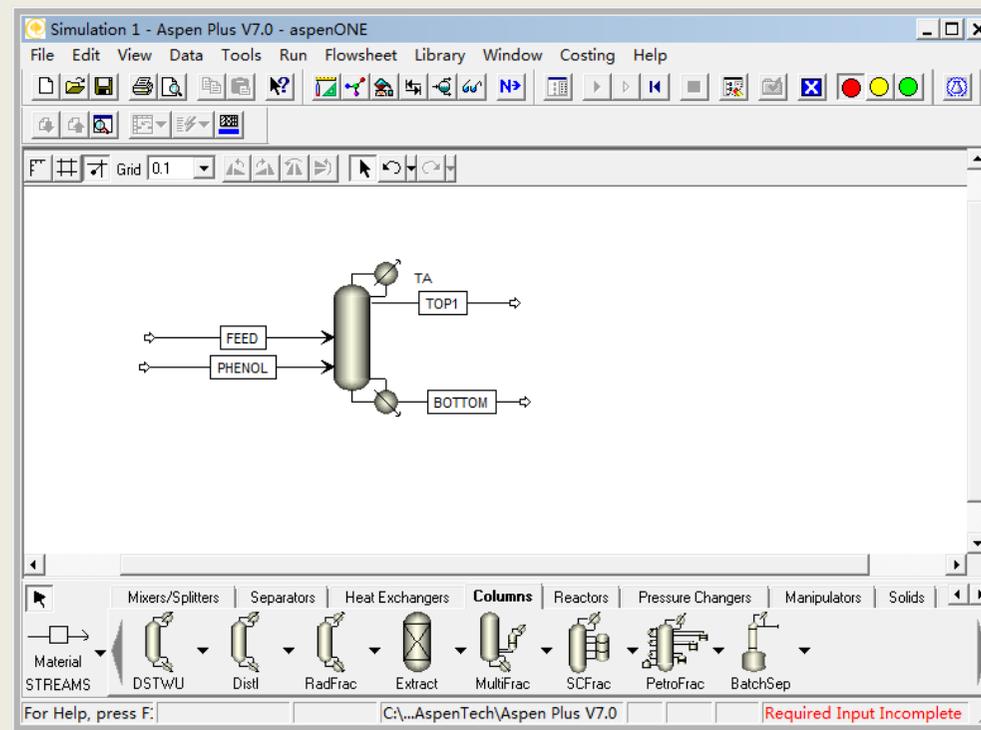
# 模拟实例

6

**【例1】**：甲基环己烷与甲苯形成一个共沸体系，采用简单的分离方法很难分离。在回收塔中，使用苯酚来萃取甲苯，使得在塔顶能够回收相对纯的甲基环己烷。甲基环己烷回收塔的操作条件为：塔的理论板数为**22**、采用全凝器切压力位**16psia**、回流比为**8**、塔顶馏出物的流量为**200lbmol/h**、再沸器压力为**20.2psia**、原料进料位置为**14**、温度为**220F**、压力为**20psia**、甲基环己烷与甲苯各**200lbmol/h**，苯酚进料位置为**7**、温度为**220F**、压力为**20psia**、流量为**1200lbmol/h**。

# 流程图

7



# 输入组份

8

The screenshot shows the Aspen Plus V7.0 interface for defining components. The window title is "Simulation 1 - Aspen Plus V7.0 - aspenONE - [Components Specifications - Data Browser]". The left sidebar shows a tree view with "Components" selected. The main area is titled "Define components" and contains a table with the following data:

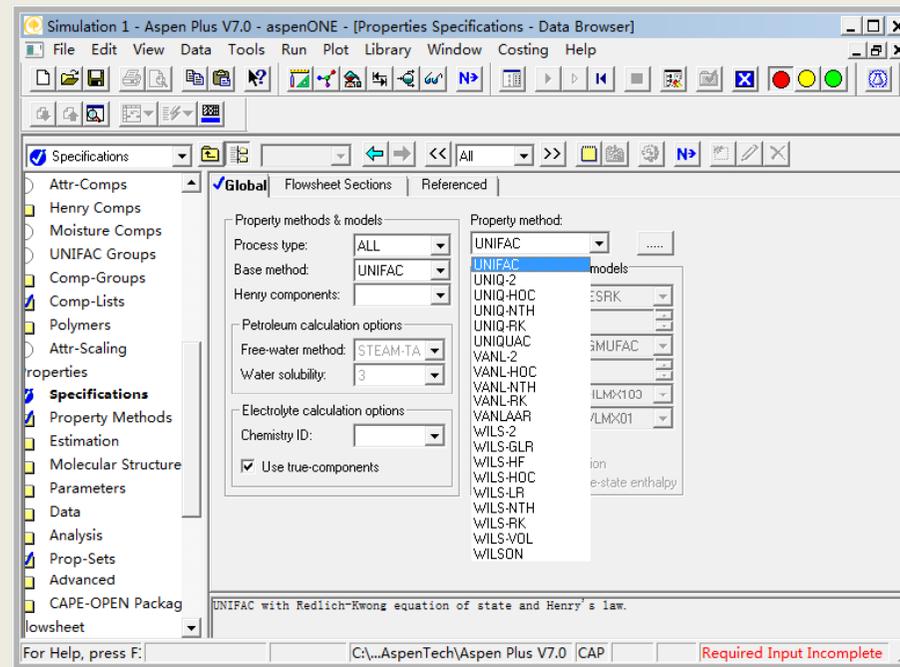
Component ID	Type	Component name	Formula
TOLUE-01	Conventional	TOLUENE	C7H8
PHENO-01	Conventional	PHENOL	C6H6O
METHY-01	Conventional	METHYLCYCLOHEC7H14-6	
*			

Below the table are buttons for "Find", "Elec Wizard", "User Defined", "Reorder", and "Review". At the bottom, there is a status bar with the text "Component ID. If data are to be retrieved from databanks, enter either Component Name or Formula. See Help." and a red error message "Required Input Incomplete".

# 指定热力学方法

9

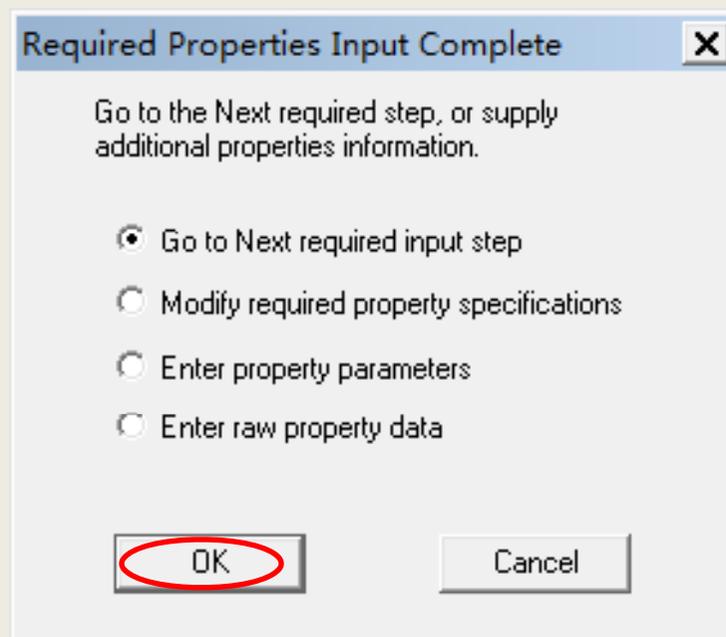
※ 热力学方法选择 **UNIFAC**:



※ 点击**NEXT**，出现下图对话框：

10

※ 点击**OK**



# 流程数据规定 (1)

11

※ 输入进料物流的温度、压力以及流量：温度**220F**、压力位**20psia**、甲苯流量**200lbmol/h**、甲基环己烷流量为**200lbmol/h**。输入完成后如下表：

Simulation 1 - Aspen Plus V7.0 - AspenONE - [Stream FEED (MATERIAL) Input - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Costing Help

Input ENG

Properties

- Specifications
- Property Methods
- Estimation
- Molecular Structure
- Parameters
- Data
- Analysis
- Prop-Sets
- Advanced
- CAPE-OPEN Packag
- Worksheet
- Streams
- BOTTOM
- FEED
- Input**
- Results
- EO Variables
- Custom Stream
- PHENOL

Substream name: MIXED Ref Temperature

State variables

Temperature: 220 F

Pressure: 20 psia

Total flow: Mole

Solvent:

Composition

Component	Value
TOLUENE-01	200
PHENOL-01	200
METHYL-01	200

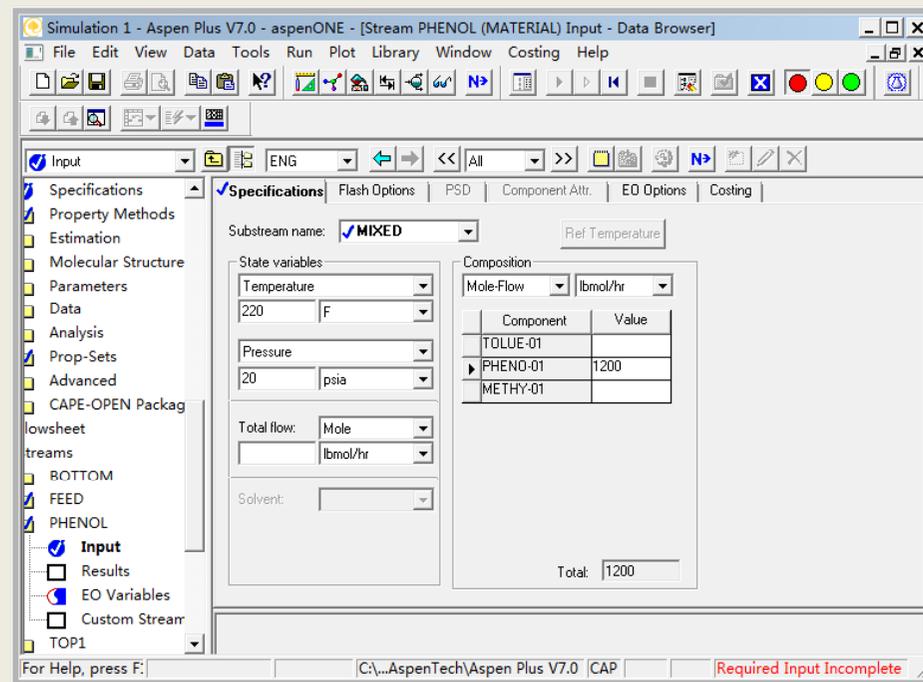
Total: 400

For Help, press F1: C:\AspenTech\Aspen Plus V7.0 CAP Required Input Incomplete

# 流程数据规定 (2)

12

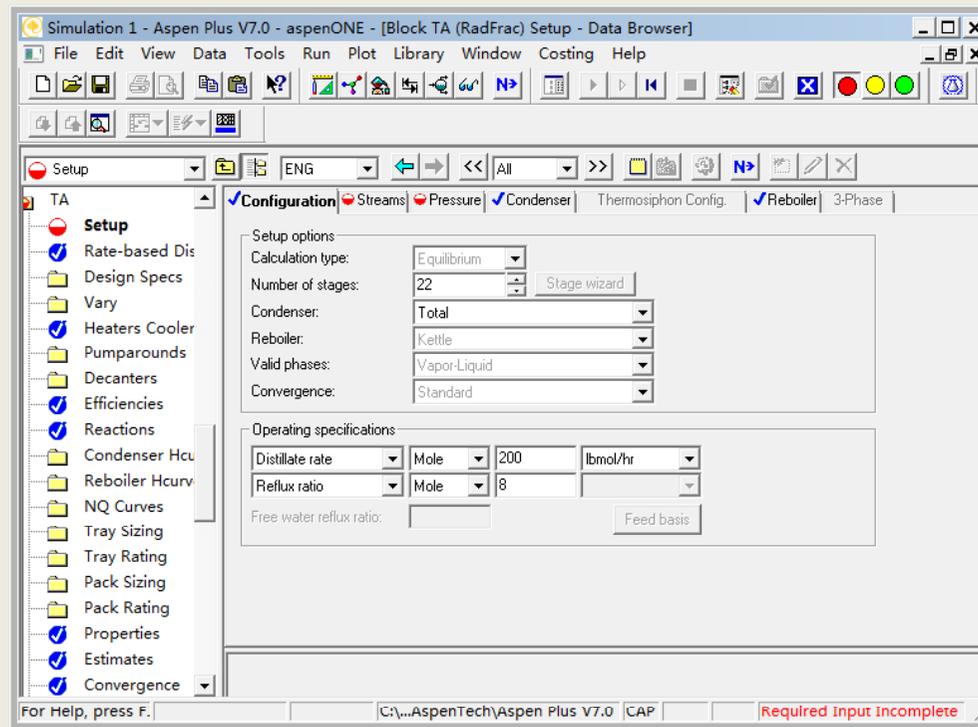
※ 苯酚物流信息：温度为**220F**、压力为**20psia**、苯酚流量为**1200lbmol/h**，输入完成后如下表：



# 单元操作模块规定 (1)

13

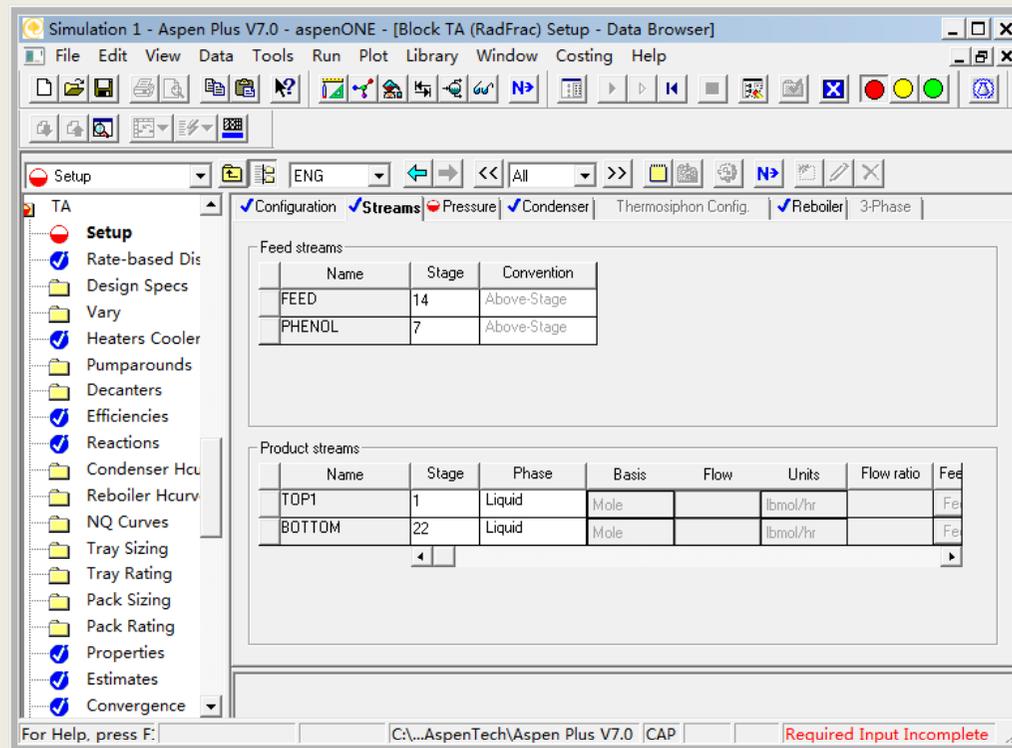
※ 理论板数为**22**、冷凝器为全凝器、塔顶产品流率为**200lbmol/h**、回流比为**8**.其他项目采用缺省值，如下图：



