

Синицкая Елена Игоревна

5 курс, ФЭХТ, ДонНТУ

e-mail: senya97.00@mail.ru

Руководитель: Ошовский Владимир Владимирович

доцент, кандидат химических наук,

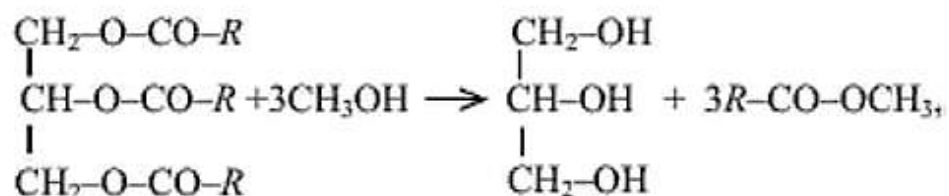
кафедра: «Химическая технология топлива»,

ДонНТУ, Донецк

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА МЕТАНОЛИЗА БИОДИЗЕЛЯ ИЗ ОРГАНИЧЕСКОГО СЫРЬЯ В СРЕДЕ COMSOL MULTIPHYSICS

Биодизельное топливо или биодизель – это альтернативное топливо (смесь моноалкильных эфиров высших алифатических кислот). Оно производится из возобновляемых ресурсов (растительные масла), которые не вызывают накопления газов, создающих парниковый эффект, что характерно для горючего, в основе которого находится нефть. Классическим способом получения биодизельного топлива является реакция метанолиза растительного масла.

Реакция метанолиза растительного масла проходит с образованием ди- и моноглицеринов, а затем и свободного глицерина и в общем виде она выглядит следующим образом [1]:



где R – это общее обозначение для радикалов высших алифатических кислот, входящих в состав триацилглицеринов масла

Однако данный процесс проходит ступенчато и при этом его можно представить в виде последовательности трех реакций:

стадия 1: $\text{T} + \text{МС} \rightleftharpoons \text{Д} + \text{Э}$;

стадия 2: $\text{Д} + \text{МС} \rightleftharpoons \text{М} + \text{Э}$;

стадия 3: $\text{М} + \text{МС} \rightleftharpoons \text{Г} + \text{Э}$;

где Т – триацилглицерин, Д – диглицерид, М – моноглицерид, МС – метиловый спирт, Г – глицерин, Э – метиловый эфир главных алифатических кислот (в растительном масле большую часть занимают олеиновая, линолевая и линоленовая кислоты).

Для моделирования кинетики процесса метанолиза рассмотрим обратимые реакции всех трех стадий как элементарные реакции, следующие второму или третьему порядку, а также будем считать

концентрацию катализатора (гидроксида калия) постоянной. Скорость реакции метанолиза расписывается как сумма скоростей прямой и обратной реакций

Исходя из всего выше сказанного кинетические уравнения относительно каждого компонента будут выглядеть следующим образом :

$$\frac{dC_T}{dt} = -k_1 C_T C_{MC} + k_2 C_3 C_D \quad (1)$$

$$\frac{dC_D}{dt} = k_1 C_T C_{MC} - k_2 C_D C_{MC} + k_4 C_3 C_M \quad (2)$$

$$\frac{dC_M}{dt} = k_3 C_D C_{MC} - k_4 C_3 C_M - k_4 C_3 C_M - k_5 C_M C_{MC} + k_6 C_3 C_\Gamma \quad (3)$$

$$\frac{dC_\Gamma}{dt} = k_5 C_M C_{MC} - k_6 C_3 C_\Gamma \quad (4)$$

$$\frac{dC_3}{dt} = k_1 C_T C_{MC} - k_2 C_3 C_D - k_4 C_3 C_M + k_3 C_D C_{MC} + k_5 C_M C_{MC} - k_6 C_3 C_\Gamma \quad (5)$$

$$\frac{dC_{MC}}{dt} = -k_1 C_T C_{MC} + k_2 C_3 C_D + k_4 C_3 C_M - k_3 C_D C_{MC} - k_5 C_M C_{MC} + k_6 C_3 C_\Gamma \quad (6)$$

Таким образом мы получаем систему дифференциальных уравнений, которую мы можем решить с помощью метода конечных элементов и построить модель зависимости изменения концентрации веществ во времени в пакете моделирования Comsol Multiphysics.

