



XXI Congresso Brasileiro  
de Engenharia Química

Fortaleza/CE  
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o  
Ensino de Engenharia Química  
Fortaleza/CE  
25 a 29 de setembro

# MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROCESSO REATIVO E DE SEPARAÇÃO DO BIODIESEL

J. S. dos SANTOS<sup>1</sup>, A.C. BRANDÃO<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, Departamento de Engenharia Química

<sup>2</sup> Universidade Federal de Campina Grande, Departamento de Engenharia Química  
E-mail para contato: santosjislane@gmail.com

**RESUMO** – *A busca por soluções energéticas que substituam os combustíveis nocivos ao meio ambiente se faz a cada dia mais indispensável, o biodiesel é uma dessas soluções. Além de ser obtido de fontes renováveis, tem como vantagens a menor emissão de gases poluentes e a menor persistência no solo. Entretanto, o custo de produção atualmente é maior, e o balanço energético é menos favorável em relação ao óleo diesel. Por esse motivo, a análise e criação de novas formas de produção é de grande importância. Nesse sentido, a aplicação da simulação computacional se torna um fator relevante para o desenvolvimento do setor. Essa pesquisa teve como objetivo estudar o processo de produção e separação do biodiesel, com reação metanólica do óleo de palma, e simulá-la na plataforma Aspen Plus™. Os resultados gerados a partir da simulação, foram utilizados para testar um método interpolador geoestatístico chamado Kriging, através da criação de um modelo tipo Black-Box em uma das extensões do Excel que reproduziu com fidelidade e precisão as simulações executadas, sem necessidade de simular a planta no software novamente, podendo assim substituí-lo. Além de muito mais simples, esse modelo tem como benefício a acessibilidade, estando disponível para qualquer engenheiro que tenha o Microsoft Excel instalado em seu computador.*

## 1. INTRODUÇÃO

Os combustíveis obtidos de fontes renováveis e processados através de tecnologias limpas têm ocupado um papel de destaque no cenário mundial atual. Tal posição deve-se principalmente a redução da disponibilidade energética oriunda de fontes fósseis, de políticas de desenvolvimento e gerenciamento de processos ambientalmente benignos associados à temática relativa à poluição e ao aquecimento global. (Silva, Freitas, 2008)

O biodiesel derivado de fontes renováveis pode ser obtido por diferentes processos, tais como o craqueamento, a esterificação ou pela transesterificação. Produzido a partir de gorduras animais ou de óleos vegetais, a partir de plantas abundantes no Brasil tais como soja, dendê (palma), girassol, babaçu, amendoim, pinhão manso e mamona, dentre outras, o biodiesel pode

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO



substituir total ou parcialmente o óleo oriundo de petróleo em motores a diesel. (Souza, 2006)

A aplicação da simulação computacional é uma área bastante promissora em novas pesquisas à respeito deste combustível. Modelos deste tipo de processo podem ser desenvolvidos através de programas específicos de simulação, como Aspen Plus, Aspen Dynamics ou Hysys, ou de modelos baseados em fundamentos geoestatísticos, como o Kriging, possibilitando assim o desenvolvimento de soluções ótimas para os sistemas. (Souza, 2011)

Nesse trabalho, estudamos o processo de produção e separação do biodiesel, com ênfase no sistema reacional de transesterificação e na recuperação de metanol e glicerol, podendo assim propor um novo sistema de produção e utilizar os dados gerados pela simulação, para testar e comprovar a eficácia de um método interpolador, através da utilização de uma ferramenta tipo Black-Box, em Excel.

## 2. ETAPAS DO PROCESSO PRODUTIVO INDUSTRIAL

A rota mais comum de produção do biodiesel é realizada através da reação de transesterificação. A Equação 1 apresenta uma reação generalizada dessa produção:



As principais etapas envolvidas no processo são: mistura, reação de transesterificação, decantação do glicerol, recuperação do álcool em excesso, e separação do glicerol (Meneghetti, Brito, 2013), como é ilustrado na Figura 1.

