



Simulação da produção de biodiesel via destilação reativa: avaliação de parâmetros operacionais no Aspen Plus®

Simulation of biodiesel production via reactive distillation: evaluation of operational parameters in Aspen Plus®

Victor Miguel de Abreu Nabo¹, Eduardo Dellosso Penteado², Luiza Helena da Silva Martins³, Johnatt Allan Rocha de Oliveira⁴, Andrea Komesu^{2,*}

¹ Aluno de graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal de São Paulo – UNIFESP, campus Baixada Santista, SP, Brasil

² Professores do Instituto do Mar, Universidade Federal de São Paulo – UNIFESP, campus Baixada Santista, SP, Brasil

³ Professora do Instituto de Saúde e Produção Animal, Universidade Federal Rural da Amazônia – UFRA, PA, Brasil

⁴ Professor da Faculdade de Nutrição, Universidade Federal do Pará- UFPA, PA, Brasil

*Autor para correspondência, E-mail: andrea.komesu@unifesp.br

Received: 24 February 2025 | Accepted: 17 March 2025 | Published online: 15 April 2025

Resumo: Diante do crescente investimento em fontes renováveis de energia para suprir a demanda populacional e promover a conservação ambiental, a produção de biocombustíveis tem ganhado destaque nas pesquisas do setor energético. Em particular, a geração de biodiesel se sobressai devido ao seu bom rendimento, obtido a partir da transformação de óleos de origem vegetal ou animal. A reação de transesterificação é o principal processo para a produção de biodiesel, podendo ser conduzida por diferentes abordagens, como a destilação reativa. Essa técnica permite a integração das etapas de reação e separação química do produto em um único equipamento, otimizando o uso de energia e reduzindo os custos de purificação do biodiesel. Neste contexto, este trabalho teve como objetivo a simulação computacional da reação de transesterificação e purificação via destilação reativa para avaliar a conversão de biodiesel utilizando o simulador Aspen Plus®. Foram analisados os principais parâmetros que influenciam a conversão do biocombustível, tais como a conversão do reagente em relação ao álcool adicionado (razão álcool: óleo) e razão de refluxo. Obteve-se nas melhores condições uma conversão de 89-% de biodiesel, utilizando uma razão de refluxo de 0,2, razão metanol:óleo de 15:1 e vazão de metanol na entrada de 97 kmol/h, resultando em uma vazão molar de biodiesel de 18 kmol/h na corrente de produto.

Palavras-chave: biodiesel, transesterificação, destilação reativa, simulação computacional, Aspen Plus®.

Abstract: Given the increasing investment in renewable energy sources to meet population demand and promote environmental conservation, biofuel production has gained prominence in energy sector research. In particular, biodiesel production stands out due to its high yield, achieved through the conversion of vegetable- or animal-derived oils. The transesterification reaction is the primary process for biodiesel production and can be conducted using different approaches, such as reactive distillation. This technique allows for the integration of reaction and chemical separation stages within a single unit, optimizing energy use and reducing biodiesel purification costs. In this context, this study aimed to perform a computational simulation of the transesterification reaction and purification via reactive distillation to assess the feasibility of biodiesel production using the Aspen Plus® simulator. The key parameters influencing biofuel conversion were analyzed, such as the conversion of reactants relative to the added alcohol (alcohol-to-oil ratio) and reflux ratio. Under optimal conditions, a biodiesel conversion of 89.1% was achieved, using a reflux ratio of 0.2, a methanol-to-oil ratio of 15:1, and a methanol feed flow rate of 96.75 kmol/h, resulting in a biodiesel molar flow rate of 18.186 kmol/h in the product stream.

Keywords: biodiesel, transesterification, reactive distillation, computational simulation, Aspen Plus®.

1 Introdução

Nos últimos anos, pesquisas voltadas à utilização e aprimoramento de fontes energéticas renováveis têm ganhado cada vez mais espaço no setor de energia, impulsionadas por políticas governamentais que restringem o uso de combustíveis fósseis, como petróleo e carvão. Segundo um relatório da Organização das Nações Unidas (ONU) de 2020, estima-se que os países devem reduzir a produção global dessas fontes em 6% ao ano entre 2020 e 2030. Essa medida visa limitar o aquecimento global a 1,5 °C e mitigar os impactos ambientais e sociais negativos decorrentes da queima de petróleo, carvão e gás natural, principais responsáveis pelo aumento das emissões de gases de efeito estufa (Zandonai, 2020).

Além da redução da produção, diversas nações têm adotado medidas fiscais para desestimular o consumo de combustíveis fósseis. Um exemplo notável são os países nórdicos (Dinamarca, Noruega, Suécia e Finlândia), onde a tributação incide tanto sobre o preço final do combustível fóssil quanto por tonelada de CO₂ emitida (Prado, 2021). O valor da tributação varia entre os países e impacta diretamente os setores de transporte e indústria. Em contrapartida, alguns países em desenvolvimento, como o Brasil, adotam políticas opostas, como a isenção de impostos federais e estaduais sobre combustíveis fósseis para estimular seu consumo, como ocorreu em 2023 (Guarde, 2023). No entanto, essas estratégias tendem a ser temporárias, visto que o avanço tecnológico e a redução dos custos de produção de biocombustíveis, como o biodiesel e o etanol, tornam seu uso cada vez mais competitivo, especialmente com o apoio de políticas governamentais voltadas à sustentabilidade.

