



**MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE REATORES CONTÍNUOS PARA
SÍNTESE DE BIODIESEL: Parte I – Análise da Mistura entre os Reagentes**

Gabriel B. SILVA¹; João L. SILVA JR.²

RESUMO

O crescente aumento de consumo das reservas de óleo promove uma constante busca por fontes alternativas de energia. O biodiesel se apresenta como uma boa opção do ponto de vista ambiental, social e econômico, sendo um combustível de alta eficiência, produzido a partir da transesterificação de óleo vegetal com álcool na presença de catalisadores. O desenvolvimento de novas tecnologias é uma parte essencial para se alcançar meios produtivos eficientes, e neste sentido, a modelagem, simulação e otimização de processos usando recursos computacionais se apresenta como uma importante ferramenta. Nesta primeira parte do projeto, uma análise da mistura etanol-óleo de girassol foi realizada em um reator tubular convencional, e observou-se que o tempo de residência representa um parâmetro fundamental para a eficiência de mistura, mesmo em condições laminares de escoamento (ausência de mistura turbulenta).

Palavras-chave: modelagem matemática, fluidodinâmica computacional, otimização de processos, síntese de biodiesel.

1. INTRODUÇÃO

O crescente aumento de consumo das reservas de combustíveis fósseis promove uma constante busca por fontes alternativas de energia. O biodiesel se apresenta como uma boa opção do ponto de vista ambiental, social e econômico, sendo um biocombustível de alta eficiência, produzido a partir da transesterificação de óleo vegetal (soja, milho, mamona, palma, entre outros) ou gordura animal (banha de porco) com álcool na presença de catalisadores, que podem ser ácidos, básicos ou enzimáticos. A reação apresenta melhores resultados com maiores quantidades de álcool e temperaturas entre 40 e 60 °C. O desenvolvimento de novas tecnologias é uma parte essencial para se alcançar meios produtivos e eficientes de produção. Este projeto objetiva desenvolver e implementar um modelo matemático para prever as características do escoamento e da cinética química envolvida na síntese de biodiesel a partir da catalise básica, fornecendo uma maneira de desenvolver reatores contínuos otimizados para a produção do biodiesel em grande escala, além de incentivar o uso de simulações e o desenvolvimento da tecnologia. Este trabalho apresenta a primeira parte do projeto, relacionado a modelagem matemática, simulação numérica e análise da mistura entre os reagentes etanol e óleo, usados na transesterificação para produção de biodiesel.

1 Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais – Campus Pouso Alegre – gabrielbaioni@hotmail.com

2 Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Sul de Minas Gerais – Campus Pouso Alegre – joao.lameu@ifsuldeminas.edu.br



2. MATERIAL E MÉTODOS

Para realização do projeto de pesquisa, será utilizado um computador com processador i7 de 3GHz, 8GB de RAM, 1TB de disco rígido, adquirido em projeto de pesquisa anterior contemplado no Edital Interno: Nº 03/2015, de 03 de março de 2015. O pacote computacional aberto e livre OpenFOAM versão 4.0 foi usado nas simulações.

Casos de Estudo

A primeira etapa da modelagem matemática consistiu em definir um modelo fluidodinâmico para analisar a mistura entre etanol e o óleo (definido como óleo de girassol). O solver *twoLiquidMixingFoam* foi usado, e as condições iniciais foram obtidas pelo uso do solver básico *potentialFoam* (resolve a conservação de massa a partir de um campo de pressão, fornecendo um campo de velocidades inicial). O solver *twoLiquidMixingFoam* resolve basicamente as equações de conservação de massa total, de Navier-Stokes e da continuidade das espécies com base na fração volumétrica destas.

A geometria usada nesta análise consiste em um reator tubular de diâmetro uniforme igual a 5 cm de comprimento total de 20 m para permitir um longo tempo de residência dos fluidos. A alimentação dos fluidos é feita de modo separado por duas entradas conectadas em forma de T. Uma malha com aproximadamente 9000 volumes de controle usada, necessitando de um tempo de processamento de aproximadamente 12 h para simular 150 s (valor suficiente para a simulação chegar a um estado-estacionário). Três casos de estudo foram simulados, todos mantendo a razão molar etanol:óleo igual a 9, variando-se a vazão e consequentemente o tempo de residência de 97,5 s; 70,9 s e 51,6 s, respectivamente para os casos 1, 2 e 3. Estes valores foram definidos para posterior análise cinética e comparação com dados experimentais de Richard *et al.* (2013). A saída foi mantida aberta para atmosfera e na parede a condição de não-deslizamento para ambas as fases foi definida. As propriedades físico-químicas dos fluidos foram obtidas de Santana *et al.* (2017). Para avaliar o padrão de mistura e de escoamento, foram analisados os perfis radiais de velocidade axial e o índice de mistura etanol-óleo.

O índice de mistura, M , é uma medida da eficiência da mistura entre etanol e óleo, sendo calculada do desvio padrão da concentração de um dos componentes. Este varia entre 0 (segregação total) 1 (mistura perfeita).



$$M = 1 - \sqrt{\frac{\sigma^2}{\sigma_{\max}^2}} \quad \text{com} \quad \sigma = \sqrt{\frac{\sum (\alpha_n - \bar{\alpha})^2}{N}} \quad (1)$$

em que α é a fração volumétrica, σ é a variância da fração volumétrica, $\sigma_{\max}^2$ é a máxima variância em toda a faixa de intervalo de dados da seção transversal, α_n é a fração volumétrica no ponto de amostragem n , $\bar{\alpha}$ é a média da fração volumétrica na seção transversal e N é o número de pontos amostrais.