# 单元操作模块规定 (2)

14

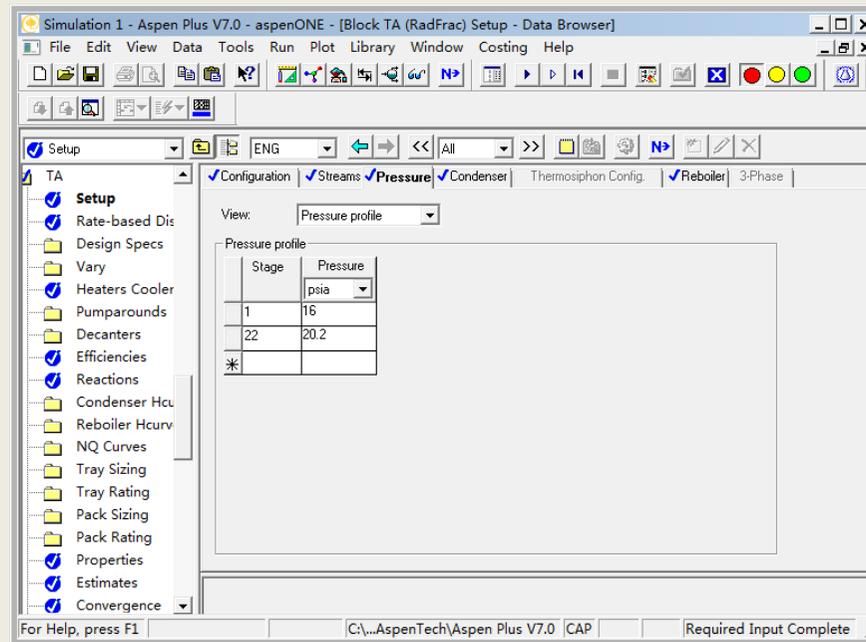
※ 原料进料位置为14、苯酚进料位置为7，完成后如下图：



# 单元操作模块规定 (3)

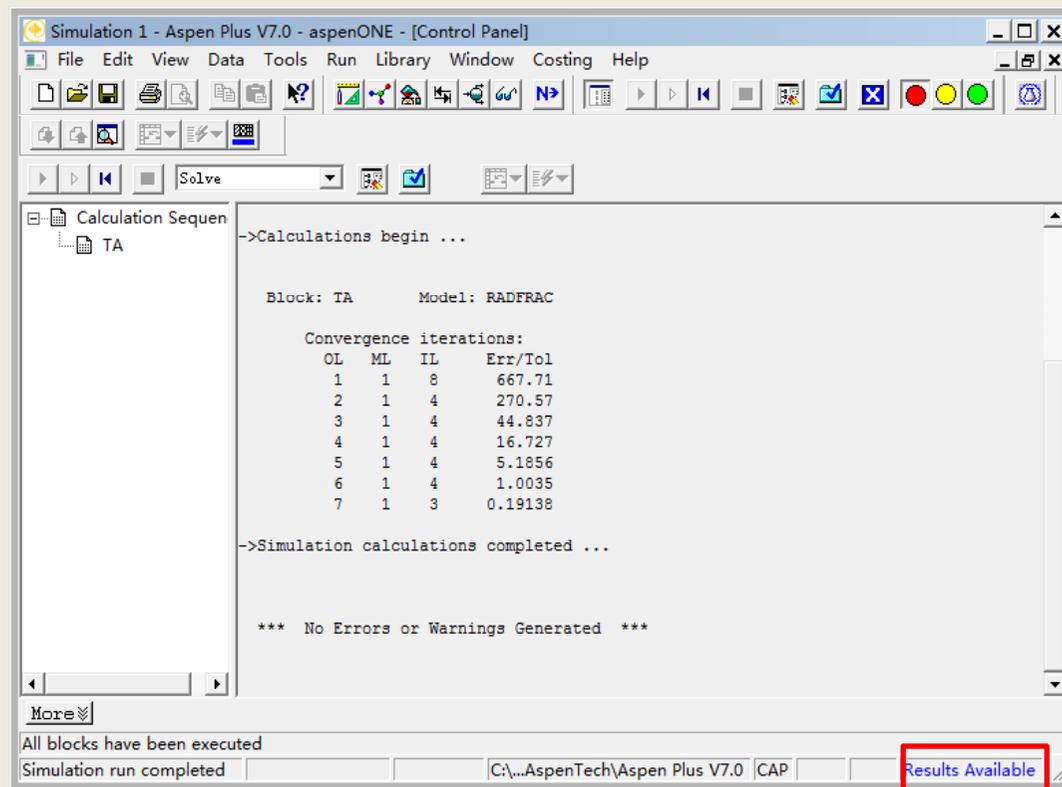
15

※ 设定塔顶冷凝器的压力为**16psia**，设定再沸器的压力为**20.2psia**，设定完成后如下图所示：



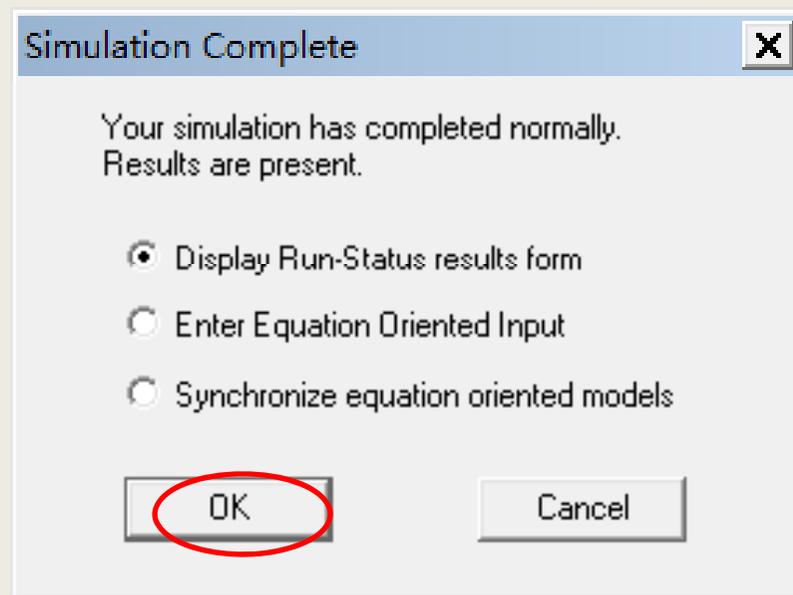
# 运行模拟

16



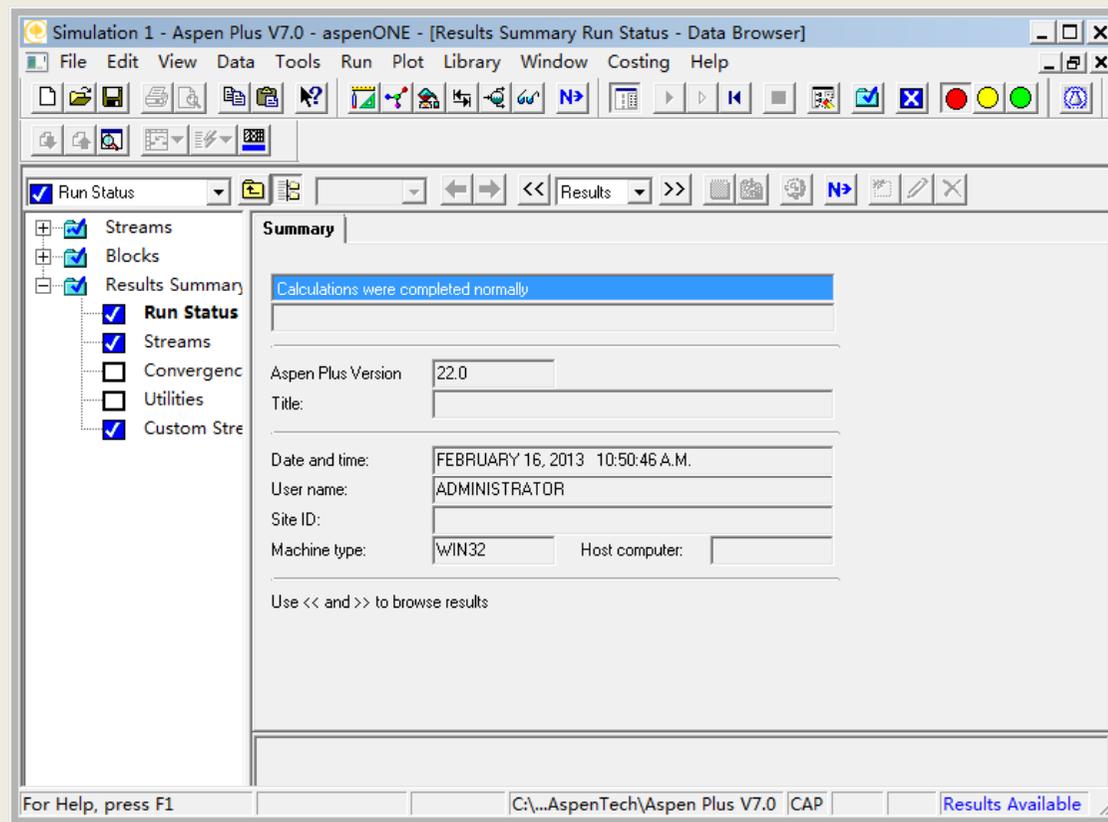
※ 点击**NEXT**，出现下图对话框：

17



※ 点击上图**OK**，显示运行状态结果表格

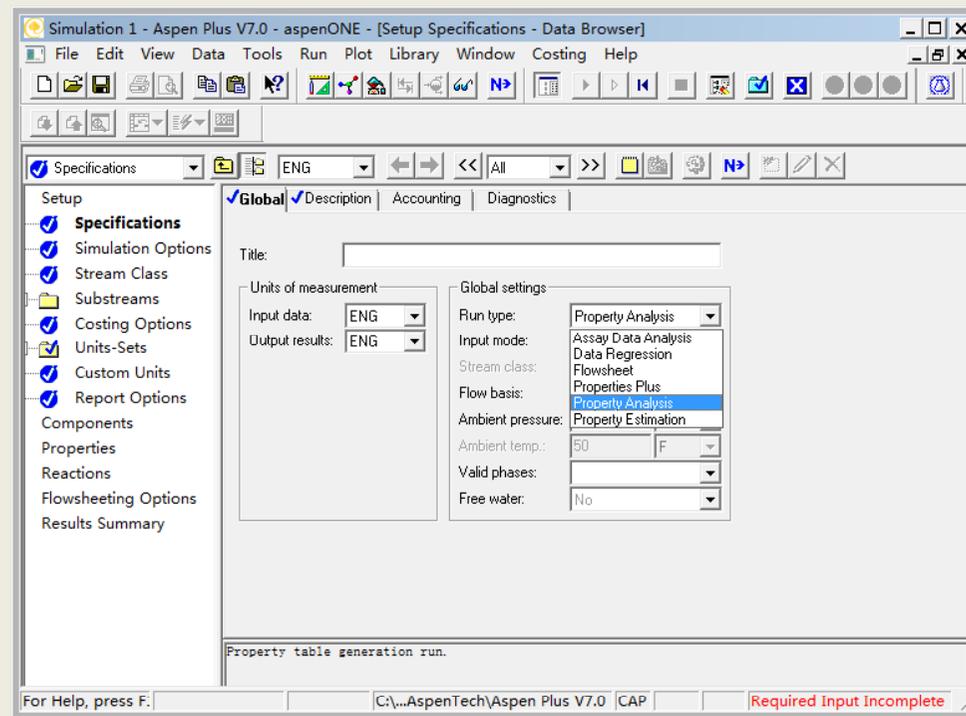
18



# 纯组份物性分析（1）

19

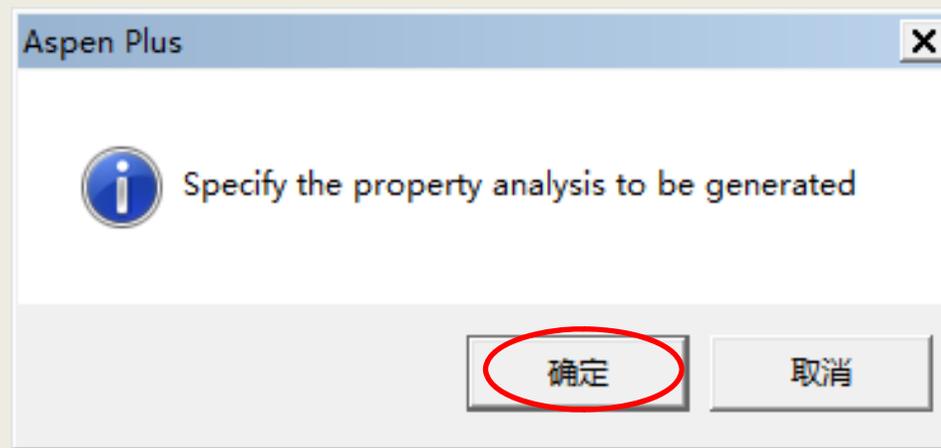
※ 利用数据浏览器的**Setup/Specifications/Global/Global settings/Run type**:中的下拉菜单将运行类型设置为性质分析，如图：



## 纯组份物性分析（2）

20

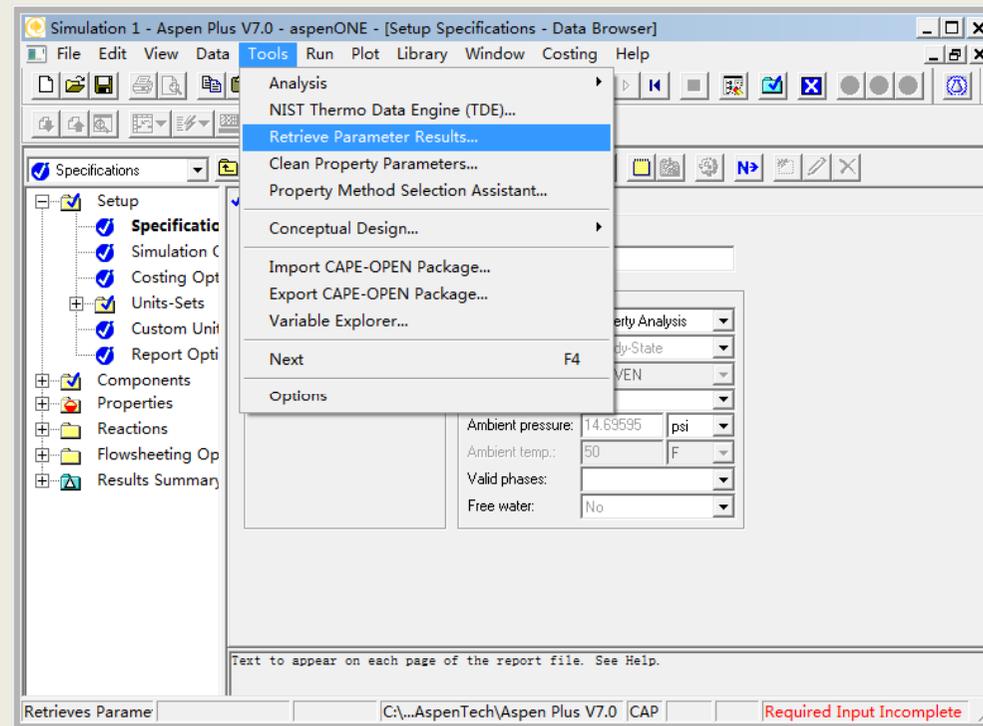
※ 点击**NEXT**，弹出下图对话框，点击**确定**：



# 纯组份物性分析（3）

21

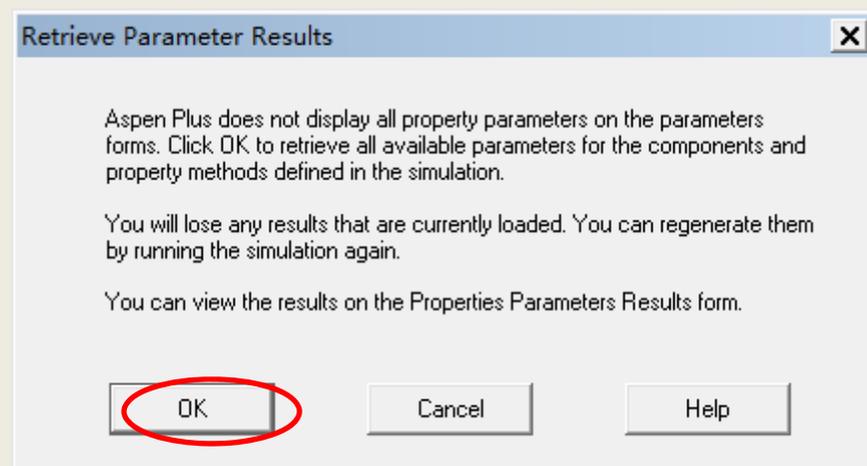
※ 选择 **Tools/Retrieve Parameter Results:**



## 纯组份物性分析（4）

22

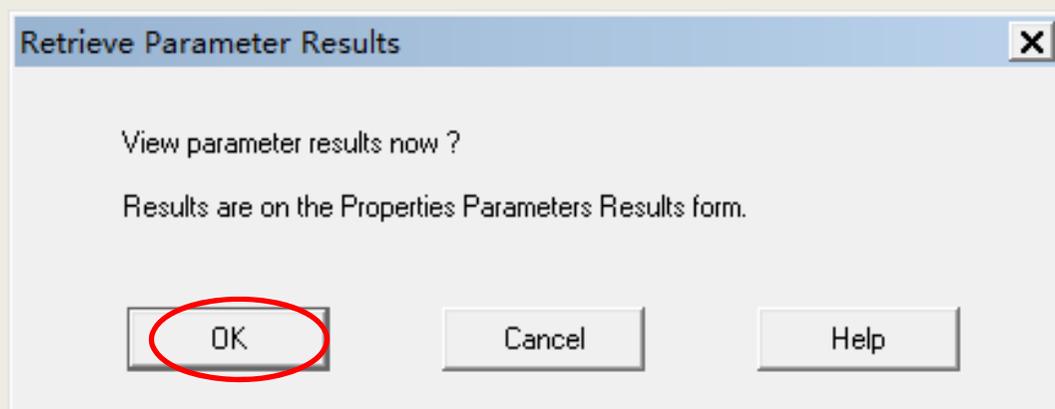
※ 弹出下图对话框，单击**OK**：



## 纯组份物性分析（5）

23

提示可以查看参数结果，如图：



# 纯组份物性分析（6）

24

单击上图OK，然后单击数据浏览器中的  
**Properties/Parameters/Results/Pure component**，  
可以查看相关的性质数据，如图：

The screenshot shows the Aspen Plus V7.0 Data Browser interface. The left pane displays a tree view with 'Results' expanded to 'Pure Component'. The right pane shows a table of 'Pure component scalar parameters' for three components: TOLUENE-01, PHENOL-01, and METHANOL-01. The table includes parameters such as API, CHARGE, CHI, and various heat capacity coefficients (DGF, DGS, DHA, DHF, DHS, DHV) in units of BTU/LBMOL.

