

Engenharia Química

Avaliação de modelos termodinâmicos para estimativa de densidade de ácidos graxos presentes em óleos vegetais

Lucas Renato de Oliveira Mourão - 7º módulo de Engenharia Química, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq.

Nathan Sombra Evanequista - Orientador DEG, UFLA. - Orientador(a)

Resumo

O aumento da demanda de energia e o conhecimento dos impactos ambientais produzidos pela base principal da matriz energética mundial incentivam o estudo acerca de fontes alternativas de energia. Dentre estas, o biodiesel, uma mistura de ésteres alquílicos de ácidos graxos, obtida a partir de processos de transesterificação e esterificação de lipídios naturais presentes em óleos vegetais, aponta-se como um dos principais substituintes industriais às fontes tradicionais. Isto porque o biodiesel é um combustível renovável, biodegradável, não tóxico e que gera uma baixa emissão de gases poluentes. Para o projeto de produção do biodiesel em uma planta industrial de larga escala, é fundamental a etapa de simulação computacional e, para a execução deste estágio, é necessário o conhecimento da densidade dos ácidos graxos em fase líquida, presentes na cadeia produtiva. Mesmo que a literatura disponha de dados experimentais para estes compostos, esses não suprem a necessidade industrial em sua totalidade, visto que não abrangem todas as substâncias e não compõem faixas extensas de temperatura e de pressão. Assim, é evidente a necessidade da aplicação de modelos termodinâmicos para obtenção desses dados. Nesse sentido, o presente trabalho visa avaliar três modelos de Contribuição de Grupos na determinação da densidade de ácidos graxos presentes em óleos vegetais comumente utilizados na cadeia produtiva do biodiesel. Os modelos utilizados foram: Elbro/Ihmels/Gmehling (1991), Ihmels/Gmehling (2003) e Constantinou/Gani (1995). As estimativas obtidas a partir dos modelos foram comparadas com 455 dados experimentais para 12 ácidos graxos coletados na literatura. Os resultados mostraram que o modelo de Constantinou/Gani (1995) foi o mais confiável, pois apresentou o menor desvio médio absoluto (1,0257%). Porém, este modelo é válido apenas para temperatura de 25 °C (298,15 K). Nesse sentido, o modelo Ihmels/Gmehling (2003) é o mais recomendado para estimar a propriedade avaliada, pois esse apresentou um desvio relativo médio de 1,2979% (em módulo). Em conclusão, observou-se que todos os três modelos adotados possuem alta confiabilidade, dado que os desvios obtidos foram menores que 1,5%.

Palavras-Chave: Ácidos-graxos, Densidade, Modelos termodinâmicos..

Instituição de Fomento: Universidade Federal de Lavras

Link do pitch: <https://youtu.be/OUjptOMwilo>