

По своей сути химическая кинетика является нестационарной, так как изменение состава в процессе превращения протекает во времени. Вынесенный в заголовок термин «квазистационарный» связан с тем, что в данном материале термодинамические параметры, такие как давление, температура, а также соотношение сырье-водяной пар принимаются постоянными величинами в течение конкретного расчета. Вариация определяющих параметров позволяет определить их конкретные количественные величины, обеспечивающие оптимальный выход целевого продукта. Система уравнений химической кинетики, аппроксимирующая процесс пиролиза этана на тринадцать составляющих может быть записана в виде: For[Tau=0,Tau0.01,

```
W:=1000+10000*Tau; Sol=NDSolve[{ c1'[t]=k10[W]*c3[t]*c6[t]+k13[W]*c3[t]^2-
k1[W]*c1[t]-k2[W]*c1[t]*c2[t]-k4[W]*c1[t]*c6[t], c2'[t]=-
k12[W]*c2[t]*c3[t]+2*k1[W]*c1[t]-k2[W]*c1[t]*c2[t]-k5[W]*c2[t]*c5[t]-
k6[W]*c2[t]*c6[t]-k7[W]*c2[t], c3'[t]=-k10[W]*c3[t]*c6[t]-2*k11[W]*c3[t]^2-
k12[W]*c2[t]*c3[t]-2*k13[W]*c3[t]^2+k2[W]*c1[t]*c2[t]-
k3[W]*c3[t]+k4[W]*c1[t]*c6[t], c4'[t]=k2[W]*c1[t]*c2[t]+k5[W]*c2[t]*c5[t],
c5'[t]=k13[W]*c3[t]^2+k3[W]*c3[t]-k5[W]*c2[t]*c5[t], c6'[t]=-k10[W]*c3[t]*c6[t]-
k14[W]*c6[t]*c11[t]+k3[W]*c3[t]-k4[W]*c1[t]*c6[t]-k6[W]*c2[t]*c6[t]-
k8[W]*c6[t]*c10[t]+k9[W]*c8[t],
c7'[t]=k14[W]*c6[t]*c11[t]+k4[W]*c1[t]*c6[t]+k6[W]*c2[t]*c6[t]+k7[W]*c2[t]+k8[W]*c6[t]*c10[t],
c8'[t]=k5[W]*c2[t]*c5[t]-k9[W]*c8[t], c9'[t]=k9[W]*c8[t], c10'[t]=k6[W]*c2[t]*c6[t]-
k8[W]*c6[t]*c10[t], c11'[t]=-k14[W]*c6[t]*c11[t]+k7[W]*c2[t]+k8[W]*c6[t]*c10[t],
c12'[t]=k11[W]*c3[t]^2, c13'[t]=k12[W]*c2[t]*c3[t], c14'[t]=k14[W]*c6[t]*c11[t], (1)
```

Помним, что процесс протекает при давлении $P = 0,27$ Мра, а соотношение этан-пар составляет 0,75 – 0,25 частей. Диапазон возможных температур 1000 – 1090 оК с шагом 10о. В рассматриваемом случае систему краевых условий представим в форме: $c1[0]=0.02889$, $c2[0]=0$, $c3[0]=0$, $c4[0]=0$, $c5[0]=0$, $c6[0]=0$, $c7[0]=0$, $c8[0]=0$, $c9[0]=0$, $c10[0]=0$, $c11[0]=0$, $c12[0]=0$, $c13[0]=0$, $c14[0]=0$, {c1,c2,c3,c4,c5,c6,c7,c8,c9,c10,c11,c12,c13,14}, {t,0,0.5} Оценка весовых долей продуктов пиролиза в функции времени осуществляется посредством пакета «Mathematica» с использованием процедуры NDSolve. Ниже приведем программу численной реализации системы (1). Последнюю приведем в полном виде, что даст потребителю использовать ее в практических целях:

```
S=Append[S,Evaluate[{(c1[t]*gc2h6)/c1[0],(c2[t]*15*gc2h6)/(c1[0]*30),(c3[t]*29*gc2h6)/(c1[0]*30),
(c5[t]*28*gc2h6)/(c1[0]*30),(c6[t]*1*gc2h6)/(c1[0]*30),(c7[t]*2*gc2h6)/(c1[0]*30)}],
Temperatura=Append[Temperatura,W]; Tau=Tau+0.001];
{1000,1010.,1020.,1030.,1040.,1050.,1060.,1070.,1080.,1090.} Результаты счета
приведены в фигурных скобках. Здесь: 1 – C2H6; 2 – CH3; 3 – C2H5; 4 – CH4; 5 –
C2H4; 6 – H; 7 – H2; 8 – C2H3; 9 – C2H2; 10 – CH2; 11 – CH; 12 – C4H10; 13 – C3H8; 14
– C. {{0.553976,4.12221*10-6,3.68553*10-7,0.0169677,
0.164546,0.0000116,0.011189,1.75547*10-7,0.0032503, 7.84129*10-9,1.4797*10-
```