O Brasil possui grande disponibilidade de resíduos de matéria orgânica, especialmente de óleos vegetais e animais provenientes do setor agrícola. Nesse contexto, a pesquisa sobre a aplicação do biodiesel como substituto do diesel fóssil tem ganhado relevância na comunidade científica, dada a abundância de matéria-prima para sua produção.

A frota brasileira de veículos pesados é composta majoritariamente por caminhões e trens, ambos dependentes de diesel. Em 2022, o país registrou 7,2 milhões de caminhões e 104.824 locomotivas, sendo o transporte rodoviário o principal meio de movimentação de cargas no Brasil (Infra S.A., 2023). Entretanto, a participação do biodiesel no consumo total de diesel ainda é reduzida: dos 52,2% de consumo de diesel pelo setor de transportes, apenas 5,7% eram provenientes de fontes vegetais ou animais em 2022 (Infra S.A., 2023). Esse cenário se deve, em grande parte, à ausência de incentivos fiscais que viabilizem a aplicação em larga escala, dado o alto custo associado à produção, extração e refino do biodiesel. Como consequência, cresce a demanda por processos mais eficientes para sua obtenção, tanto no meio acadêmico quanto na indústria energética.

O biodiesel é definido pela *American Society for Testing Materials* (ASTM), na norma D6751, como um combustível líquido sintético, originário de matéria prima renovável e constituída por mistura de ésteres alquílicos de ácidos graxos de cadeias longas, derivados de óleos vegetais ou gorduras animais. Também pode ser definido como derivado de biomassa renovável que pode substituir, parcial ou totalmente, combustíveis derivados de petróleo e gás natural em motores a combustão ou em outro tipo de geração de energia (ANP, 2010).

A produção de biodiesel ocorre predominantemente por meio da reação de transesterificação, na qual triglicerídeos (óleos vegetais ou gorduras animais) reagem com um álcool, resultando na formação de ésteres e glicerina. Esse processo pode ser catalisado por ácidos, bases ou enzimas, além de poder ocorrer sem catalisadores quando se utiliza álcool em condições supercríticas.

Tradicionalmente, o biodiesel é produzido em reatores de agitação contínua operando em batelada (BSTR). No entanto, diversas alternativas vêm sendo investigadas para tornar a transesterificação mais eficiente e economicamente viável. Entre os sistemas estudados para otimizar essa reação, destacam-se reatores de agitação contínua em série, reatores de alta rotação, ultrassônicos, assistidos por micro-ondas, micro-reatores com placas de troca térmica, reatores tubulares combinados com agitação contínua, colunas contendo resinas de troca iônica, reatores bifásicos (líquido-gás) operando em altas temperaturas e a destilação reativa, entre outros (Lima, 2010).

A destilação reativa foi primeiramente patenteada por Backhaus em 1921 (Wankat, 2007) e tem sido objeto de atenção até os dias atuais. É uma operação unitária em que a reação química e a separação por destilação são realizadas simultaneamente dentro do destilador fracionado (Perry e Chilton, 1999). O termo destilação catalítica também é utilizado para tais sistemas onde um catalisador (homogêneo ou heterogêneo) é usado para acelerar a reação (Taylor e Krishna, 2000).

A combinação de destilação fracionada acompanhada por reação química em uma única unidade, contribui para a intensificação da transferência de massa ao mesmo tempo em que simplifica a operação da planta de produção de biodiesel. Outra vantagem é a combinação das etapas de reação e purificação em

uma única unidade deslocando o equilíbrio da reação de transesterificação para a produção de éster (biodiesel), uma vez que ocorre a contínua remoção dos produtos da reação. Além disso, a utilização da destilação reativa na produção de biodiesel permite o desenvolvimento de um processo extremamente rápido, uma vez que é possível atingir uma conversão em éster (biodiesel) superior a 90% m/m em apenas 3 minutos de reação (He, 2006; Lima, 2010).

A integração entre reação e separação adiciona complexidade ao processo, exigindo um maior entendimento da cinética reacional e do comportamento do sistema. Por esse motivo, pesquisas sobre o projeto e a simulação da destilação reativa vêm sendo desenvolvidas há mais de uma década (Taylor e Krishna, 2000). Com os avanços tecnológicos, a simulação de processos químicos, que anteriormente era restrita a grandes centros de pesquisa, tornou-se mais acessível, permitindo maior disseminação do conhecimento e redução de custos. Isso possibilita a exploração e otimização de processos industriais com investimentos reduzidos. Um exemplo notável dessa evolução é o software Aspen Plus®, desenvolvido pela AspenTech em parceria com o Instituto de Tecnologia de Massachusetts (MIT) e o Departamento de Energia dos Estados Unidos (Yadav et al., 2022). Essa ferramenta permite a modelagem e simulação de processos químicos e operações unitárias, como a destilação reativa aplicada à produção de biodiesel. Assim, torna-se viável avaliar alternativas para a obtenção de combustíveis com menor impacto ambiental, capazes de atender às crescentes demandas do setor energético e de transportes.

