

УДК 51-73

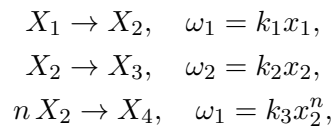
Исследование устойчивости кинетической модели химической реакции

Босоногова М. В., Пескова Е. Е., Язовцева О. С.

Национальный исследовательский Мордовский государственный университет

Отсутствие универсальных методов исследования устойчивости нелинейных моделей обуславливает актуальность освещаемой в докладе темы.

Рассмотрим сложную химическую реакцию вида:



где w_i , $i = \overline{1,3}$ – скорость i -ой стадии реакции; k_i , $i = \overline{1,3}$ – константы скоростей стадий; x_j , $j = \overline{1,4}$, – концентрация вещества X_j .

Подобные цепи, включающие в себя последовательные реакции с последующей полимеризацией, встречаются, например, при переработке углеводородного сырья [1].

В предположении изотермичности процессов и гомогенного (квазигомогенного) характера реакции кинетическая реакция представляет собой нелинейную систему обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\begin{cases} \dot{x}_1 = -k_1 x_1, \\ \dot{x}_2 = k_1 x_1 - k_2 x_2 - k_3 x_2^n, \\ \dot{x}_3 = k_2 x_2, \\ \dot{x}_4 = k_3 x_2^n. \end{cases} \quad (1)$$

Система имеет бесконечно много положений равновесия вида

$$(0, 0, x_3^*, x_4^*), \quad x_3^*, x_4^* \in \mathbb{R}^+. \quad (2)$$

Для линеаризации системы (1) в точках положениях равновесия вида (2) построена матрица Якоби

$$\begin{pmatrix} -k_1 & 0 & 0 & 0 \\ k_1 & -k_2 & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (3)$$

В окрестности любого положения равновесия вида (2) матрица (3) имеет несколько нулевых собственных значений – критический случай по Ляпунову. Одним из методов исследования устойчивости в критическом случае является метод асимптотической эквивалентности [1].

Фундаментальная матрица для линейного приближения системы (1) имеет вид:

$$\begin{pmatrix} \frac{k_1 - k_2}{k_2} e^{-k_1 t} & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{k_1}{k_2} e^{-k_1 t} & -e^{-k_2 t} & 0 & 0 \\ e^{-k_1 t} & e^{-k_2 t} & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Из работы [2] (теоремы 3.1 и 3.2) получены достаточные условия для следующих асимптотических свойств положений равновесия вида (2) системы (1). Оно асимптотически устойчиво по переменным x_1 и x_2 и устойчиво по переменным x_3 и x_4 при выполнении условий $k_2 < k_1 < n k_2$ или $k_1 < k_2 < n k_1$.

Для иллюстрации полученного результата был проведен численный эксперимент. На рис. 1 и 2 представлены графики решений системы (1) для различных параметров, соответствующих полученным достаточным условиям. Результаты численного эксперимента не противоречат теоретическим результатам.

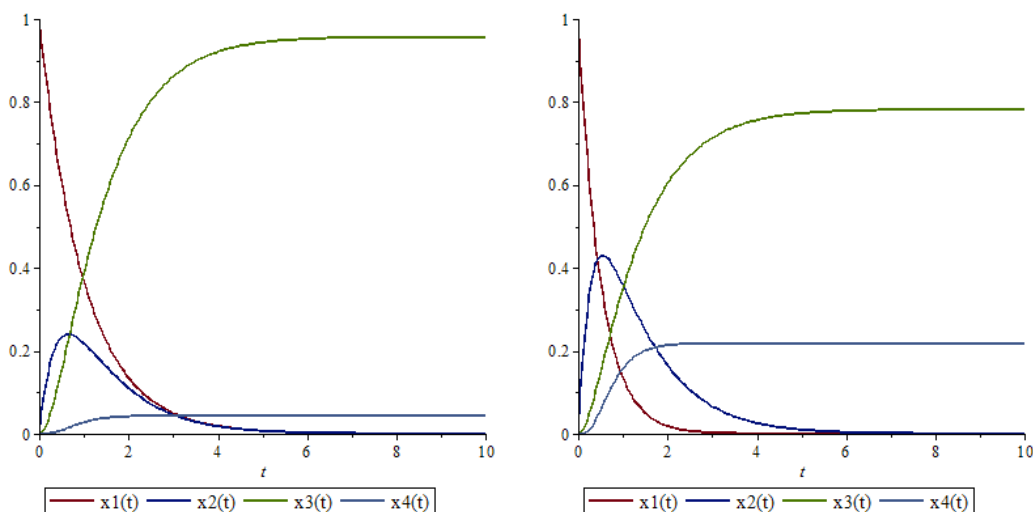


Рис. 1. Графики решений системы (1) при $k_1 = 1, k_2 = 2, k_3 = 3, n = 3$

Рис. 2. Графики решений системы (1) при $k_1 = 2, k_2 = 1, k_3 = 3, n = 3$

С точки зрения химических процессов полученный результат предполагает наложение на константы скоростей некоторых условий, соблюдение которых может быть достигнуто, например, изменением температуры проведения реакции.

Литература

1. Мухина Т. Н., Барабанов Н. Л., Бабаш С. Е. и др. Пиролиз углеводородного сырья. М.: Химия, 1987. 240 с.
2. 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

Investigation of the stability of the chemical reaction's kinetic model

M. V. Bosonogova, E. E. Peskova, O. S. Yazovtseva

National Research Mordovia State University