

## Кількісні закономірності в ході амідування триацилгліцеринів рослинних олій

Л.М. Шкаранута, Л.Л. Митрохіна, Л.О. Тищенко, Л.А. Шевченко, І.П. Морозова

Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії ім. В.П. Кухаря НАН України,  
Україна, 02160 Київ, Харківське шосе, 50; тел.: (044) 559-66-47

Показано доцільність одержання обґрунтованих оцінок витрати вихідних речовин і виходу алкіламідів рослинних олій за умови нехтування відмінностей між  $k_1$  і  $k_2$ ,  $k_1$  і  $k_3$  ( $k_1 = k_2 = k_3$ ). При цьому похибка визначення виходу цільового продукту не перевищує 10 % (соняшникова олія) і 13 % (соєва олія). В присутності каталізатора NaOH алгоритм розрахунку оцінок кінетичних констант зводиться до визначення передекспоненти константи швидкості некаталітичної реакції амідування триацилгліцеринів і побудови залежності енергії активації від вмісту NaOH за співвідношенням  $E(C) = -RT \ln[k(C,T) / k_{01}]$  і кількісного розрахунку з використанням розв'язувача ode 45.

**Ключові слова:** амідування, рослинні олії, триацилгліцерини, алгоритм розрахунку, оцінка виходу цільового продукту

### Вступ

Стрімке зменшення запасів нафти і збільшення її вартості стимулює використання відновлювальної сировини при одержанні поверхнево-активних речовин (ПАР) для підвищення продуктивності видобувних свердловин і виробництва миючих засобів, косметичних та фармацевтичних препаратів, тощо. Відомою альтернативою одержання ПАР з нафтопродуктів є процеси, що орієнтовані на амідування рослинних олій амінами. Проте, робіт, що присвячені виявленню кількісних співвідношень процесів амідування триацилгліцеринів, критично мало. Це призводить до реалізації в промисловості нераціональних, практично лабораторних, умов синтезу, зайвої витрати вихідних речовин і часу, низької якості цільових продуктів.

**Мета роботи:** розробити ефективний алгоритм розрахунку оцінок витрати вихідних речовин і виходу цільового продукту каталітичного амідування триацилгліцеринів соєвої олії, уточнити опис закономірностей амідування триацилгліцеринів соняшникової олії.

**Об'єкти дослідження:** процеси амідування триацилгліцеринів соєвої та соняшникової олій.

Характерним прикладом складнощів, що виникають при кількісному аналізі таких процесів є робота досвідчених фахівців [1] з амідування триацилгліцеринів соєвої олії. Авторами досліджено кінетику амідування триацилгліцеринів (ТАГ) соєвої олії моноетаноламіном (МЕА) при температурах 373–423 К. Показано, що при цьому відбуваються реакції з утворенням ацилгліцеринів (МАГ, ДАГ) і моноетаноламідів (АА) жирних кислот. Знайдено константи швидкості, визначено термодинамічні параметри реакцій.

На жаль, в роботі [1] не наводиться розв'язок запропонованої авторами кінетичної моделі (1)

$$\begin{aligned} \frac{dC_{ТАГ}}{d\tau} &= -K_1 \cdot C_{ТАГ} \cdot C_A \\ \frac{dC_{ДАГ}}{d\tau} &= -K_2 \cdot C_{ДАГ} \cdot C_A + K_1 \cdot C_{ТАГ} \cdot C_A \\ \frac{dC_{МАГ}}{d\tau} &= -K_3 \cdot C_{МАГ} \cdot C_A + K_2 \cdot C_{ДАГ} \cdot C_A \\ \frac{dC_{АА}}{d\tau} &= K_1 \cdot C_{ТАГ} \cdot C_A + K_2 \cdot C_{ДАГ} \cdot C_A + K_3 \cdot C_{МАГ} \cdot C_A \\ \frac{dC_{ГЛ}}{d\tau} &= K_3 \cdot C_{МАГ} \cdot C_A \\ \frac{dC_A}{d\tau} &= -K_1 \cdot C_{ТАГ} \cdot C_A - K_2 \cdot C_{ДАГ} \cdot C_A - K_3 \cdot C_{МАГ} \cdot C_A \end{aligned} \quad (1)$$

та співставлення результатів аналітичного прогнозу з експериментом (рис. 1).