Diante desse contexto, este trabalho pretende contribuir com o estudo da simulação do processo de produção do biodiesel em um sistema de destilação reativa utilizando o software comercial Aspen Plus®. Serão avaliadas as melhores condições operacionais de produção do biodiesel, visando à produção do mesmo de forma viável técnica, econômica e ambientalmente.

2 Metodologia

A execução deste trabalho seguiu as seguintes etapas:

- Revisão bibliográfica – Levantamento e análise da literatura científica para compreender o processo de síntese do biodiesel a partir do óleo de girassol, utilizando álcool como reagente em condições subcríticas. O estudo foi baseado, entre outros, no trabalho de Roma (2020).
- Definição dos parâmetros e modelagem computacional – Inserção dos dados operacionais e físico-químicos no simulador Aspen Plus®, seguida da construção do modelo de destilação reativa para a produção de biodiesel.
- Execução das simulações e análise de variáveis – Realização de simulações iniciais, seguida de ajustes e avaliação dos principais parâmetros do processo, incluindo razão de refluxo e razão de alimentação metanol:óleo na coluna de destilação.
- Tratamento e interpretação dos resultados – Geração de gráficos para visualização dos dados e análise da eficiência do processo, considerando a pureza do biodiesel obtido como principal critério de desempenho.

2.1 Fluxograma do processo de destilação reativa para produção de biodiesel

A Figura 1 apresenta o diagrama de fluxo do processo de destilação reativa para a produção de biodiesel, modelado no software Aspen Plus®.

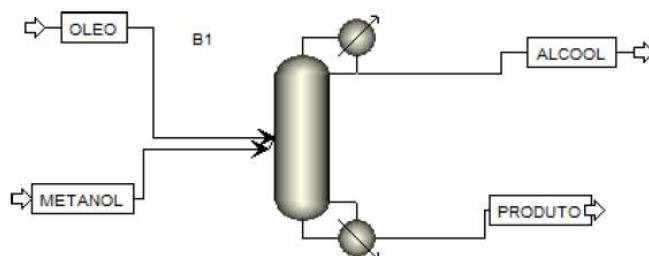
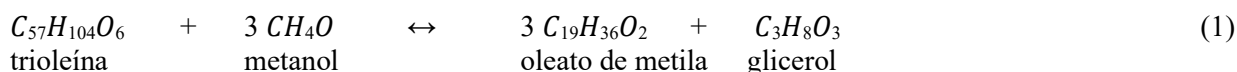


Figura 1. Fluxograma do processo de destilação reativa para produção de biodiesel no Aspen Plus®

O sistema é composto por uma coluna de destilação reativa (B1), onde ocorrem simultaneamente a reação de transesterificação e a separação dos produtos. O óleo e o metanol são alimentados na coluna, onde reagem para formar o biodiesel. Na parte superior da coluna, o excesso de álcool é recuperado, enquanto o produto final, o biodiesel, é coletado na corrente inferior. Na configuração da coluna, será

avaliada a pureza do biodiesel obtido na ausência de catalisador, com o objetivo de reduzir custos e a complexidade do processo reacional. A reação de transesterificação é representada pela Eq. (1):



O modelo RADFRAC foi utilizado para simular a coluna de destilação reativa no Aspen Plus® 11.1, sendo escolhido por sua capacidade de representar, de forma rigorosa, a interação entre equilíbrio de fases e reações químicas dentro da coluna. Ele permite definir estágios reativos específicos, onde ocorre a conversão química simultaneamente à separação dos produtos. Além disso, o RADFRAC oferece flexibilidade na escolha de modelos termodinâmicos adequados, garantindo uma simulação precisa dos perfis de temperatura, composição e conversão ao longo da coluna.

2.2 Dados de entrada

A corrente de alimentação foi composta por óleo de girassol, conforme descrito por Iocca (2015), e metanol. A Tabela 1 apresenta a composição detalhada dessas correntes. Para a modelagem termodinâmica, foi utilizado o modelo NRTL (*Non-Random Two-Liquid*), enquanto os parâmetros cinéticos da reação de transesterificação foram extraídos do estudo de Roma (2020), conforme indicado na Tabela 2.

Tabela 1. Dados de alimentação das correntes de entrada da coluna.

Fração mássica das correntes de alimentação		
Componente	Metanol	Óleo
Metanol	1,00	0,00
Trioleína	0,00	0,98
Ácido oleico	0,00	0,20

Tabela 2. Parâmetros da cinética reacional de transesterificação (Roma, 2020).

