

Análise Paramétrica de Processo da Produção do Biodiesel a partir do Etanol por Simulação Computacional**Parametric Analysis of Biodiesel Production Process from Ethanol by Computer Simulation**

DOI:10.34117/bjdv6n3-345

Recebimento dos originais: 29/02/2020

Aceitação para publicação: 23/03/2020

Luiz Antônio de Oliveira Chaves

Doutorando em Engenharia Química pela Universidade Estadual do Rio de Janeiro
Universidade Federal Fluminense
E-mail: luizchaves@gmail.com

Lucas Neves de Almeida

Graduando em Engenharia de Produção pela Universidade Federal Fluminense
Universidade Federal Fluminense
E-mail: neveslucas07@hotmail.com

Mateus Carvalho Amaral

Doutor em Engenharia e Ciência dos Materiais pela Universidade Estadual Norte Fluminense
Universidade Federal Fluminense
E-mail: mateus_amaral@id.uff.br

Luis Gustavo Zelaya Cruz

Doutor em Engenharia de Transportes pela Universidade Federal do Rio de Janeiro
Universidade Federal Fluminense
E-mail: lgustavozelaya@gmail.com

João Carlos Ferreira Almeida de Sá

Graduando em Engenharia de Petróleo pela Universidade Estácio de Sá
Universidade Estácio de Sá
E-mail: neliano2010sanilsom@gmail.com

RESUMO

A crescente busca por sistemas de geração de energia com baixo impacto ambiental, substituindo insumos derivados de hidrocarbonetos, implica nas pesquisas de novas fontes energéticas usando recursos biodegradáveis. Desta forma, os biocombustíveis são apresentados como uma proposta viável para atender aos requisitos econômicos e ambientais. No entanto, é necessário avaliar as tecnologias e a capacidade produtiva de recursos naturais, além da área geográfica brasileira para suprir a demanda. O presente artigo tensiona a substituição do metanol, derivado de hidrocarbonetos, no processo de fabricação do biodiesel pelo biocombustível renovável e com larga escala de produção no regime brasileiro, o etanol. O método empregado é a análise da eficácia do processo de obtenção do biodiesel por meio da modelagem da reação de transesterificação do triglicerídeo e do etanol desenvolvida por comparação de simulações computacionais em dois softwares, para estimar a viabilidade técnica e ambiental. Os resultados alcançados

foram satisfatórios demonstrando eficácia no método proposto, apresentando um aumento na produção do biodiesel pela configuração adotada em ambas simulações efetuadas.

Palavras-chave: Transesterificação, Viabilidade ambiental, Modelagem de processo, Biocombustível, Óleo vegetal.

ABSTRACT

The growing search for energy generation systems with low environmental impact, replacing inputs derived from hydrocarbons, implies the search for new energy sources using biodegradable resources. In this way, biofuels are presented as a viable proposal to meet economic and environmental requirements. However, it is necessary to assess the technologies and the productive capacity of natural resources, in addition to the Brazilian geographic area to supply the demand. This article tends to replace the substitution of methanol, derived from hydrocarbons, in the biodiesel manufacturing process by renewable biofuel with large scale production in the Brazilian regime, ethanol. The method employed is the analysis of the efficiency of the process of obtaining biodiesel through the modeling of the triglyceride and ethanol transesterification reaction developed by comparing computer simulations in two softwares, to estimate the technical and environmental feasibility. The results achieved were satisfactory, demonstrating effectiveness in the proposed method, showing an increase in biodiesel production due to the configuration adopted in both simulations.

Keywords: Transesterification, Environmental feasibility, Process modeling, Biofuel, Vegetable oil.

