



**XXXIII SIC** SALÃO INICIAÇÃO CIENTÍFICA

<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2021: SIC - XXXIII SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2021
<b>Local</b>	Virtual
<b>Título</b>	Estudo Cinético de Reações Modelo para a Produção de Biodiesel
<b>Autor</b>	KARINE EISENHUT IVANOVICK
<b>Orientador</b>	ELISA BARBOSA COUTINHO

# Estudo Cinético de Modelo para a Produção de Biodiesel



Porto Alegre, Setembro

01 | INTRODUÇÃO

PHP

C++

JS

03 | METODOLOGIA

05 | CONSIDERAÇÕES



### Reação de Transesterificação

- Utiliza Etanol
- 10% do peso do produto final é o devido ao subproduto glicerol





# Produção de Biodiesel com baixo teor de glicerol

Karine Eisenhut Ivanovick

Prof.<sup>a</sup> Orientadora: Elisa Barbosa Coutinho  
Instituto de química -UFRGS

Porto Alegre, Setembro de 2020.



## Biodiesel no Brasil



## 01 | INTRODUÇÃO



Análise de Conjuntura dos Biocombustíveis – Ano 2020

Brasil continua a ser o maior consumidor de B20 após Indonésia e Estados Unidos.

Os Estados Unidos continuam a produzir o maior percentual de B20.

A produção de B20 nos Estados Unidos estagnada de 46 bilhões em 2020.

## 01 | INTRODUÇÃO

### Porque estudar a cinética química?

- Otimização das condições operacionais;
- Aumento da escala de produção a partir da escala de bancada;
- Previsão da influência de cada variável do processo.