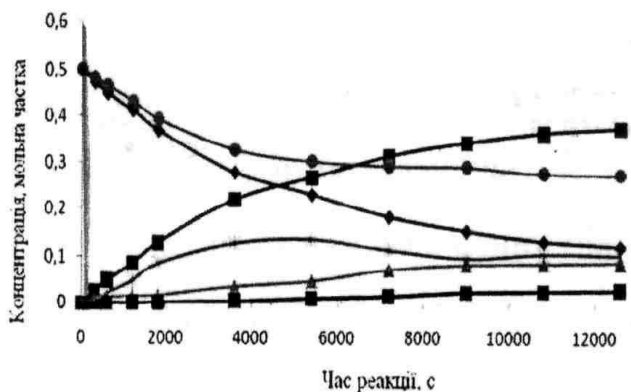
Нами була зроблена спроба розрахунку кінцевих значень ( $\tau = 12000$  с) ТАГ, МЕА та АА при  $T = 373$  К і зазначених в [1]  $k_1 = 1,81 \cdot 10^{-4}$ ;  $k_2 = 0,38 \cdot 10^{-4}$ ;  $k_3 = 0,02 \cdot 10^{-4}$  1/(м.ч. с). Використовувався відомий метод розв'язку систем нелінійних диференціальних рівнянь ode 45. Тут і далі прийнято  $y(1) = [ТАГ]$ ;  $y(2) = [МЕА]$ ;  $y(3) = [ДАГ]$ ;  $y(4) = [МАГ]$ ;  $y(5) = [АА]$ ;  $y(6) = [ГЛ]$ .

Розв'язувач:

```
[x,y]=ode45(@mono653,[0 12000],[0 5 0 5 0 0 0])
plot(x,y)
grid on
```

М-файл:

```
>> function dy=mono68(x,y);
dy=zeros(5,1);
dy(1)=-1.81e-4.*y(1).*y(2);
```



**Рис. 1.** Зміна концентрацій інгредієнтів в ході амідування триацилгліцеринів соєвої олії [1]:  $\blacklozenge$  – моноетаноламіни (МЕА),  $\blacktriangle$  – моноацилгліцерини (МАГ),  $\blacksquare$  – гліцерин (ГЛ),  $\blacksquare$  – моноетаноламід (АА) жирних кислот,  $\bullet$  – діацилгліцерини (ДАГ),  $\bullet$  – триацилгліцерини (ТАГ)

$$dy(2) = -1.81e-4 \cdot y(1) \cdot y(2) - 0.38e-4 \cdot y(3) \cdot y(2) - 0.02e-4 \cdot y(4) \cdot y(2);$$

$$dy(3) = +1.81e-4 \cdot y(1) \cdot y(2) - 0.38e-4 \cdot y(3) \cdot y(2);$$

$$dy(4) = +0.38e-4 \cdot y(3) \cdot y(2) - 0.02e-4 \cdot y(4) \cdot y(2);$$

$$dy(5) = +1.81e-4 \cdot y(1) \cdot y(2) + 0.38e-4 \cdot y(3) \cdot y(2) + 0.02e-4 \cdot y(4) \cdot y(2);$$

Результати розрахунку наведено на рис. 2.

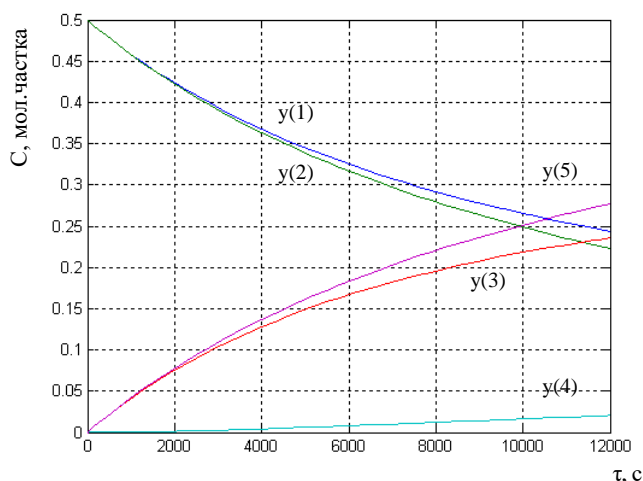
Співставлення рис. 1 і 2 свідчать про дуже низьку точність аналітичного прогнозу (табл. 1).