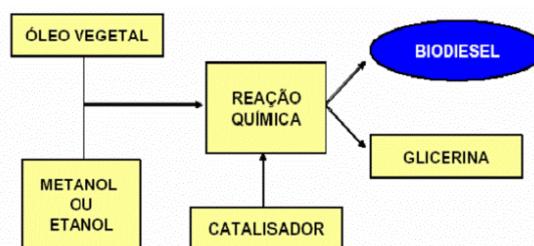


Figura 1 – Etapas da produção do biodiesel

A utilização de catalisadores básicos permite obter taxas de reação quase 4000 vezes superiores as obtidas pela mesma quantidade de catalisadores no processo ácido. Além disso, o custo das bases fortes é bastante inferior ao das enzimas utilizadas como biocatalisadores, ademais vantagens adicionais associadas à disponibilidade dos catalisadores básicos que, apesar das dificuldades de recuperação, permitem a reutilização como catalisadores sem perda de atividade. A catálise básica permite a utilização de temperaturas e pressões menores, diminuindo



XXI Congresso Brasileiro  
de Engenharia Química

Fortaleza/CE  
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o  
Ensino de Engenharia Química  
Fortaleza/CE  
25 a 29 de setembro

os custos energéticos e de instalação dos reatores, e ainda o uso de menores relações molares álcool / óleo. (Quessada, Guedes , 2010)

Entretanto, devido à possibilidade de saponificação, o processo é limitado a óleos de baixa acidez, de maior preço, dificultando a utilização de resíduos ou óleos não processados, mais baratos. No caso de se utilizar resíduos de óleos não processados é necessária a utilização de metanol ou etanol anidro, que são mais caros que seus correspondentes hidratados.

A separação, recuperação e purificação do glicerol e dos catalisadores são dispendiosas e demoradas. O tempo de reação necessário é relativamente longo, e como o processo transcorre em reatores agitados, o consumo energético é alto e os custos associados também são. Assim, embora seja a alternativa mais utilizada, o processo alcalino está longe de ser completamente ótimo.

### 3. INTRODUÇÃO A PROCESSOS DE MODELAGEM COMPUTACIONAL

A modelagem científica computacional aplica a computação à áreas de conhecimento em que são impossíveis, ou muito caros, a realização de testes para análises de possíveis soluções para algum processo, partindo de modelos experimentais ou de soluções analíticas.

No que diz respeito a simuladores, a carteira de produtos da Aspen Technology Inc. detêm as melhores ferramentas de solução e otimização de processos no mercado. Estas, por sua vez, são baseadas em modelos matemáticos e termodinâmicos fundamentados nos princípios básicos dos fenômenos de transporte.

#### 3.1. O Modelo Interpolador Geoestatístico Kriging

O método de Krigagem permite a estimação de um valor desconhecido associado à um ponto, a partir de determinado conjunto de dados previamente estudados. Dessa forma, após a análise e conclusão da validade desse estudo, caso o comportamento das variáveis não seja totalmente aleatório, o modelo kriging pode ser aplicado. (Cott,1995)

As simulações levam a definição de um modelo de variograma que servirá para inferir os valores de variância e covariância que serão utilizados pelo Kriging. Este, por sua vez, é executado em Excel através de uma ferramenta chamada de XonGrid.

#### 3.2. Ferramenta XonGrid

O XonGrid nada mais é, que uma extensão do excel composta por funções que permitem a execução de interpolações de dados dispersos. Ele é um software livre, e não necessita de nenhum privilégio para ser instalado. Tornando-se assim uma ferramenta extremamente

PROMOÇÃO

REALIZAÇÃO

ORGANIZAÇÃO



acessível e de fácil manuseio para qualquer engenheiro que tenha o pacote Microsoft Office instalado em seu computador. Além disso, ela possibilita a obtenção de perspectivas fiéis aos dados amostrados, apresentando erros de estimação com variância mínima. (Gmehling *et al*, 2002)

## 4. METOLOGIA

A Figura 2 apresenta o fluxograma do processo de produção de biodiesel proposto, implementado no Aspen Plus.