Parâmetros da cinética de reação	
Energia de ativação (kJ/kmol)	58320
Fator pré-exponencial (sec ⁻¹)	10,1

A Tabela 3 apresenta os dados iniciais utilizados na simulação, baseados em Roma (2020), assim como o conjunto de especificações do processo de destilação reativa. Posteriormente, foram realizadas variações nos parâmetros de razão metanol:óleo e razão de refluxo para avaliar seus impactos no desempenho do processo. Com esses dados foram obtidos os perfis de temperatura, composição e conversão ao longo da coluna de destilação reativa.

Tabela 3. Conjunto de especificações do processo de destilação reativa (Roma, 2020).

Especificações iniciais do processo de destilação reativa	
Modelo Termodinâmico	NRTL
Temperatura das correntes de alimentação (°C)	45
Pressão (atm)	3
Vazão da corrente de metanol (kmol/h)	126,15
Vazão da corrente de óleo (kmol/h)	6,45
Razão metanol:óleo	19,5:1
Número de estágios	20
Refrervador	Parcial
Razão de refluxo (mol)	0,4
Carga térmica do refrervador (kW)	2100
Pressão do condensador (atm)	3
Estágio de alimentação do metanol	2
Estágio de alimentação do óleo	3

3 Resultados e discussões

As simulações foram realizadas com base nos dados apresentados nas Tabelas 1, 2 e 3, resultando nos valores mostrados na Tabela 4. Já a Tabela 5 exibe as especificações do biodiesel conforme estabelecido pela Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP).

Tabela 4. Correntes de produto da coluna de destilação reativa B1.

Destilado (ALCOOL)	
Fração mássica metanol	0,996
Fração mássica trioleína	< 0,0002
Fração mássica ácido oleico	< 0,0002
Fração mássica oleato de metila (biodiesel)	< 0,0002
Fração mássica glicerol	0,0038
Vazão metanol (kmol/h)	107,592
Vazão trioleína (kmol/h)	0,000
Vazão ácido oleico (kmol/h)	$3,482 \times 10^{-13}$
Vazão oleato de metila (biodiesel) (kmol/h)	$7,251 \times 10^{-31}$
Vazão glicerol (kmol/h)	0,144
Resíduo (PRODUTO)	
Fração mássica metanol	0,002
Fração mássica trioleína	0,98
Fração mássica ácido oleico	0,018
Fração mássica oleato de metila (biodiesel)	0,889
Fração mássica glicerol	0,089
Vazão metanol (kmol/h)	0,371
Vazão trioleína (kmol/h)	0,000
Vazão ácido oleico (kmol/h)	0,388
Vazão oleato de metila (biodiesel) (kmol/h)	18,186
Vazão glicerol (kmol/h)	5,918

Tabela 5. Especificações do biodiesel de acordo com a ANP n° 920/2013

Biodiesel (ANP n° 920/2013)	
Fração mássica metanol	0,965
Fração mássica trioleína	0,2
Fração mássica ácido oleico	Não especificado
Fração mássica oleato de metila (biodiesel)	0,965 (mín.)
Fração mássica glicerol	0,2 (máx.)

A partir da Tabela 4, observa-se que a conversão de óleo de girassol em biodiesel atingiu 89% (fração mássica de 0,889) na forma de éster de oleato de metila. Esse valor está ligeiramente abaixo do mínimo exigido pela regulamentação brasileira para a comercialização do biodiesel, que é de 96,5%, conforme indicado na Tabela 5.

Um aspecto importante a ser destacado é que a reação foi conduzida na ausência de catalisadores, com o objetivo de avaliar a viabilidade do processo sem o uso de catalisadores ácidos ou alcalinos e compará-lo com estudos acadêmicos que adotaram diferentes abordagens. Ferreira (2007), por exemplo, utilizando óleo de algodão com 13% de ácido oleico e 1,0% de catalisador NaOH (básico), obteve uma conversão de 98,3% na rota metílica. Já Roma (2020), ao trabalhar com óleo residual e catalisador ácido, obteve uma conversão máxima de 70,37%. Dessa forma, apesar da pureza do biodiesel obtida na presente simulação ser inferior à frequentemente reportada na literatura, a conversão foi superior àquela observada por Roma (2020) com óleo residual. Segundo Silva e Neto (2013), esse comportamento pode ser explicado pelo teor de ácidos graxos livres, que é significativamente maior nos óleos residuais -como observado no estudo de Roma (2020). Esses ácidos interferem negativamente no rendimento da reação, pois favorecem a formação excessiva de sabão, comprometendo a eficiência do processo.

Outro ponto relevante é a recuperação eficiente do metanol, evidenciada pela alta fração mássica (0,996) no destilado da coluna de destilação reativa. Esse fator é vantajoso, pois reduz perdas, possibilita a reutilização do metanol e contribui para a viabilidade econômica do processo. No entanto, a presença de pequenas quantidades de trioleína e ácido oleico tanto no destilado quanto no resíduo indica que a reação de transesterificação não foi completa.