Parameter	Unit	Data set	Component TOLUENE-01	Component PHENOL-01	Component METHANOL-01
API		1	30.8	3.4	51.3
CHARGE		1	0	0	0
CHI		1	0	0	0
DGFDM	BTU/LBMOL	1	52536.5434	-14031.384	11749.785
DGSFRM	BTU/LBMOL	1	0	0	0
DHAQFM	BTU/LBMOL	1	0	0	0
DHFDM	BTU/LBMOL	1	21569.2175	-41444.11	-66552.021
DHSFRM	BTU/LBMOL	1	0	0	0
DHVLB	BTU/LBMOL	1	14343.5512	19981.5993	13446.9905

# 纯组份物性分析（7）

25

纯组份与温度有关的性质可以通过单击**Scalar**标签右侧的**T-Dependent**标签得到，如图：

The screenshot shows the Aspen Plus V7.0 Data Browser interface. The left pane displays a tree view of simulation components, including Pure Component, Binary Interaction, Electrolyte Pair, Electrolyte Ternary, UNIFAC Group, and Results. The right pane is titled 'Scalar T-Dependent' and shows 'Temperature-dependent correlation parameters'. The 'View' is set to 'Parameters' and the 'Parameter' is 'ATOMND-1'. A table displays the data for three components: TOLLUE-01, PHENO-01, and METHY-01, all with a source of 'PURE22'.

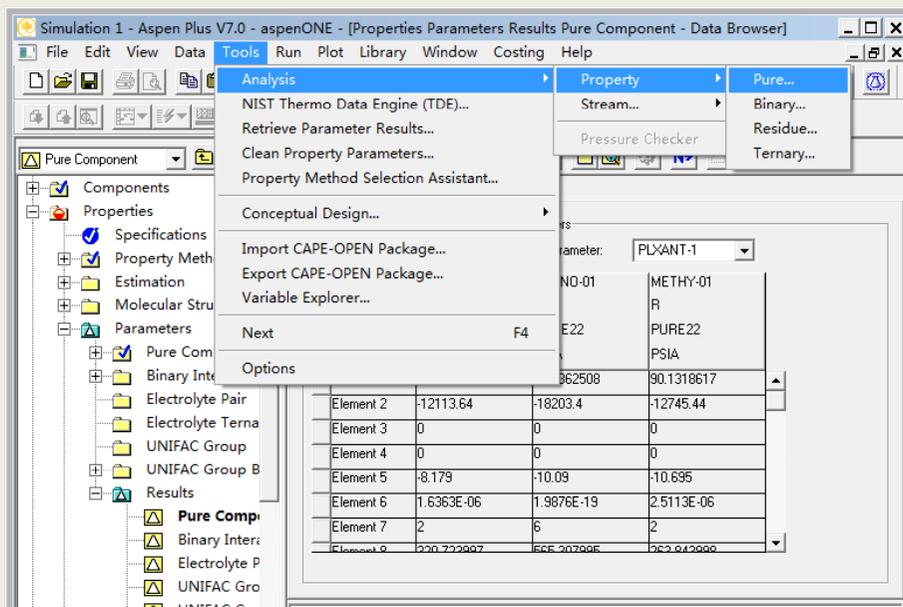
Component	TOLLUE-01	PHENO-01	METHY-01
Temperature			
Source	PURE22	PURE22	PURE22
Property units			
Element 1	6	6	6
Element 2	1	1	1
Element 3		8	



# 绘图 (1)

27

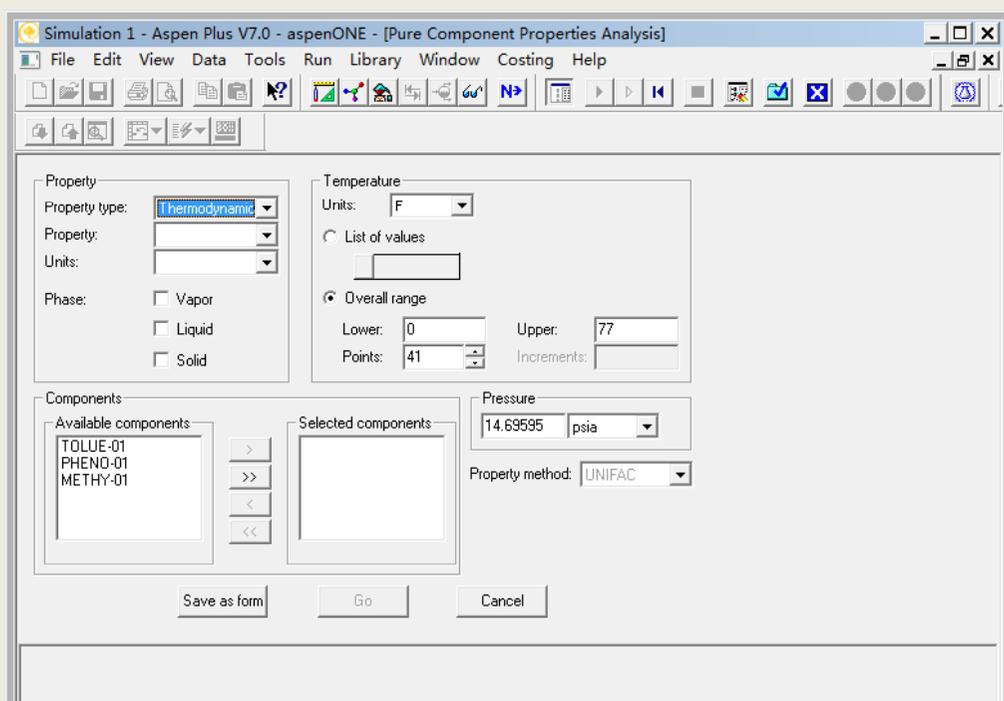
对上例，可利用做图功能绘制出不同温度三种物质的饱和蒸汽压，单击**Tools/Analysis/property/pure**，如图：



## 绘图 (2)

28

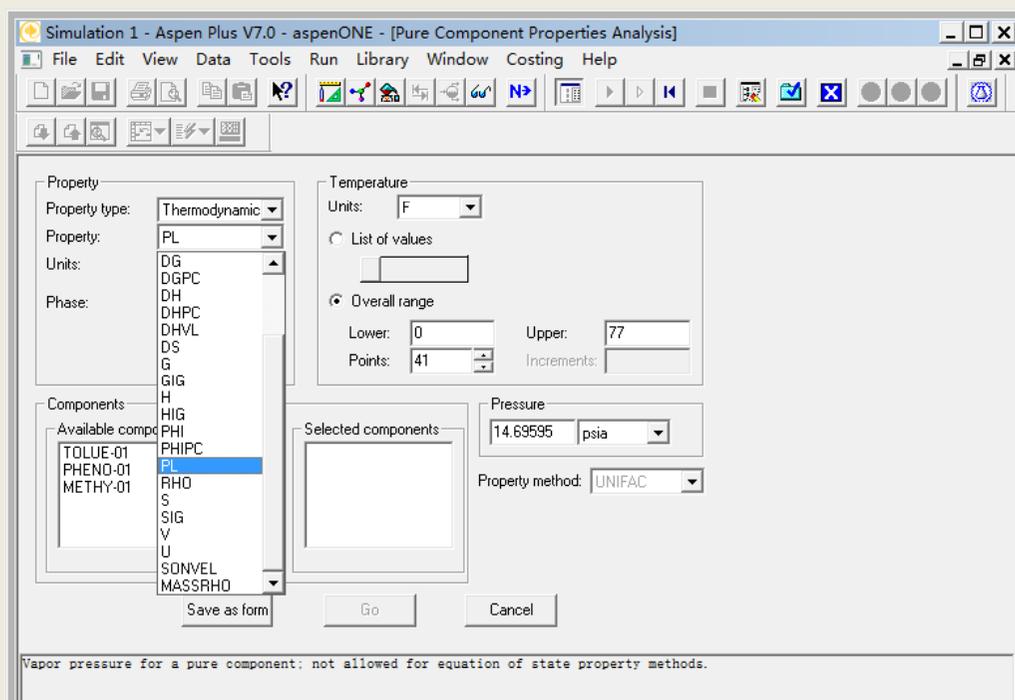
出现下图窗口，此图为纯组份性质分析的规定：



## 绘图 (3)

29

在上图中，单击 **property /property** 的下拉菜单，选择 **PL**，即饱和蒸汽压。

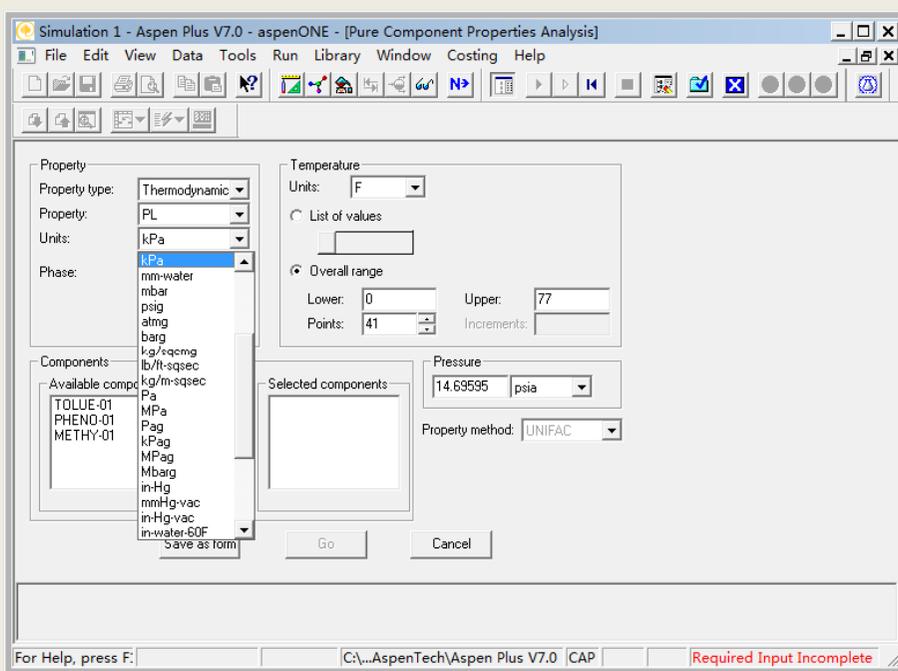


Vapor pressure for a pure component: not allowed for equation of state property methods.

# 绘图 (4)

30

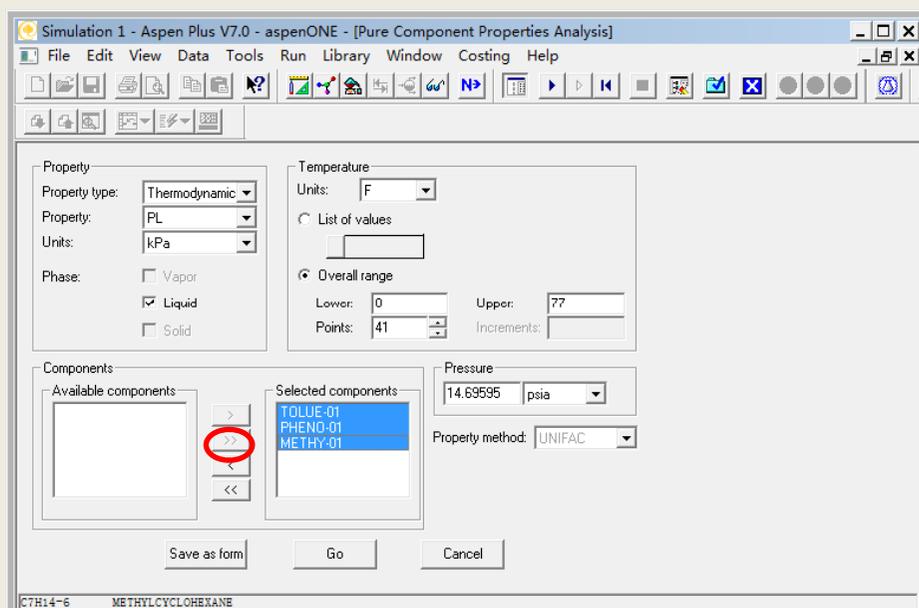
单击 **property /Units** 的下拉菜单，选择 **kPa**，如图：



# 绘图 (5)

31

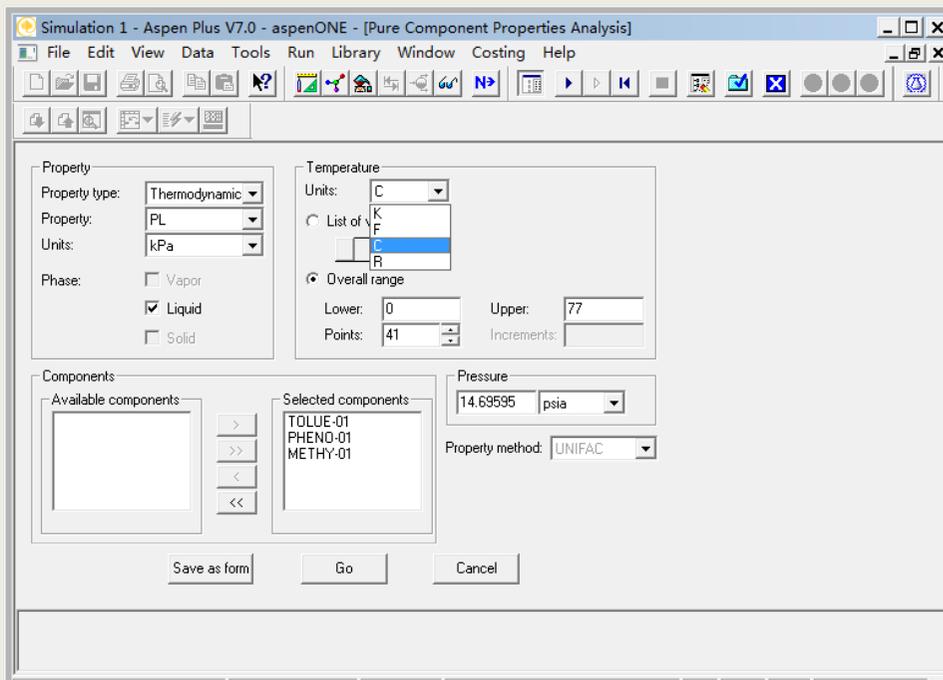
单击**Components**下两个方框之间的第二个按钮，  
三个物质都选中，如图：