## 02 | OBJETIVOS



**01**

---

**Dados**

Buscar na literatura



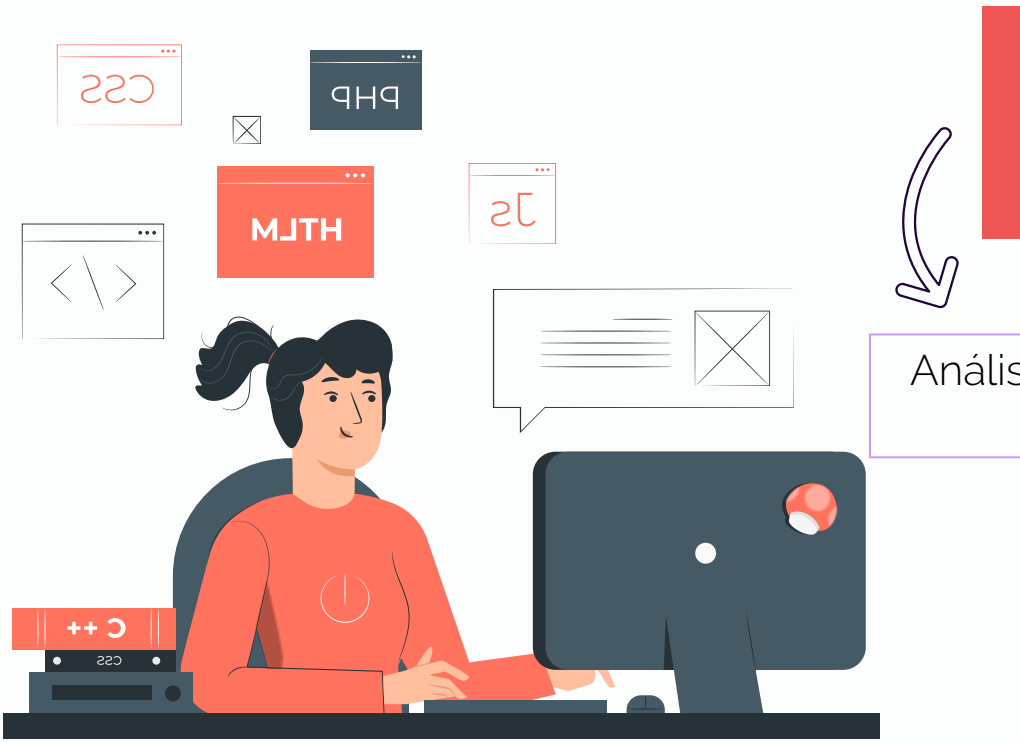
**02**

---

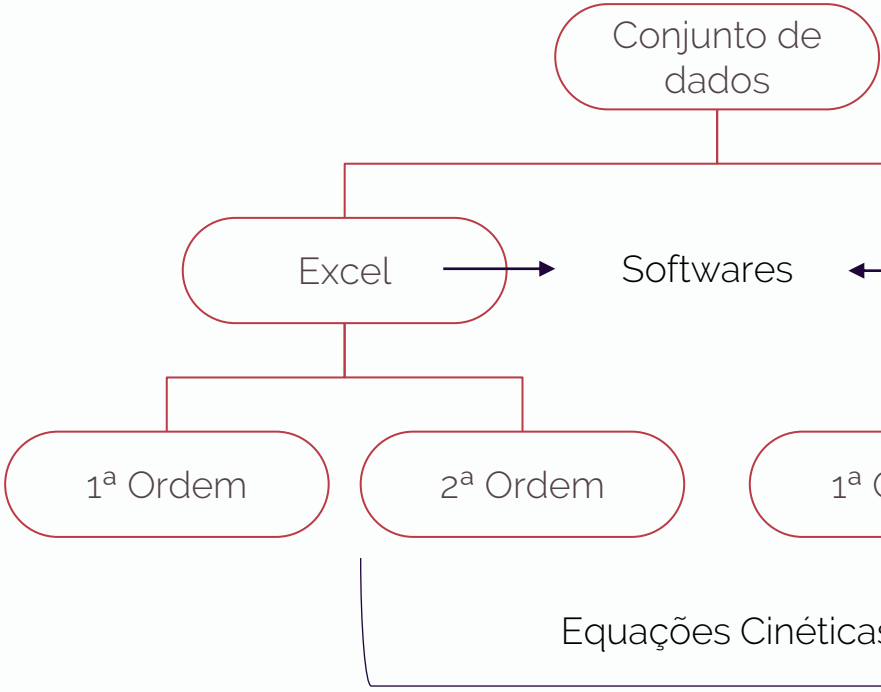
**Softwares**

Excel e Scilab

## 02 | OBJETIVOS



# 03 | METODOLOGIA



## Equações Cinéticas

**Tabela 1:** Equações cinéticas para reações de  
Reatores em batela

Ajuste Não Linear	Equação Integrada
1ª Ordem	$C_A = C_{A0}e^{-kt}$
2ª Ordem	$C_A = \frac{C_{A0}}{(1 + C_{A0}kt)}$

Ajustes 1 e 2 ordem - Excel

Arquivo | Página Inicial | Inserir | Layout da Página | Fórmulas | **Dados** | Revisão | Exibir | Ajuda

Obter Dados: De Text/CSV, De Web, De Tabela/Intervalo

Fontes Recentes: Conexões Existentes

Consultas e Conexões: Atualizar Tudo, Propriedades, Editar Links

Classificar e Filtrar: Classificar, Filtro, Limpar, Reaplicar, Avançado

Obter e Transformar Dados | Consultas e Conexões | Classificar e Filtrar

B26: =SOMA(B25:125)

	A	B	C	D	E	F	G	H
1								
2		<b>Primeiro Conjunto de dados</b>						
3								
4	[A] (mmol/dm <sup>3</sup> )	68	50,2	40,3	33,1	28,4	22,3	18,7
5	t (min)	0	40	80	120	160	240	300
6								
7		<b>Ajuste linear de PRIMEIRA ORDEM</b>						
8								
9		Cálculo do CA $\ln(Ca)=\ln(Ca_0)-kt$						
10								
11	ln(CA)	4,219507705	3,91602	3,69635	3,49953	3,346389145	3,104586678	2,928523524
12								
13	Inclinação		-0,00356		k	CAO		
14	intercepção		4,02797		0,00356	56,14654157		
15	exp da inter = CAO		56,1465					
16								
17								
18		Cálculo do CA modelo Linear $CA_{mod} = CAO * \exp(-k*t)$						
19								
20	CA_modLinear	56,14654157	48,6987	42,2387	36,6357	31,77597038	23,9048888	19,30979473
21								
22		Cálculo do CA modelo <b>NÃO</b> Linear $CA_{mod} \text{ Não Linear} = CAO * e^{-kt}$						
23								
24	CA_modNLinear	62,91085764	52,4084	43,6592	36,3706	30,29880583	21,02691044	15,9877714
25	ERRO (Ca.exp-Ca)^2	25,89936992	4,87686	11,2841	10,6969	3,605463575	1,62075702	7,356184006