Considerando os resultados obtidos, ajustes em parâmetros operacionais podem ser implementados para elevar a pureza do biodiesel e atender às especificações comerciais. A otimização da razão metanol:óleo e da razão de refluxo pode aumentar o grau de conversão, pois uma maior razão metanol:óleo favorece a reação de transesterificação, proporcionando mais metanol para a conversão de triglicerídeos. Já a razão de refluxo adequada promove uma melhor separação dos produtos e mantém as condições de temperatura e composição ideais para a reação, minimizando perdas e promovendo uma maior eficiência na conversão dos reagentes, resultando em um maior rendimento do biodiesel. A combinação desses ajustes pode melhorar o equilíbrio entre separação e reação, otimizando todo o processo e contribuindo para a produção de biodiesel de alta qualidade. Além disso, a adição de catalisadores mostrou-se eficaz na maioria dos trabalhos revisados, permitindo conversões superiores a 95% na produção de ésteres de biodiesel. Outra possibilidade seria a inclusão de um estágio de purificação adicional para reduzir a presença de impurezas e aumentar a conformidade do produto final com as normas vigentes.

Portanto, os resultados indicam que o uso da destilação reativa para a produção de biodiesel apresenta um bom potencial, principalmente devido à alta conversão obtida e à recuperação eficiente do metanol. Entretanto, otimizações adicionais são necessárias para garantir a conformidade do produto com as exigências regulatórias e aprimorar sua viabilidade técnica e econômica.

3.1 Análise da variação da razão álcool: óleo

Para avaliar o efeito da variação da razão álcool:óleo na porcentagem de biodiesel formado, a razão foi aumentada progressivamente, mantendo-se a vazão molar de óleo constante em 6,45 kmol/h, conforme a simulação inicial (Tabela 3). O comportamento resultante está ilustrado na Figura 2.

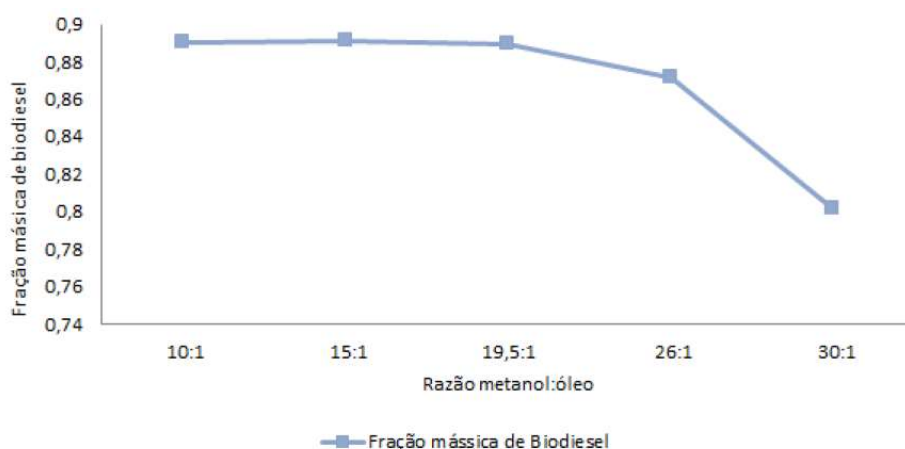


Figura 2. Conversão de biodiesel em função da razão álcool: óleo.

Observou-se que, para razões entre 10:1 e 19,5:1, a fração mássica de biodiesel manteve-se praticamente constante, em torno de 0,89. Esse comportamento sugere que, dentro dessa faixa, o excesso de metanol não exerce influência significativa na conversão do óleo em biodiesel, indicando que a reação já ocorre de forma eficiente. No entanto, o aumento pouco significativo na fração mássica de biodiesel quando a razão álcool:óleo foi reduzida para valores próximos aos considerados ideais na literatura pode estar relacionado à baixa influência desse parâmetro na pureza do produto final nas condições adotadas na simulação inicial. Ainda assim, fatores como a qualidade do óleo utilizado, a cinética da reação e a composição inicial influenciam diretamente na razão álcool:óleo ideal para maximizar a conversão (Ferreira, 2007).

Estudos anteriores demonstram que a razão álcool:óleo ótima pode variar conforme as condições experimentais. Kucek et al. (2007) reportaram que, ao combinar óleo de soja com etanol, a melhor conversão foi obtida com uma razão de 12:1. Já Moraes et al. (2013) verificaram que, ao aumentar a razão metanol:óleo de 4:1 para 12:1, houve uma redução na conversão de ésteres, atribuída à perda de reagente

na fase líquida em razões mais elevadas. Dessa forma, fica evidente que esse parâmetro está intrinsecamente ligado às condições específicas de cada processo.

Para razões superiores a 20:1, observou-se uma tendência de redução na conversão de biodiesel, que se acentuou significativamente em 30:1. Esse comportamento pode ser explicado pelo aumento da diluição da glicerina no meio reacional, causado pelo excesso de metanol. Em concentrações elevadas, a glicerina dissolvida interfere na separação de fases, deslocando o equilíbrio da reação no sentido dos reagentes e, consequentemente, reduzindo a conversão global (Ferreira, 2007). Esse fenômeno justifica o padrão observado na simulação.