Comsol Multiphysics – это программа для конечно-элементных расчетов сложных научно-технических задач, с помощью которой можно анализировать, решать и имитировать различные мультифизические явления. Проводится моделирование в двух постановках : физической, которая используется для доступа к шаблонам специфических прикладных областей (акустика, биология, химические реакции, диффузия, электрохимия, электромагнетизм, гидродинамика, и т.д.) и математической, которая применяется в случаях, когда не находится подходящего физического прикладного режима для модели (задача в этом случае определяется в терминах математических выражений и коэффициентов). Пакет COMSOL Multiphysics содержит набор модулей, которые содержат стандартные шаблоны и пользовательские интерфейсы с уже определенными уравнениями и переменными для специфической области физики (гидродинамики, электромагнетизма, акустики, теплопереноса и др.). Комбинируя различные прикладные модули, можно строить мультифизические модели. Основная стратегия процесса

мультифизического моделирования - это поиск физических интерфейсов, подходящих для рассматриваемого явления. Если таковы не найдены, то добавляется один или несколько математических интерфейсов. Для сопряжения различных интерфейсов используются зависимые переменные их производные, или выражения, содержащие зависимые переменные. Сопряжение может производиться в области и на границах [2].

Решение любой задачи базируется на численном решении уравнений в частных производных методом конечных элементов.

Сам метод конечных элементов основывается на том, что некоторое искомое решение заменяется на приближенные функции простого вида. Помимо этого вся расчетная область разбивается на определенное количество частей простой формы, что, в свою очередь, и называется конечными элементами. Все функции во всех элементах, различаясь по конкретным числовым параметрам, имеют общий вид. Данный принцип и применяется в программном пакете Comsol Multiphysics.

Из всего вышесказанного, можно выделить несколько стадий решения дифференциальных уравнений методом конечных элементов:

- разбиение расчетной области на большое (но конечное) количество элементов;
- описание искомого решения задачи внутри каждого элемента через конечное число неизвестных;
- объединение элементов в единую систему и запись уравнений связи между неизвестными;
- решение системы.

Для моделирования процесса метанолиза растительного масла были приняты следующие исходные данные :

СМС 3[mol/l] "Концентрация метилового спирта"

СТ- 1[mol/l] "Концентрация триацилглицерина"

k1 - 4[L*(mol⁻¹)*min⁽⁻¹⁾] "константа скорости 1 реакции прямая"

k2 - 27[L*(mol⁻¹)*min⁽⁻¹⁾] "константа скорости 1 реакции обратая"

k3 - 55[L*(mol⁻¹)*min⁽⁻¹⁾] "константа скорости 2 реакции прямая"

k4 - 65.5[L*(mol⁻¹)*min⁽⁻¹⁾] "константа скорости 2 реакции обратая"

k5 - 0.91[L*(mol⁻¹)*min⁽⁻¹⁾] "константа скорости 3 реакции прямая"

k6 - 0.0001[L*(mol⁻¹)*min⁽⁻¹⁾] "константа скорости 3 реакции обратная"

T0 - 65[degC] температура

Результаты моделирования представлены на рис.1.

