

建模背景

在能源与化工过程中，反应器的转化率是衡量化学反应效率的重要性能指标。该指标受到多个操作变量的影响，包括反应温度、压力以及催化剂的使用特性。为了实现对反应过程的定量分析与控制，建立一个确定性数学模型来描述转化率与关键输入变量之间的函数关系具有重要意义。

本模型旨在通过经验分析方法，构建一个能够反映温度、压力和催化剂负载对转化率综合影响的确定性模型。模型考虑了温度的指数增强效应、压力的线性促进作用以及催化剂负载量的非线性响应特征，从而为工艺优化与控制提供理论依据。

建模公式

$$\text{conversion} = 0.1 \times (1 - e^{-0.05 \times \text{temperature}}) \times \left(\frac{\text{pressure}}{1 + e^{-0.2 \times (\text{catalyst_loading} - 50)}} \right)$$

该模型输出为反应转化率，取值范围介于0到1之间，分别表示反应物未转化和完全转化的状态。模型结构综合考虑了各变量对反应动力学行为的实际影响，具备良好的物理意义与工程适用性。