

CÁLCULO DE PONTO DE FULGOR DE MISTURAS DE BIOCOMBUSTÍVEIS E HIDROCARBONETOS USANDO O SOFTWARE FLAMMA¹

João Victor dos Reis Bertol², Antonio Marinho Barbosa Neto³, Tiffany Cristine Franzoi⁴.

¹ Vinculado ao projeto “Modelagem e Implementação Numérica de Modelos Termodinâmicos para a Predição do Ponto de Fulgor de Misturas de Biocombustíveis e Hidrocarbonetos”

² Acadêmico (a) do Curso de Engenharia de Petróleo – CESFI – Bolsista PROBIC

³ Orientador, Departamento de Engenharia de Petróleo – CESFI – antonio.marinho@udesc.br

⁴ Acadêmico (a) do Curso de Engenharia de Petróleo – CESFI

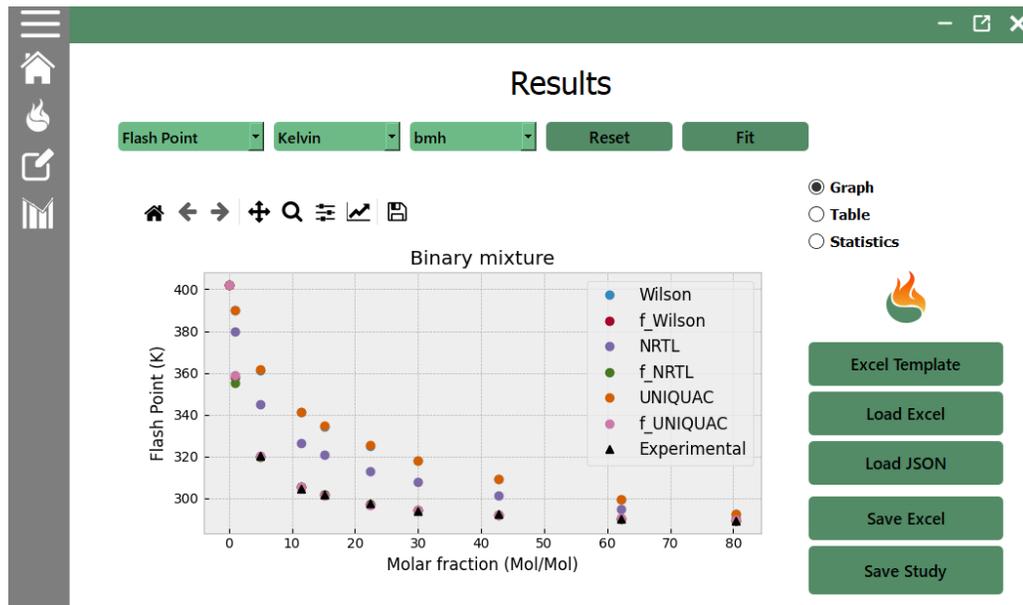
No contexto de Biocombustíveis, o Brasil destaca-se como uma referência mundial. Atualmente, de acordo com informações do Ministério de Minas e Energia, aproximadamente 20% de todo consumo de combustíveis no setor de transporte se encaixa como combustíveis renováveis. Nesse sentido, é crucial garantir a segurança de produção, transporte e armazenamento de qualquer líquido combustível a partir do conhecimento de propriedades termodinâmicas (NASCIMENTO, 2020). Em especial, torna-se fundamental o conhecimento de uma propriedade denominada ponto de fulgor (FP, do inglês *Flash Point*) que consiste em uma medida de inflamabilidade de líquidos combustíveis, isso ocorre por conta da liberação de uma quantidade de vapor suficiente para ignição desse fluido (LEES, 1996). De maneira clássica, os valores de FP podem ser obtidos de forma experimental, entretanto, a literatura dispõe de uma base de dados enxuta, o que torna a realização experimental para inúmeras substâncias inviável. Por isso, desenvolveram-se modelos termodinâmicos que buscam obter esse dado de forma ágil e precisa.

Diante deste contexto, o FLAMMA (*FLAsh point Multicomponent: Methods and Algorithm*) foi desenvolvido com o intuito de ser uma ferramenta capaz de prever valores de ponto de fulgor, conforme os modelos termodinâmicos dispostos na literatura. O FLAMMA foi desenvolvido com base em programação orientada à objetos, utilizando a linguagem Python.

Com intuito de apresentar todas as funcionalidades da aba de resultados, um estudo de caso considerando uma mistura binária de Etanol e Laurato de etila foi elaborado. Os modelos termodinâmicos de Wilson, NRTL e UNIQUAC foram selecionados para simulação do FP de 10 combinações distintas da fração molar dos componentes da mistura. Em seguida, os dados experimentais de FP da mistura foram carregados no FLAMMA. Esses valores foram utilizados para ajuste de parâmetros dos modelos termodinâmicos através de um algoritmo de regressão disponível no simulador.

Ressalta-se que o usuário pode analisar os resultados gerados tanto em forma de gráfico, quanto em tabela. Além disso, o botão “Load Excel” permite carregar os dados experimentais para a interface do FLAMMA. Desta forma, o usuário tem acesso ao botão de “Fit” cujo intuito é calibrar os parâmetros dos modelos termodinâmicos para melhor reprodutibilidade dos dados experimentais. Desse modo, após a inserção dos dados experimentais no FLAMMA foi feito o ajuste para os três modelos mencionados anteriormente e os resultados são apresentados na Figura 1.

Figura 1. Resultados da simulação após ajuste de parâmetros.



É possível observar os modelos ajustados a partir da identificação “f_” antes do nome do modelo termodinâmico. No presente contexto, nota-se que ao analisar o parâmetro estatístico de R^2 é possível dizer que o modelo de NRTL foi o modelo que melhor previu os dados antes do ajuste dos parâmetros segundo a Tabela 1. Entretanto, após a calibração dos parâmetros termodinâmicos o modelo de Wilson foi o que obteve o melhor ajuste. Portanto, foi o que melhor se ajustou aos dados experimentais após a otimização dos parâmetros do modelo.

Tabela 1. Tabela com modelos antes e após ajuste.

Parâmetros	Modelos					
	Wilson	f_Wilson	NRTL	f_NRTL	UNIQUAC	f_UNIQUAC
MAE	-7,847	-0,00024	-4,504603	-0,00597	-7,942205	-0,028463
AARE	7,847	0,112972	4,504603	0,127364	7,942205	0,175290
RMSE	26,770	0,394866	15,698107	0,449281	27,071937	0,578359
R2	0,295	0,998298	0,476845	0,997774	0,29185	0,996377

Portanto, o simulador FLAMMA mostrou-se uma ferramenta capaz de simular dados de ponto de fulgor de misturas de biocombustíveis.

Os autores agradecem a FAPESC pelo suporte financeiro através dos projetos 2021TR794 e 2021TR000544.

Palavras-chave: Biocombustíveis. Ponto de fulgor. Ajuste de parâmetros. Software.