

AVALIAÇÃO DA FRAÇÃO MOLAR DE POLÍOIS SOLUBILIZADOS EM SOLUÇÕES PURAS ATRAVÉS DOS MODELOS MARGULES, NRTL, VAN LAAR E WILSON¹

Dionatan Felipe Hackenhaar Coleti ², Fernanda Sebem Donatti ³, João Victor Thomas Feyh ⁴, Alessandro Cazonatto Galvão ⁵

¹ Vinculado ao projeto “Estudo experimental, modelagem e simulação da solubilidade dos compostos de interesse para a transformação da biomassa”

² Acadêmico (a) do Curso de Engenharia Química – CEO – Bolsista PIVIC/UDESC

³ Acadêmico (a) do Curso de Engenharia Química – CEO – Bolsista PROBIC/UDESC

⁴ Acadêmico (a) do Curso de Engenharia Química – CEO – Bolsista PROBIC/UDESC

⁵ Orientador, Departamento de Engenharia de Alimentos e Engenharia Química – CEO –
alessandro.galvao@udesc.br.

Os polióis tem sido utilizados como edulcorantes em vários setores industriais, principalmente o alimentício. Pelo motivo de que quando comparados com os açúcares comuns (por exemplo: Sacarose) possuem um sabor mais adocicado e ainda que contabilizam menos caloria quando metabolizados. Em vista de sua importância no setor industrial sendo para desenvolvimento de novas rotas químicas ou otimização de certos processos. Foram realizadas revisões bibliográficas referentes à solubilidade dos seguintes polióis monossacarídeos: Sorbitol, Xilitol, Manitol e Eritritol em diferentes solventes orgânicos, (por exemplo: Metanol, Etanol, Água...) buscando a maior variedade possível de dados disponíveis na literatura. Os dados encontrados foram organizados em tabelas na plataforma Excel, de modo a relacionar solubilidade em função da temperatura com variáveis ajustáveis. Após a organização das planilhas foram aplicados 4 modelos matemáticos diferentes (Margules, Wilson, Van Laar e NRTL), cada qual requisitando cálculos diferentes para sua execução, para prever o comportamento dos solutos citados anteriormente com determinados solventes puros. Foi utilizada a ferramenta Solver dentro da plataforma Excel para ajustar os parâmetros e minimizar a função objetiva, que garante uma concordância entre os dados experimentais, encontrados na revisão bibliográfica, e os dados calculados através da aplicação dos modelos já citados. Para cada série de dados analisada foi gerado um gráfico comparando as frações molares experimentais com as frações molares encontradas através da modelagem, de modo a observar a proximidade dos dados. Com a verificação dos gráficos e tabelas gerados são então analisados os desvios encontrados entre os modelos e os dados experimentais, para determinar qual foi o modelo que apresentou o menor desvio das soluções analisadas. Analisando a Tabela 1, pode-se notar que dos modelos apresentados, aquele que demonstrou menor desvio perante os demais foi o modelo de Van Laar apresentando as melhores correlações para as soluções Sorbitol – Etanol, Manitol – Água, Sorbitol – Metanol e Sorbitol – n-Propanol, tendo respectivamente os desvios 0,010%, 0,0011%, 0,14% e 0,75%. Seguido pelo modelo de Wilson que apresentou as melhores correlações para as soluções Xilitol – Etanol e Xilitol – Água, tendo respectivamente os valores de desvio de 0,21% e 0,37%. O modelo de Margules apresentou uma boa correlação dos dados ainda que não obteve os menores desvios quando comparados com os outros modelos, já o modelo NRTL difere com facilidade pois possui uma terceira variável em seu cálculo para encontrar o coeficiente de

atividade. Pode-se afirmar então que o modelo que apresentou melhor desempenho foi o de Van Laar, seguido de Wilson, Margules e por último NRTL.

Tabela 1. Correlação entre a solubilidade experimental e solubilidade provinda da modelagem referente aos modelos.

