定义 LHHW 反应的通用例子

编者按

1）这篇中文技术支持文章将会告诉我们在 Aspen Plus 中如何定义复杂的动力学反应方程（如 LHHW 型反应）。

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：

定义 LHHW 反应的通用例子

问题描述

在 Aspen Plus 中如何定义 LHHW 动力学反应？

解决方案

对于反应 W + X □ Y + Z，一般情况下，反应速率表达式是：

$$Rate = \frac{k\exp\left(\frac{-E}{RT}\right)\left\{K_f[W][X] - K_b[Y][Z]\right\}}{\text{Adsorption expression}}$$

© 2020 Aspen Technology, Inc. All rights reserved.

如果反应是不可逆的，其动力学常数（和用来表述与温度关系的 E）可并入总反应速率常数 k。简化的反应速率表述式是：

$$Rate = \frac{k\exp\left(\frac{-E}{RT}\right)[W][X]}{\text{Adsorption expression}}$$

此处，K_f=1，K_b=0

为了在 Aspen Plus 中定义此式，你需要在 Kinetic 表中输入 k 和 E 的值，然后点击 Driving Force。在 LHHW 反应集中，对于 Term 1 输入 A=0，反应物浓度的指数=1。然后将 Enter Term 改为 Term 2 并给 A 一个很大的负值，使K_b趋近于零。

对于可逆反应，反应速率可写成：

$$Rate = \frac{K_f[W][X] - K_b[Y][Z]}{\text{Adsorption expression}}$$

为了定义这个表达式，在 Kinetic 表中输入 k=1 和 E=0。然后点击 Driving Force，将 Term 1 中反应物浓度指数和 Term 2 中产物浓度指数都定义为 1。分别在 Term 1 和 Term 2 中输入K_f和K_b的表达式。表达式的形式是：

$$\ln(K) = A + \frac{B}{T} + C\ln(T) + DT$$

或

$$K = \exp(A)\exp\left(\frac{B}{T}\right)T^C\exp(DT)$$

另一种方法，可将反应速率公式写成：

$$Rate = \frac{k\exp\left(\frac{-E}{RT}\right)\left\{[W][X] - \frac{1}{K_{eq}}[Y][Z]\right\}}{\text{Adsorption expression}}$$

这样的话，你可以在 Kinetic 表中输入 k 和 E 的值。然后点击 Driving Force，按上述公式输入浓度的指数。在 Term 1 中输入 A=0，在 Term 2 中输入K_b（$K_b = \frac{1}{K_{eq}}$）以温度为自变量的表达式，公式的形式也是：

© 2020 Aspen Technology, Inc. All rights reserved.

$$K = \exp(A)\exp\left(\frac{B}{T}\right)T^C \exp(DT)$$

在 LHHW 反应中，不同吸附机理的吸附表达式各不相同。各种吸附表达式可以在 *Perry's Chemical Engineers' Handbook*, table 7-2 中找到。假设吸附表达式可以写成：

$$Adsorption = \left\{1 + K_w[W] + K_x[X] + K_y[Y] + K_z[Z]\right\}^2$$

为了在 Aspen Plus 中输入这个吸附表达式，需要将 Adsorption expression exponent 设为 2，并定义 5 项。

浓度的指数按下表输入：

Component	Term no. 1	Term no. 2	Term no. 3	Term no. 4	Term no. 5
W	0	1	0	0	0
X	0	0	1	0	0
Y	0	0	0	1	0
Z	0	0	0	0	1

对于吸附常数，输入 Ks 对应的以温度为变量的表达式，表达式形式也是 $K = \exp(A)\exp\left(\frac{B}{T}\right)T^C \exp(DT)$。通常 C 和 D 是 0。吸附表达式的第一项通常是 1，即输入 A=0（因为 1=exp0）。

参考文献

R. H. Perry and D. W. Green, eds., Perry's Chemical Engineers' Handbook, 7th ed., McGraw-Hill (1997), pp. 7-11 to 7-13.

关键词

Langmuir-Hinshelwood Hougen-Watson, Chinese, 中文

© 2020 Aspen Technology, Inc. All rights reserved.