9,1.73635*10-6,0.0000613582,0.0000242434}, {0.497888,5.05178*10-6,3.78734*10-7,0.023682,0.208234,0.0000145068, 0.0142834,2.54395*10-7,0.00579399,1.04523*10-8,1.95337*10-9,2.07188*10-6,0.000086216,0.0000428359},{0.432702,5.98137*10-6,3.74305*10-7,0.0322973,0.257054,0.0000184995,0.0178672,3.48277*10-7, 0.0098931,1.34388*10-8,2.48775*10-9, 2.39388* 10-6, 0.000117123,0.0000737768},{0.360358,6.79212*10-6,3.52451*10-7, 0.0429189,0.308507,0.0000235161,0.0218412,4.45619*10-7,0.016096,1.65449*10-8,3.03431*10-9, 2.6712*10-6,0.000153427,0.000123614},{0.284459,7.32579*10-6,3.12698*10-7,0.055416,0.35888,0.0000298008,0.0260153,5.26117*10-7, 0.0248265,1.93169*10-8,3.51045*10-9, 2.87597*10-6, 0.000193544,0.000201006},{0.210063,7.40875*10-6,2.58009*10-7, 0.0693514,0.403782,0.0000376381,0.0301116,5.64506*10-7,0.036124,2.11154*10-8,3.80303*10-9,2.99367*10-6,0.000235291,0.00031636},{0.142863,6.90605*10-6,1.94677*10-7,0.0839901,0.439151,0.0000473426,0.0337998,5.40812*10-7, 0.0494131,2.1135*10-8,3.99223*10-9,3.02794*10-6, 0.000276652,0.000480624},{0.0878193,5.80339*10-6,1.32617*10-7, 0.0984319,0.462444,0.0000591973,0.0367697,4.53238*10-7,0.063478,1.92391*10-8,3.40519*10-9, 2.9989*10-6,0.000316646,0.000703333},{0.0477023,4.27828*10-6,7.94341*10-8,0.111862,0.473419,0.0000735135,0.038822,3.24559*10-7, 0.0767994,1.52647*10-8,2.67894*10-9, 2.93206*10-6, 0.000355619,0.000990903},{0.0222741,2.68068*10-6,4.08193*10-8, 0.123814,0.473997,0.00009,0.03993,1.93564*10-7,0.0881702,1.02801*10-8,1.78918*10-9,2.84921*10-6,0.000394821,0.00134715}} На рис. 1 – 3 приведены результаты расчета выхода компонент в функции температуры при P = 0,27 Мпа для момента времени 0,5 сек. t0=0,5; graf1={}; For[i=1,i11, graf1=Append[graf1,{Temperat[[i]],S[[i]][[1]]/.t→t0}]; i=i+1] graf1 {{1000,0.553976},{1010.,0.497888},{1020.,0.432702},{1030.,0.360358},{1040.,0.284459} List Plot[graf1,Plotstyle→PointSize[]0.02] Рис. 1 graf2={}; For[i=1,i11, graf2=Append[graf2,{Temperat[[i]],S[[i]][[2]]/.t→t0}]; i=i+1] graf2 {{1000,4.12221*10-6},{1010.,5.05178*10-6}, {1020.,5.98137*10-6},{1030.,6.79212*10-6}, {1040.,7.32579*10-6},{1050.,7.40875*10-6},{1060.,6.90605*10-6}, {1070.,5.80339*10-6},{1080.,4.27828*10-6},{1090.,2.68068*10-6}} List Plot[graf2,Plotstyle→PointSize[]0.02] Рис. 2 graf3={}; For[i=1,i11, graf3=Append[graf3,{Temperat[[i]],S[[i]][[3]]/.t→t0}]; i=i+1] graf3 {{1000,3.68553*10-7}, {1010.,3.78734*10-7}, {1020.,3.74305*10-7}, {1030.,3.52451*10-7}, {1040.,3.12698*10-7}, {1050.,2.5800*10-7}, {1060.,1.9467*10-7}, {1070.,1.3261*10-7}, {1080.,7.94341*10-8},{1090.,4.08193*10-8}} List Plot[graf2,Plotstyle→PointSize[]0.02] Рис. 3 Graf4={}; For[i=1,i11, graf4=Append[graf4,{Temperat[[i]],S[[i]][[7]]/.t→t0}]; i=i+1] graf4 {{1000,0.01118},{1010.,0.014283},{1020.,0.01782}, {1030.,0.021841},{1040.,0.026015},{1050.,0.0316},

{1060.,0.0337998},{1070.,0.03676},{1080.,0.0388}, {1090.,0.0399386}} Рис. 4 Из рис. 1-3 следует, что выход компонент сильно разнится. Если выход этилена C_2H_4 превышает 40%, то продуктов CH_3 и C_2H_5 практически нулевой. На рис. 4 данные рис. 1-3 введены воедино с целью выявления диапазона температур, обеспечивающих максимальный выход. Так для получения этилена наилучший уровень температуры может быть принят равный – 1080о К. Обработка карт операторов действующих производств показывает, что выход этилена при данных условиях составляет 0,46 – 0,48 весовых долей.