На нашу думку, причиною розходжень є висока жорсткість системи рівнянь (1), коефіцієнти якої відрізняються в 5–90 разів. Спроба використання програм, що орієнтовані на розв’язок жорстких рівнянь (ode 153; ode 21t; ode 23tb), не привела до збільшення точності розрахунку. На часі розробка більш потужних математичних методів. Однак, з огляду на суттєві похибки (до 15 %) при визначенні кінетичних констант, плинність характеристик промислових партій рослинних олій, актуально одержання в рамках поширених математичних методів добре обґрунтованих оцінок кількісних показників процесу амідування.

Для інженерних цілей виправданий запропонований нами в роботі [2] підхід: для визначення виходу цільового продукту доцільне нехтування відмінностями між кінетичними константами  $k_1 = k_2 = k_3$ . Так, похибка при амідуванні триацилгліцеринів соняшникової олії не перевищувала 10 %, в присутності каталізатора

Таблиця 1. Точність визначення інгредієнтів при  $k_1 \neq k_2 \neq k_3, \tau = 12000$  с

Сполука	Концентрація, мол. частка		Похибка аналітичного визначення, %
	Експеримент, [1]	Розрахунок ode 45	
ТАГ	0,27	0,244	9,6
МЕА	0,12	0,225	88,0
АА	0,38	0,275	27,6



**Рис. 2.** Зміна концентрацій в ході амідування за умов  $k_1 = 1,81 \cdot 10^{-4}; k_2 = 0,38 \cdot 10^{-4}; k_3 = 0,02 \cdot 10^{-4} 1/(\text{м.ч.} \cdot \text{с})$  (NaOH) – 3–4 % [2].

Розв’язок системи (1) здійснювали за допомогою розв’язувача (2) і

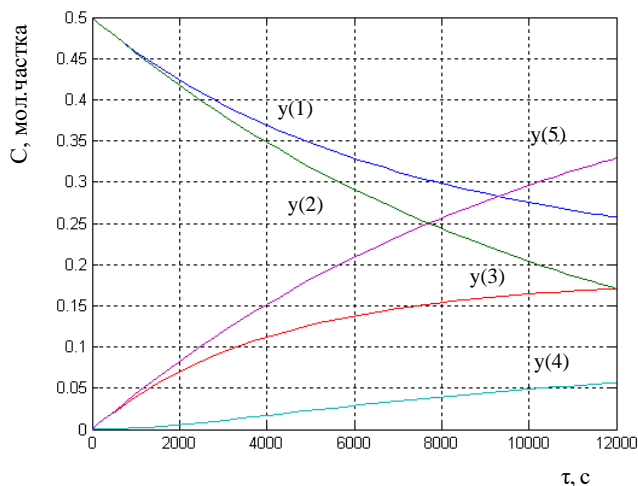
М-файла:

```
function dy=моноб18(x,y);
dy=zeros(5,1);
dy(1)=-1.81e-4.*y(1).*y(2);
dy(2)=-1.81e-4.*y(1).*y(2)-1.81e-4.*y(3).*y(2)-1.81e-4.*y(4).*y(2);
dy(3)=+1.81e-4.*y(1).*y(2)-1.81e-4.*y(3).*y(2);
dy(4)=+1.81e-4.*y(3).*y(2)-1.81e-4.*y(4).*y(2);
dy(5)=+1.81e-4.*y(1).*y(2)+1.81e-4.*y(3).*y(2)+1.81e-4.*y(4).*y(2);
```

Результати розв’язку рівнянь системи (1) при  $k_1 = k_2 = k_3 = 1,81 \cdot 10^{-4} 1/(\text{м.ч.} \cdot \text{с})$  наведено на рис. 3.