1 INTRODUÇÃO

A demanda de energia se tornou ao longo do decorrer dos anos uma necessidade humana e ambiental principalmente para a geração de fontes energéticas limpas, como a utilização do biodiesel. Esse insumo tende a ser a opção mais viável, tendo em vista que o Brasil se encontra em uma posição destacada em relação ao resto do mundo; atuando em cogeração com o etanol, ambos constituem em biocombustíveis com considerável potencial de viabilidade econômica e ambiental (KOHLHEPP, 2010; MEHER et al, 2006; VERMEERSCH, 2001). Ao considerar os parâmetros de energia gerada, o etanol obtém um ganho de energia produzida decorrente a seu investimento de 25%, e o biodiesel 93% (HILL et al, 2006). Visando atenuar desgastes ambientais pela utilização de combustíveis e compostos derivados de hidrocarbonetos, as fontes de energias renováveis surgem como principal ativo na matriz energética (BUENO et al, 2010; SRIVASTAVA e PRASAD, 2000; SHIMADA et al, 2002).

O atual artigo tem por interesse demonstrar a eficácia de produção de energia e efeitos ambientais positivos pelo processo de produção do biodiesel utilizando o etanol como catalisador na reação de transesterificação por simulação computacional. A

proposta é a substituição do metanol no processo, tornando-se assim uma geração de energia renovável e promover a troca dos combustíveis derivados de hidrocarbonetos que são poluentes.

A produção de biocombustíveis consiste primeiramente na utilização do etanol (etanol anidro) com o catalisador (KOH) para formação da mistura. Nessas condições sob catalisador alcalino e álcool o nível de conversão é satisfatório da ordem de cerca de 90% (RASHID e ANWAR, 2008; VOGEL et al, 2016; AGARWAL et al, 2012; STAMENKOVIC et al, 2015). O mecanismo de catálise na produção do biodiesel, após a mistura, constitui a reação de transesterificação, obtendo por fim, o biodiesel (RASHID et al, 2015; CERIANI et al, 2011). Entretanto, ao utilizar-se o etanol anidro na combinação com a água a formação do azeótropo pode chegar a 96% w/w (CLUGSTON e FLEMMING, 2000; ZHAO et al, 2017). A estratégia para evitar perdas corresponde na utilização de uma peneira molecular para atingir melhores resultados da separação e recuperação dos produtos (PATIL, 2016; MARNOTO et al, 2019).

2 ANÁLISE DA PRODUÇÃO NACIONAL DE BIOCOMBUSTÍVEL

A produção de combustíveis de menor impacto ambiental com maior sustentabilidade apresenta cenários de impacto no Brasil. Conforme os dados estatísticos disponibilizados pela ANP (2020), é perceptível o progresso da produção do etanol anidro e hidratado no território brasileiro (Tabela 1), que apresenta um acréscimo de 48,6% em uma variação de 7 (sete) anos, mantendo um elevado nível de produção.

Tabela 1. Produção de etanol anidro e hidratado

Ano	Produção total no ano (10 ³ m ³)
2012	23.758.673
2013	27.527.832
2014	28.215.108
2015	29.999.873
2016	28.694.247
2017	28.593.143
2018	33.014.650
2019	35.306.704

Fonte: Adaptado de ANP em Dados estatísticos da Produção de biocombustíveis (2020)

2.1 ANÁLISE DA PRODUÇÃO NACIONAL DE BIODIESEL

Na análise da produção de biodiesel (Tabela 2) também é possível visualizar o considerável avanço da produção de biocombustível no país no decorrer de 7 (sete) anos,

pois apresenta um aumento de 117,2%, o que reforça sua fabricação como uma alternativa de potencial estratégico.

Tabela 2. Produção de biodiesel puro (B100)

Ano	Produção total no ano (m ³)
2012	2.717.483
2013	2.917.488
2014	3.422.210
2015	3.937.269
2016	3.801.339
2017	4.291.294
2018	5.350.036
2019	5.901.104

Fonte: Adaptado de ANP em Dados estatísticos da Produção de biocombustíveis (2020)

Deste modo, o Brasil constitui uma opção viável com boa perspectiva de estudos exploratórios para o aproveitamento no segmento de processos de produção (SILVA et al, 2016).

3 MATERIAL E MÉTODOS

A metodologia empregada consiste na modelagem e simulação da planta de processo usando o software CHEMCAD (*Chemical Engineering Simulation Advanced*) e o software PRO/II (*Process Engineering*), para a construção completa dos processos.

