使用 Chemistry 表观组分法生成的挥发组分

编者按

1）这篇中文技术支持文章将会告诉我们模拟生成挥发组分的电解质反应时，应如何处理以避免计算结果错误。

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：

使用 Chemistry 表观组分法生成的挥发组分

问题描述

能否使用含挥发组分的电解质化学反应？在 Chemistry 的反应中本该生成 CO2，但是在气相中却没有该组分。

解决方案

在 Chemistry 的反应中，如果任一组分的蒸汽压较大，或有挥发组分生成，那么只能使用真实组分法（true component approach）。一些电解质反应会生成 CO2， H2S，HCN 等挥发组分，都应如此处理。

根本的原因是当使用表观组分法时 Aspen Plus 会忽略真实反应产物（指解离反应式右侧组分，平衡反应两侧的组分）的蒸汽压。即使是连续反应（同一组分会出现在某些反应的右

© 2020 Aspen Technology, Inc. All rights reserved.

侧，也会出现在其它反应的左侧），表观组分法也不能使用。这样的设计是有意为之的，因为 Chemistry 的反应就是希望用在反应产物都是液相的情况。

比如，如果定义了下面的反应：

H2SO4 + NaCN -> Na2SO4 + HCN (气)

如果所有的表观组分（此例子中指 H2SO4 和 NaCN）都是不挥发的，那么就没有办法表征挥发性物质。因此在使用表观组分法时，挥发性物质（HCN）就不能生成。因此，气相中也不会出现 HCN。

在 V7.1 及更高版本中，可以在 phase equilibrium results 中增加一个检查项。在 Setup | Simulation Options | Check Results 表中通过设定 Warning, Error 或 Information 来激活此功能。

关键词

电解质反应平衡　CO2　H2S

© 2020 Aspen Technology, Inc. All rights reserved.