Pronto

Primeiro Conj. Dados | 2º Dados Levine pg 528 | 3º Dados Atkins (11th edition, | 4º dados Levr ...

```

AjusteNL 1ª Ordem - 1ª Conj. Dados.sce (C:\Users\karin\Google Drive\Biodiesel\Programação\Programas - scilab\AjusteNL 1ª Ordem - 1ª Conj. D
Arquivo Editar Formatar Opções Janela Executar ?
AjusteNL 1ª Ordem - 1ª Conj. Dados.sce (C:\Users\karin\Google Drive\Biodiesel\Programação\Programas - scilab\AjusteNL 1ª Ordem - 1ª Conj. Dados.sce) - SciNotes
AjusteNL 1ª Ordem - 1ª Conj. Dados.sce
1 //Ajuste não linear de primeira ordem
2 //CA= CA0*exp^(-k*t)
3
4 function Fobj=MQDD(parametros)
5 .....
6 //Entrada de Dados
7 ... texp = [0 40 80 120 160 240 300 420]; //tempo
8 ... yexp = [68 50.2 40.3 33.1 28.4 22.3 18.7 14.5]; //concentração
9 ... NE=8; // número de experimentos
10 .....
11 //Gráfico
12 plot(texp',yexp','o');
13 xtitle('Dados Experimentais e Ajustes','tempo (min)','Concentração (mmol/dm3)');
14 .....
15 ... Fobj = 0;
16 //....CA0 = PARAMETROS(1);
17 //....k = PARAMETROS(2);
18 .....
19 ..... for i = 1:NE;
20 ..... CA = parametros(1)*exp(-parametros(2)*texp(i)); //1ª ordem
21 ..... //CA = parametros(1)/(1 + parametros(1)*parametros(2)*texp(i)); //2ª ordem
22 ..... erro = (CA-yexp(i))^2;
23 ..... Fobj = Fobj + erro;
24 ..... end
25 //.....disp(Fobj);
26
27 endfunction
28
29

```

```

AjusteNL 1ª Ordem INTEGRADOR - 1ª Conj. Dados.sce (C:\Users\karin\Google Drive\Biodiesel\Programação\Programas - scilab\AjusteNL 1ª Ordem
Arquivo Editar Formatar Opções Janela Executar ?
AjusteNL 1ª Ordem INTEGRADOR - 1ª Conj. Dados.sce (C:\Users\karin\Google Drive\Biodiesel\Programação\Programas - scilab\AjusteNL 1ª Ordem INTEGRADOR - 1
AjusteNL 1ª Ordem INTEGRADOR - 1ª Conj. Dados.sce
1  ///Ajuste não linear de primeira ordem
2  /// CA= CA0*exp^(-k*t)
3
4  function Fobj=MQDD(parametros)
5  ... global k NE
6  ...
7  //Entrada de Dados
8  ... texp = [0 40 80 120 160 240 300 420]; //tempo
9  ... yexp = [68 50.2 40.3 33.1 28.4 22.3 18.7 14.5]; //concentração
10 ... NE=8; // número de experimentos
11 ...
12 //Gráfico
13 plot(texp',yexp','o');
14 xtitle('Dados Experimentais e Ajuste','tempo (min)','Concentração (mmol/dm3)');
15 ... // Parâmetros
16 ... CA0 = parametros(1);
17 ... k = parametros(2);
18 ...
19 ... Fobj = (CA0 - yexp(1))^2; //iniciar o valor da Fobj contando o ponto inicial que
20 ...
21 ... for i = 2:NE;
22 ... tspan = texp(i-1):1:texp(i); //intervalo de integração
23 ... CA = ode(CA0,texp(i-1),tspan,Modelo) //chama o integrador para resolver
24 ... [a b] = size(CA); //último valor do vetor CA da integração
25 ... erro = (CA(a,b)-yexp(i))^2;
26 ... Fobj = Fobj + erro;
27 ... CA0 = CA(a,b);
28 ... end

