

УДК 51-73

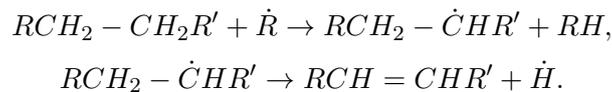
## Устойчивость кинетической модели пиролиза непредельных углеводородов

Журавлева М. А., Язовцева О. С.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Одним из самых необходимых видов сырья в нефтехимической промышленности являются непредельные углеводороды, которые легко подвергаются изомеризации и полимеризации благодаря наличию двойной и тройной связей между атомами углерода. Наиболее простым способом получения непредельных углеводородов является пиролиз. Современное развитие нефтехимической промышленности обуславливает потребность в повышении эффективности синтеза веществ, что неизбежно приводит к критическим условиям протекания реакций. Одним из последствий применения подобных условий является выброс опасных веществ в окружающую среду. В связи с этим остается актуальным вопрос о компонентной устойчивости математических моделей подобных процессов [1].

Реакция пиролиза непредельных углеводородов имеет вид [2]:



Кинетическая модель реакции описывается линейной автономной системой обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{c}_1 = -k_1 c_1 c_2 \\ \dot{c}_2 = -k_1 c_1 c_2 \\ \dot{c}_3 = k_1 c_1 c_2 - k_2 c_3, \\ \dot{c}_4 = k_2 c_3 \\ \dot{c}_5 = k_2 c_3 \end{cases}, \quad (1)$$

где  $c_1(t)$  – концентрация исходного предельного углеводорода,  $c_2(t)$  – концентрация свободных радикалов  $R$ ,  $c_3(t)$  – концентрация гидрогенизированных радикалов  $RH$ ,  $c_4(t)$  – концентрация целевого непредельного углеводорода,  $c_5(t)$  – концентрация отщепленных в процессе дегидратации атомов водорода,  $k_1, k_2$  – константы скоростей соответствующих химических реакций; при этом  $c_i \geq 0, i = \overline{1,5}, k_j > 0, j = \overline{1,2}$ .

Исследуем модель (1) при следующих значениях параметров:

$$\begin{aligned}k_1 &= 2, k_2 = 0.8, \\c_1(0) &= 0.2, a = 0.6.\end{aligned}$$

Преобразованиями, приведенными в [3], приведем исследуемую модель к виду:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -1.2x_1 - 2x_1^2 \\ \dot{x}_2 = 1.2x_1 - 0.8x_2 + 2x_1^2, \\ \dot{x}_3 = 0.8x_2 \end{cases}, \quad (2)$$

с начальными данными  $x_1(0) = 0.2, x_2(0) = 0, x_3(0) = 0$ .

Для исследования подобных систем было разработано программное обеспечение, реализующее алгоритм нахождения фундаментальной матрицы системы линейных дифференциальных уравнений. Данный алгоритм основан на поиске собственных значений, собственных и присоединенных векторов матрицы, для нахождения которых используется метод Крылова. Этот численный метод основан на построении характеристического уравнения и его дальнейшем решении. Данное программное обеспечение было написано на языке C++. Программный код представлен в виде набора функций, из которых можно выделить:

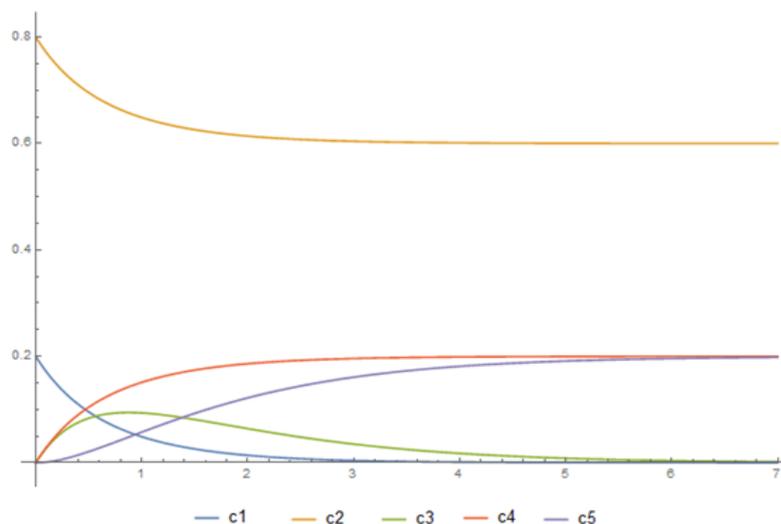
1. Функцию, реализующую метод Гаусса. Данный метод позволяет найти решение системы  $n$  линейных алгебраических уравнений.
2. Функцию, реализующую метод Ньютона. Метод Ньютона является итерационным методом решения уравнений вида  $f(x) = 0$ . Он также применим для поиска комплексных корней уравнений.
3. Функцию, реализующую метод Барейса. Данный метод позволяет привести матрицу к ступенчатому (треугольному) виду, с помощью чего находится ее ранг.

Результатом работы программного кода является вывод об исследовании нулевого положения равновесия системы обыкновенных дифференциальных уравнений, сделанный при помощи метода асимптотической эквивалентности для нелинейных систем с возмущениями в виде векторных полиномов [4, 5].

Для системы (2) был получен следующий вывод: нулевое положение равновесия системы асимптотически устойчиво по переменным  $x_1$  и  $x_2$  и имеет асимптотическое равновесие по переменной  $x_3$ .

С учетом преобразований можно сделать вывод о поведении решений системы (1). Поскольку  $c_1$ ,  $c_2$  и  $c_4$  совпадают с точностью до константы, то нулевое положение равновесия системы (1) будет устойчиво по переменным  $c_2$  и  $c_4$ .

Графики концентраций веществ, полученные в результате вычислительного эксперимента представлены на рис. 1.



**Рис. 1.** Графики концентраций веществ:  $c_1(t)$  – концентрация исходного предельного углеводорода,  $c_2(t)$  – концентрация свободных радикалов  $R$ ,  $c_3(t)$  – концентрация гидрогенизированных радикалов  $RH$ ,  $c_4(t)$  – концентрация целевого непредельного углеводорода,  $c_5(t)$  – концентрация отщепленных в процессе дегидратации атомов водорода

Как видно из графиков, результаты вычислительного эксперимента не противоречат

результатам качественного исследования.

Таким образом, углеводород, подвергаемый пиролизу, будет расходоваться полностью, равно как и промежуточный продукт, образующийся при дегидрировании исходного реагента. Гидрогенизированный свободный радикал и основной продукт реакции (непредельный углеводород) с течением времени будут приходить к ненулевому равновесию.

## **Литература**

1. Мухина Т. Н., Барабанов Н. Л., Бабаш С. Е. и др. Пиролиз углеводородного сырья. М.: Химия, 1987. 240 с.
2. Лебедев Н. Н. Химия и технология основного органического и нефтехимического синтеза: учебник для вузов. М.: Химия, 1988. 592 с.
3. Шаманаев П. А., Язовцева О. С. Об устойчивости по части переменных положения равновесия нелинейной системы дифференциальных уравнений // Международная конференция по дифференциальным уравнениям и динамическим системам: тезисы докладов. 2018. С. 219-221.
4. Воскресенский Е. В. Асимптотические методы: теория и приложения. Саранск: СВМО, 2000. 300 с.
5. Шаманаев П. А., Язовцева О. С. Достаточные условия локальной покомпонентной асимптотической эквивалентности нелинейных систем обыкновенных дифференциальных уравнений и ее приложение к устойчивости по части переменных // Журнал Средневолжского математического общества. 2017. Т. 19, № 1. С. 102-115.

MSC2020 93A30, 80A30

## **Stability of the unsaturated hydrocarbons pyrolysis kinetic model**

M. A. Zhuravleva, O. S. Yazovtseva

National Research Mordovia State University