

ОПТИМИЗАЦИЯ ПРОЦЕССА ЭТЕРИФИКАЦИИ ВИЦИНАЛЬНЫХ ДИКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

Велиева Ф.М., Алиева Ф.Х., Исаев Н.З.

Национальная Академия Наук Азербайджана
Азербайджан, AZE 1025, пр.Ходжалы 30,
тел: (994 12) 490-24-76, E-mail:firuzal@aport2000.ru

Сложные эфиры карбоновых кислот нашли широкое применение в различных отраслях промышленности как смазочные материалы, присадки к смазочным маслам и топливам. В качестве катализатора процесса этерификации использовали различные кислотные катализаторы (ПТСК, Цеокар-2, TiO₂ наноструктуры, NaHSO₄, KY-23, Seokar-600, 1,4-диметилпиперазин и N- метилпирролидон гидросульфат).

Предварительные исследования данной реакции показали, что выходными параметрами процесса являются: выход моноэфира – Y_1 %; диэфира – Y_2 %; остаток – Y_3 %; а входными – массовый процент катализатора от реагирующей смеси – X_1 , %; время – X_2 , ч и кислотное число, мгКОН/г – X_3 %.

Математическое выражение зависимости параметра оптимизации от входных независимых переменных представлено в виде регрессионного уравнения:

$$Y_k = a_0 + \sum_{i=1}^n a_i \cdot x_i + \sum_{i=1}^n a_{ij} \cdot x_i \cdot x_j, \quad i \neq j$$

где Y_k –значение параметра оптимизации; x_i, x_j –кодированное обозначение факторов модели, n –число факторов, a_0 –величина свободного члена в уравнении регрессии; a_i, a_{ij} –коэффициенты соответственного линейного эффекта и парного взаимодействия факторов.

Уравнения регрессии в кодированном виде:

$$Y_1 = 57,74 - 6,67 \cdot X_1 - 19,71 \cdot X_2 - 0,5 \cdot X_3 - 1,9 \cdot X_1 \cdot X_2 + 0,68 \cdot X_1 \cdot X_3 - 0,16 \cdot X_2 \cdot X_3 - 4,46 \cdot X_1^2 + 3,008 \cdot X_2^2 + 0,0056 \cdot X_3^2$$

$$Y_2 = 3,14 + 60,44 \cdot X_1 + 22,37 \cdot X_2 - 1,62 \cdot X_3 - 8,129 \cdot X_1 \cdot X_2 - 1,002 \cdot X_1 \cdot X_3 - 0,1779 \cdot X_2 \cdot X_3 - 4,75 \cdot X_1^2 - 1,11 \cdot X_2^2$$

$$+ 0,046 \cdot X_3^2$$

$$Y_3 = -1,12 - 10,56 \cdot X_1 + 6,015 \cdot X_2 - 0,848 \cdot X_3 - 0,009 \cdot X_1 \cdot X_2 + 0,9266 \cdot X_1 \cdot X_3 + 0,4499 \cdot X_2 \cdot X_3 + 4,93 \cdot X_1^2 - 1,4624 \cdot X_2^2 - 0,01154 \cdot X_3^2$$

На базе математической модели была решена задача оптимизации, которое показало, что оптимальный выход $Y = 96\%$ достигается при $X_1 = 1,36\%$, $X_2 = 2,606$ час, $X_3 = 2$ к.ч.. Полученные расчетные значения хорошо согласуются с экспериментальными.