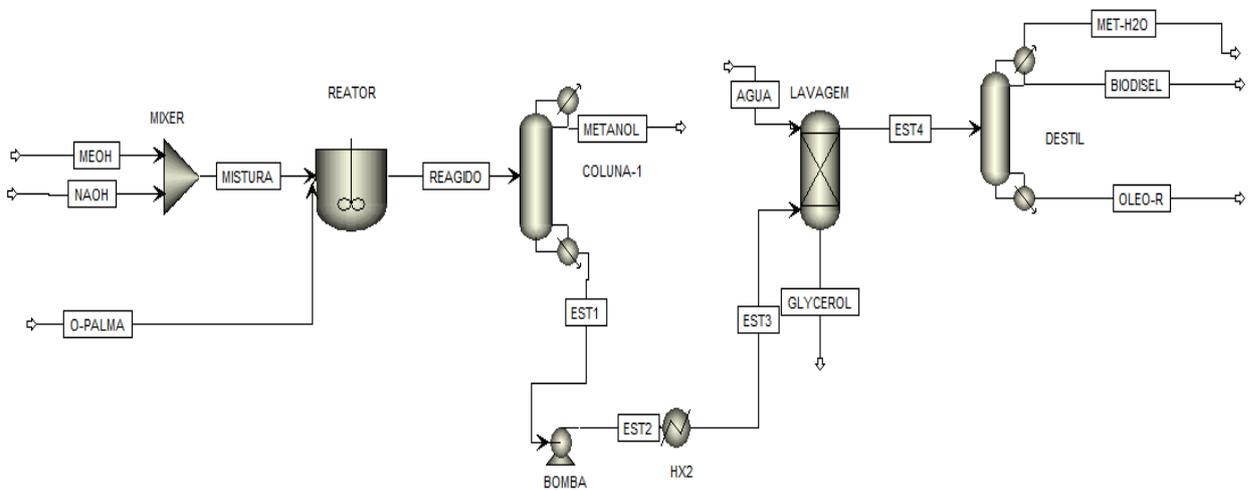


Figura 2: Fluxograma do processo de produção de biodiesel

A primeira etapa do processo consiste na reação de transesterificação, onde a mistura de metanol e hidróxido de sódio é adicionada em excesso no reator juntamente com o óleo a ser convertido, neste caso utilizou-se o óleo de palma.

O reator utilizado foi um CSTR, que possibilita a homogeneidade da mistura através de um agitador contínuo, sua temperatura é mantida na faixa de 60° C e a reação dura em torno de 2 horas.

A segunda etapa simulada foi a de recuperação do metanol. Ele foi adicionado em excesso no reator, sendo parcialmente recuperado por uma unidade de destilação. Utilizou-se uma coluna de destilação de sete estágios, operando com condensador do tipo total para proporcionar um refluxo à torre e reboiler kettle parcial, conseguindo separar o álcool dos demais componentes. A fase pesada da primeira coluna de destilação é então encaminhada à uma coluna de extração de 6 estágios, operando de forma adiabática, onde passa por uma lavagem para retirada do glicerol, bem como parte do metanol ainda existente no processo. Em seguida, o fluxo resultante

é direcionado para uma segunda coluna de destilação esta, por sua vez, constituída de seis estágios e operando com um condensador do tipo parcial havendo, assim, a saída de duas correntes de topo, a fase vapor composta basicamente de metanol e água, e a fase líquida composta dos elementos que formam o biodiesel.

Foi necessária a seleção de cada componente que participa da produção do biodiesel, e que já estão na base de dados do Aspen Plus. Foram adicionadas todas as reações que envolveriam os triglicerídeos, diglicerídeos, monoglicerídeos, e algumas reações paralelas, totalizando noventa e seis reações inseridas, a fim de minimizar possíveis erros de conversão.

## 4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Com o modelo implementado em regime estacionário (baseado na figura 2), o seguinte cenário é proposto: É introduzida no processo uma quantidade fixada de óleo de palma de 1050 kg/hr, então é adicionado metanol suficiente para reagir com a proporção de triglicerídeos inserida. Então, calculou-se um o rendimento do processo, definido como a divisão da vazão mássica de saída do biodiesel pela vazão mássica de entrada do óleo. Nesta simulação, o fluxo que sai do reator, depois de passar por uma recuperação parcial do metanol, é direcionado para uma lavagem com 50 kg/hr de água pura em uma coluna de destilação.

### 4.1. Verificação do Modelo e do Rendimento

O modelo elaborado no Aspen Plus passou por uma etapa de verificação, na qual as propriedades do biodiesel produzido foram confrontadas com os parâmetros da norma ANP Res nº 7 de 19/03/08. Os dados e os resultados obtidos são apresentados na tabela 4.