Як впливає з табл. 2, похибки прогнозу зменшено вдвічі.

Таким чином, запропонований підхід дає змогу не лише суттєво підвищити точність аналітичного прогнозу, але і значно скорочує обсяг кінетичних досліджень, дозволяє прогнозувати вихід цільового продукту з похибкою близькою до 13 %.



**Рис. 3.** Зміна концентрацій в ході амідування за умов  $k_1 = k_2 = k_3 = 1,81 \cdot 10^{-4} 1/(\text{м.ч.} \cdot \text{с})$

Таблиця 2. Точність визначення інгредієнтів при  $k_1 = k_2 = k_3 = 1,81 \cdot 10^4 \text{ л/(м.ч.с)}$

Сполука	Концентрація, мол. частка		Похибка, аналітичного визначення, %
	Експеримент, [1]	Розрахунок ode 45	
ТАГ	0,27	0,257	4,8
МЕА	0,12	0,171	42,5
АА	0,38	0,329	13,0

При визначенні константи швидкості реакції амідування триацилгліцеринів соняшникової олії [2] замість кінетичної константи  $k(403) = 0,0154 \text{ кг/(моль} \cdot \text{хв)}$  було помилково використано значення початкової швидкості витрати моноетиленаміну  $dy(2)_0/dt = 0,0454 \text{ кг/(моль} \cdot \text{хв)}$ . З метою оцінки впливу допущеної помилки на твердження про спроможність запропонованого підходу математичного опису амідування триацилгліцеринів соняшникової олії було повторно визначено  $k_0$  і залежність енергії активації каталітичної реакції  $E(C)$  від  $C \equiv [\text{NaOH}]$ . Так, виходячи з співвідношення Арреніуса, отримали константу швидкості реакції амідування соняшникової олії  $k_1 = 37,67 \exp(-26142/RT)$ .

Використовуючи уточнені значення констант  $k_{01}$  та  $k_1(403 \text{ K})$ , за допомогою співвідношення [2]  $E(C) = -RT \cdot \ln[k_1(C,T)/k_{01}]$  були скореговані значення констант некаталітичного амідування ( $k_{01}$  і  $E$ )

$$\text{NaOH} = [0 \ 0 \ 0.041 \ 0.041 \ 0.041 \ 0.061 \ 0.0602]$$

$$k = [51 \ 154 \ 167 \ 333 \ 400 \ 552 \ 728] / 10000$$

$$T = [353 \ 403 \ 353 \ 383 \ 403 \ 383 \ 403]$$

$$k_0 = 37.6676$$

$$E = -8.3143 \cdot T \cdot \log(k/k_0)$$

format short

plot(NaOH, E, '\*')

grid on

xlabel('[NaOH], mol/kg')

ylabel('E, j/mol')

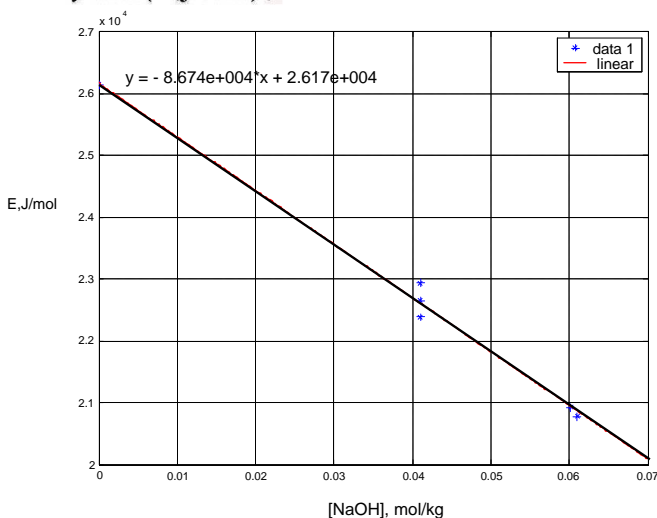


Рис. 4. Залежність енергії активації каталітичної реакції амідування соняшникової олії від вмісту NaOH

Таблиця 3. Розрахунок концентрацій інгредієнтів

$\tau$	y(1)	y(2)	y(3)	y(4)	y(5)
0	0,9790	2,9360	0	0	0
0,0005	0,9789	2,9359	0,0001	0,0000	0,0001
0,0009	0,9789	2,9359	0,0001	0,0000	0,0001
0,0014	0,9788	2,9358	0,0002	0,0000	0,0002
176,1624	0,0099	0,2241	0,0455	0,1044	2,7119
178,0812	0,0097	0,2216	0,0449	0,1035	2,7144
180,0000	0,0096	0,2191	0,0444	0,1026	2,7169

побудовано залежність  $E(C) = f[\text{NaOH}]$  (рис. 4) та визначено, що  $E(C) = (2,6 - 8,7 \cdot [\text{NaOH}]_0) \cdot 10^4$ , а не як помилково зазначено в роботі [2]  $E(C) = 24000 - 88000 \cdot [\text{NaOH}]$ .

Для оцінки спроможності запропонованих співвідношень було визначено константу швидкості процесу амідування при 393 K і вмісті 0,04078 моль/кг каталізатора NaOH.

$$k = 37,6678 \cdot \exp(-26168 - 86737 \cdot 0.04078) / (8.3143 \cdot 393) = 0,0370$$

З урахуванням одержаних результатів було побудовано розв'язувач:

```
[x,y]=ode45(@mono631,[0 180],[0.979 2.936 0 0 0])
plot(x,y)
grid on
xlabel('Time, min')
ylabel('C, mol/kg')
```

і M-файл:

```
function dy=mono631(x,y);
dy=zeros(5,1);
dy(1)=-370e-4.*y(1).*y(2);
dy(2)=-370e-4.*y(1).*y(2)-370e-4.*y(3).*y(2)-370e-4.*y(4).*y(2);
dy(3)=+370e-4.*y(1).*y(2)-370e-4.*y(3).*y(2);
dy(4)=+370e-4.*y(3).*y(2)-370e-4.*y(4).*y(2);
dy(5)=+370e-4.*y(1).*y(2)+370e-4.*y(3).*y(2)+370e-4.*y(4).*y(2);
```

Нижче наведено фрагменти розв'язку, табл. 3.

Вихід цільового продукту склав  $y(5)_{180} \cdot 100 / y(2)_0 = 2,7169 \cdot 100 / 2,936 = 92,54 \%$ . Корекція кінетичних констант  $k_1(403 \text{ K})$  і  $k_{01}$  дозволила дещо зменшити похибку прогнозу виходу цільового продукту в ході каталітичного амідування триацилгліцеринів соняшникової олії з 3–4 % до 2,5 %.

Була досліджена можливість використання процедури [2] для кількісного опису каталітичного амідування триацилгліцеринів соєвої олії. В якості аміну використовували моноетаноламін (МЕА фірми BASF з масовою часткою основної речовини 99,79 %) та соєва олія (за ДСТУ 4534-2006) при мольному співвідношенні 3:1 та їдкий натр (чистота 96 %). Визначення вмісту МЕА проводили за відомою методикою [4].

