

MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE REATORES CONTÍNUOS PARA SÍNTESE DE BIODIESEL: Parte II – Análise da Reação Química

Gabriel B. SILVA¹; João L. da SILVA Júnior²

RESUMO

O 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 segunda etapa foram realizadas simulações da reação ocorrendo em três geometrias distintas em diferentes situações. Desta forma, foi possível prever o transporte e as conversões dos reagentes, incluindo os efeitos de difusão e convecção das espécies, mecanismos estes que influenciam diretamente no desempenho do processo.

Palavras-chave:

Biodiesel; Modelagem Matemática; Fluidodinâmica Computacional; OpenFOAM.

1. INTRODUÇÃO

O biodiesel é produzido a partir da transesterificação de óleo vegetal (soja, milho, mamona, palma, entre outros) ou gordura animal (banha de porco) com álcool na presença do catalisador hidróxido de sódio. 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. Através da modelagem matemática é possível 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.

2. MODELAGEM MATEMÁTICA

A cinética de reação utilizada nesse estudo foi baseada no trabalho de Marjanovic *et al.* (2010). Eles estudaram a cinética da transesterificação do óleo de girassol com etanol usando hidróxido de sódio em diferentes condições reacionais. Eles partiram da reação global de

¹Bolsista FAPEMIG, IFSULDEMINAS – Campus Pouso Alegre. E-mail: gabrielbaioni@hotmail.com.

²Orientador, IFSULDEMINAS – Campus Pouso Alegre. E-mail: joao.lameu@ifsuldeminas.edu.br.

transesterificação de óleos vegetais com álcool na presença de catalisador:



Em que TG significa triglicerídeo, A é álcool, E é o biodiesel (éster etílico) e GL é a glicerina. Para ajustar a modelagem cinética, foram adotadas as seguintes hipóteses:

- A reação de transesterificação é uma reação irreversível de pseudo-segunda ordem no início do processo. Com excesso de etanol e uma baixa concentração dos produtos, considerou-se que as reações reversas eram negligenciáveis.
- Próximo ao equilíbrio, a cinética de reação é representada por reações diretas e reversas de segunda ordem.

Foi admitido o equilíbrio de reação na simulação do processo de transesterificação, assim a taxa de reação perto do equilíbrio foi:

$$(-r_{TG}) = -\frac{dC_{TG}}{dt} = k^{\rightarrow} C_{TG} C_A - k^{\leftarrow} C_E C_{GL} \quad (2)$$

Em que $(-r_{TG})$ é a velocidade de reação de triglicerídeo ($\text{mol m}^{-3} \text{s}^{-1}$), k^{\rightarrow} e k^{\leftarrow} são as constantes de taxa de reação para a reação direta e reversa ($\text{m}^3 \text{mol}^{-1} \text{s}^{-1}$), respectivamente, C_{TG} , C_A , C_E e C_{GL} são as concentrações molares de triglicerídeo, álcool, biodiesel e glicerol, respectivamente. Para obter o comportamento das propriedades dos fluidos do interior da geometria são utilizadas as equações da continuidade e Navier-Stokes:

$$\frac{d\rho}{dt} + \frac{d(\rho u)}{dx} + \frac{d(\rho v)}{dy} + \frac{d(\rho w)}{dz} = 0 \quad (3)$$

$$\rho \left[\frac{\partial V}{\partial t} + (V \cdot \nabla) V \right] = -\nabla P + \rho g + \mu \nabla^2 V \quad (4)$$

A fração de cada componente ao longo do reator foi obtida através do balanço de massa das espécies químicas:

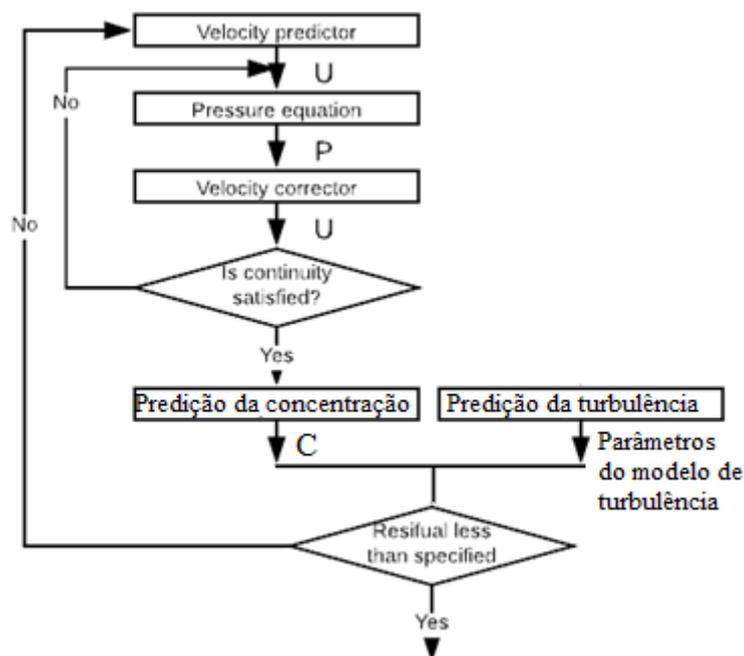
$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho u Y_i) = \rho D_i \nabla^2 Y_i + S_{Y_i} \quad (5)$$

Para utilizar o OpenFOAM foi necessário a implementação da equação 5 no solver PISOFOAM, já incluído do *software*.