# 绘图 (6)

32

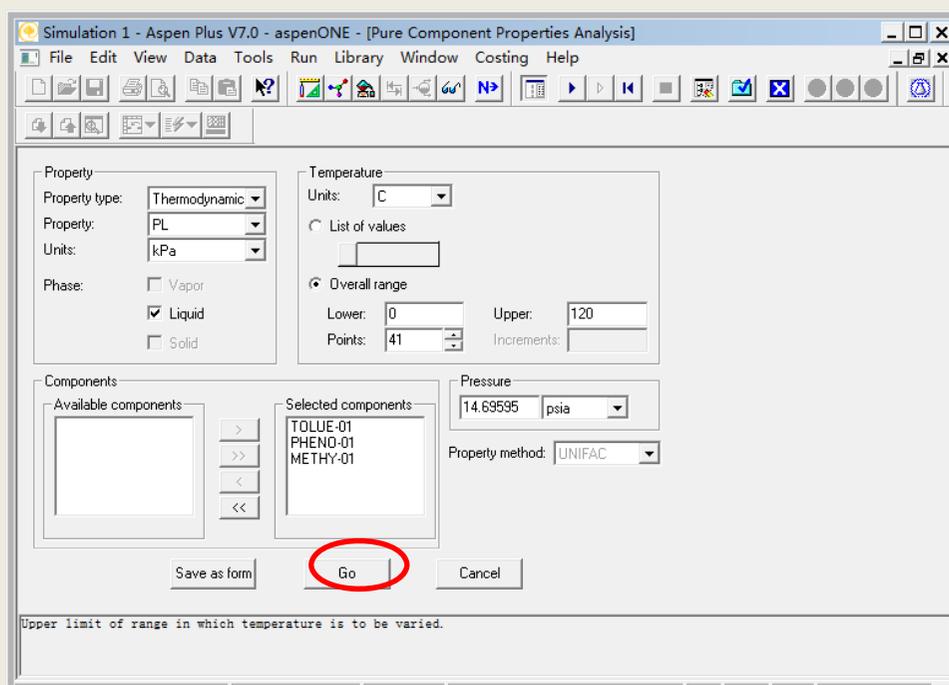
单击 **Temperature/Units** 的下拉菜单，选择 **C**，即摄氏度



# 绘图 (7)

33

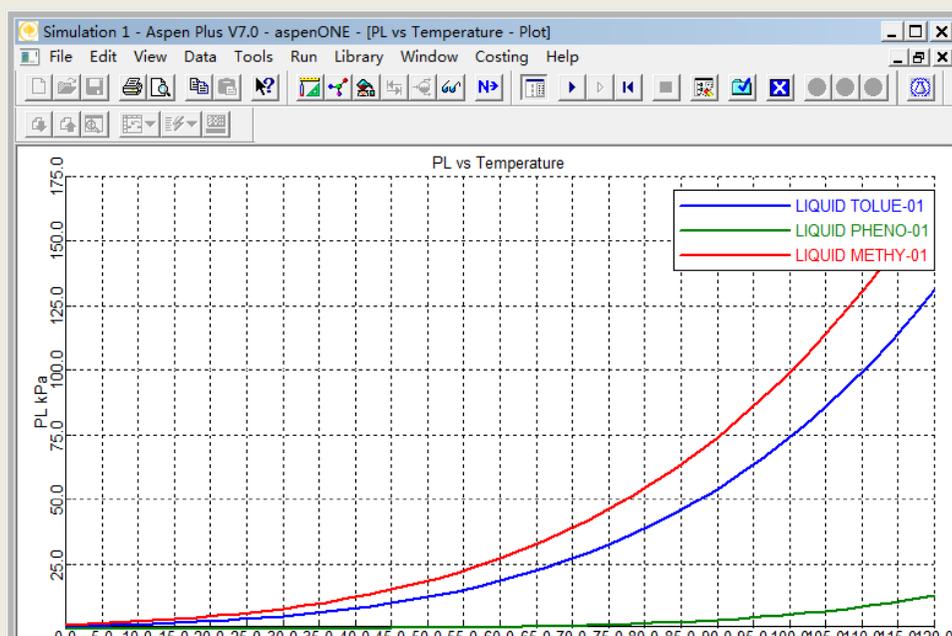
将Upper右侧的数值设定为120，完成后如下图：



## 绘图 (8)

34

单击下部的Go按钮，则绘制出不同温度下三种物质的饱和蒸汽压，如图：



# 绘图 (9)

35

关闭图形，出现下图表格：

Simulation 1 - Aspen Plus V7.0 - aspenONE - [Pure Component Properties Analysis Results]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Costing Help

Pure component properties analysis results

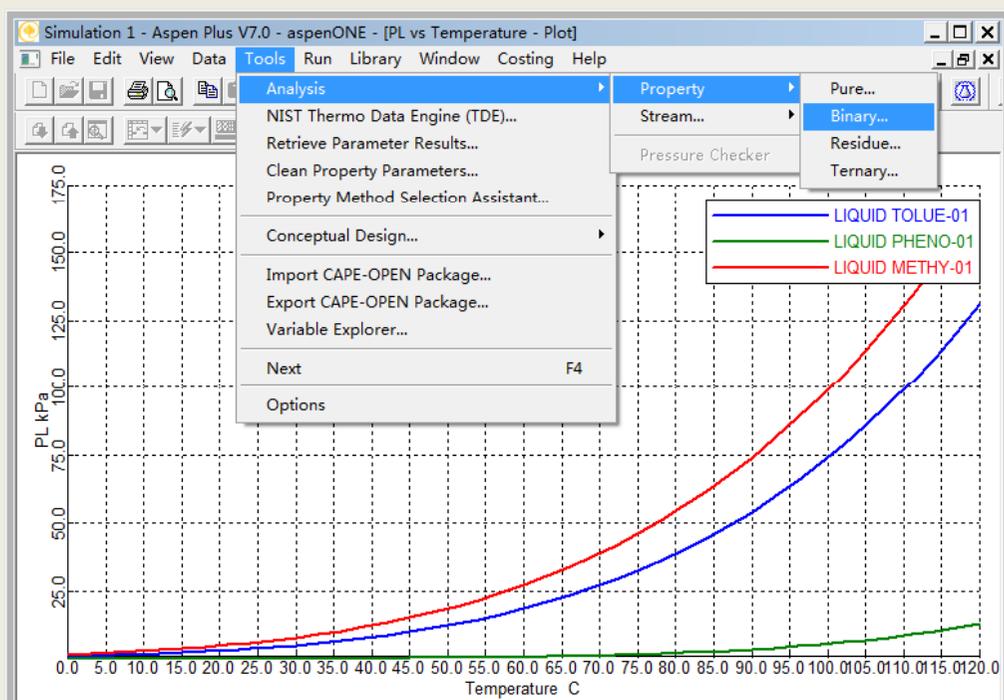
TEMP	PRES	LIQUID PL TOLUE-01	LIQUID PL PHEND-01	LIQUID PL METHY-01
0	14.69595	0.1326476	0.00098824	0.2300713
3	14.69595	0.159932	0.00130322	0.2749505
6	14.69595	0.1919259	0.0017084	0.3270616
9	14.69595	0.2292792	0.0022267	0.3873109
12	14.69595	0.2727071	0.00288611	0.4566822
15	14.69595	0.3229933	0.00372064	0.5362392
18	14.69595	0.3809939	0.00477144	0.6271281
21	14.69595	0.4476403	0.00608805	0.73058

Plot Wizard Close

# 混合物相图的绘制 (1)

36

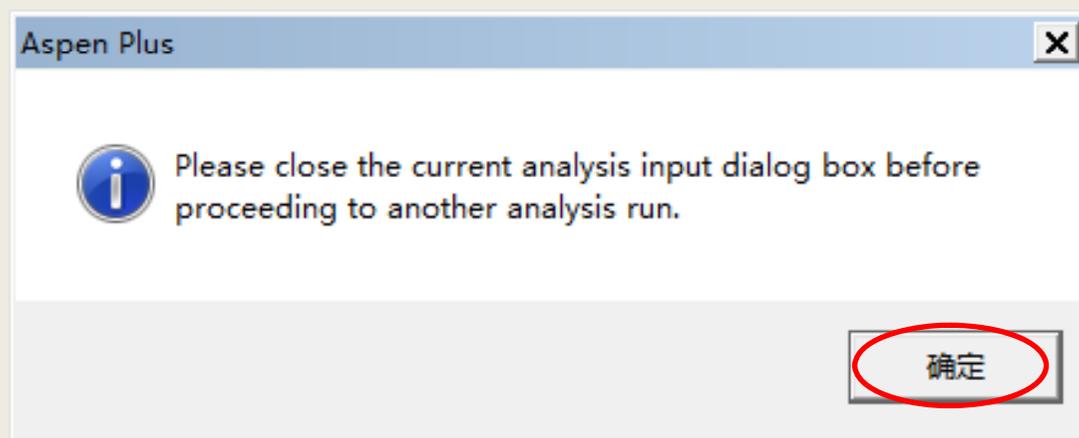
单击**Tools/Analysis/property/Binary**，如图：



## 混合物相图的绘制 (2)

37

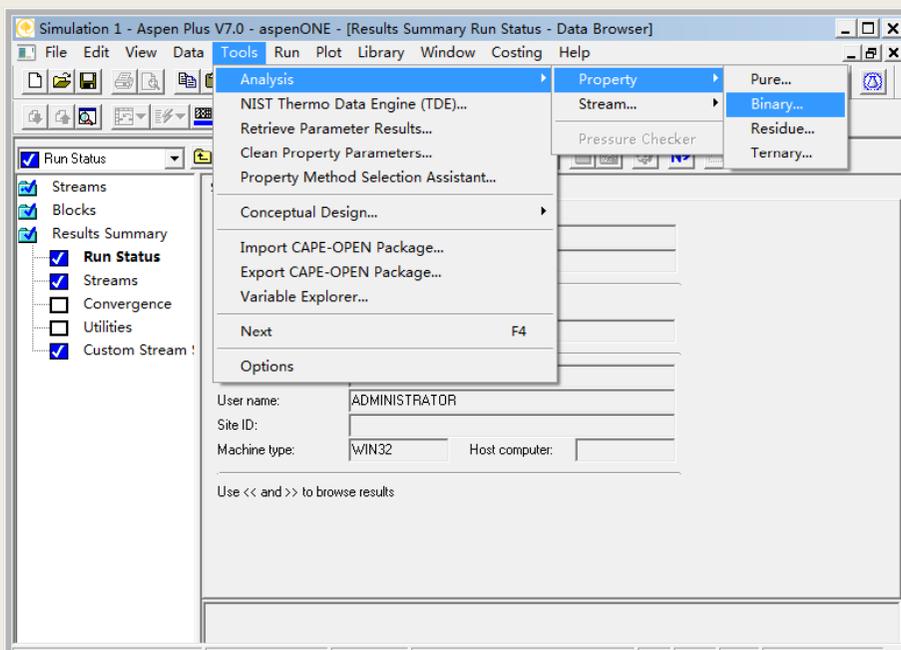
弹出如下对话框，单击**确定**：



# 混合物相图的绘制 (3)

38

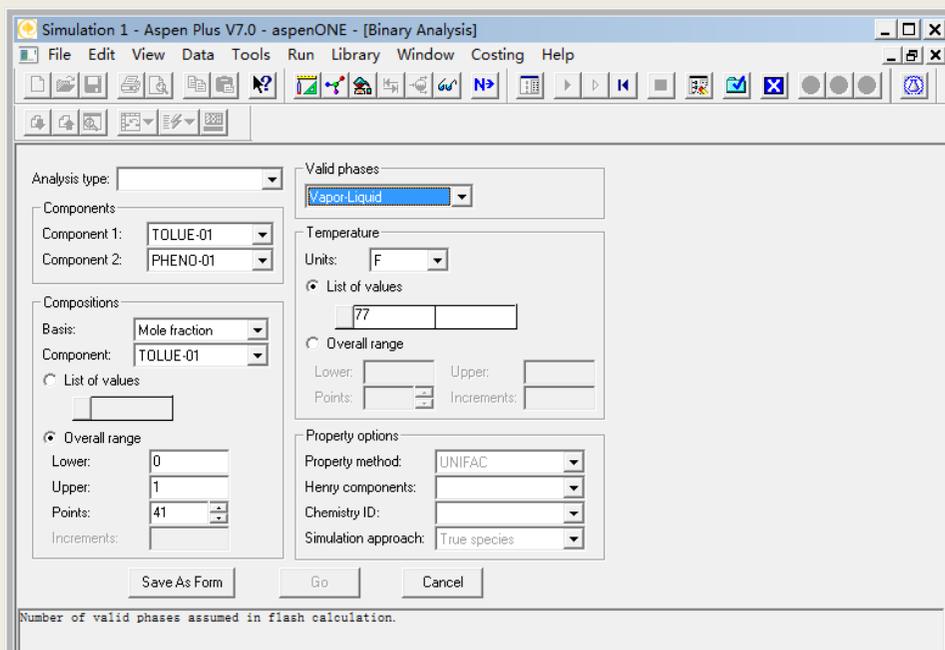
关闭现有的窗口，进行混合物相图的绘制：



# 混合物相图的绘制 (4)

39

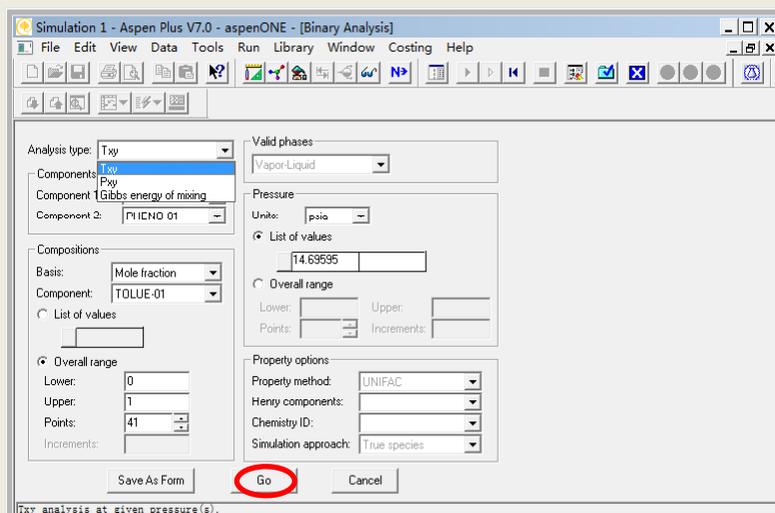
出现二元分析对话框，如图：



# 混合物相图的绘制 (5)

40

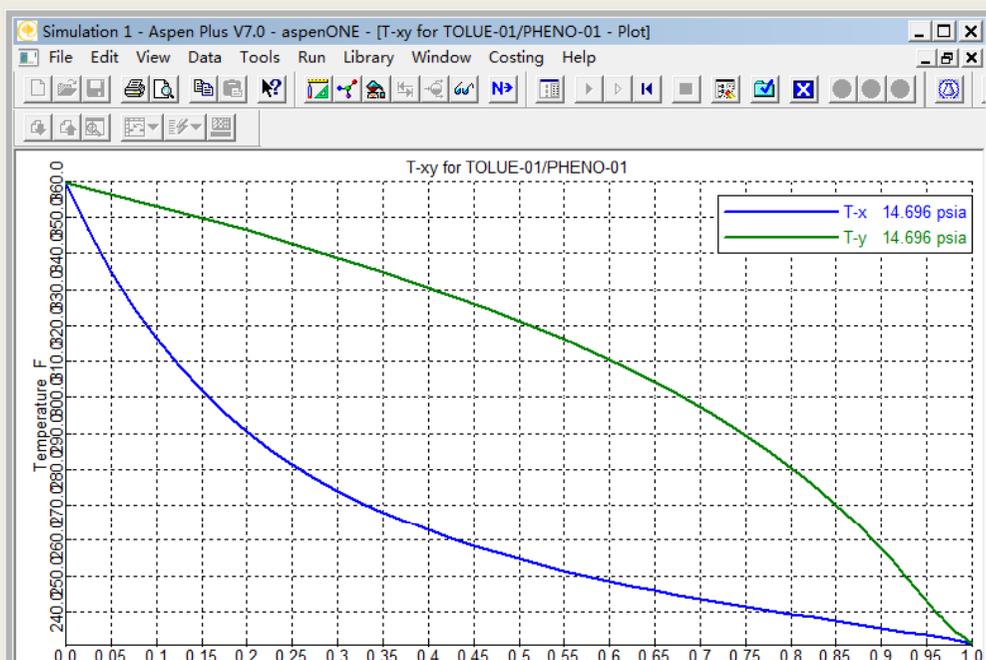
在 **Analysis type** 中包括可用的分析类型：**Txy and Pxy** 分析用于研究气液体系的非理想性，是否形成共沸物。**Gibbs energy of mixing** 用于观察体系是否会形成两个液相。



