

Engenharia Química

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

Karine Lima Scalioni - 9º módulo de Engenharia Química, UFLA, bolsista PIBIC/FAPEMIG.

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

Resumo

A escassez dos combustíveis derivados do petróleo, somada aos impactos ambientais resultantes de seu uso, tem impulsionado a exploração de fontes energéticas alternativas. Nesse contexto, o biodiesel, uma alternativa ao diesel de origem mineral, tem ganhado destaque tanto na esfera acadêmica quanto na industrial ao longo das últimas décadas. Para viabilizar a produção em larga escala do biodiesel, é crucial obter informações sobre a viscosidade dos compostos envolvidos ao longo de toda a cadeia produtiva, com ênfase nos ácidos graxos. Apesar de haver dados experimentais sobre a viscosidade dos ácidos graxos na literatura, tais informações não são suficientes para fins de simulação, devido à abrangência limitada de compostos e condições térmicas. Para suprir essa lacuna de dados, é possível recorrer a modelos termodinâmicos capazes de estimar viscosidades com níveis de precisão adequados para os cálculos de engenharia. O propósito deste estudo foi comparar diferentes modelos termodinâmicos presentes na literatura para a previsão da viscosidade de ácidos graxos sob diversas condições de temperatura através do modelo de contribuição de grupos. Os modelos avaliados incluem: Souders (1938), Thomas (1946), Orrick/Erbar (1974), Morris (1986), Joback/Reid (1987), Marrero-Pardillo (2000), Hsu-Sheu-Tu (2002), Yinghua-Peisheng-Ping (2002), Nannoolal et al. (2009) e Ceriani-Gonçalves-Coutinho (2011). A avaliação da precisão dos modelos baseou-se em um conjunto de dados contendo 283 valores experimentais de viscosidade associados a 16 ácidos graxos, em uma faixa de temperatura no intervalo 273,36/573,15 K. Todos os dados foram coletados da ferramenta Thermolit, integrada ao simulador de processos Aspen Plus. Para avaliar o desempenho dos modelos, realizou-se comparações diretas entre os valores experimentais e os calculados, utilizando parâmetros estatísticos. Os resultados revelaram que o modelo de Hsu-Sheu-Tu produziu as melhores estimativas para ácidos graxos saturados, exibindo um %DMRA de 7,73%. Quanto aos ácidos graxos insaturados, o modelo de Ceriani-Gonçalves-Coutinho demonstrou o melhor desempenho, apresentando um %DMRA de 2,58%. Entretanto, ao examinarmos a totalidade dos dados, chegamos à conclusão de que o modelo proposto por Ceriani-Gonçalves-Coutinho se destaca na previsão dos valores de viscosidade, baseado em seu %DMRA de 8,13%, que se alinha às expectativas considerando que se trata de um modelo mais recente e específico para ácidos graxos.

Palavras-Chave: Ácidos-graxos, viscosidade, modelos termodinâmicos.

Instituição de Fomento: FAPEMIG

Link do pitch: https://youtu.be/UJ5CD8dy9r8?si=uA7LGWt9vg90S_7L