Portanto, os resultados indicam que a otimização da razão álcool:óleo deve ser cuidadosamente ajustada para maximizar a conversão de biodiesel, evitando tanto razões excessivamente baixas, que podem limitar a reação, quanto razões muito altas, que podem comprometer a eficiência do processo devido à diluição dos produtos e reagentes.

3.2 Análise da variação da razão de refluxo

A Figura 3 apresenta o comportamento da fração mássica de biodiesel em função da razão de refluxo no processo de destilação reativa. A razão de refluxo molar foi variada de 0,2 a 1,2, mantendo-se os demais parâmetros constantes, conforme a simulação inicial (Tabela 3). Observa-se uma tendência decrescente na pureza do biodiesel à medida que a razão de refluxo aumenta.

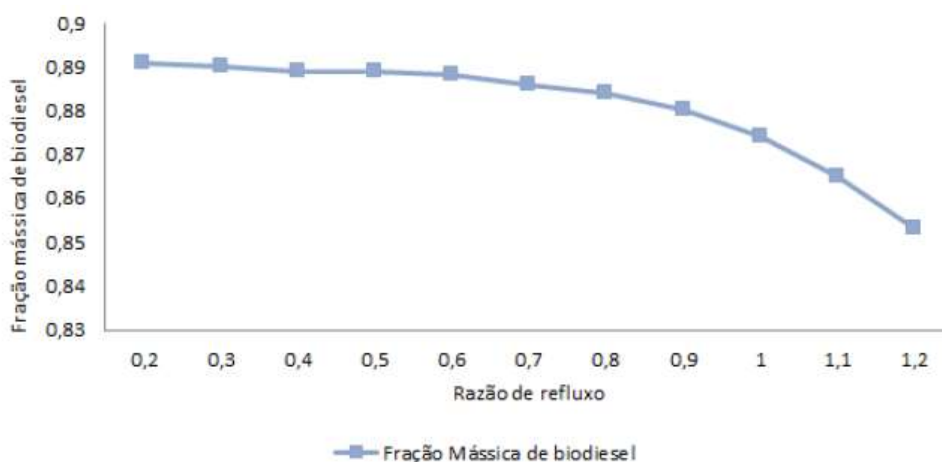


Figura 3. Conversão de biodiesel em função da razão de refluxo.

Assim como relatado por Roma (2020) e em outros estudos que investigaram essa variável, verificou-se pequena variação na pureza do biodiesel com a alteração da razão de refluxo. No entanto, a melhor conversão foi obtida com uma razão de refluxo de 0,2. Esse resultado sugere que, com esse valor, há um maior acúmulo de reagentes no topo da coluna, favorecendo a reação de transesterificação e, consequentemente, uma maior formação de biodiesel. Esse comportamento está em concordância com Oliveira (2021), que indica que a maior parte da produção de biodiesel ocorre na região superior da coluna.

O efeito da razão de refluxo na destilação reativa envolve uma interação complexa entre a separação dos componentes e a eficiência das reações químicas na coluna. Quando a razão de refluxo é baixa, pode ocorrer uma separação inadequada dos produtos, o que aumenta a quantidade de reagentes e pode deslocar o equilíbrio químico, gerando subprodutos. Por outro lado, uma razão de refluxo excessivamente alta pode diminuir o contato entre os reagentes, comprometendo a conversão da reação. Além disso, o aumento da razão de refluxo eleva a carga térmica do reator, impactando o consumo de energia e a eficiência do processo (Bretas 2020; Mallaiah and Reddy, 2016; Datta and Patle, 2010). Portanto, é essencial ajustar cuidadosamente a razão de refluxo para equilibrar a separação e a reação, visando otimizar o desempenho do processo.

3.3 Distribuição dos componentes na coluna

A composição dos componentes (reagentes e produtos) ao longo dos estágios reativos, assim como a variação da temperatura de reação na coluna de destilação, está representada nas Figuras 4 e 5, respectivamente, com base nos dados apresentados nas Tabelas 1, 2 e 3.