T (K)	Xi	Modelos				T (K)	Xi	Modelos			
		Margules	Wilson	Van Laar	NRTL			Margules	Wilson	Van Laar	NRTL
Xylitol - Ethanol						Xylitol - Water					
293,23	0,001728	0,00186	0,00176	0,001756	0,001723	293,28	0,1619	0,154701975	0,15546198	0,148290364	0,14316
298,28	0,002419	0,00241	0,002346	0,002345	0,002328	298,3	0,1797	0,183020217	0,183024157	0,172618181	0,17225
303,17	0,003091	0,00308	0,00306	0,003072	0,003083	303,17	0,2031	0,210355204	0,209299341	0,199918461	0,20295
308,21	0,003974	0,00397	0,00403	0,00404	0,00410	308,21	0,2324	0,238849203	0,236829075	0,232522039	0,23743
313,19	0,005224	0,00515	0,0053	0,005319	0,005419	313,29	0,2661	0,268512025	0,266067864	0,270449555	0,27521
318,29	0,00709	0,00684	0,00709	0,0071	0,007233	318,26	0,3017	0,299804913	0,297724489	0,313108769	0,31572
323,24	0,009657	0,00924	0,00954	0,009516	0,009618	323,25	0,3391	0,334753431	0,333875971	0,362152752	0,36056
328,19	0,01315	0,01289	0,013	0,0129	0,012878	328,21	0,3766	0,374647608	0,375742414	0,417810571	0,41032
333,22	0,01785	0,01881	0,01804	0,01807	0,01747	Desvio (%)		0,47	0,37	2,63	3,17
Desvio (%)		1,17	0,21	0,24	0,5	Sorbitol - Methanol					
Sorbitol - Ethanol						278,15	0,0020500	0,0020644	0,0024894	0,0020651	0,00203
278,15	0,0005980	0,0005893	0,0007727	0,0005931	0,0005547	283,15	0,0027500	0,0027108	0,0023323	0,0027114	0,00269
283,15	0,0007530	0,0007477	0,0006731	0,0007504	0,0007203	288,15	0,0035120	0,0035284	0,0032091	0,0035286	0,00352
288,15	0,0009440	0,0009427	0,0008692	0,0009439	0,0009273	293,15	0,0046100	0,0045679	0,0043456	0,0045677	0,00458
293,15	0,0011680	0,0011815	0,0011130	0,0011805	0,0011839	298,15	0,0058530	0,0058718	0,0058013	0,0058705	0,00592
298,15	0,0014630	0,0014751	0,0014182	0,0014717	0,0015003	303,15	0,0073920	0,0075086	0,0076422	0,0075059	0,0076
303,15	0,0018060	0,0018334	0,0017942	0,0018271	0,0018875	308,15	0,0095940	0,0095894	0,0093369	0,0095863	0,00972
308,15	0,0022480	0,0022745	0,0022589	0,0022658	0,0023594	313,15	0,0120100	0,0121781	0,0127740	0,0121737	0,01234
313,15	0,0028570	0,0028266	0,0028362	0,0028176	0,0029333	318,15	0,0157430	0,0155464	0,0162093	0,0155456	0,01568
318,15	0,0035350	0,0035034	0,0035428	0,0034953	0,0036241	323,15	0,0200170	0,0197980	0,0203440	0,0198008	0,01984
323,15	0,0043850	0,0043529	0,0044154	0,0043496	0,0044561	328,15	0,0256610	0,0253432	0,0252170	0,0253528	0,0251
328,15	0,0054640	0,0543730	0,0054987	0,0054453	0,0054564	333,15	0,0318530	0,0323542	0,0309347	0,0323629	0,03163
333,15	0,0067710	0,0068289	0,0068418	0,0068553	0,0066546	Desvio (%)		0,15	8,49	0,14	0,31
Desvio (%)		0,11	8,86	0,10	1,42	Xylitol - 2 - propanol					
Erythritol - Methanol						293,28	0,001128	0,001270697	0,001154748	0,001154192	0,00112
