

建模背景

在能源化工过程中，反应器的操作性能直接影响产物的生成效率与工艺经济性。为了对反应过程进行定量分析和优化设计，需建立能够反映关键操作参数影响的经验或机理模型。本模型针对一个典型的连续流动化工反应器，基于反应动力学原理，构建了一个简化的转化率预测表达式。该模型综合考虑了温度、压力、进料浓度、流速以及反应速率常数对反应进程的影响，适用于初步工艺设计或过程优化研究中的快速估算。

建模公式

$$X = 1 - e^{-k_0 \cdot \frac{C_{in}}{F} \cdot \left(\frac{T}{300}\right)^{1.5} \cdot \left(\frac{P}{10}\right)}$$

该公式通过指数函数形式描述了反应转化率与主要操作变量之间的非线性关系，其中各变量分别为：

- T ：反应温度 (K)
- P ：系统压力 (bar)
- C_{in} ：进料中反应物浓度 (mol/m^3)
- F ：进料流速 (m^3/s)
- k_0 ：反应速率常数 ($1/\text{s}$)

模型输出 X 表示反应物转化为产物的比例，取值范围为 $[0, 1]$ ，反映了反应的完成程度。