```

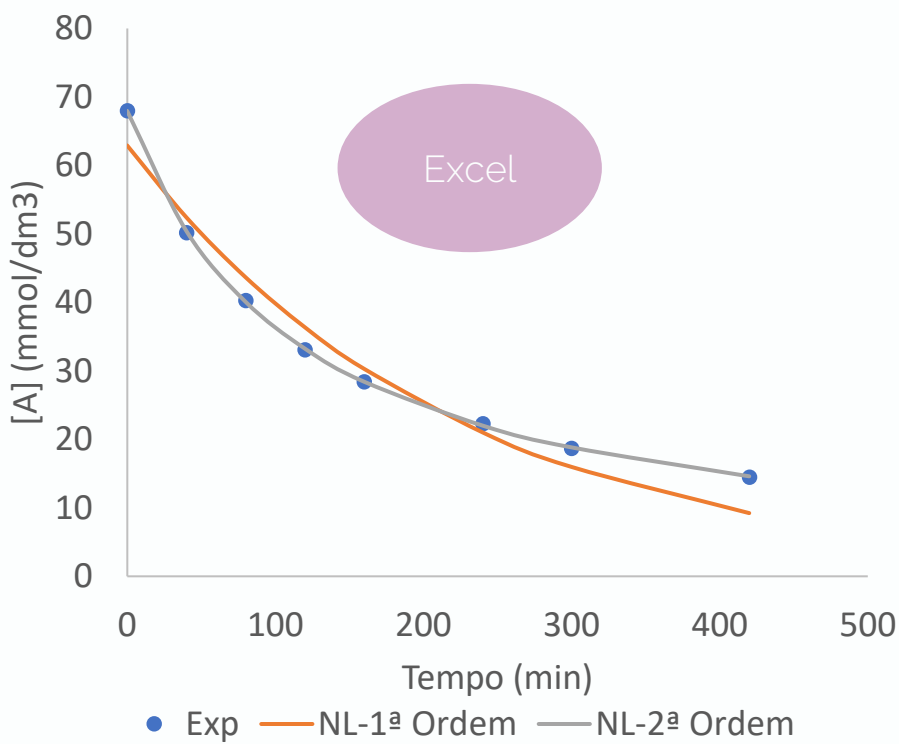
### Primeiro conjunto de dados

Tabela 1: Valores de concentração e

[A] (mmol/dm <sup>3</sup> )	68,0	50,2	40,3	33,0
t (min)	0	40	80	120

Fonte: Ta



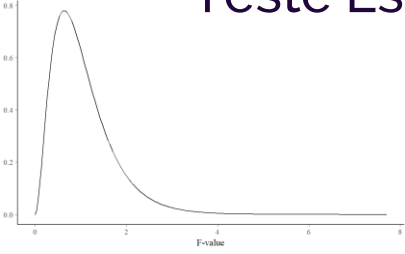


Concentração (mmol/dm<sup>3</sup>)

Tabela 2: Valores das constantes e condições

Modelo	Ajuste Não Linear 1ª Ordem	
	Excel	Scilab
Software	Excel	Scilab
k (min/mol.L)	4,566E-03	4,566E-03
$C_{A0}$ (mol/L)	62,9108	62,9108