283,15	0,0038470	0,0038141	0,0035811	0,0036841	0,003308527	298,2	0,001542	0,001622591	0,001530096	0,001529344	0,0015
288,15	0,0047870	0,0047550	0,0046028	0,0046783	0,004290529	303,23	0,002117	0,002082271	0,002031263	0,002029515	0,00203
293,15	0,0057200	0,0058871	0,0058566	0,0058805	0,005514859	308,19	0,002682	0,002643657	0,002656503	0,002658606	0,00269
298,15	0,0072930	0,0072620	0,0073574	0,0073295	0,007029854	313,32	0,003422	0,003384342	0,003491433	0,003499779	0,00359
303,15	0,0089390	0,0089082	0,0091547	0,0090549	0,008890445	318,21	0,004425	0,004314294	0,004538017	0,004549785	0,00447
308,15	0,0109200	0,0108846	0,0112722	0,0110995	0,01160072	323,16	0,005883	0,005595108	0,005952497	0,005959516	0,00615
313,15	0,0132900	0,0132570	0,0137358	0,0135093	0,013911038	328,21	0,007983	0,007454477	0,007923109	0,007912478	0,0081
318,15	0,0161400	0,0161102	0,0165617	0,0163384	0,017225773	333,27	0,01086	0,010225052	0,010664809	0,010628367	0,01068
323,15	0,0195800	0,0195547	0,0197522	0,0196521	0,021198171	338,19	0,01456	0,01438124	0,014387181	0,014344842	0,01402
328,15	0,0237300	0,0237350	0,0232901	0,0235302	0,025935205	343,23	0,01942	0,021219182	0,019728989	0,019780532	0,0186
333,15	0,0287700	0,0288516	0,0271248	0,0280770	0,031559442	Desvio (%)		3,68	4,36	2,63	1,4
Desvio (%)		0,1	1,45	0,47	6,7	Sorbitol - n - propanol					
Mannitol - Water						278,15	0,0005530	0,000545454	0,000670901	0,000545986	0,00046
288,15	0,0150510	0,0152795	0,0150524	0,015072436	0,013120802	283,15	0,0006670	0,000674956	0,000585555	0,000675225	0,00059
293,15	0,017506	0,0175581	0,0174368	0,017465196	0,015899327	288,15	0,0008380	0,000832946	0,000755801	0,00083291	0,00077
298,15	0,0201530	0,0201548	0,0201662	0,020141624	0,019272071	293,15	0,0010180	0,001021753	0,000966776	0,001021354	0,00098
303,15	0,0231130	0,0231256	0,0232337	0,023154321	0,023350476	298,15	0,0012380	0,001249226	0,001225409	0,001248488	0,00125
308,15	0,0265890	0,0265518	0,0265892	0,026590125	0,028257769	303,15	0,0015180	0,001525127	0,001539213	0,001524195	0,00157
313,15	0,0304240	0,0305137	0,0303922	0,030422181	0,034156814	308,15	0,0018480	0,001858387	0,001917001	0,001857498	0,00197
318,15	0,0347080	0,0351272	0,0346827	0,034697861	0,041220594	313,15	0,0022770	0,002269236	0,002366069	0,002268861	0,00245
Desvio (%)		0,39	0,0044	0,0011	7,68	318,15	0,0027970	0,002775732	0,002895441	0,002776336	0,00304
						323,15	0,0034560	0,003414432	0,003511045	0,003416245	0,00374
						328,15	0,0042160	0,004212333	0,004222803	0,004214447	0,00458
						333,15	0,0052240	0,005271319	0,005025027	0,005269079	0,00559
Desvio (%)						Desvio (%)		0,81	7,37	0,75	9,58

Palavras-chave: Modelagem, Solubilidade, polióis.