

Міністерство освіти і науки України
Сумський державний університет
Шосткинський інститут Сумського державного університету
Фармацевтична компанія «Фармак»
Управління освіти Шосткинської міської ради
Виконавчий комітет Шосткинської міської ради

ОСВІТА, НАУКА ТА ВИРОБНИЦТВО: РОЗВИТОК І ПЕРСПЕКТИВИ

МАТЕРІАЛИ

II Всеукраїнської науково-методичної конференції,

(Шостка, 20 квітня 2017 року)



Суми
Сумський державний університет
2017

УДК 661.574

МАТЕМАТИЧНИЙ ОПИС КІНЕТИКИ ПЕРЕЕСТЕРИФІКАЦІЇ РОСЛИННИХ ВІДПРАЦЬОВАНИХ ОЛІЙ

О.І.Василькевич, О.Ю.Кукушкіна, С.Г.Бондаренко, М.Б.Степанов

Національний технічний університет України

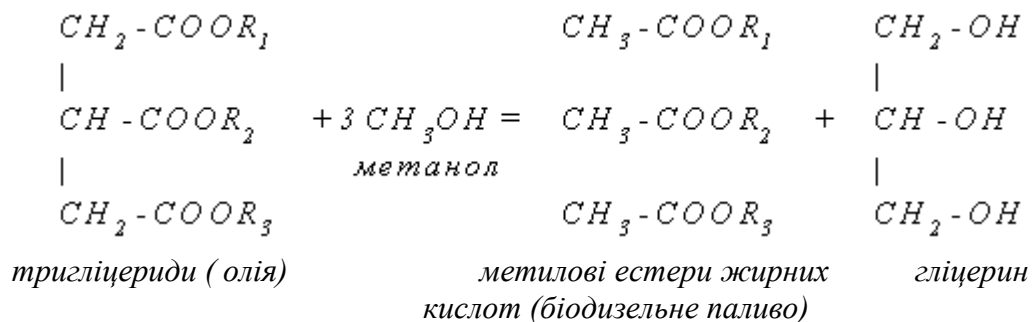
«Київський Політехнічний Інститут імені Ігоря Сікорського»

м. Київ, просп. Перемоги, 37, 03056

nikola.step54@yandex.ua

Розвиток в Україні енергетики, заснованої на використанні поновлюваних джерел енергії, стимулюється дефіцитом традиційних паливно-енергетичних ресурсів і рухом в захист екології. Високі темпи видобутку нафти та скорочення її запасів примушують економічно розвинені країни приділяти велику увагу пошуку нових джерел палива, які зменшили б їх залежність від імпорту нафтопродуктів. Найбільш перспективним, відносно дешевим способом є отримання біодизельного палива шляхом переестерифікації олій та тваринних жирів. Тому в світі зростає інтерес до створення нових технологій отримання синтетичного палива з сировини рослинного чи тваринного походження та все більшого поширення набувають альтернативні біопалива на основі олій та тваринних жирів. Про це свідчить збільшення кількості наукових і патентних публікацій в даній області. Важливою перевагою палив на основі рослинних олій є більш висока екологічність як під час виробництва, так і при застосуванні. Саме цей факт вказує на велику перспективність їх використання.

Реакція переестерифікації рослинних жирів (олій) метанолом в присутності лужного каталізатору з отриманням гліцерину як побічного продукту проходить за такою схемою:



де R1; R2; R3 - вуглеводневі радикали.

Побічним продуктом цієї реакції є технічний гліцерин, який є висококалорійним паливом, яке може бути застосовано для опалювальних котлів.

Система, в якій протікає реакція, є гетерофазною, що складається з двохфаз, розділених поверхнею контакту. Механізми переносу через поверхню контакту фаз до цих пір детально не вивчені[1]. А в літературних джерелах можна зустріти суперечливі дані щодо механізму цієї реакції.

