

Рис. 2. Решение обратной задачи для микрореактора MX-V при температуре 30 °С (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

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 .

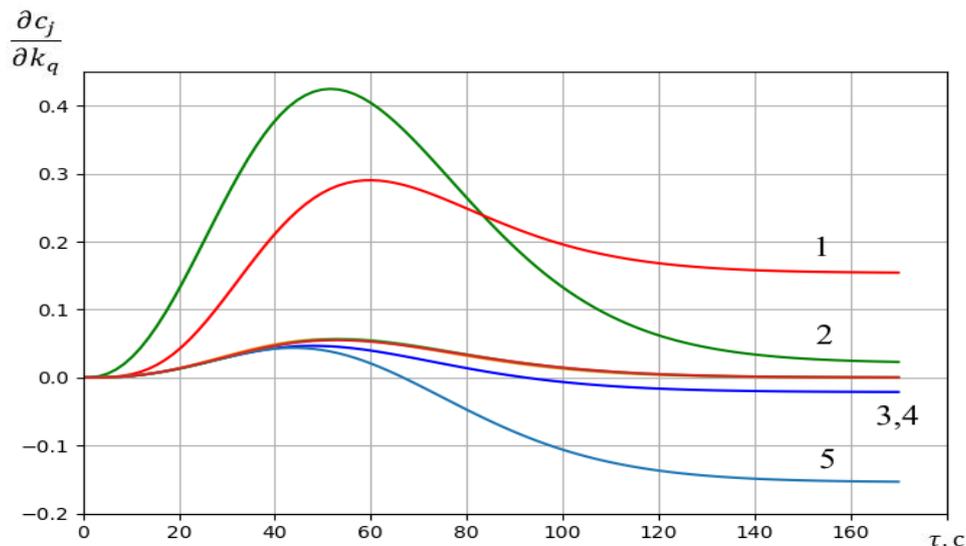


Рис. 1. Влияние кинетических параметров модели на выход эфира в реакции переэтерификации растительного масла этиловым спиртом
Начальные условия: $c_{2,0} = 1,057$ моль/л; $c_{6,0} = 16,72$ моль/л; $c_{9,0} = 0,442$ моль/л

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.