### Teste Estatístico de Fisher



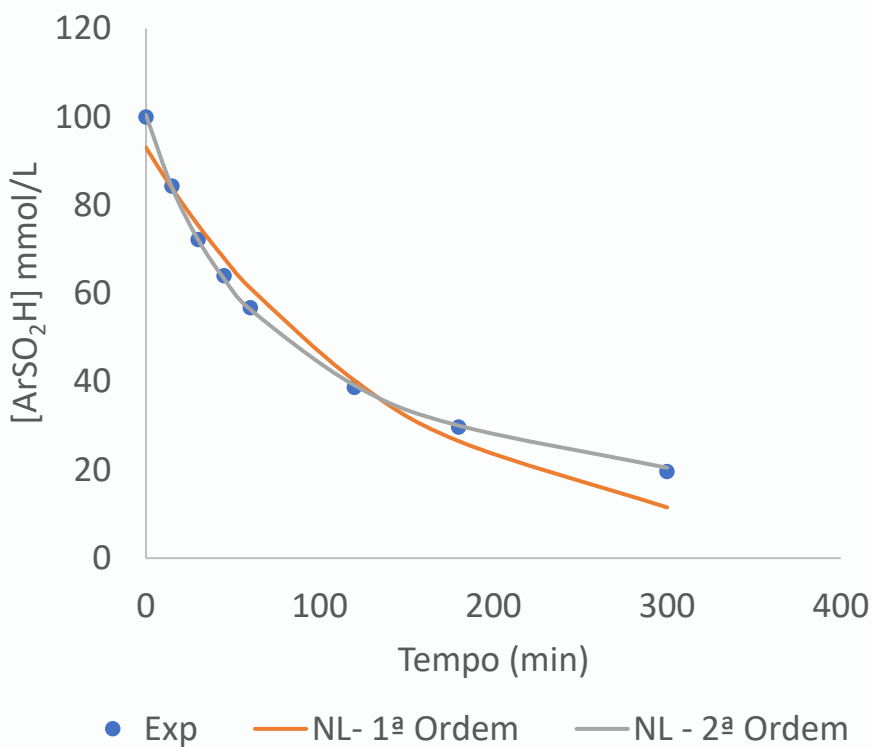
$$F_{min}(0,025; GL1; GL2) < \frac{\sigma^2_{m1}}{\sigma^2_{m2}} < F_{\alpha}$$

$$GL = (NE - NP)$$

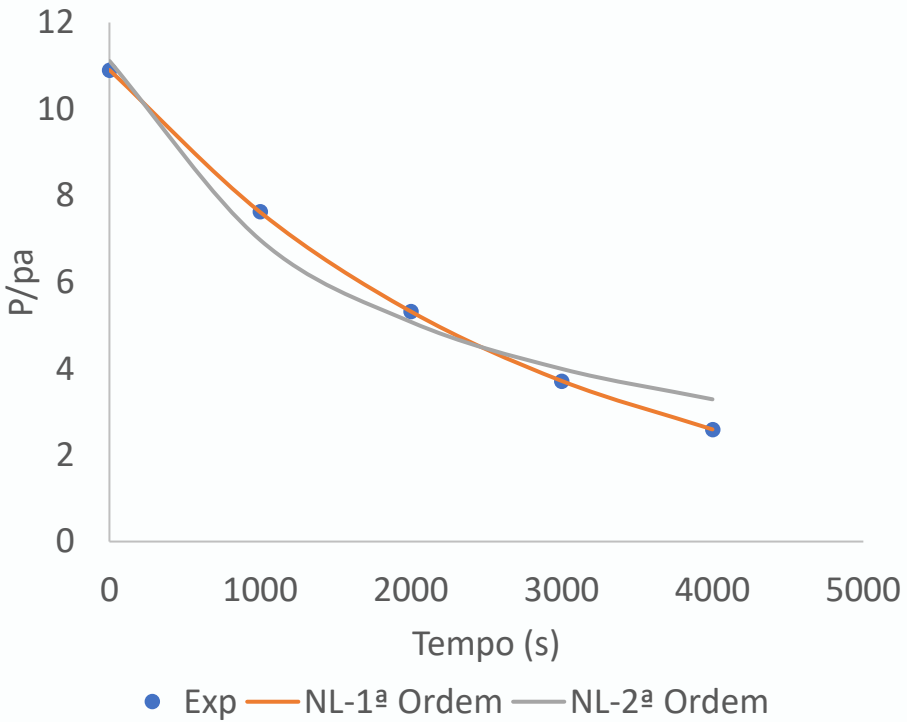
Tabela 3: Dados para a função

Modelo	Função Objetivo	
Ajuste Não Linear 1ª Ordem	92,9756	
Ajuste Não Linear 2ª Ordem	0,2341	