Desta forma, além do comportamento fluidodinâmico, conseguimos obter também a fração dos componentes e a conversão dos reagentes. Em adição, um modelo de turbulência padrão (k- ϵ) complementa o sistema de equações de transporte do solver, para possibilidade de simulação de escoamento em condições de turbulência.

O fluxograma abaixo (Figura 1) explica o funcionamento do software, com a implementação feita para inclusão do balanço de massa das espécies.

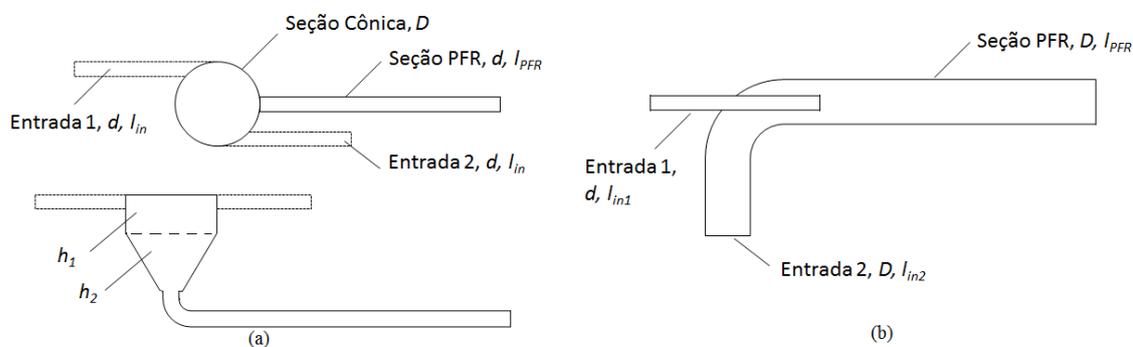
Figura 1: Fluxograma da simulação. Fonte: Adaptado de Giannopapa e Papadakis (2007).



3. CASOS DE ESTUDO

Utilizando as propriedades físico químicas dos reagentes etanol e óleo de girassol (Triglicerídeo, foram realizadas simulações em duas temperaturas (25 e 50 °C) e diferentes velocidades de entrada dos reagentes, variando assim o número de Reynolds entre 1500 e 6000. As simulações foram feitas em três diferentes geometrias, sendo Reator 0 (usado como referência), configuração padrão com tubos de entrada em T acoplados ao canal de reação (tubo PFR – *plug flow reactor*); Reator 1 com entrada tipo ciclone e Reator 2 com configuração tipo bomba injetora, conforme a Figura 2.

Figura 2: Geometrias propostas (a) Reator 1; (b) Reator 2. Fonte: Elaborada pelo autor.



4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

As conversões de óleo preditas e o desvio da queda de pressão em relação a geometria de referências (reator 1 – tubular à Reynolds = 6000), são apresentadas na Tabela 1.

Pela Tabela 1 foi observado que o Reator 1 apresentou conversões praticamente iguais em todas as condições, apresentando desempenho inferior ao reator tubular padrão. O Reator 2 apresentou bom desempenho, aumentando a conversão de óleo para 67%, com queda de pressão menor que do reator referência. No entanto, não foi possível simular o desempenho deste Reator 2 na condição de Reynolds = 6000 devido a dificuldade de convergência das simulações.

Tabela 1: Resultados das simulações. Fonte: elaborada pelo autor.

	Reynolds 1500			Reynolds 6000		
	Reator 1 (25°C)	Reator 1 (50°C)	Reator 2 (50°C)	Reator 1 (25°C)	Reator 1 (50°C)	Reator 0 (50 °C)
Conversão de TG (%)	50,92	51,17	67,03	49,94	49,84	55,61
Delta P (%)	-18,50	92,84	-47,88	-3,11	34,53	(referência)

5. CONCLUSÕES

Tendo em vista as médias conversões apresentadas, chegando ao máximo de 67% no reator proposto, ficou evidente que nas condições analisadas os reatores necessitam de otimizações adicionais, desde que a produção de biodiesel em reatores contínuos apresenta grande dificuldade de mistura das espécies reagentes devido a natureza físico-química destas. Para as condições analisadas seria necessário um maior comprimento de reator ou obstáculos internos (misturadores estáticos) que pudessem aumentar o índice de mistura e assim possibilitando uma maior conversão em menores volumes. No entanto, vale ressaltar que o modelo matemático proposto conseguiu prever o transporte e as conversões dos reagentes, incluindo os efeitos de difusão e convecção das espécies químicas, mecanismos estes que influenciam diretamente no desempenho do processo.

AGRADECIMENTOS

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Os autores agradecem também à FAPEMIG pelo apoio financeiro ao projeto (PIBIC/FAPEMIG Edital 44/2016).

REFERÊNCIAS

- GIANNOPAPA, G.C. e G. PAPADAKIS. Indicative Results and Progress on the Development of the Unified Single Solution Method for Fluid-Structure Interaction Problems. 10.1115/PVP2007-26420, 2007.
- MARJANOVIC, A.V., STAMENKOVIĆ, O.S., TODOROVIC, Z.B., VELJKOVIĆ, B.V. Kinetics of the base-catalyzed sunflower oil ethanolysis. **Fuel**, v. 89, p. 665-671, 2010.