

建模背景

在能源化工过程中，反应器内物质浓度的动态变化是影响反应效率与产物分布的关键因素。

为描述这一动态行为，需建立数学模型以揭示浓度变化率与系统输入变量之间的内在关系。

该模型可为过程控制、优化操作及安全评估提供理论依据。

本模型聚焦于一个典型的化学反应过程，其中反应物浓度随时间变化的速率受到温度、压力及初始浓度的共同影响。通过合理的简化与假设，采用一阶常微分方程描述该过程的动力学行为，适用于在恒定反应速率常数条件下的定常系统分析。

建模公式

描述浓度变化率的微分方程如下：

$$\frac{dC}{dt} = -k \cdot C \cdot \frac{P}{T}$$

其中：

- \$ C \$ 表示物质的瞬时浓度，单位为 mol/m³；
- \$ T \$ 为系统温度，单位为 K；
- \$ P \$ 为系统压力，单位为 bar；
- \$ k \$ 为反应速率常数，取值为 0.05；

该方程表明，浓度变化率与当前浓度、系统压力成正比，与温度成反比，反映了温度升高对

反应速率的抑制作用（如在放热反应中常见），以及压力增强反应速率的物理机制。模型输出为单位时间浓度的变化量，可用于预测反应器内物质浓度的动态演变趋势。