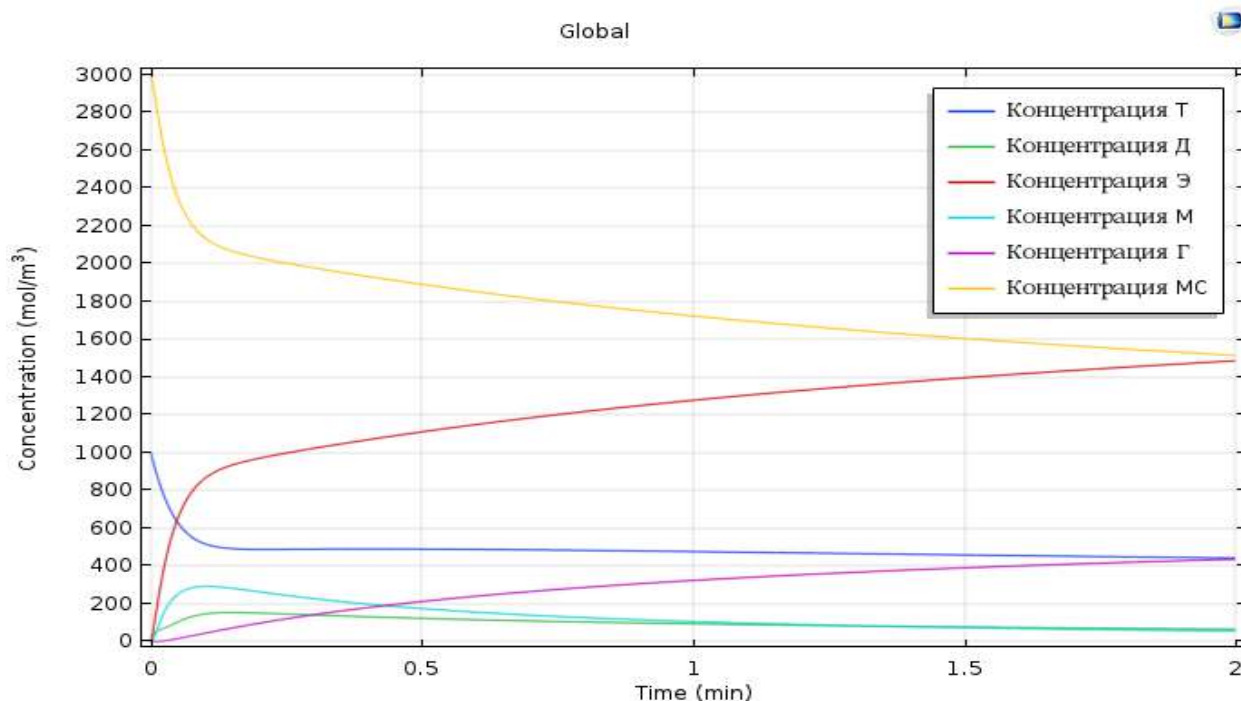


Рисунок 1 – График изменения концентрации веществ реакции метанолиза во времени

Таким образом, решив систему дифференциальных уравнений методом конечных элементов, мы получили кинетическую модель реакции метанолиза растительного масла при помощи пакета моделирования Comsol Multiphysics. Данная программа является мощным инструментом для моделирования широкого круга проблем, которые могут быть описаны дифференциальными уравнениями с частными производными. Comsol Multiphysics предоставляет возможность решать задачи как в математической постановке, в виде систем уравнений, так и в физической, путем выбора физической модели.

Литература

1. Нагорнов С.А. Исследование кинетики процесса метанолиза при переработке растительного сырья в биотопливо [Электронный ресурс] / С.А. Нагорнов, С.В. Романцова, С.И. Дворецкий, В.П. Таров, И.А. Рязанцева, Малахов К.С // Электронный журнал «Вестник Тамбовского государственного университета». – 2009. – С. 572-580. – Режим доступа: URL: <https://cyberleninka.ru/article/v/issledovanie-kinetiki-protssessa-metanoliza-pri-pererabotke-rastitelnogo-syrya-v-biotoplivo>.
2. [Электронный ресурс] / - Режим доступа URL: https://studbooks.net/959826/ekologiya/vozmozhnosti_comsol_multiphysics