O método empregado inclui o conjunto de simulações computacionais da reação em regime estacionário com base em dados de literatura para investigação e comparação de resultados para uma única planta modelo.

O processo foi delineado com os parâmetros obtidos por Rodrigues e Assis (2014), substituindo o metanol no sistema pelo etanol. Nessa decisão proporciona possíveis pesquisas para a inclusão do catalisador KOH.

3.1 PARÂMETROS DA REAÇÃO

Os insumos da reação na planta de processo são o óleo vegetal e o etanol. O óleo de canola (trioleína) foi utilizado como uma das matérias primas por ter um elevado teor de óleo nos grãos e também apresentar propriedades satisfatórias (Tabela 3) para medir o rendimento e possíveis alternativas de configurações de operação.

Tabela 3. Propriedades do óleo vegetal

Óleo utilizado	Canola (Trioleína)
Índice de Acidez (KOH/g)	0,11 ± 0,02
Umidade (%)	0,04 ± 0,01
Ponto de Fulgor (°C)	233 ± 5
Índice de Saponificação	193
Matéria Insaponificável	0,7 ± 0,02
g/100g	
Índice de Refração a 40°C	1,4670 ± 0
Densidade relativa a 20°C	0,917 ± 0,04

Fonte: TOMM et al, 2009; FUENTES, 2011.

Ao considerar a metanólise ou etanólise de óleos vegetais é relevante avaliar os parâmetros relativos à taxa de reação e a conversão que incluem as variações das concentrações de etanol e óleo vegetal. Estas são conhecidas no tempo zero, definida pelo perfil da curva da concentração do produto, taxa de reação inicial no tempo, conforme a equação:

$$g / L / \text{min} = \left[\frac{\partial C}{\partial t} \right]_{t=0}$$

Onde C é a concentração de éster metílico/etílico produzido e t é o tempo de reação (PIZARRO e PARK, 2003; MAEDA et al, 2017).

3.2 REAÇÃO DE TRANSESTERIFICAÇÃO

O biodiesel por ser um éster alquílico de ácido graxo, contém uma cadeia original desse componente em um dos lados e um hidrocarboneto chamado alceno no outro, constituindo assim o produto de interesse na reação de transesterificação. Normalmente, a forma do alceno é especificada, como éster metílico ou éster etílico (ZONG et al, 2010).

A reação de transesterificação de triglicérides foi desenvolvida para produzir o biodiesel por meio do processo de catálise envolvendo a fonte de óleo vegetal (trioleína) e um álcool em excesso para produzir ésteres alquílicos de ácidos graxos (biodiesel) e glicerol (Figura 1) (KROUMOV et al, 2007; LI et al, 2012; AISYAH et al, 2012; MUJELI et al, 2016). A avaliação dos efeitos do catalisador no desempenho da planta de processo, induz a necessidade de implantar o KOH para promover a reação o que ocasiona um aceleração considerável (SCHUCHARDT et al, 1997; KANSEDO et al, 2009; YATISH et al, 2016).

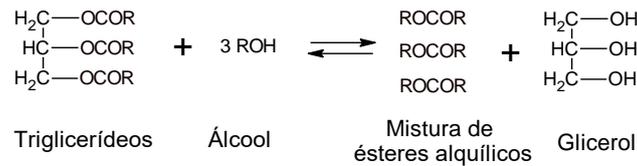


Figura 1. Reação de transesterificação

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

As simulações computacionais foram realizadas para a planta de produção de biodiesel construída em dois diferentes sistemas que constituíram os softwares CHEMCAD (Figura 2) e PRO/II (Figura 3) com um conjunto de equipamentos que incluem reator de Gibbs, colunas de separação e misturadores.