Таблиця 4. Кінетичні константи за різних умов

[NaOH]·10 <sup>4</sup> , моль/кг	T, K	y(2) <sub>0</sub> /y(1) <sub>0</sub>	Апроксимуючий вираз y(2) = f(τ)	k·10 <sup>4</sup> , кг/(моль·хв)	E·10 <sup>-4</sup> , Дж/моль
0	373	3,1	y(2)=2,8537-0,0168τ+0,000486τ <sup>2</sup>	63	4,80
0	373	3,1	y(2)=2,784-0,0707τ	62	4,81
410	413	3,0	y(2)=2,7893-0,1432τ+0,00316τ <sup>2</sup>	544	4,57
434	373	3,1	y(2)=3,021-0,01456τ+0,00325τ <sup>2</sup>	131	4,57
599	373	3,0	y(2)=2,7635-0,03797τ+1,8·10 <sup>-5</sup> τ <sup>2</sup>	147	4,53
618	413	3,0	y(2)=2,7962-0,04217τ+2,3·10 <sup>-5</sup> τ <sup>2</sup>	671	4,50
552	373	3,0	y(2)=2,8404-0,0374τ+0,001853τ <sup>2</sup>	143	4,54
0	373	3,7	y(2)=3,3427-0,0182τ	61	4,81
0	373	3,0	y(2)=2,7494-0,01547τ	59	4,82
0	413	3,0	y(2)=2,7828-0,068195τ-0,000268τ <sup>2</sup>	268	4,81
0	413	3,0	y(2)=2,7911-0,06781τ-0,000273τ <sup>2</sup>	275	4,80
565	373	3,0	y(2)=2,769-0,301τ+0,0013τ <sup>2</sup>	116	4,61

Алгоритм розрахунку кінетичних констант передбачав побудову експериментальних точок в координатах  $y(2) = f(\tau)$ , їх апроксимацію поліномом, аналітичне визначення початкової швидкості  $dy(2)/d\tau|_0$  і розрахунок за очевидним рівнянням

$$k_1 = -(y(1)_0 y(2)_0)^{-1} dy(2)/d\tau|_0,$$

де:  $y(1)_0$  та  $y(2)_0$  – відповідно початкові концентрації ТАГ і МЕА;

$y(2)$  – поточна концентрація МЕА.

Як приклад нижче наведено розрахунок константи швидкості реакції отримання діацилгліцерину  $k_1$  при температурі 413 К і концентрації NaOH 0,041 моль/кг.

```
>> mm=100.598% g Soevoe.M 18.06.18. Magazin,
T=140, 3/1, NaOH
Nmm=mm/886 % mol
mMEA=21.01 % g
Nmea=mMEA/61.08 % mol
N0=Nmea/Nmm
mNaOH=0.2 % g
M=mm+mMEA+mNaOH % g
C0=1000*Nmea/M % mol/kg
Cm0=1000*Nmm/M
CNaOH0=1000*mNaOH/40/M % mol/kg
MEA0=100*mMEA/M % %
NaOH0=mNaOH/M % part
t=[0 5 10 15 20] % min
V=[10.1 6.8 6.6 5.3] % ml titrant
n=[0.486 0.403 0.469 0.457] % g mass sample
g=0.006108*V % 0.1*V*E/1000, g, mass MEA
P=100*g/n % % MEA
MEA=[MEA0 P]
C=10*MEA./61.08 % mol/kg
N=Nmea+Nmm
W0=0.14325% nachal. skorost,mol/(kg*min)
k=W0./C0./Cm0, kg/(mol*min)
plot(t,C,'*')
grid on
```

xlabel('t,min')

За умови, що  $mm = 100.598$ ;  $mMEA = 21.010$ ;  $mNaOH = 0.200$  і при  $t = 0 \ 5 \ 10 \ 15 \ 20$   
 $V = 10.10 \ 6.80 \ 6.60 \ 5.30$   
 $n = 0.486 \ 0.403 \ 0.469 \ 0.457$   
отримали  $Nmm = 0.1135$ ;  $Nmea = 0.344$ ;  $N0 = 3.0295$ ;  $M = 121.808$ ;  $C0 = 2.8239$ ;  $Cm0 = 0.9321$ ;  $CNaOH0 = 0.041$ ;  $MEA0 = 17.2485$ ;  $NaOH0 = 0.0016$   
 $MEA = 17.2485 \ 12.6936 \ 10.3063 \ 8.5955 \ 7.0837$   
 $C = 2.8239 \ 2.0782 \ 1.6873 \ 1.4072 \ 1.1597$   
 $W0 = 0.1432$ ;  $k = 0.0544$

