

建模背景

在能源化工过程中，反应器的设计与优化依赖于对反应动力学的准确描述。转化率作为衡量反应进行程度的关键参数，通常受到反应时间、温度以及反应速率常数的显著影响。为了对反应行为进行定量分析，构建一个简化的数学模型能够有效预测在不同操作条件下的转化率变化趋势，从而为工艺参数的设定提供理论依据。

本模型采用积分方程形式，结合阿伦尼乌斯方程描述温度对反应速率的影响，并通过时间积分反映反应的累积效果。该方法适用于均相反应体系的初步模拟，可作为连续搅拌釜反应器(CSTR)或固定床反应器中反应动力学分析的基础工具。

建模公式

$$\text{Conversion}(t, T) = \int_0^t k(T) \cdot e^{-\tau} d\tau$$

其中反应速率常数 $k(T)$ 由阿伦尼乌斯方程给出：

$$k(T) = A \cdot e^{-\frac{E_a}{R(T+273.15)}}$$

模型通过数值积分求解该积分表达式，并对结果进行归一化处理，以确保转化率在物理合理的范围内(0~1)。通过该建模方法，可以灵活调整指前因子 A 和活化能 E_a ，以适配不同反应体系的实际动力学参数。