



Evento	Salão UFRGS 2015: SIC - XXVII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
Ano	2015
Local	Porto Alegre - RS
Título	EQUILÍBRIO DE FASES DE SISTEMAS ENVOLVENDO BIODIESEL – CÁLCULOS COM MODELOS TERMODINÂMICOS
Autor	JONAS MACHADO
Orientador	PAULA BETTIO STAUDT

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL - UFRGS
EQUILÍBRIO DE FASES DE SISTEMAS ENVOLVENDO BIODIESEL – CÁLCULOS
COM MODELOS TERMODINÂMICOS

Jonas Machado; Paula Bettio Staudt

O biodiesel tem se tornado um combustível cada vez mais importante nos dias de hoje, levando-se em conta a futura escassez de petróleo (matéria-prima do óleo diesel comum) e, por se tratar de um combustível renovável. O biodiesel possui características muito semelhantes ao diesel comum, porém, ao invés de ser derivado do petróleo, é obtido a partir de óleos de origem animal ou vegetal. Por ser queimado em motores feitos para óleo diesel comum, o biodiesel não deixa de ser um poluente, mas é um combustível menos agressivo à natureza.

Dento desse contexto atual, o principal objetivo deste trabalho é poder, por meio de modelos termodinâmicos, prever o comportamento de misturas contendo biodiesel e misturas presentes no seu processo de síntese. Ou seja, poder saber o comportamento de misturas, antes de realizar procedimentos experimentais. Isso é importante para a indústria, para diminuir custos e poupar tempo, sendo que dessa forma não seriam necessários vários testes para avaliar o tipo de equipamento a ser utilizado para um dado tipo de processo.

O modelo COSMO-SAC foi escolhido para a descrição das propriedades dos sistemas estudados. Uma grande quantidade de dados de equilíbrio de fases foi coletada da literatura. Como os dados coletados são de experimentos realizados a altas pressões, relacionados à síntese do biodiesel com alcoóis supercríticos, utilizou-se o modelo COSMO-SAC acoplado a uma equação de estado com o uso de uma regra de mistura.

Nesse estudo inicial, foram determinadas as cargas aparentes dos compostos, além dos perfis σ , informações requeridas pelo modelo COSMO-SAC. Foram coletados dados de equilíbrio de misturas contendo ésteres, alcoóis, água e glicerol. De posse dos dados necessários para o trabalho, foi possível analisar a eficiência do modelo em relação aos dados experimentais. Notou-se que o modelo estava longe da realidade. Assim, foi necessária uma etapa de otimização dos parâmetros do COSMO-SAC.

Após vários testes, acreditamos ter obtido um conjunto de parâmetros satisfatórios para algumas misturas, como etanol + laurato de etila. No entanto, esse mesmo conjunto não apresenta resultados bons para misturas contendo metanol. Para melhores resultados, seria necessário o uso de uma rotina automática eficiente para a otimização, com o objetivo de conseguir um conjunto genérico que prediz o comportamento de qualquer mistura.