Таким же чином було одержано константи швидкості реакції амідування соєвої олії за умов  $373 \text{ K} \leq T \leq 413 \text{ K}$  і  $0 \leq [NaOH]_0 \leq 618$  моль/кг. В подальшому, використовуючи наведений в роботі [2] вираз  $E(C) = -RT \ln[k_i(C, T) / k_{01}]$ , було визначено  $E(C)$  як функцію вмісту катализатора, табл. 4. Аналіз одержаних результатів (рис. 5) показує доцільність оцінки витрати вихідних

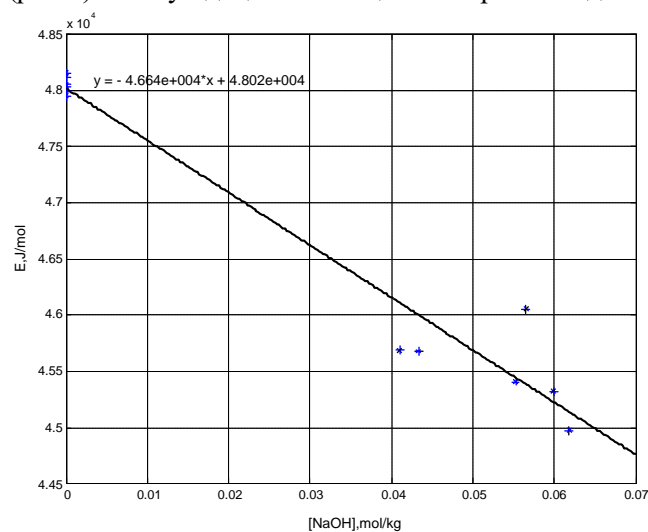


Рис. 5. Залежність енергії активації реакції амідування від початкової концентрації NaOH

матеріалів і виходу цільового продукту при амідуюванні соєвої олії, виходячи із лінійної залежності енергії активації від вмісту каталізатора  $E(C) = (4,8-4,7 [NaOH]_0) \cdot 10^4$ .

#### Висновки

Дослідження амідуювання триацилгліцеринів соняшникової та соєвої олій свідчить, що для одержання обґрунтованих оцінок витрати вихідних речовин і виходу цільових продуктів є доцільним нехтування відмінностей між  $k_1$  і  $k_2$ ,  $k_1$  і  $k_3$  ( $k_1 = k_2 = k_3$ ). При цьому похибка визначення виходу цільового продукту не перевищує 10 % (соняшникова олія) і 13 % (соєва олія). В присутності каталізатора NaOH алгоритм розрахунку оцінок витрати вихідних речовин та виходу цільових продуктів зводиться до визначення передекспоненти константи швидкості некаталітичної реакції амідуювання триацилгліцеринів, побудови залежності енергії активації від вмісту NaOH за співвідношенням  $E(C) = -RT \ln[k(C,T) / k_{01}]$  і кількісного розрахунку з використанням розв'язувача ode 45.

#### Література

1. Мельник А.П., Марценюк Т.І., Малік Г.С. Кінетика амідуювання соєвої олії моноетаноламіном. *Вестник НТУ "ХПИ"*. 2011. 24. 16–19.
2. Шкарапута Л.Н., Митрохина Л.Л., Морозова И.П. Амидирование триацилглицеринов подсолнечно-

го масла. *Каталіз и нефтехимия*. 2017. 26. 53–58.

3. Карпеева И.Э., Зорина А.В., Шихалиев Х.С. Синтез амидов жирных кислот подсолнечного масла. *Вестник ВГУ, сер.: химия, биология, фармация*. 2013. 2. 39–41.
4. Діхтенко К.М. *Технологія отримання моноацилгліцеринів амідуюванням ріпаккової олії*: дис...канд. техн. наук. Харків: НТУ "Харківський політехнічний інститут", 2008.

