

Engenharia Química

Determinação da pressão de vapor de componentes do biodiesel por meio de equações de estado cúbicas

Victor Raphael Santos Souza - 8º período de Engenharia Química, UFLA, iniciação científica voluntária

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

Resumo

O biodiesel é uma mistura de ésteres alquílicos de ácidos graxos e um promissor combustível como alternativa ao óleo diesel, uma vez que os combustíveis de origem mineral são responsáveis por cerca de 75 % da emissão global de gases do efeito estufa. A determinação em laboratório de propriedades termofísicas para cada um dos ésteres que compõem o biodiesel demanda um alto investimento financeiro e consome muito tempo, o que a torna inviável. Em consequência disso, é interessante a adoção de uma alternativa de baixo custo no âmbito financeiro, temporal e computacional. As equações de estado cúbicas permitem estimar propriedades termodinâmicas e de transporte úteis para simular processos industriais. Dentre elas, destaca-se a pressão de vapor, visto que é necessária conhecê-la em diferentes condições de temperatura para cálculos envolvendo o projeto de colunas de destilação, um equipamento comum em plantas de produção de biodiesel. Neste trabalho avaliou-se o uso de seis equações de estado cúbicas para estimar a pressão de vapor de componentes do biodiesel em uma ampla faixa de temperaturas (291,53 K – 600,90 K), sendo elas: van der Waals, Redlich-Kwong, Wilson, Soave, Peng-Robinson e Twu. Essas equações foram implementadas em um código escrito na linguagem de programação Python. Os valores estimados pelas equações foram comparados sistematicamente com 348 dados experimentais de pressão de vapor compilados da literatura. Para tal, calculou-se o desvio médio relativo absoluto (%DMRA) entre os valores experimentais e estimados para cada equação empregada. O modelo de Peng-Robinson se sobressaiu com relação aos demais, com um desvio médio de 12,14 % considerando todos os ésteres analisados. Na análise por tipo de componente, a acurácia dessa equação também foi superior para ésteres metílicos (%DMRA de 13,10 %) e ésteres etílicos (%DMRA 7,43 %).

Palavras-Chave: simulação, termodinâmica, propriedades termofísicas.

Link do pitch: <https://www.youtube.com/watch?v=tcZqG0PDJMo>