Проведений аналіз кінетичних моделей отримання біодизеля показав, що для опису кінетики даного процесу може бути застосована наступна система диференціальних рівнянь:

$$\frac{-dTG}{dt} = a \cdot OH \cdot \left(\frac{k'_2 \cdot TG \cdot ROH - k'_{2r} \cdot DG \cdot E}{W} + k_9 \cdot TG \right)$$

$$\begin{aligned} \frac{-dDG}{dt} &= a \cdot OH \cdot \left(\frac{-k'_2 \cdot TG \cdot ROH + k'_{2r} \cdot DG \cdot E + k'_4 \cdot DG \cdot ROH - k'_{4r} \cdot MG \cdot E}{W} - k_9 \cdot TG + k_{10} \cdot DG \right) \\ \frac{-dMG}{dt} &= a \cdot OH \cdot \left(\frac{-k'_4 \cdot DG \cdot ROH + k'_{4r} \cdot MG \cdot E + k'_6 \cdot MG \cdot ROH - k'_{6r} \cdot G \cdot E}{W} - k_{10} \cdot DG + k_{11} \cdot MG \right) \\ \frac{dG}{dt} &= a \cdot OH \cdot \left(\frac{k'_6 \cdot MG \cdot ROH - k'_{6r} \cdot G \cdot E}{W} + k_{11} \cdot MG - \frac{k'_2 \cdot TG \cdot ROH - k'_{2r} \cdot DG \cdot E + k'_4 \cdot DG \cdot ROH - k'_{4r} \cdot MG \cdot E}{W} + k'_6 \cdot MG \cdot ROH - k'_{6r} \cdot G \cdot E \right) \\ \frac{-dROH}{dt} &= a \cdot OH \cdot \left(\frac{k'_2 \cdot TG \cdot ROH - k'_{2r} \cdot DG \cdot E + k'_4 \cdot DG \cdot ROH - k'_{4r} \cdot MG \cdot E}{W} - k^8 \cdot E \right) \\ \frac{dE}{dt} &= a \cdot OH \cdot \left(\frac{k'_6 \cdot MG \cdot ROH - k'_{6r} \cdot G \cdot E}{W} - k^8 \cdot E \right) \\ \frac{-dOH}{dt} &= \frac{dA}{dt} = a \cdot OH \cdot (k_8 \cdot E + k_9 \cdot TG + k_{10} \cdot DG + k_{11} \cdot MG + k_{12} \cdot FFA) \\ \frac{dW}{dt} &= \frac{-dFFA}{dt} = a \cdot OH \cdot k_{12} \cdot FFA. \end{aligned}$$

Де $k'_2 = k_2 K_1$; $k'_{2r} = k_{2r} K_1$; $k'_4 = k_4 K_1$; $k'_{4r} = \frac{k_{4r} K_1}{K_5}$; $k'_6 = k_6 K_1$;
 $k'_{6r} = \frac{k_{6r} K_1}{K_7}$.

Диференціальні рівняння показують, що швидкості обох процесів: алкоголізу і трансестерифікації пропорційні концентрації гідроксид-іону, а швидкість алкоголізу обернено пропорційна концентрації води. Для визначення констант швидкості при різних температурах були використані дані, що наведені в роботі [2].

Для проведення розрахунків за моделлю був розроблений програмний модуль. В якості середовища розробки було обрано мову програмування JAVA 1.7.

Для вирішення диференціальних рівнянь моделі був використаний метод Рунге-Кутта. Для проведення розрахунків за моделлю використовувалась стандартна функція математичного пакету Matlab – ode45. Для організації взаємодії між розробленим java-додатком та програмою Matlab була організована клієнт серверна архітектура, що основана на технології RMI (RemoteMethodInvocation), яка дозволяє викликати методи програми-сервера для виконання розрахунків.

Дане програмне забезпечення дозволяє оцінити час протікання реакції та обрати оптимальні параметри процесу.

Список літературних джерел

1. Василькевич, О. І., Бондаренко С. Г., Старостін А. Р., Будько М. О. Кінетика переестерифікації соняшникової олії при різних температурах [Текст] /

О.І.Василькевич, С.Г.Бондаренко, А.Р.Старостін, М.О. Будько // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2012. - №2/14. – С. 21-23.

2. Turner, T. L. Modeling and Simulation of Reaction Kinetics for Biodiesel oduction, 2005.