

Рис. 2. Решение обратной задачи для микрореактора MX-V при температуре 30 °C (слева Python, справа Scilab)

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках ГЗ № 10.3444.2017/ПЧ.*

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ РЕАКЦИИ ЭТАНОЛИЗА РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЕЛ

Боровков В. А., Юленец Ю. П., Боровинская Е. С.

## ДОСЛІДЖЕННЯ ПАРАМЕТРИЧНОЇ ЧУТЛИВОСТІ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ РЕАКЦІЇ ЕТАНОЛІЗУ РОСЛИННИХ ОЛІЙ

Боровков В. А., Юленец Ю. П., Боровинська Е. С.

## INVESTIGATION OF PARAMETRIC SENSITIVITY OF MATHEMATICAL MODEL FOR ETHANOLYSIS REACTION OF VEGETABLE OILS

Borovkov V., Yulenets Yu., Borovinskaya E.

Кафедра системного анализа и информационных технологий  
Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет)  
г. Санкт-Петербург, Россия

Chair of Systems Analysis and Information Technology  
Saint-Petersburg State Institute of Technology  
(Technical University)  
Saint-Petersburg, Russia  
[ekaterina.borovinskaya@daad-alumni.de](mailto:ekaterina.borovinskaya@daad-alumni.de)

Эффективное получение биодизельного топлива из возобновляемых источников сырья является весьма актуальной научно-технической задачей. Реакция этанолиза растительных масел описывается сложной математической моделью. С целью её упрощения необходимо исследовать параметрическую чувствительность решений системы дифференциальных уравнений.

**Ключевые слова:** математическая модель, параметрическая чувствительность, биодизель, этанолиз, растительное масло

Ефективне виробництво біопалива з відновлювальних джерел сировини є досить актуальним науково-технічним завданням. Реакція етанолізу рослинних олій описується складною математичною моделлю. З метою її спрощення необхідно досліджувати параметричну чутливість рішень системи диференціальних рівнянь.

**Ключові слова:** математична модель, параметрична чутливість, біодизель, етаноліз, рослинна олія

Effective production of biofuels from the renewable raw materials is a very urgent scientific and technical task. The ethanolysis reaction of vegetable oils is described by a complex mathematical model. In order to simplify it, it is necessary to investigate the parametric sensitivity of the solutions of the system of differential equations.

**Keywords:** mathematical model, parametric sensitivity, biodiesel, ethanolysis, vegetable oil

Реакция переэтерификации растительного масла этиловым спиртом отличается высокой сложностью и включает в себя три обратимые последовательные стадии. Для определения границ применимости упрощенного математического описания необходимо исследовать чувствительность решений исходной (полной) системы уравнений химической кинетики к изменению входящих в нее кинетических констант. Исследование параметрической чувствительности решений системы уравнений, описывающих реакцию переэтерификации, проводили методом локального анализа чувствительности [1] с использованием программного пакета Python. Полное описание кинетики реакции из девяти дифференциальных уравнений приведено в работе [2].

В качестве критерия оценки чувствительности решений системы уравнений к изменению входящих в него кинетических констант (параметров) использован обобщенный критерий:

$$u_{jq} = \frac{\partial c_j}{\partial k_q}, \quad (1)$$

где  $u_{jq}$  – все неизвестные величины, от которых зависит скорость реакции;  $k_q$  – константы скорости реакции;  $c_j$  – концентрации исходных веществ и продуктов.

На рисунке 1 построены зависимости от времени критерия (1) по пяти константам скорости:  $k_1, \dots, k_5$ .

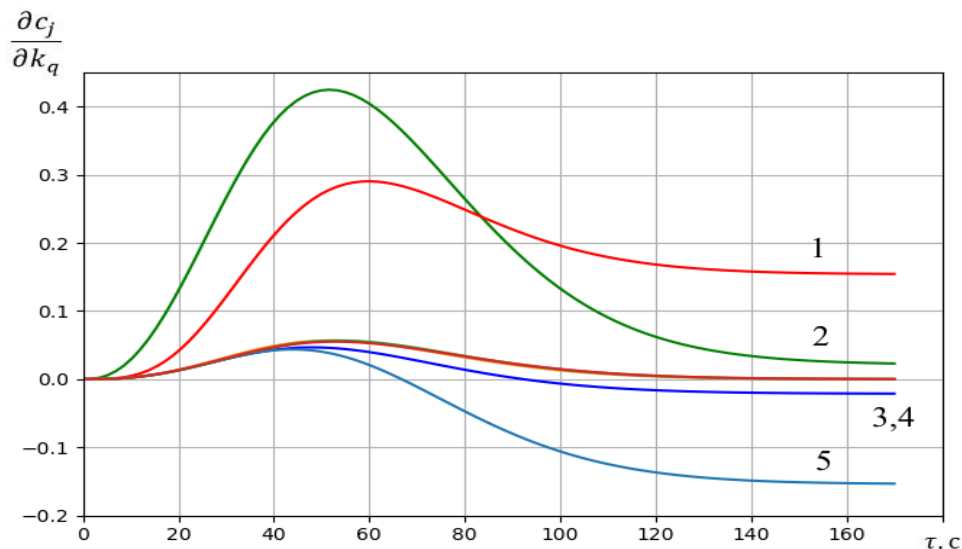


Рис. 1. Влияние кинетических параметров модели на выход эфира в реакции переэтерификации растительного масла этиловым спиртом  
Начальные условия:  $c_{2,0} = 1,057$  моль/л;  $c_{6,0} = 16,72$  моль/л;  $c_{9,0} = 0,442$  моль/л

Можно видеть, что кривые зависимости от времени критерия (1) по константам  $k_3, k_4$  и особенно  $k_5$  располагаются близко к оси времени на протяжении всего времени реакции. Следовательно, изменения констант  $k_3 - k_5$  оказывают наименьшее влияние на концентрацию целевого продукта (выход) эфира, и, в первом приближении, эти параметры могут быть исключены из математического описания.

*Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ в рамках ГЗ № 10.3444.2017/ПЧ.*

### Литература

1. Полак, Л. С. Применение вычислительной математики в химической и физической кинетике / Под. ред. Л.С. Полака. – М.: Наука, 1969. – 279 с.
2. Schwarz, S. Base catalyzed ethanolysis of soybean oil in microreactors: Experiments and kinetic modeling / S. Schwarz, E. S. Borovinskaya, W. Reschetilowski // Chem. Eng. Sci. – 2013. – Vol.104. – pp. 610-618.