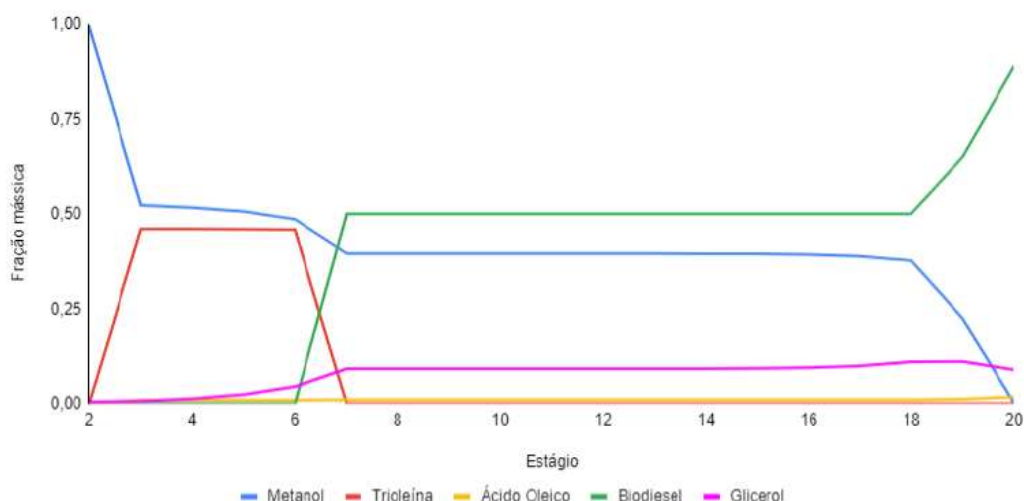


Figura 4. Perfis das composições mássicas ao longo dos estágios da coluna de destilação reativa.

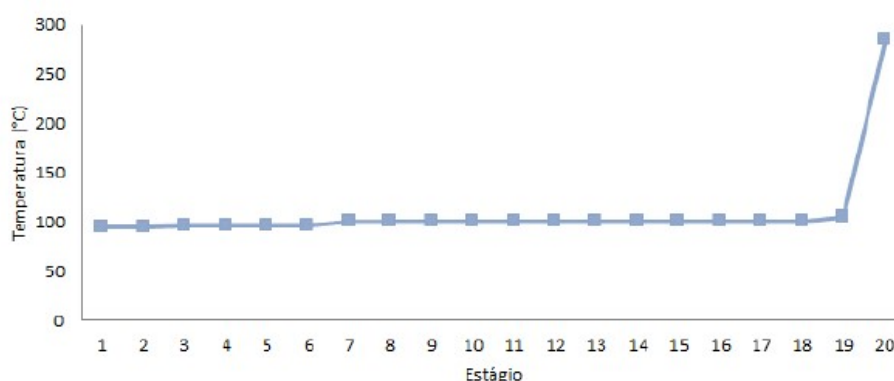


Figura 5. Perfil de temperatura da reação ao longo dos estágios da coluna de destilação reativa.

Na Figura 4, observa-se que, para as condições iniciais de reação, a maior concentração de biodiesel ocorre no último estágio reativo, acompanhada por uma redução significativa do teor de metanol. Além disso, observa-se um aumento de temperatura nesse estágio (Figura 5), influenciado pela presença do refeedor, que fornece calor ao sistema e mantém a temperatura elevada na parte inferior da coluna. Esse comportamento está de acordo com o maior consumo do álcool no final da reação para a formação do éster desejado. Nota-se que a conversão da trioleína ocorre majoritariamente nos primeiros estágios, com sua fração mássica reduzindo drasticamente até o estágio 6. O biodiesel, por outro lado, apresenta um aumento expressivo na fração mássica nos estágios inferiores da coluna (18 a 20), indicando que a separação dos reagentes é favorecida nessa região. A fração mássica de glicerol encontra-se abaixo de 0,1, um valor consideravelmente reduzido em comparação com o estudo de Roma (2020), no qual apenas 70% da fração mássica correspondia a ésteres, enquanto o restante era composto por glicerol e etanol não reagido. Esse teor poderia ser ainda mais diminuído com a implementação de uma segunda coluna de destilação para a purificação do produto final.

4 Conclusões

Este estudo demonstrou o potencial da simulação computacional para a obtenção de biodiesel, ressaltando sua importância ambiental como combustível renovável derivado de óleos vegetais, como o óleo de girassol. Nas melhores condições operacionais testadas, obteve-se uma conversão de 89,1% de biodiesel, utilizando uma razão de refluxo de 0,2, razão metanol:óleo de 15:1 e uma vazão de metanol de 96,75 kmol/h na entrada, resultando em uma vazão molar de biodiesel de 18,186 kmol/h. Comparativamente, a literatura relata conversões superiores a 90% para esse e outros óleos, atribuídas principalmente ao uso de catalisadores em concentrações iguais ou superiores a 1%. A ausência de catalisadores neste estudo impactou significativamente a qualidade do produto final. Além disso, a limitação de dados cinéticos bem definidos dificultou a replicação exata da simulação, indicando que melhorias nesse aspecto podem elevar a conversão de biodiesel. Dessa forma, recomenda-se a realização de novas pesquisas que explorem essas

variáveis, a fim de otimizar a conversão de biodiesel e aprimorar a confiabilidade das simulações computacionais na modelagem desse processo.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Programa Institucional de Bolsas de Iniciação em Desenvolvimento Tecnológico e Inovação (PIBITI/CNPq) pelo apoio financeiro por meio da concessão de bolsa ao autor Victor Miguel de Abreu Nabo e à Universidade Federal de São Paulo pela infraestrutura disponibilizada para a realização deste trabalho.