# 混合物相图的绘制 (6)

41

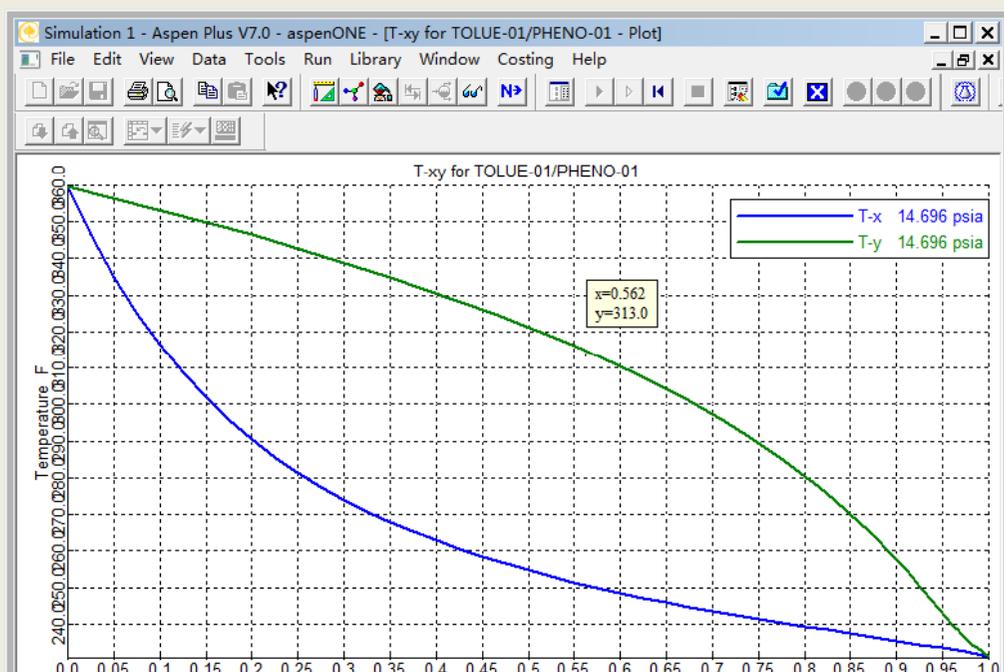
单击**GO**，计算完成后，结果以表格的形式出现，同时自动显示一个**T-xy**图，如图：



# 混合物相图的绘制 (7)

42

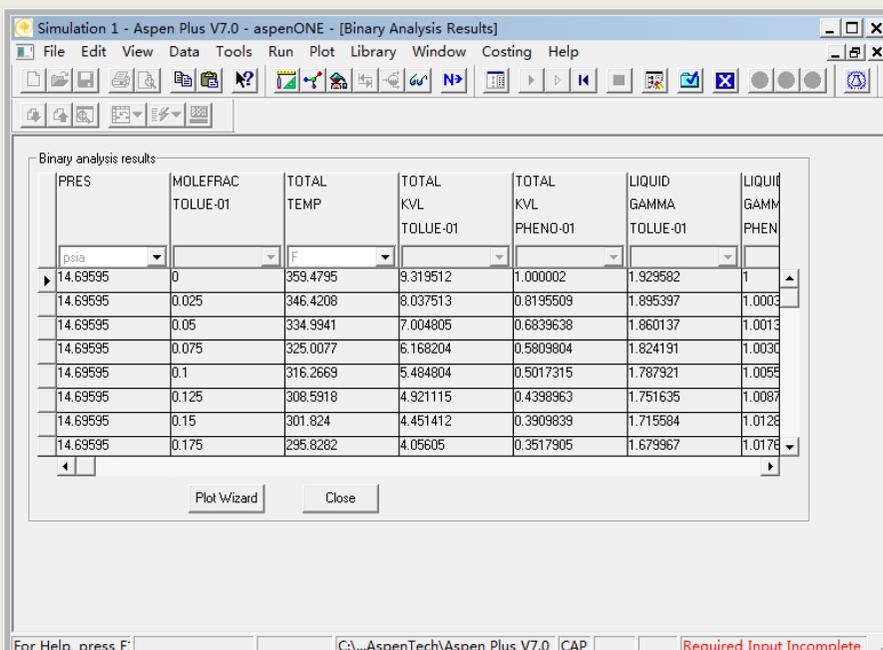
在图的内部单击鼠标可以显示相应的坐标，图中显示苯酚和甲苯不形成共沸物，如图：



# 混合物相图的绘制 (8)

43

关闭图形，出现下图表格：



Binary analysis results

PRES	MOLEFRAC TOLUE-01	TOTAL TEMP	TOTAL KVL TOLUE-01	TOTAL KVL PHENO-01	LIQUID GAMMA TOLUE-01	LIQUID GAMMA PHEN
psia		F				
14.69595	0	359.4795	9.319512	1.000002	1.929582	1
14.69595	0.025	346.4208	8.037513	0.8195509	1.895397	1.0003
14.69595	0.05	334.9941	7.004805	0.6839638	1.860137	1.0013
14.69595	0.075	325.0077	6.168204	0.5809804	1.824191	1.0030
14.69595	0.1	316.2669	5.484804	0.5017315	1.787921	1.0055
14.69595	0.125	308.5918	4.921115	0.4398963	1.751635	1.0087
14.69595	0.15	301.824	4.451412	0.3909839	1.715584	1.0128
14.69595	0.175	295.8282	4.05605	0.3517905	1.679967	1.0176

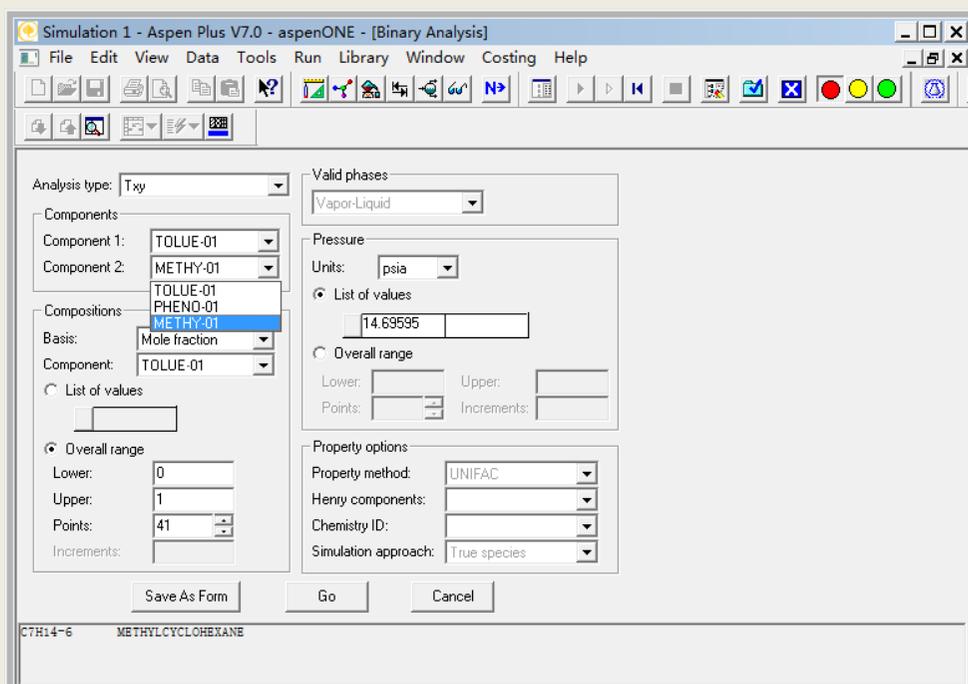
Plot Wizard Close

For Help, press F1. C:\AspenTech\Aspen Plus V7.0\CAP Required Input Incomplete

# 混合物相图的绘制 (9)

44

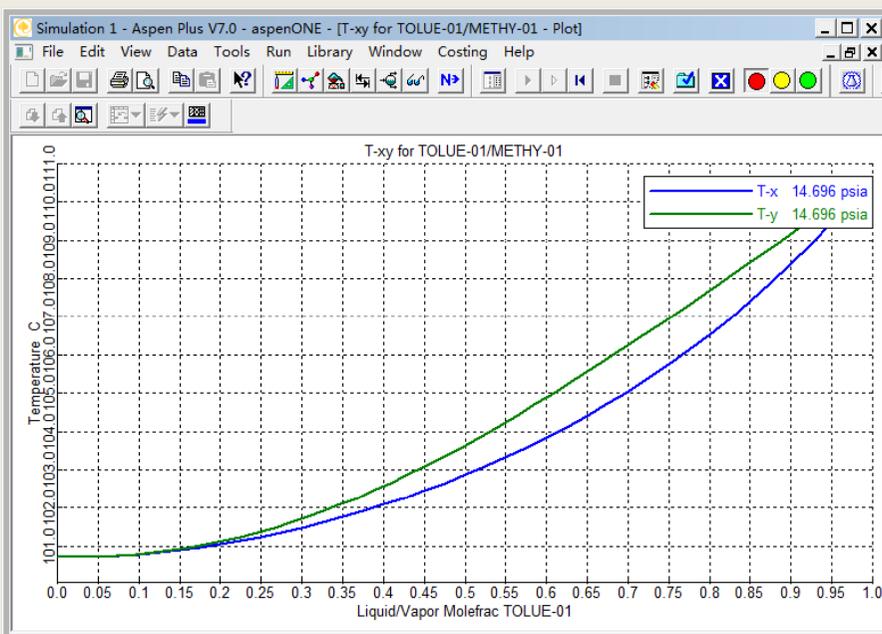
同样进行甲苯与甲基环己烷相图的绘制，如图：



# 混合物相图的绘制 (10)

45

从图中看出，体系含有一个共沸物：



# 混合物相图的绘制 (11)

46

※ 关闭图形，出现下图表格：

PRES	MOLEFRAC TOLUE-01	TOTAL TEMP	TOTAL KVL TOLUE-01	TOTAL KVL METHY-01	LIQUID GAMMA TOLUE-01	LIQUID GAMMA METH
14.69595	0	100.7259	1.012797	1.000001	1.344397	1
14.69595	0.025	100.7213	0.9973781	1.000067	1.324107	1.0001
14.69595	0.05	100.7304	0.9829922	1.000892	1.304653	1.0007
14.69595	0.075	100.753	0.9695889	1.002463	1.286007	1.0017
14.69595	0.1	100.7882	0.957116	1.004763	1.268147	1.0030
14.69595	0.125	100.8356	0.9455291	1.00778	1.251048	1.0047
14.69595	0.15	100.8948	0.9347888	1.011507	1.234687	1.0068
14.69595	0.175	100.9653	0.9248599	1.015939	1.219042	1.0093

## 混合物相图的绘制（12）

47

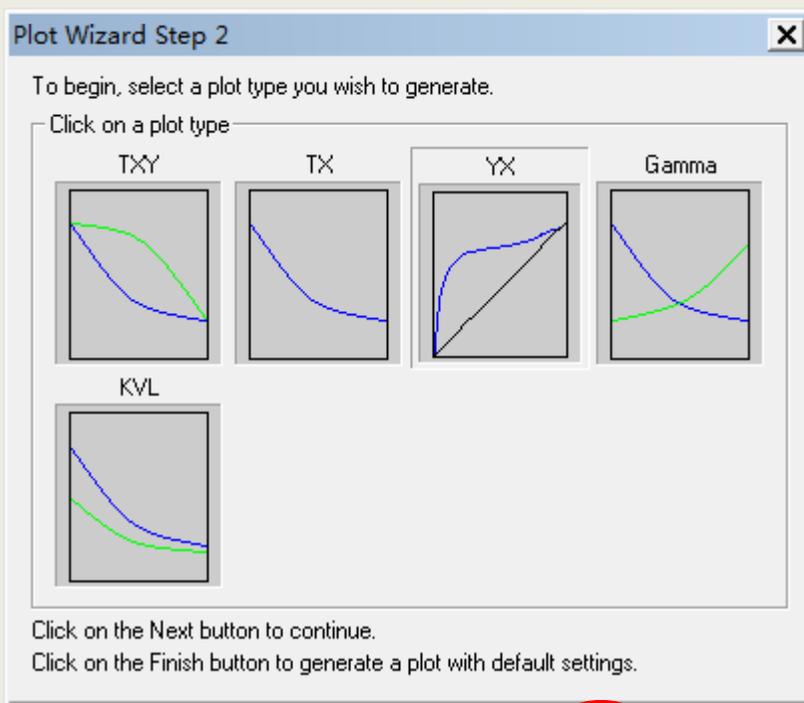
上表格下边有一个**Plot Wizard**，可以用来绘制相关的图形。  
单击**Plot Wizard**，出现**Plot Wizard Step1**对话框，如图：



# 混合物相图的绘制 (13)

48

单击**NEXT**，出现**Plot Wizard Step2**对话框，选择所要绘制图形的类型，选择**YX**图标，如图：



# 混合物相图的绘制（14）

49

单击**NEXT**，出现**Plot Wizard Step3**对话框，如图，绘图变量的单位采用缺省设置。

Plot Wizard Step 3

Select component to plot on x-axis

Component to plot: TOLUE-01

Select unit for plot variables

Temperature: F

Pressure: psia

Select plot mode

New plot  Add to plot

# 混合物相图的绘制（15）

50

单击**NEXT**，出现**Plot Wizard Step4**对话框，如图，对于图中显示的信息采取缺省设置，单击**Finish**，生成绘图。

Plot Wizard Step 4

Plot title: Y-x for TOLUE-01/PHENO-01

Axis titles

X-Axis: Liquid Molefrac TOLUE-01

Y-Axis: Vapor Molefrac TOLUE-01

Select display options

Show legend    Add time stamp    Show diagonal line

Would you like to update the plot when new results are available?

Yes  
 No

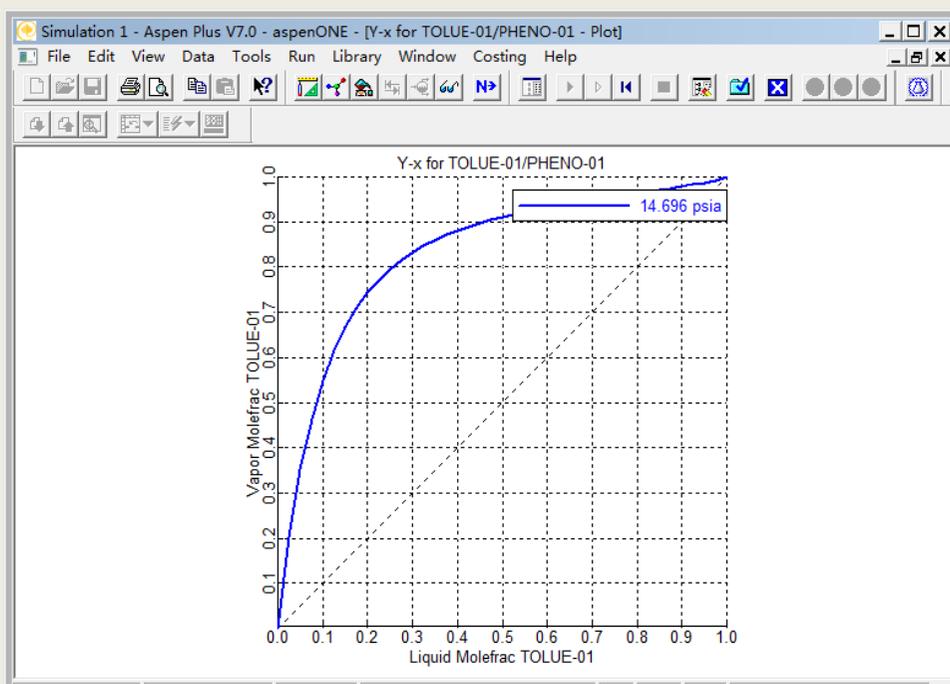
Select grid type: Mesh

Select line type: Line only

# 混合物相图的绘制 (16)

51

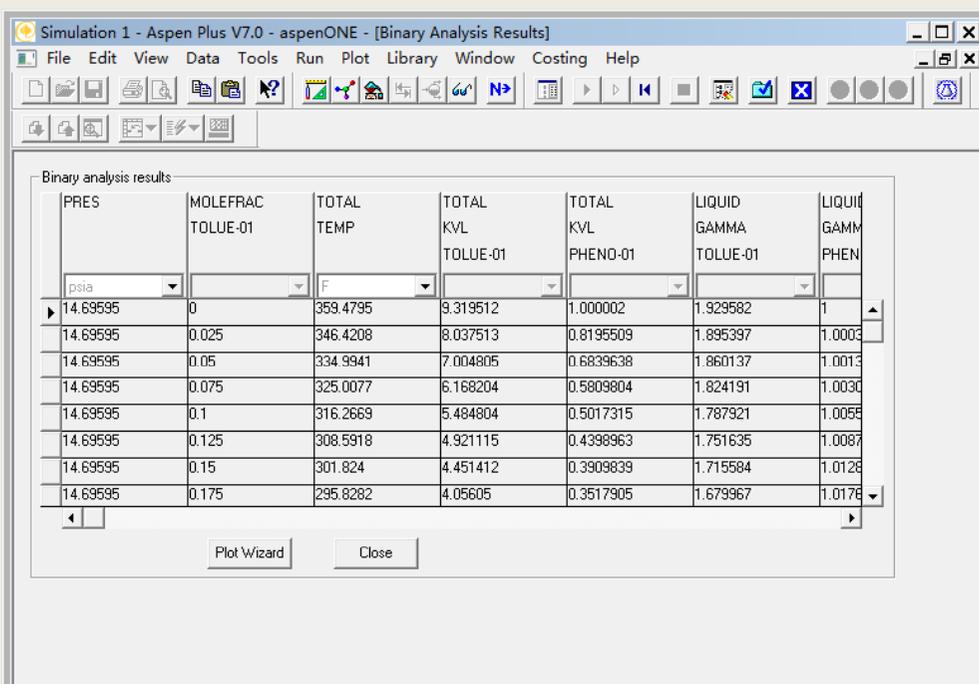
生成的图形如下:



# 混合物相图的绘制 (17)

52

关闭图形，出现下图表格：



Simulation 1 - Aspen Plus V7.0 - aspenONE - [Binary Analysis Results]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Costing Help

Binary analysis results

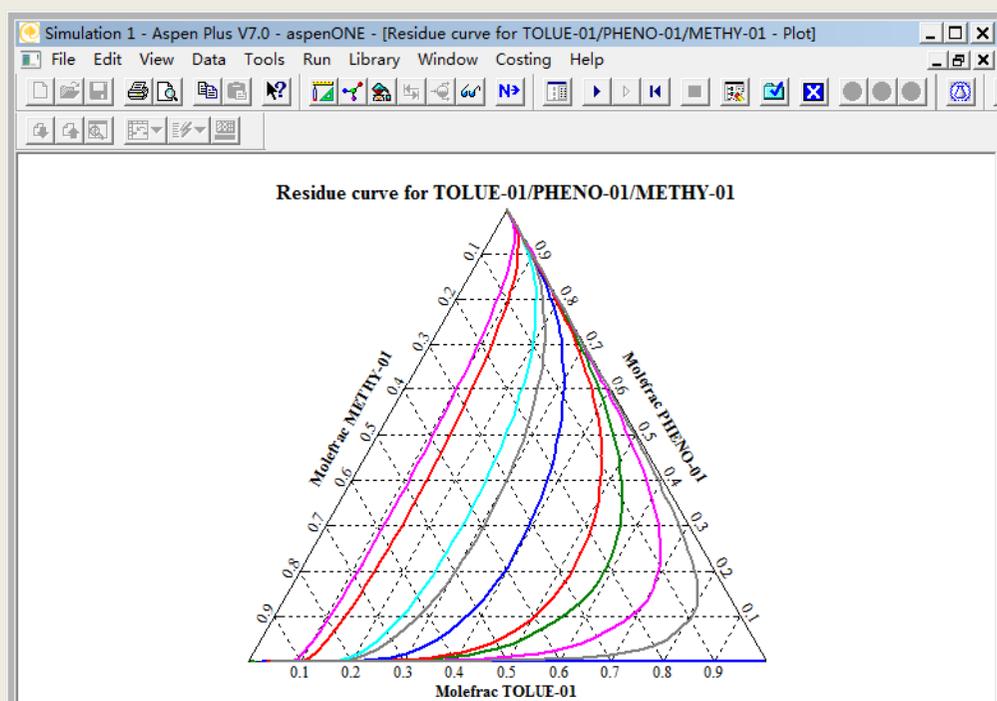
PRES	MOLEFRAC TOLUE-01	TOTAL TEMP	TOTAL KVL TOLUE-01	TOTAL KVL PHENO-01	LIQUID GAMMA TOLUE-01	LIQUID GAMMA PHEN
psia		F				
14.69595	0	359.4795	9.319512	1.000002	1.929582	1
14.69595	0.025	346.4208	8.037513	0.8195509	1.895397	1.0003
14.69595	0.05	334.9941	7.004805	0.6839638	1.860137	1.0013
14.69595	0.075	325.0077	6.168204	0.5809804	1.824191	1.0030
14.69595	0.1	316.2669	5.484804	0.5017315	1.787921	1.0055
14.69595	0.125	308.5918	4.921115	0.4398963	1.751635	1.0087
14.69595	0.15	301.824	4.451412	0.3909839	1.715584	1.0126
14.69595	0.175	295.8282	4.05605	0.3517905	1.679967	1.0176

Plot Wizard Close

# 混合物相图的绘制 (18)

53

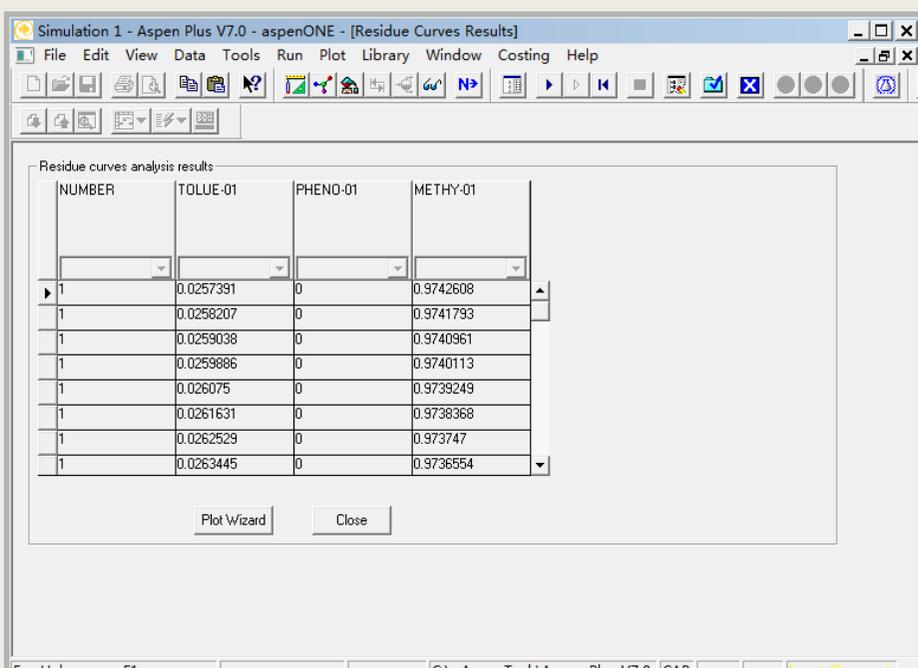
采用同样的方法，可绘制三种物质的剩余物曲线



# 混合物相图的绘制 (19)

54

关闭图形，出现下图表格：



The screenshot shows the 'Residue curves analysis results' window in Aspen Plus V7.0. The window title is 'Simulation 1 - Aspen Plus V7.0 - aspenONE - [Residue Curves Results]'. The menu bar includes File, Edit, View, Data, Tools, Run, Plot, Library, Window, Costing, and Help. The toolbar contains various icons for file operations and simulation control. The main area displays a table with the following data:

NUMBER	TOLUE-01	PHENO-01	METHY-01
1	0.0257391	0	0.9742608
1	0.0258207	0	0.9741793
1	0.0259038	0	0.9740961
1	0.0259886	0	0.9740113
1	0.026075	0	0.9739249
1	0.0261631	0	0.9738368
1	0.0262529	0	0.973747
1	0.0263445	0	0.9736554

At the bottom of the window, there are two buttons: 'Plot Wizard' and 'Close'.

# 估计非数据库组份的物性 (1)

55

## 定义通用结构的步骤:

在纸上勾画出分子的结构

给每个原子编号, 忽略氢原子 (编号必须是从1开始的连续数字)

转到 **Properties/Molecular Structure** 对象管理器中, 选定组分, 然后选择 **Edit** 命令

在 **Molecular Structure General1** 页上, 按照其连接顺序定义分子。

一次描述两个原子:

- 指定原子类型 (C, O, S, ...)
- 指定连接这两个原子的键的类型 (单键、双键...)

: 如果该分子是非数据库组分, 则要在 **Components/Specifications** 窗口上, 输入 **Component ID** (组分标识符), 但不要输入 **Component name** (组分名) 或 **Formula** (分子式)。

# 估计非数据库组份的物性 (2)

56

## 原子类型

原子类型	描述	原子类型	描述
C	Carbon (碳)	P	Phosphorous (磷)
O	Oxygen (氧)	Zn	Zinc (锌)
N	Nitrogen (氮)	Ga	Gallium (镓)
S	Sulfur (硫)	Ge	Germanium (锗)
B	Boron (硼)	As	Arsenic (砷)
F	Fluorine (氟)	Cd	Cadmium (镉)
Cl	Chlorine (氯)	Sn	Tin (锡)
Br	Bromine (溴)	Sb	Antimony (锑)
I	Iodine (碘)	Hg	Mercury (汞)
Al	Aluminum (铝)	Pb	Lead (铅)

## 估计非数据库组份的物性 (3)

57

### ※目前可用的键类型:

- **Single bond** (单键)
- **Double bond** (双键)
- **Triple bond** (叁键)
- **Benzene ring** (苯环)
- **Saturated 5-membered ring** (饱和五元环)
- **Saturated 6-membered ring** (饱和六元环)
- **Saturated 7-membered ring** (饱和七元环)
- **Saturated hydrocarbon chain** (饱和烃链)

# 估计非数据库组份的物性（4）

58

## ※ 激活物性估算：

要打开**Property Estimation**（物性估算），可转到**Properties Estimation Input Setup**页上，并选择下列选项之一：

### ➤ **Estimate all missing parameters**

估算所有缺少的必需参数以及在**Pure Component**、**T-Dependent**、**Binary**和**UNIFAC-Group**页中你可能需要的参数

### ➤ **Estimate only the selected parameters**

只估算你在这页上（以及以后在适当的附加页上）选择的参数类型

## 估计非数据库组份的物性（5）

59

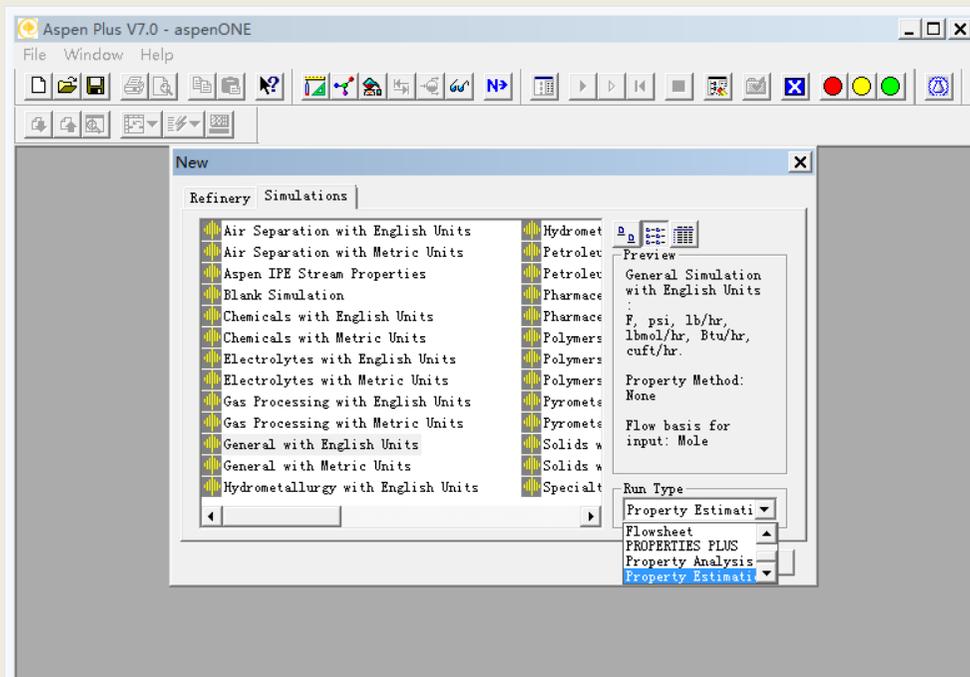
### 物性估算的说明

可以把物性数据规定、结构和估算存为**备份文件**，然后它们转入其它模拟中（**Flowsheet、DataRegression、Property Analysis**或**Assay Data Analysis Run-Types**）

# 估计非数据库组份的物性

60

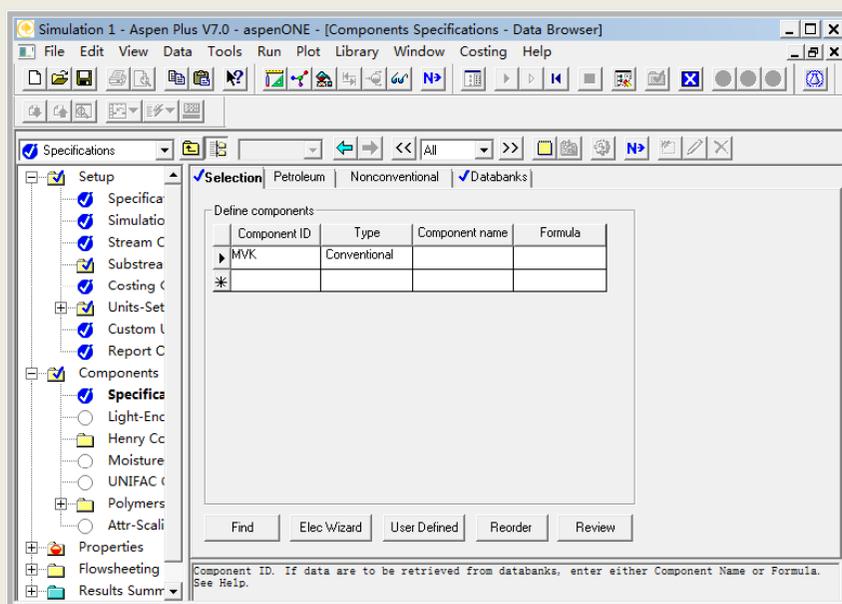
启动Aspen plus并创建模拟，选择Template并单击OK，在运行类型中选择性质估计，如图：



# 输入组分ID并规定估计的性质（1）

61

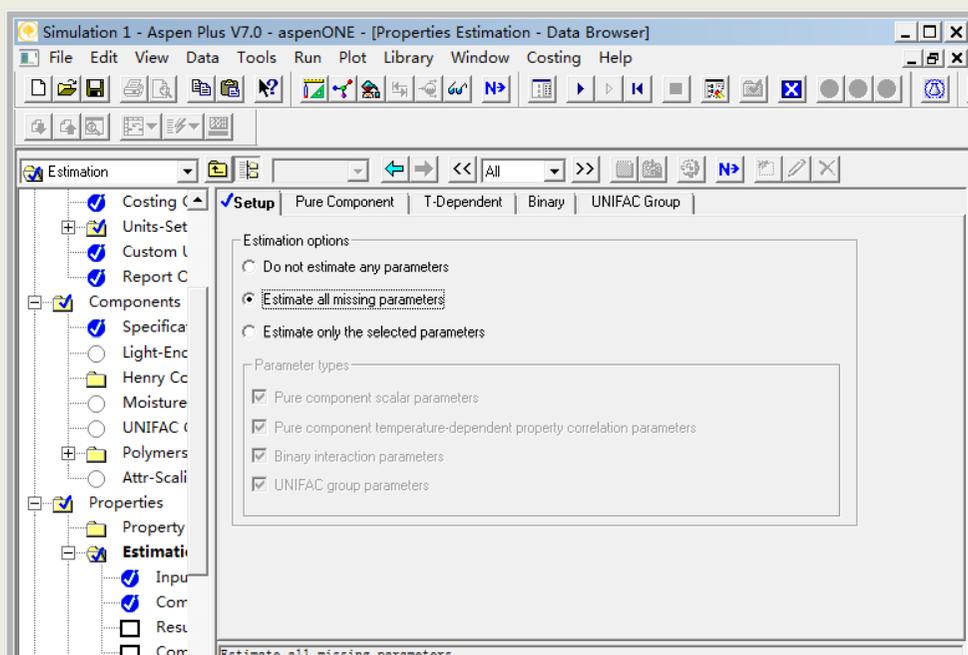
单击 **Components/Specifications/Selection** 表格，输入组分ID，本例中输入 **MVK**，由于该组分是未知组分，不必输入组分的名称与分子式，如图：



## 输入组分ID并规定估计的性质（2）

62

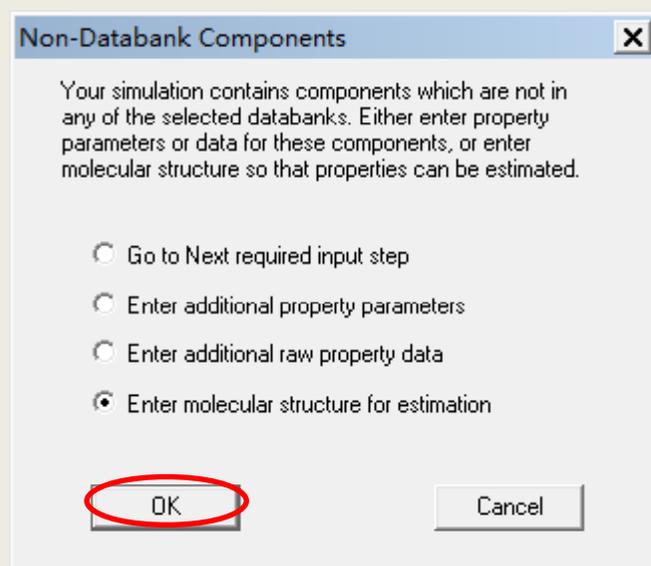
单击**NEXT**，出现**Properties/Estimation/Input/Setup**表格。规定要估计的性质，本例采用缺省的估计性质，即估计所有缺少的参数，如图：