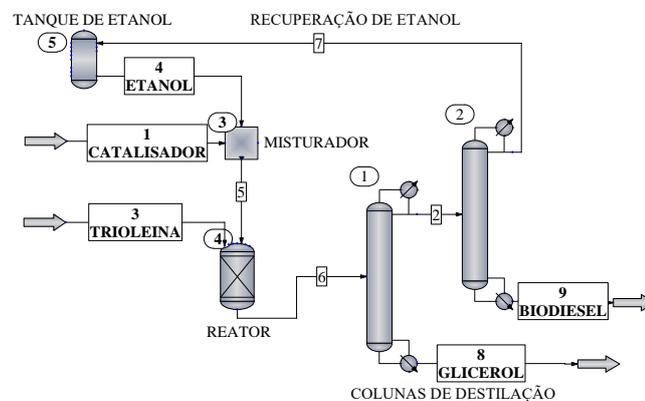


Figura 2. Processo de produção do biodiesel construído no software CHEMCAD

As medições experimentais conduzidas incluíram uma carga de 1200 mol/h de trioleína (TG), além de um álcool (ROH, Etanol) operando a uma razão molar de 1:3 (TG:ROH) correspondendo a uma vazão de 3600 mol/h. A planta também foi simulada nos dois sistemas com as idênticas condições operacionais de alimentação: trioleína a 30°C e 101.325 kPa e etanol a 25°C e 101.325 kPa.

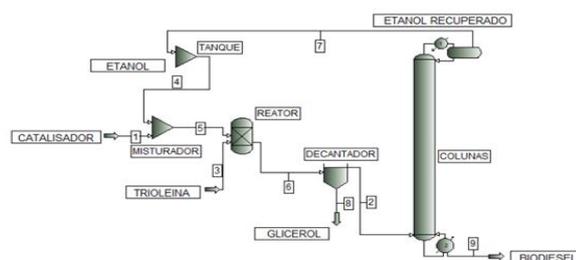


Figura 3. Processo de produção do biodiesel construído no sistema PRO/II

A análise da eficiência da reação com a substituição do metanol pelo etanol na planta de processo demonstrou eficácia e concordância de resultados com as referências empregadas no estudo do caso. Os resultados das simulações obtidas pelos sistemas computacionais CHEMCAD (Tabela 4) e PRO/II (Tabela 5) também apresentaram consistência em relação a produção de biodiesel (Corrente 9) com completa reação da transesterificação e a separação com reciclo do etanol.

Tabela 4. Resultado obtidos pelo software CHEMCAD

Corrente	Pressão (kPa)	Temperatura (°C)	Fluxo (mol/h)
1	-----	-----	-----
2	101.325	117.96	4681.3955
3	101.325	30	1200
4	101.325	25	3600
5	101.325	25	3600
6	101.325	15.72	4800
7	101.325	75.79	3421.9893
8	101.325	280.29	118.606
9	101.325	348.57	1259.3932

Tabela 5. Resultados obtidos pelo software PRO/II

Corrente	Pressão (kPa)	Temperatura (°C)	Fluxo (mol/h)
1	-----	-----	-----
2	101.325	78.31	4681.3955
3	101.325	30	1200
4	101.325	25	3600
5	101.325	25	3600
6	101.325	14.50	4676.9220
7	101.325	78.31	3445.0
8	101.325	272.15	93.1219
9	101.325	343.91	1138.8001

4 CONCLUSÕES

O potencial de viabilidade da produção de biodiesel foi demonstrado por meio da reação de transesterificação do triglicerídeo (trioleína) e etanol para geração de energia de forma sustentável. Os resultados obtidos em uma unidade modelo foram satisfatórios e equivalentes na investigação da taxa de reação para 2 diferentes sistemas computacionais com a produção de 1199.358 mol/h de biodiesel pelo software CHEMCAD e 1138.7 mol/h pelo PRO/II. Um erro relativo de 5.3% foi gerado com base

nas simulações efetuadas e demonstram um aumento na produção em relação à planta de processo modelo. A inclusão de um reagente renovável (etanol) confirma o potencial de uso e viabilidade para futuros estudos quantitativos de análise econômica e ambiental para desenvolver testes de simulação de novos parâmetros. O plano de trabalho pressupõe futuras pesquisas com a utilização novas configurações de processo em planta de maior complexidade para análise de rendimento.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Coordenação de Aperfeiçoamento Pessoal de Nível Superior (CAPES), a Universidade Estácio de Sá (UNESA) e a Universidade Federal Fluminense (UFF) pelo material cedido e apoio técnico de pesquisa no atual estágio de estudo.

