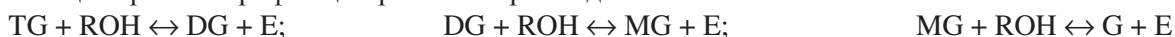


Кукушкіна О.Ю., Безносик Ю.О. (Україна, Київ)

ДОСЛІДЖЕННЯ ТА МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ БІОДИЗЕЛЬНОГО ПАЛИВА

Незважаючи на те, що важливість біодизеля як альтернативного палива зросла протягом останніх двадцяти років, хімічна кінетика реакції трансестерифікації, яка є найбільш важливим питанням у виробництві біодизеля, залишається спірною. Більшість досліджень направлені на пошук і розробку найкращої моделі процесу і визначення та обґрунтування порядку реакції трансестерифікації. Тому визначення оптимальної моделі процесу отримання біодизеля є дуже важливим питанням. В якості каталізатора використовуються калій гідроксид, або натрій гідроксид. Гідроксид іон, в даному випадку, являється каталізатором для реакції трансестерифікації. Також він виступає реагентом в реакція омилення. Таким чином, омилення позбавляє реакцію трансестерифікації не тільки реагентів які можуть бути перетворені в біодизель, але й каталізатора необхідного для протікання реакції. Тому, при проведенні реакції необхідно контролювати вміст вільних жирних кислот у вихідній сировині, оскільки якщо їх процентний вміст складає більше 1%, то це призводить до утворення мила і значно зменшує ефективність каталізатора. Отже, при розробці математичної моделі процесу, необхідно враховувати всі ці фактори.

Реакція трансестерифікації протікає в три стадії:



де TG – тригліцериди, DG – дигліцериди, MG – моногліцериди, G – гліцерин, ROH – спирт, E – метиловий естер.

Всі зворотні реакції мають другий порядок. В даній роботі на основі аналізу існуючих моделей для отримання біодизельного палива з відпрацьованої рослинної олії необхідно було обрати модель для дослідження кінетики реакції отримання біодизеля та виконати її програмну реалізацію. Проведений аналіз кінетичних моделей отримання біодизеля показав, що для описання кінетики даного процесу може бути застосована система диференційних рівнянь, які описують зміну концентрацій TG – тригліцеридів, DG – дигліцеридів, MG – моногліцеридів, G – гліцерину, ROH – спирту, E – метилового естеру, а також гідроксил іону OH [1].

Диференційні рівняння показують, що швидкості обох процесів: алкоголізу і трансестерифікації пропорційні концентрації гідроксиду-іону, і що швидкість алкоголізу обернено пропорційна концентрації води. Ці залежності мають місце і в оригінальній моделі, але там концентрація води зосереджена в сукупних константах швидкості.

Для проведення розрахунків за моделлю був розроблений програмний модуль. В якості середовища розробки було обрано мову програмування JAVA 1.7. Початковими даними до розрахунку були дані, що отримані експериментально на лабораторній установці в науково-дослідній лабораторії. 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 основана на технології RMI (Remote Method Invocation), яка дозволяє викликати методи програми-сервера для виконання розрахунків. Проведено аналіз кінетичні моделі, що використовуються для отримання біодизельного палива. Обрано модель яка найкращим чином описує процес у випадку використання відпрацьованої олії в якості вихідної сировини і враховує такі фактори як формування метоксиду, метаноліз, омилення, наявність в олії вільних жирних кислот.

Розроблено алгоритм рішення моделі, який реалізовано в якості обчислювального модуля. Дане програмне забезпечення дозволяє оцінити час протікання реакції та обрати оптимальні параметри процесу.

Література

1. Кукушкіна О.Ю. Аналіз кінетичних моделей процесу отримання біодизельного палива / Зб. наук. статей 5 міжнародної наук.-практ. Конференції «Комп'ютерне моделювання в хімії і технологіях та системах сталого розвитку» // Київ – 2016. – с.56-61.