## 输入组分ID并规定估计的性质（3）

63

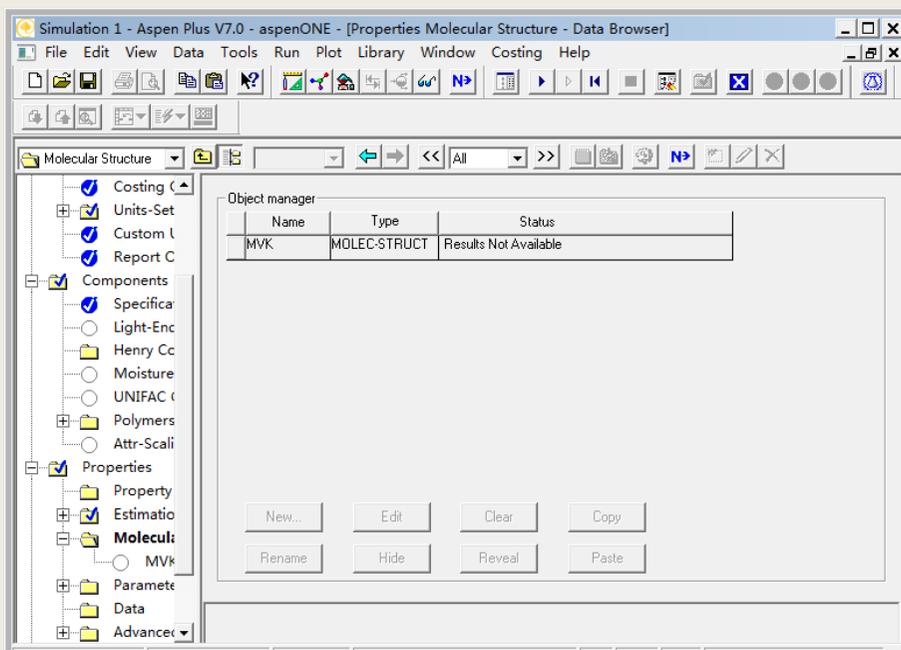
单击**NEXT**，弹出对话框，提示组分为未知组分，选择最下面的选项，即输入分子结构：



# 输入组分ID并规定估计的性质（4）

64

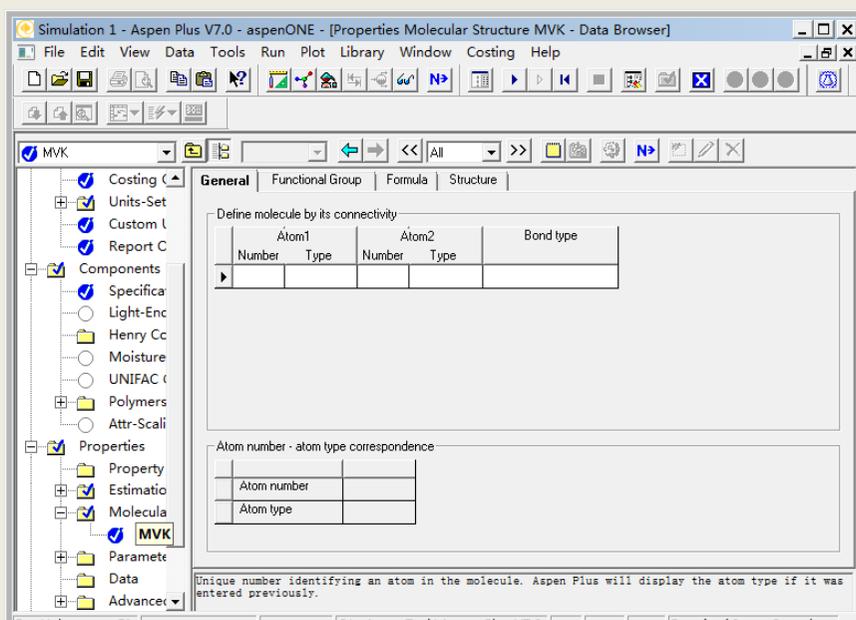
单击上图OK，进入组分输入向导：



## 输入组分ID并规定估计的性质（5）

65

单击数据浏览器中的**Properties/Molecular Structure**,单击**MVK**前面的**圆圈**选择该物质,出现下图表格:



# 输入组分ID并规定估计的性质（6）

66

✧ 在**General**页上，输入其结构，如图：

The screenshot shows the Aspen Plus V7.0 interface. The 'General' tab is selected, and the 'Define molecule by its connectivity' section is active. The connectivity table is as follows:

Atom1		Atom2		Bond type
Number	Type	Number	Type	
1	C	2	C	Single bond
1	C	3	C	Single bond
1	C	4	O	Double bond
2	C	5	C	Double bond
*				

Below the connectivity table, the 'Atom number - atom type correspondence' table is shown:

Atom number	1	2	3	4	5
Atom type	C	C	C	O	C

# 输入组分ID并规定估计的性质 (7)

67

通过下拉菜单选择键的类型:

The screenshot shows the Aspen Plus V7.0 interface. The main window is titled "Simulation 1 - Aspen Plus V7.0 - aspenONE - [Properties Molecular Structure MVK - Data Browser]". The "General" tab is selected in the "Define molecule by its connectivity" dialog box. The dialog box contains a table for defining bonds between atoms and a dropdown menu for selecting bond types.

Atom1		Atom2		Bond type
Number	Type	Number	Type	
1	C	2	C	Single bond
1	C	3	C	Single bond
1	C	4	O	Double bond
2	C	5	C	Double bond

The dropdown menu for the bond type of the bond between atoms 2 and 5 is open, showing the following options:

- Double bond (selected)
- Single bond
- Triple bond
- Benzene ring
- Sat. 5-member ring
- Sat. 6-member ring
- Sat. 7-member ring
- Sat. hydrocarbon chain

Below the table, there is a section for "Atom number - atom type correspondence":

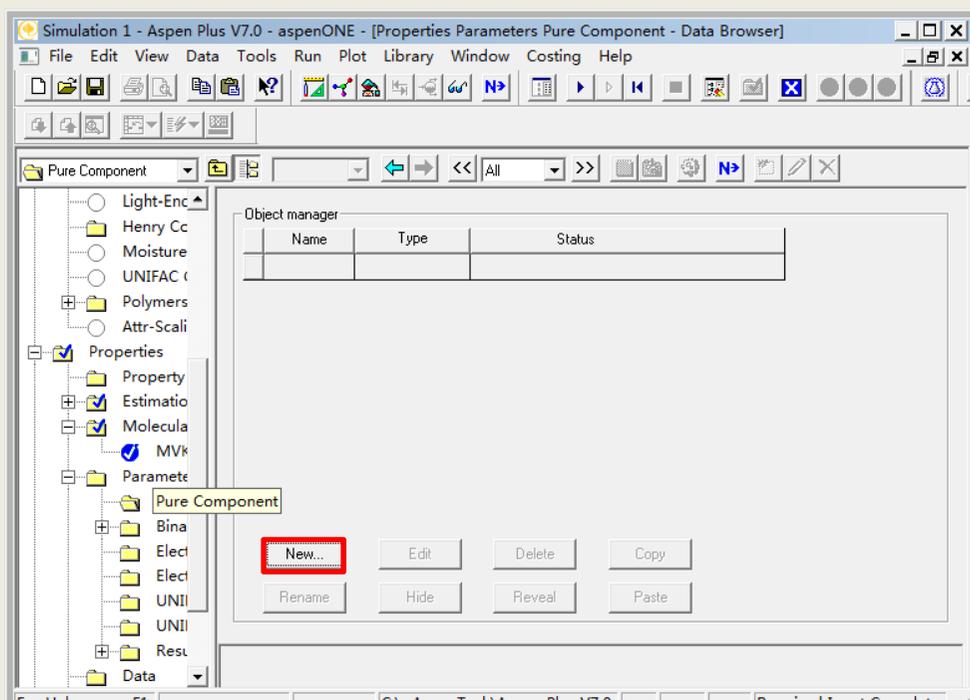
Atom number	1	2	3	4	5
Atom type	C	C	C	O	C

The status bar at the bottom of the window shows "For Help, press F1", "C:\...AspenTech\Aspen Plus V7.0", and "Required Input Complete".

# 输入已有物性的实验数据（1）

68

点击数据浏览器中的**Properties/Parameters/Pure Component**,出现对象管理器:



## 输入已有物性的实验数据（2）

69

点击**NEW**，建立一个新的纯组分标量参数：

New Pure Component Parameters

Select type of pure component parameter

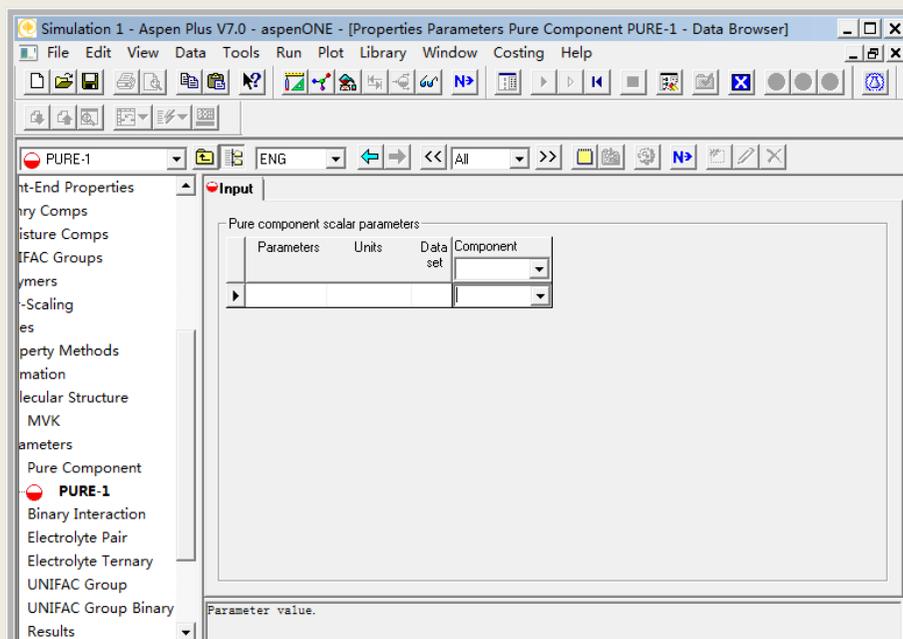
- Scalar
- T-dependent correlation
- Nonconventional