REFERÊNCIAS

- J. HILL, E. NELSON, D. TILMAN, S. POLASKY, D. TIFFANY - Environmental, economic, and energetic costs and benefits of biodiesel and ethanol biofuels. Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America, Vol. (103), No. (30), pp. (11206-11210), **2006**.
- U. RASHID, F. ANWAR, R. YUNUS, A. AL-MUHTASEB - Transesterification for Biodiesel Production Using Thespesia Populnea Seed Oil: An Optimization Study. International Journal of Green Energy, Vol. (12), No. (5), pp. (479-484), **2015**.
- M. CLUGSTON, R. FLEMMING - Advanced Chemistry. pp. (556-568), **2000**.
- O. BUENO, M. ESPERANCINI, A. PIMENTEL, E. SIMON - Caracterização de Potencial de Produção de Oleaginosas em Assentamos Rurais Para Fins de Produção de Biocombustíveis. Inclusão Social e Energia, Embrapa Algodão, pp. (353-357), **2010**.
- N. PATIL - Molecular Sieve Dehydration: a major development in the field of ethanol dehydration to produce fuel ethanol. Asian Journal of Science and Technology, Vol. (7), pp. (2897-2902), **2016**.
- G. KOHLHEPP - Análise da situação da produção de etanol e biodiesel no Brasil. Estudos Avançados, Vol. (24), No. (68), **2010**.

- L. PIZARRO, E. PARK - Lipase-catalyzed production of biodiesel fuel from vegetable oils contained in waste activated bleaching earth. *Process Biochemistry*, Vol. (38), No. (7), pp. (1077-1082), **2003**.
- R. CERIANI, C. GONÇALVES, J. COUTINHO - Prediction of Viscosities of Fatty Compounds and Biodiesel by Group Contribution. *Energy Fuels*, Vol. (25), No. (8), pp. (3712-3717), **2011**.
- U. SCHUCHARDT, R. SERCHELI, R. VARGAS – Transesterification of vegetable Oils: A review. *Journal of the Brazilian Chemical Society*, Vol. (9), No. (3), **1997**.
- L. ZONG, S. RAMANATHAN, C. CHEN - Predicting Thermophysical Properties of Mono- and Diglycerides with the Chemical Constituent Fragment Approach. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. Vol. (49), No. (11), pp. (5479-5484), **2010**.
- A. KROUMOV, A. MÓDENES, B. WENZEL - Desenvolvimento de um modelo da cinética enzimática da transesterificação de óleos vegetais para produção de biodiesel. *Acta Scientiarum: Technology*, Vol. (29), No. (1), **2007**.
- U. RASHID, F. ANWAR - Production of biodiesel through optimized alkaline-catalyzed transesterification of rapeseed oil. *Fuel*, Vol. (87), No. (3), pp. (265-273), **2008**.
- A. SRIVASTAVA, R. PRASAD - Triglycerides-based Diesel Fuels. *Renewable Sustainable Energy*. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol. (4), No. (2), pp. (111-133), **2000**.
- Y. SHIMADA, Y. WATANABE, Y. SUGIHARA, Y. TOMINAGA - Enzymatic alcoholysis for biodiesel fuel production and application of the reaction to oil processing. *Journal of Molecular Catalysis B: Enzymatic*, Vol. (17), No. (3-5), pp. (133-142), **2002**.
- L. MEHER, V. SAGAR, S. NAIK - Technical aspects of biodiesel production by transesterification - a review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, Vol. (10), No. (3), pp. (248-268), **2006**.
- F. RODRIGUES, A. ASSIS – Biodiesel Process Simulation: 1. Computational Implementation of Chemical and Physical Properties. *XX Congresso Brasileiro de Engenharia Química, Blucher Chemical Engineering Proceedings*, V. (1), N. (2), **2014**.
- P. VOGEL, Y. LAM, A. SIMON, K. HOUK – Organocatalysis: Fundamentals and Comparisons to Metal and Enzyme Catalysis. *Catalysis*, Vol. (6), No. (9), pp. (128), **2016**.
- M. AGARWAL, S. CHAURASIA, G. CHAUHAN, K. SINGH – Study of catalytic behavior of KOH as homogeneous and heterogeneous catalyst for biodiesel production.

Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers, Vol. (43), No. (1), pp. (89-94), **2012**.

O. STAMENKOVIC, M. KOSTIC, N. JOKOVIC, V. VELJKOVIC – The Kinetics of base-catalyzed methanolysis of waste cooking oil. *Advanced Technologies*, Vol. (4), No. (1), pp. (33-41), **2015**.

J. LI, H. ZHOU, Y. CAO - Transesterification of Waste Cooking Oil to Produce Biodiesel Using Acid and Alkaline Catalyst. *Advanced in Environmental Science and Engineering*, Vol. (518-523), pp. (3566-3572), **2012**.

C. AISYAH, Z. JAMIL, A. MUSLIM – Performance of KOH as a catalyst for Transesterification of Jatropha Curcas Oil. *Journal of Applied Sciences*, Vol. (9), No. (17), pp. (3161-3165), **2012**.

J. KANSEDO, S. BHATIA, K. LEE – Biodiesel production from palm oil via heterogeneous transesterification. *Biomass and Bioenergy*, Vol. (33), No. (2), pp. (271-276), **2009**.

K. YATISH, R. SURESH, H. LALITHAMBA, B. ARUN, P. KUMAR – Optimization of Scum Oil Biodiesel Production by using Response Surface Methodology. *Process Safety and Environmental Protection*, Vol. (102), pp. (667-672), **2016**.

L. ZHAO, W. WANG, T. QIU, X. LYU, J. SHAN - Comparison of Heterogeneous Azeotropic Distillation and Extractive Distillation Methods for Ternary Azeotrope Ethanol/Toluene/Water Separation. *Computers & Chemical Engineering*, Vol. (100), pp. (27-37), **2017**.

T. MARNOTO, C. HAPSARI, K. ARIFIN, I. BUDIAMAN, R. PRAKOSA - Dehydrating ethanol using a ternary solute and extractive batch distillation. *Malaysian Journal of Analytical Sciences*, Vol. (23), No. (1), pp. (124-130), **2019**.

M. MUJELI, H. KEFAS, A. SHITU, I. AYUBA - Optimization of Biodiesel Production from Crude Cotton Seed Oil Using Central Composite Design. *American Journal of Chemical and Biochemical Engineering*. Vol. (1), No. (1), pp. 8-14, **2016**.

G. VERMEERSCH – Development of a biodiesel activity. *Oléagineux, Corps Gras, Lipides*. Vol. (8), No. (1), pp. (8-33), **2001**.

K. MAEDA, H. KURAMOCHI, K. ARAFUNE, K. ITOH, T. YAMAMOTO – Transesterification of Triolein and Methanol by Novozym 435 with Dimethyl Ether. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, Vol. (50), N. (12), pp. (924-928), **2017**.

P. FUENTES - Avaliação da qualidade de óleos de soja, canola, milho e girassol durante o armazenamento, Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências Agrárias, Programa de Pós-Graduação em Ciência dos Alimentos, **2011**.

L. SILVA, W. GONÇALVES, W. MALUF, L. RESENDE, C. SARMIENTO, V. LICURSI, P. MORETTO – Energy balance of biodiesel production from canola. *Cienc. Rural*, Vol. (47), No. (2), **2016**.

G. TOMM, P. FERREIRA, J. AGUIAR, A. CASTRO, S. LIMA, C. MORI – Panorama atual e indicações para aumento de eficiência da produção de canola no Brasil. *Embrapa Trigo*, p. (27), **2009**.

ANP – Produção de biocombustíveis. Disponível em: < <http://www.anp.gov.br/dados-estatisticos>>. Acesso em: 08 de março de **2020**.