Referências bibliográficas

- Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) (2010) ‘Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis’. Disponível em: <www.anp.gov.br> (acessado em 12 de novembro de 2010).
- Bretas, AS (2020) *Processo de obtenção de acetato de metila por destilação reativa*. Dissertação de Mestrado. Universidade Estadual de Campinas, Brasil.
- Datta, D e Patle, DS (2010) ‘Sensitivity analysis of steady-state methyl acetate synthesis reactive distillation column using Aspen Plus’, *Chemical Engineering Research and Design*, v. 6, n. 3, pp. 24–36.
- Ferreira, CV e Stragevitch, L (2007) *Otimização do processo de produção de biodiesel a partir de óleos de mamona e algodão*. Dissertação (Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Pernambuco, Recife.
- Guarde, G (2023) ‘Imposto sobre o diesel volta a ficar zerado’, *Epbr*. Disponível em: <https://epbr.com.br/impostosobreodieselvoltaaficarzerado/> (acesso em 26 de outubro de 2023).
- He, B, Singh, AP e Thompson, JC (2006) ‘A novel continuous-flow reactor using reactive distillation technique for biodiesel production’, *Transactions of the ASABE*, v. 49, n. 1, pp. 107-112.
- Infra SA (2023) *Anuário Estatístico de Transportes 2013-2022*. Ministério dos Transportes, Brasília, 75 p.
- Iocca, AFS et al (2015) ‘Avaliação do teor e produtividade de óleo em genótipos de girassol’, in *Simpósio Nacional sobre a Cultura do Girassol*, Londrina. Disponível em: <https://ainfo.cnptia.embrapa.br/digital/bitstream/item/132575/1/RNPG.p.125128.pdf> (acessado em 12 de abril 2024).
- Kucek, KT, César-Oliveira, MAF, Wilhelm, HM e Ramos, LP (2007) ‘Ethanolysis of refined soybean oil assisted by sodium and potassium hydroxides’, *Journal of the American Oil Chemists' Society*, 84, pp. 385-392.
- Mallaiah, M e Reddy, GV (2016) ‘Simulation of continuous packed bed reactive distillation column for the esterification process using activity based kinetic model’, *Theoretical Foundations of Chemical Engineering*, v. 50, n. 4, pp. 404–413. <http://doi.org/10.1134/S0040579516040412>.
- Morais, FR, Lopes, CS, Lima Neto, EG, Ramos, ALD e Silva, G (2013) ‘Influência da temperatura e da razão molar na produção contínua de biodiesel’, *Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Sergipe*.
- Oliveira, NS (2021) *Projeto de engenharia química – torre de destilação fracionada*. Trabalho de Conclusão de Curso (Engenharia Química). Universidade de Brasília.
- Perry, RH e Chilton, CH (1999) *Chemical Engineers' Handbook*. 7ª edn. McGraw-Hill.
- Prado, CER (2021) *Internalização no direito brasileiro da obrigação de compensação de carbono pelas companhias aéreas no âmbito do Carbon Offset and Reduction Scheme for International Aviation (CORSIA)*. Tese (Mestrado em Direito). Programa de Pós-Graduação em Direito, Universidade de Brasília, Brasília.
- Roma, JDA (2020) *Simulação da produção do biodiesel por transesterificação e esterificação heterogênea do óleo residual a partir da destilação reativa*. Monografia (Tecnólogo em Produção Sucroalcooleira). Centro de Tecnologia e Desenvolvimento Regional, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa.

Silva, NL da (2010) *Produção de biodiesel: processo e caracterizações*. Tese (Doutorado em Engenharia Química). Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP).

Silva, TAR da e Neto, WB (2013) ‘Estudo da redução da acidez do óleo residual para a produção de biodiesel utilizando planejamento fatorial fracionado’, *Revista Virtual Química*, v. 5, n. 3, pp. 516–528. Universidade Federal de Uberlândia.

Taylor, R e Krishna, R (2000) ‘Modelling reactive distillation’, *Chemical Engineering Science*, 55, pp. 5183-5229.

Wankat, PC (2007) *Equilibrium Staged Separations*. 2ª edn. New York: Prentice Hall.

Yadav, ES, Indiran, T, Nayak, D, Kumar, CA e Selvakumar, M (2022) ‘Simulation study of distillation column using Aspen Plus’, *ScienceDirect, Manipal*, v. 48, n. 2, pp. 330–337.

Zandonai, R (2020) ‘Governos devem reduzir a produção de combustíveis fósseis em 6% ao ano para limitar aquecimento catastrófico’, *ONU Programa para o Meio Ambiente*. Disponível em: <https://brasil.un.org/pt-br/103525governosdevemreduzirprodu%C3%A7%C3%A3odecombust%C3%ADveisf%C3%B3sseisem6aoanoparalimitaraquecimento#:~:text=Os%20pa%C3%ADses%20planejam%20aumentar%20a,a%20Lacuna%20de%20Produ%C3%A7%C3%A3o%202020>. (acesso em 26 de outubro de 2023).