#### References

1. Melnyk A.P., Martsenyuk T.I., Malik H.S. Kinetyka amiduvannya soyevoyi oliyi monoetanolaminom. *Vestnyk NTU "KhPP"*. 2011. 24. 16–19. [in Ukrainian].
2. Shkaraputa L.N., Mitrokhina L.L., Morozova I.P. Amidirovaniye triatsilglitserinov podsolnechnogo masla. *Kataliz i neftekhimiya*. 2017. 26. 53–58. [in Russian].
3. Karpeyeva I.E., Zorina A.V., Shikhaliyev Kh.S. Sintez amidov zhirnykh kislot podsolnechnogo masla. *Vestnik VGU, ser.: khimiya, biologiya, farmatsiya*. 2013. 2. 39–41. [in Russian].
4. Dikhtenko K.M. *Tekhnolohiya otrymannya monoatsylhlitseryniv amiduvannyam ripakovoyi oliyi*. Dys...kand. tekhn. nauk. Kharkiv: NTU "Kharkivs'kyu politekhnichnyu instytut". 2008. [in Ukrainian].

Надійшла до редакції 24.09.2019

## Количественные закономерности в ходе амидирования триацилглицеринов растительных масел

Л.Н. Шкарапута, Л.Л. Митрохина, Л.А. Тищенко, Л.А. Шевченко, И.П. Морозова

Институт биоорганической химии и нефтехимии им. В.П. Кухаря НАН Украины,  
Украина, 02160 Киев, Харьковское шоссе, 50; тел.: (044) 559-66-47

Показана целесообразность получения обоснованных оценок расхода исходных веществ и выхода алкиламидов растительных масел при условии пренебрежения различий между кинетическими константами  $k_1$  и  $k_2$ ,  $k_1$  и  $k_3$  ( $k_1 = k_2 = k_3$ ). При этом погрешность определения выхода целевого продукта не превышает 10 % (подсолнечное масло) и 13 % (соевое масло). В присутствии каталізатора NaOH алгоритм расчета оценок кинетических констант сводится к определению предэкспоненты константы скорости некаталітической реакции амидирования триацилглицеринов и построения зависимости энергии активации от содержания NaOH по соотношению  $E(C) = -RT \ln[k(C,T) / k_{01}]$  и количественного расчета с использованием решателя ode 45.

**Ключевые слова:** амидирование, растительные масла, триацилглицерины, алгоритм расчета, оценка выхода целевого продукта

## Quantitative patterns during the amidation of triacylglycerols of vegetable oils

*L.M. Shkaraputa, L.L. Mitrokhina, L.O. Tyshchenko, L.A. Shevchenko, I.P. Morozova*

*V.P. Kukhar Institute of Bioorganic Chemistry and Petrochemistry, NAS of Ukraine,  
50, Kharkivske shosse, 02160 Kyiv, Ukraine; Tel.: (044) 559-66-47*

The relevance of the study is due to the rapid decrease in oil reserves and an increase in its cost, which stimulates the use of renewable raw materials, in particular vegetable oils for the production of surface-active substances, which are used to intensify oil production and the production of products from various industries. However, there are critically few works devoted to identifying quantitative ratios of amidation processes of vegetable oils. This leads to the implementation of irrational synthesis conditions, the waste of starting materials and time. The article analyzes the difficulties encountered in the quantitative analysis of such processes. An analysis of the quantitative ratios during the amidation of triacylglycerols of sunflower and soybean oils suggests that neglecting the differences between  $k_1$  and  $k_2$ ,  $k_1$  and  $k_3$  ( $k_1 = k_2 = k_3$ ) is justified in calculating the estimates of the consumption of starting materials and the yield of target products. Moreover, the error in determining the yield of the target product does not exceed 10 % (sunflower oil) and 13 % (soybean oil), which, taking into account errors during kinetic experiments, the mobility of properties of industrial oils composition, and serious difficulties in the numerical analysis of rigid systems of differential equations, seems completely acceptable. In the presence of the NaOH catalyst, the algorithm for calculating the estimates of the consumption of starting materials and the yield of the target products reduces to determining the preexponents of the rate constant of the non-catalytic amidation of triacylglycerols, building the dependence of the activation energy on the content of NaOH taking into account the ratio  $E(C) = -RT \ln [k(C, T) / k_{01}]$  and quantitative calculation using the solver ode 45.

**Keywords:** amidation, vegetable oils, triacylglycerines, calculation algorithm, estimation of the yield of the target product