$$F_{min}(0,1718) < \frac{15,4959}{0,0390} <$$

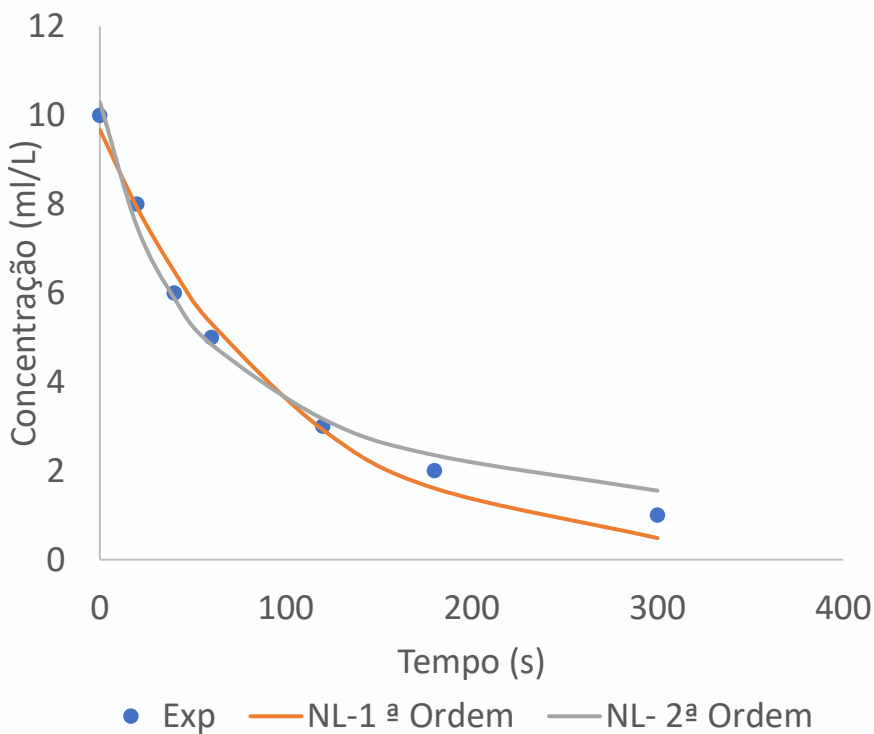


Modelo
Ajuste Não Linear - 1ª Ordem
Ajuste Não Linear - 2ª Ordem



Mo
Ajuste N 1ª O
Ajuste N 2ª O

ATKINS, P. W.; DE PAULA, J.; KEELER, J. *Atkins' Physical chemistry*. Eleventh edition. New York, NY: Oxford University Press, 2018.



Modelo
Ajuste Não Linear - 1ª Ordem
Ajuste Não Linear - 2ª Ordem

	n=0,5	n=1	n=1,5
$C_{A0}$	58,7029	62,9108	66,0080
k	2,416E-02	4,566 E-03	7,877E-04
$F_{obj}$	225,1639	92,9756	21,1199
$\sigma^2$	37,5273	15,4959	3,5199

Maior flexibilidade do modelo, possível  
ordem cinética da reação



## 05 | CONSIDERAÇÕES FINAIS

- Não há uma diferença nos ajustes obtidos com os métodos;
- Utilização da forma diferencial;
- Avanço na utilização e construção dessas ferramentas:
  - Métodos numéricos para a resolução de equações;
  - Permitindo analisar as reações químicas.



# Karine Eisenhut

karineeisenhut@g

Agradeciment