Enter new name or accept default : PURE-1

## 输入已有物性的实验数据（3）

70

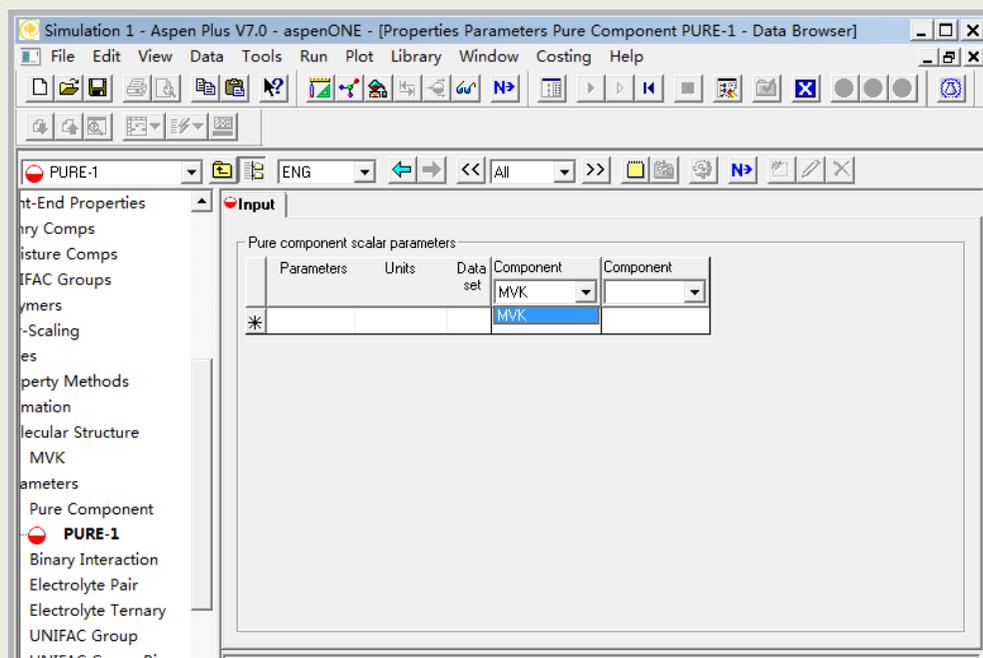
单击**OK**，出现下图窗口：



# 输入已有物性的实验数据（4）

71

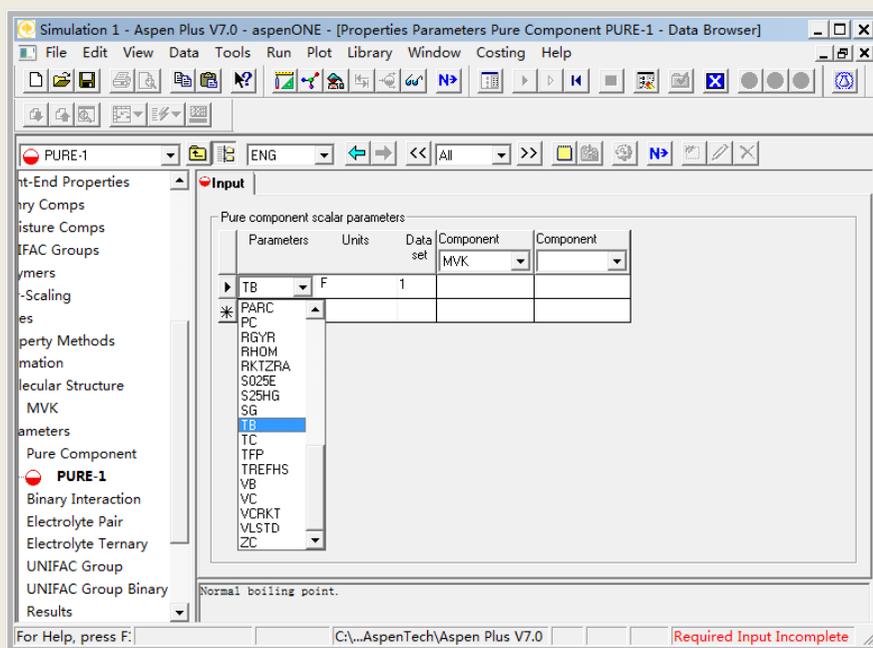
通过下拉菜单，选中**MVK**，如图：



# 输入已有物性的实验数据（5）

72

通过下拉菜单，选中**TB**，即沸点，如图：

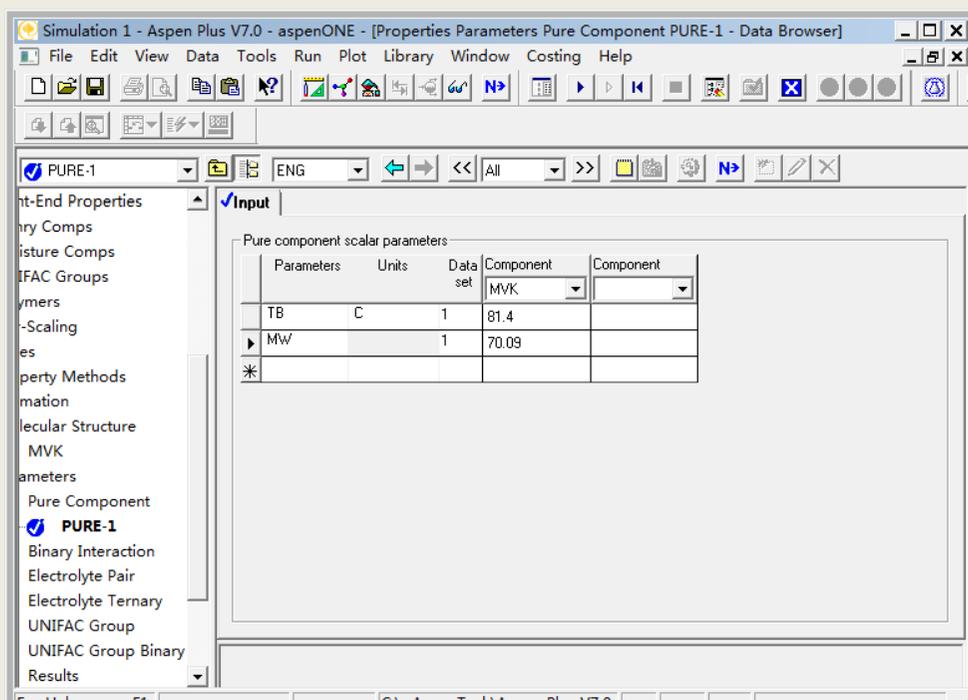




# 输入已有物性的实验数据（7）

74

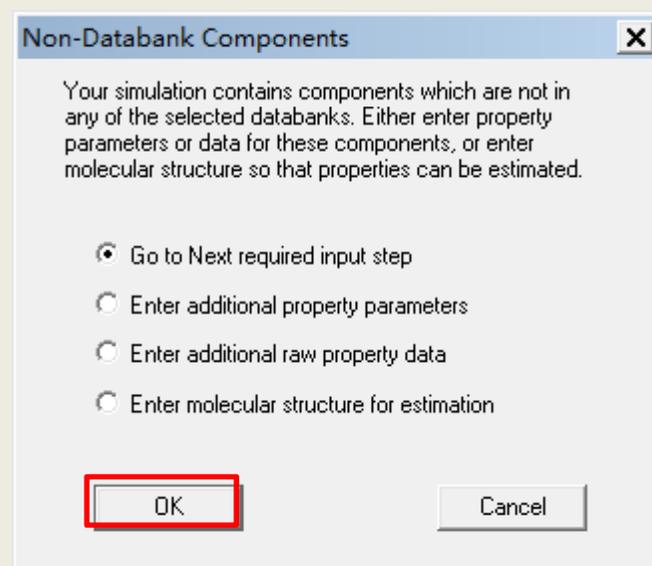
※ 输入完成后，如图：



## 完成纯组分性质数据的输入（1）

75

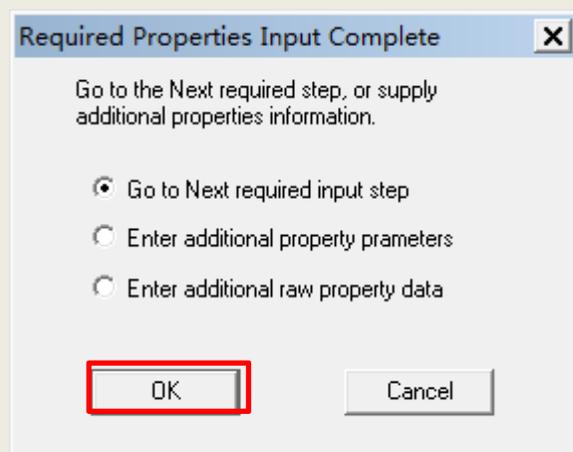
单击**NEXT**，出现下图窗口，单击**OK**，如图：



## 完成纯组分性质数据的输入（2）

76

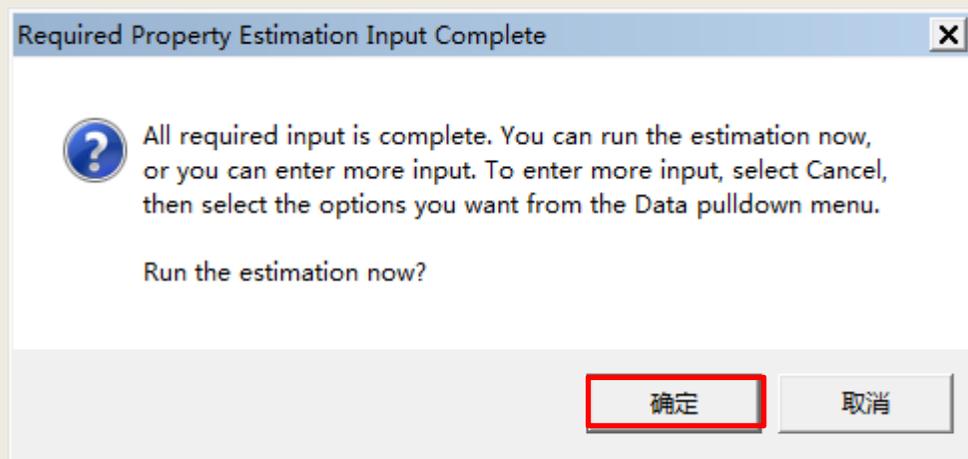
单击**OK**，出现下图窗口，再次单击**OK**：



## 完成纯组分性质数据的输入（3）

77

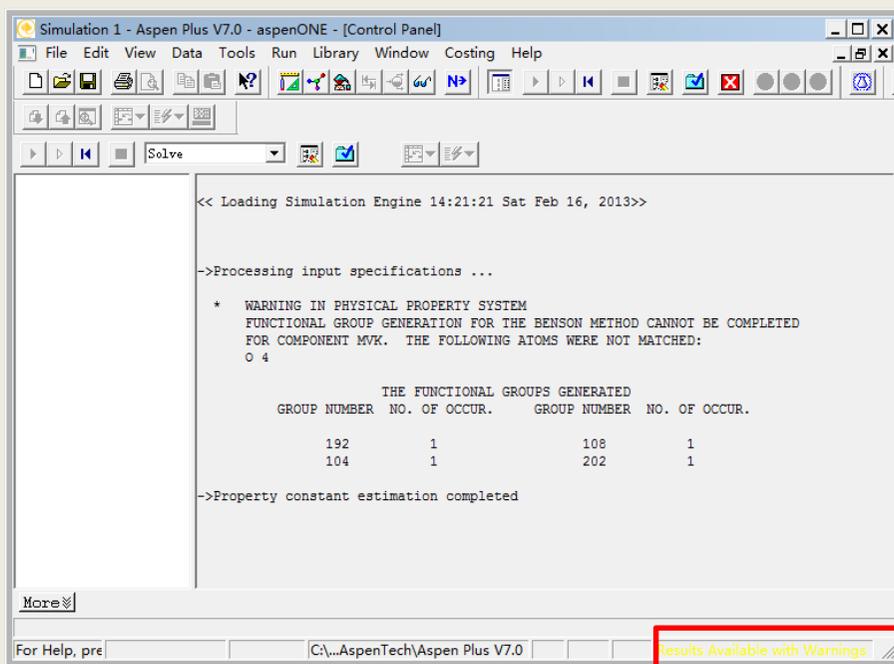
单击**OK**，出现下图窗口，再次单击**确定**，如图：



# 运行物性常数估计并查看结果 (1)

78

由于没有使用官能团，所以忽略警告信息。



```
<< Loading Simulation Engine 14:21:21 Sat Feb 16, 2013>>

->Processing input specifications ...

* WARNING IN PHYSICAL PROPERTY SYSTEM
  FUNCTIONAL GROUP GENERATION FOR THE BENSON METHOD CANNOT BE COMPLETED
  FOR COMPONENT MVK.  THE FOLLOWING ATOMS WERE NOT MATCHED:
  O 4

      THE FUNCTIONAL GROUPS GENERATED
      GROUP NUMBER  NO. OF OCCUR.   GROUP NUMBER  NO. OF OCCUR.
      192             1              108             1
      104             1              202             1

->Property constant estimation completed
```

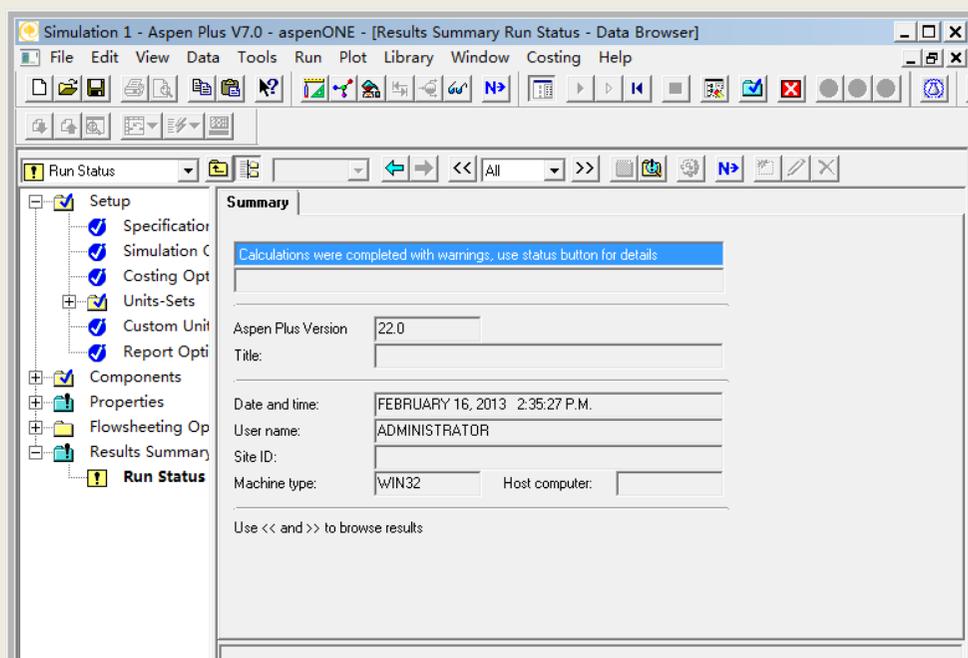
More ▾

For Help, pre | C:\...AspenTech\Aspen Plus V7.0 | Results Available with Warnings ▾

## 运行物性常数估计并查看结果（2）

79

单击数据浏览器中的**Results Summary/Run Status**,显示的信息为计算完成,可是有警告信息。



## 运行物性常数估计并查看结果（3）

80

击数据浏览器中的**Properties/Estimation/Results**, 出估计纯组分性质的表格, 如图:

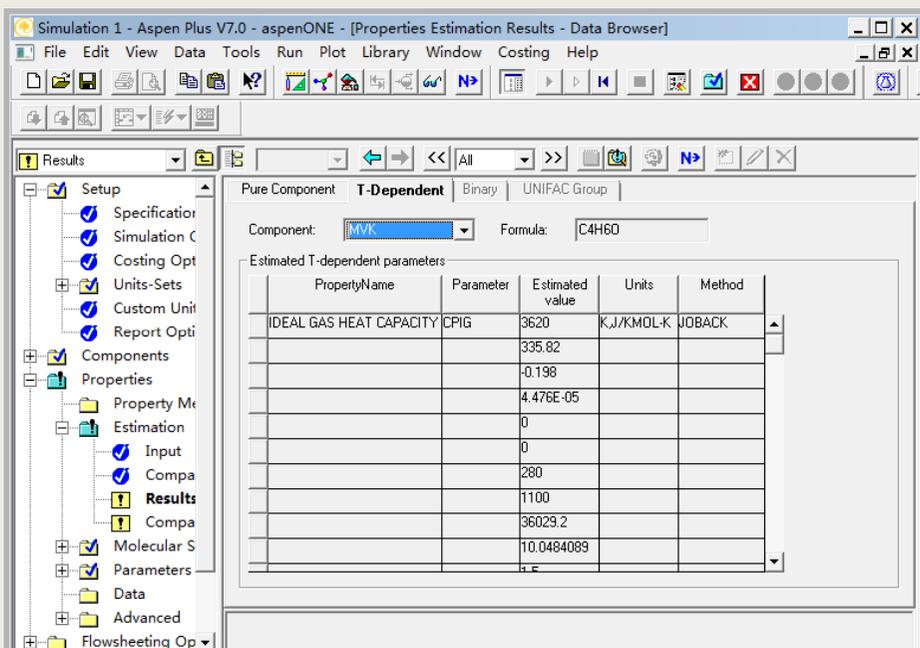
The screenshot displays the Aspen Plus V7.0 Data Browser interface. The main window shows the 'Results' section for a 'Pure Component' (MVK, Formula: C4H8O). The 'Estimated pure component parameters' table is visible, listing various properties and their estimated values.

PropertyName	Parameter	Estimated value	Units	Method
CRITICAL TEMPERATURE	TC	543.948683	K	JOBACK
CRITICAL PRESSURE	PC	4462275.7	N/SQM	JOBACK
CRITICAL VOLUME	VC	0.2465	CUM/KMOL	JOBACK
CRITICAL COMPRES.FAC	ZC	0.24321376		DEFINITI
IDEAL GAS CP AT 300 K		87754.52	J/KMOL-K	JOBACK
AT 500 K		127625	J/KMOL-K	JOBACK
AT 1000 K		186200	J/KMOL-K	JOBACK
STD. HT. OF FORMATION	DHFORM	-113040000	J/KMOL	JOBACK
STD. FREE ENERGY FORM	DGFORM	-58280000	J/KMOL	JOBACK
VAPOR PRESSURE AT TB		101307.434	N/SQM	RIEDEL
AT 0.9*TC		2036197.79	N/SQM	RIEDEL

## 运行物性常数估计并查看结果（4）

81

单击**T-Dependent**标签，出现**T-Dependent**表格，其中含有估计的多项式参数，用以模拟与温度有关的性质。



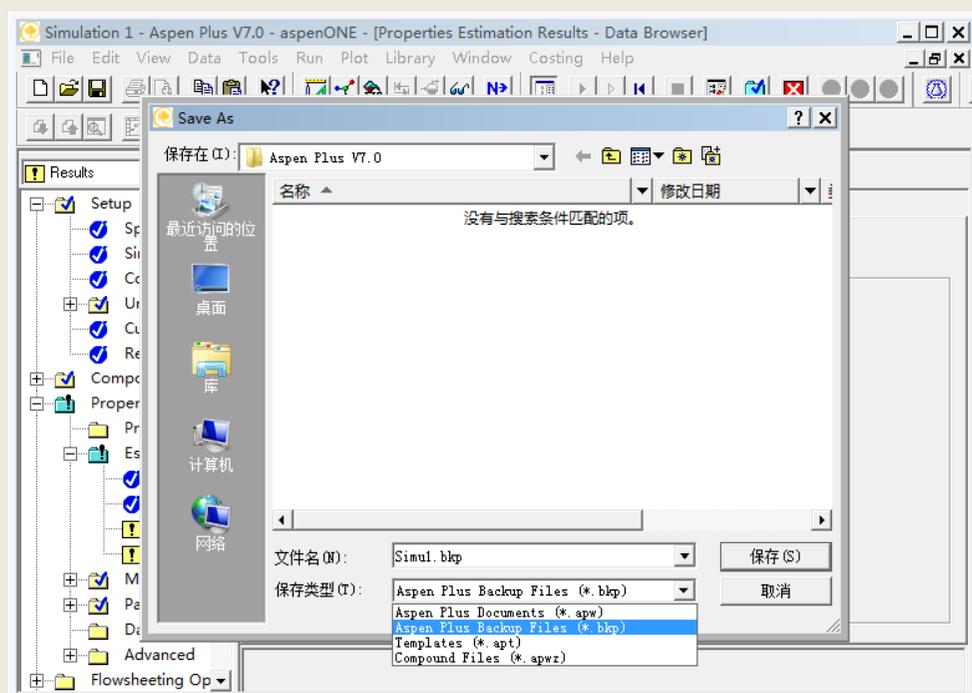
The screenshot displays the Aspen Plus V7.0 interface for Properties Estimation Results. The main window shows the 'T-Dependent' tab for component 'MVK' (Formula: C4H6O). The 'Estimated T-dependent parameters' table is visible, listing various properties and their estimated values.

PropertyName	Parameter	Estimated value	Units	Method
IDEAL GAS HEAT CAPACITY	CPIG	3620	K,J/KMOL.K	JOBACK
		335.82		
		-0.198		
		4.476E-05		
		0		
		0		
		280		
		1100		
		36029.2		
		10.0484089		
		5.5		

# 保存为备份文件

82

点击保存，将该文件保存为备份文件**bkp**文件，如图：



## 物性估算练习

83

※ **目的：** 估算二聚物—乙基**2**-乙氧基乙醇的物性。

乙基2-乙氧基乙醇不是Aspen Plus数据库中的组分。  
使用Property Estimation的Run Type（运行类型），并估算新组分的性质。

该组分的分子式以及从文献中查到的标准沸点如下所示：

分子式：CH<sub>3</sub> - CH<sub>2</sub> - O - CH<sub>2</sub> - CH<sub>2</sub> - O - CH<sub>2</sub> - CH<sub>2</sub> - OH  
TB = 195℃

---

# 结束

84

下节内容：化工过程概念设计（1）