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

A Figura 1 mostra os resultados do perfil de velocidade obtido nas simulações comparados aos perfis analíticos da solução de Hagen-Poiseuille, considerando o escoamento laminar (consideração válida pela alta viscosidade do óleo e diâmetro relativamente pequeno do reator) e mistura ideal (propriedades ponderadas pela fração mássica de alimentação dos fluidos).

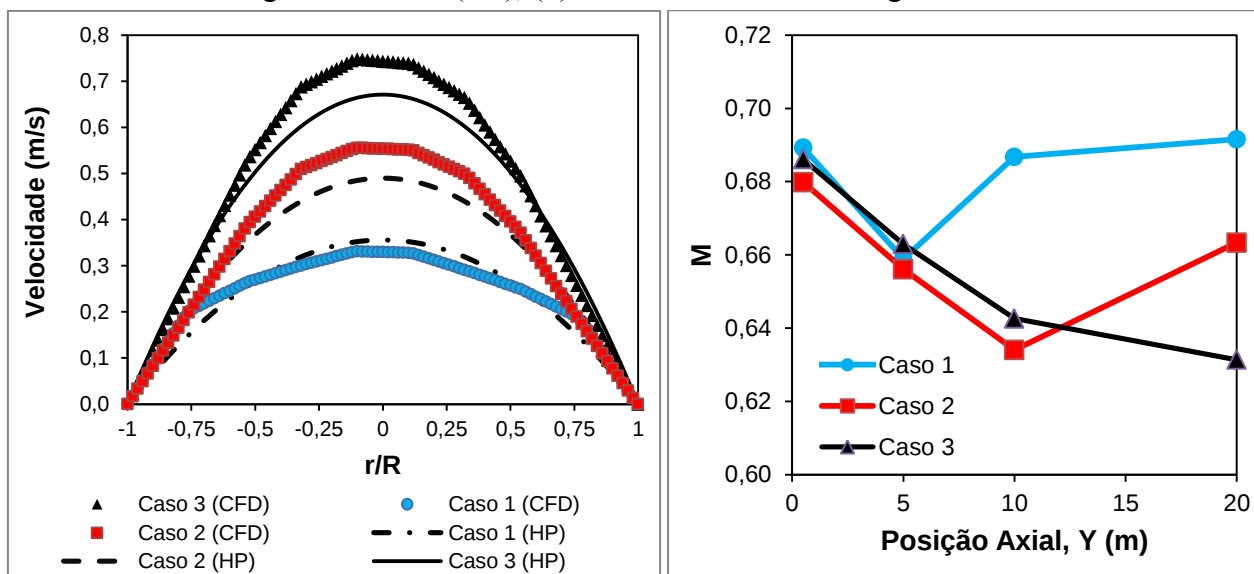
Devido ao comportamento laminar do fluido obtido durante a simulação, observado na Figura 1, pode-se perceber grande similaridade em relação ao perfil analítico (Hagen-Poiseuille), onde em menores velocidades o desvio também é menor. Utilizando os valores médios das velocidades obtidos nas simulações e as propriedades médias da mistura, os números de Reynolds obtidos para os casos 1, 2 e 3 foram respectivamente: 745, 1025 e 1405, caracterizando o regime laminar.

O caso 3 apresentou a maior segregação entre os fluidos, sendo justificado pelo menor tempo de residência destes no equipamento e pela ausência de macromisturação (aumento da transferência de massa entre os fluidos devido a turbulência), desde que o escoamento é laminar. Este efeito é menor para as vazões mais baixas, desde que o maior tempo de residência apresenta uma maior influência na mistura sobre a ausência de macromistura turbulenta, conforme observado pelos resultados do índice de mistura apresentados na Figura 2.

De acordo com a Figura 2, quanto maior o tempo de residência, maior será o índice de mistura ao longo do reator o que acarreta em uma maior conversão em biodiesel, mesmo para número de Reynolds mais baixos, desde que o caso 1 apresentou os maiores índices de mistura. Todos os casos apresentaram eficiência de mistura abaixo de 70% demonstrando o potencial de melhoria de *design* dos reatores. Para o caso 3, o aumento da vazão promoveu uma maior dificuldade de misturação, conforme já ressaltado.



Figura 1. (a) Comparativo de velocidade ao longo do raio obtido na simulação (CFD) e por Hagen-Poiseuille (HP); (b) Índice de mistura ao longo do reator.



4. CONCLUSÕES PARCIAIS

Testes de mistura iniciais entre etanol e óleo de girassol em um reator tubular convencional foram realizados. O modelo matemático escolhido e simulado representou as principais características do escoamento etanol-óleo, predizendo a segregação esperada para escoamentos laminares. A análise numérica demonstrou que o tempo de residência dos fluidos é um parâmetro fundamental, desde que um maior índice de mistura foi obtido para o caso de menor vazão dos fluidos, o que demonstra um maior efeito desta sobre a ausência de misturação turbulenta.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à FAPEMIG pelo apoio financeiro, ao NIPE do IFSULDEMINAS Campus Pouso Alegre e a PPPI do IFSULDEMINAS.

REFERÊNCIAS

- RICHARD, R.; THIEBAUD-ROUX, S.; PRAT, L. Modelling the kinetics of transesterification reaction of sunflower oil with ethanol in microreactors. **Chemical Engineering Science**, vol. 87, p. 258-269, 2013.
- SANTANA, H.S.; TORTOLA, D.S.; SILVA JR., J.L.; TARANTO, O.P. Biodiesel synthesis in micromixer with static elements. **Energy Conversion and Management**, vol. 141, p. 28-39, 2017.