Tabela 4- Qualidade esperada vs Qualidade simulada

Característica (Unidade)	ANP*	Simulado
Metanol Máximo (% em massa)	0,2%	0,005%
Teor de éster mínimo (% em massa)	96,5%	99,97%
Glicerol total máximo (% em massa)	0,25%	1,0341e-11 %

\*ANP- Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis



XXI Congresso Brasileiro  
de Engenharia Química

Fortaleza/CE  
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o  
Ensino de Engenharia Química  
Fortaleza/CE  
25 a 29 de setembro

Possíveis fontes de desvios são a composição do óleo a ser transesterificado, a escolha do pacote de fluidos e a estimação dos parâmetros dos equipamentos. Pode-se observar que o rendimento do óleo de palma na planta simulada foi de 93,64%, representando assim a eficiência do processo proposto.

## 4.2. Aplicação do Método Kriging

Para que o método Kriging pudesse ser aplicado, foi necessário a obtenção de um conjunto de dados amostrais definidos estrategicamente, que representassem com fidelidade o comportamento da planta. Para tanto, foi feita uma análise de sensibilidade da simulação, no próprio Aspen Plus, gerando a simulação de duzentos casos confiáveis, que por sua vez, serviram para treinar o modelo interpolador.

Feito isso, usou-se outra planilha, com os resultados de cinquenta casos, para comparar os resultados obtidos quando se aplicou as mesmas variáveis de entrada ao modelo black-box interpolador kriging, gerando um coeficiente de correlação entre os resultados obtidos pela simulação no software e os gerados pela interpolação.

Todas as planilhas de resultados gerados durante esse procedimento estão disponíveis no link abaixo, para qualquer consulta.

> <https://goo.gl/eksjMI>

## 4. CONCLUSÕES

O uso dos compostos químicos que representaram a mistura de triglicerídeos do óleo de palma usados na simulação forneceu resultados finais (biodiesel) muito próximos dos resultados aceitáveis do ponto de vista industrial, representando dessa forma a confiabilidade dos dados experimentados.

Estes dados, por sua vez, serviram para testar um método interpolador geoestatístico chamado Kriging, gerando um coeficiente de correlação que se manteve em todos os casos acima de 0,9, provando assim que o modelo reproduziu com fidelidade e precisão as simulações executadas.

Mas por que usar interpoladores geoestatísticos, neste caso o Kriging, se existem os simuladores comerciais que fornecem os resultados exatos que desejamos? A resposta é simples: nem todo empreendimento pode arcar com o elevado custo de aquisição e licença anual de simuladores comerciais como Aspen e PRO/II. É neste cenário que o papel de entidade de extensão da academia faz-se essencial, fornecendo para a comunidade um modelo matemático bastante preciso do processo em questão, em uma plataforma que praticamente todos possuem instalados em seus computadores e de fácil manuseio, o Excel.

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO





XXI Congresso Brasileiro  
de Engenharia Química

Fortaleza/CE  
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o  
Ensino de Engenharia Química  
Fortaleza/CE  
25 a 29 de setembro

## 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

COTT, B.; Introduction to the Process Identification. Workshop at the 1992 Canadian Chemical Engineering Conference. J Proc. Cont., 5, 2, 67-69, 1995.

CULSHAW, F.; BUTLER, C. A Review of the Potential of Biodiesel as a Transport Fuel (Reports). New York, The Stationery Office Books; 1993.

GMEHLING, J.; WITTIG, R.; LOHMANN, J. A modified UNIFAC (Dortmund) Model. 4. Revision and Extension, Ind.Eng.Chem, 41(6), p.1678-1688, 2002.

MENEGHETTI, P.; MENEGHETTI, R.; BRITO, C. A Reação de Transesterificação, Algumas Aplicações e Obtenção de Biodiesel. Rev. Virtual Quim. 2013, 5 (1), 63-73. Data de publicação na Web: 17 de janeiro de 2013.

QUESSADA, T.; GUEDES C. Obtenção de Biodiesel a partir de óleos vegetais, utilizando catálise básica e ácida. Enciclopédia biosfera, Centro Científico Conhecer - Goiânia, vol.6, N.11; 2010

SILVA, P.; FREITAS, T. Biodiesel: o ônus e o bônus de produzir combustível. Ciência Rural, Santa Maria, v.38, n.3, p. 843-851, mai-jun, 2008.ISSN 0103-8478. (Portal Scielo)

SOUZA, C. Sistemas catalíticos na produção de biodiesel por meio de óleo residual. Unifei – 5º ano de engenharia hídrica, An. 6. Enc. Energ. Meio Rural 2006.

SOUZA, C. Simulação de uma planta de biodiesel com estudo da viabilidade econômica preliminar utilizando o Aspen/HYSYS. Dissertação de mestrado da Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE, Brasil,2011.

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO

