

Engenharia Química

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

Lucas Renato de Oliveira Mourão - 9º módulo de Engenharia Química, UFLA, bolsista PIBIC/CNPq.

Nathan Sombra Evaneglista - Orientador DEG, UFLA - Orientador(a)

### **Resumo**

O aumento da demanda de energia e o estudo dos impactos ambientais da matriz energética mundial tem incitado pesquisas por fontes alternativas. Dentre estas, o biodiesel, uma mistura de ésteres alquílicos de ácidos graxos obtida pela transesterificação e esterificação de lipídios naturais presentes em óleos vegetais, aponta-se como um dos principais substituintes às fontes tradicionais. Isto, pois, é um combustível renovável e biodegradável, que gera baixa emissão de gases poluentes. Para o projeto de uma planta industrial de biodiesel, é crucial a etapa de simulação computacional e, assim, o conhecimento da densidade desses ácidos graxos em fase líquida. Embora a literatura possua dados experimentais, estes não suprem a demanda industrial em sua totalidade, visto que não abrangem todos os compostos e não compõem faixas extensas de temperatura e de pressão. Assim, torna-se necessário o emprego de modelos termodinâmicos. Logo, o presente trabalho visa avaliar modelos baseados na teoria de Contribuição de Grupos e dos Estados Correspondentes, para cálculo da densidade de ácidos graxos presentes em óleos vegetais para a produção de biodiesel. Os modelos avaliados foram: Elbro/Ihmels/Gmehling (1991), Ihmels/Gmehling (2003), Constantinou/Gani (1995), Bhirud (1978) e Rackett/Soave (1970, 1995) e as estimativas comparadas com 455 dados experimentais da literatura para 12 ácidos graxos. Os resultados mostraram que os modelos de Contribuição de Grupos ofertam maior fiabilidade, uma vez que os desvios relativos foram inferiores a 1,5%. Dentre estes, o mais preciso foi o de Constantinou/Gani (1995), com desvio médio de 1,0257%, porém avalia apenas dados para temperatura de 25 °C (298,15 K). Destarte, indica-se o modelo Ihmels/Gmehling (2003), cujo desvio foi de 1,2979%. Ademais, notou-se que Bhirud (1978) é bastante sensível à adoção de um modelo para fator acêntrico, visto que suas estimativas oscilaram entre 5,3780% e 14,8302% de desvio relativo médio absoluto.

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

Instituição de Fomento: Universidade Federal de Lavras

Link do pitch: <https://youtu.be/i6YPWhju-s0>