

DESENVOLVIMENTO DE UM SIMULADOR PARA O CÁLCULO DE PONTO DE FULGOR DE MISTURAS DE BIOCOMBUSTÍVEIS E HIDROCARBONETOS¹

Tiffany Cristine Franzoi², Antonio Marinho Barbosa Neto³, João Victor dos Reis Bertol⁴.

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

O Brasil é referência mundial em biocombustíveis. De acordo com a OCDE/FAO (2020), o Brasil é atualmente o único país do mundo em que o uso de biocombustíveis supera 10% da demanda de energia para transportes. Para garantir a segurança durante a produção, transporte e armazenamento de combustíveis líquidos é necessário conhecer uma série de propriedades termodinâmicas (NASCIMENTO, 2020). Sendo uma dessas propriedades o ponto de fulgor (FP, do inglês *Flash Point*), definido como a menor temperatura na qual o produto gera a quantidade de vapor suficiente para inflamar em condições controladas. Além disso, o FP está associado à inflamabilidade do combustível e indica as medidas precaucionais a serem tomadas durante o manuseio, transporte, armazenamento e uso do produto (ALEME et al., 2012). A determinação do ponto de fulgor por meio de um modelo computacional é de extrema importância para a indústria, e dentre suas vantagens têm-se a facilidade e rapidez de uso, já que quando comparado à parte experimental, há um menor dispêndio de recursos tais como tempo e infraestrutura laboratorial.

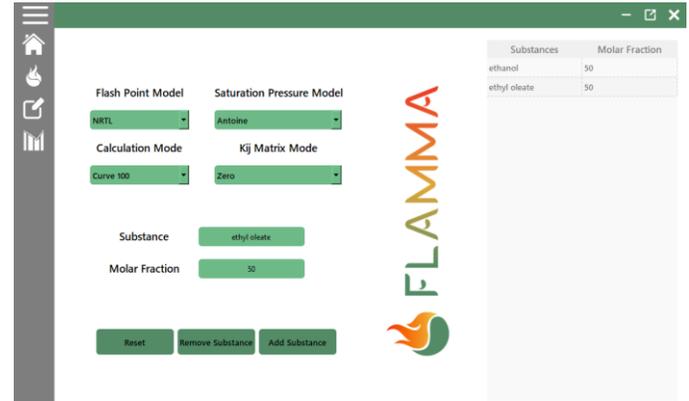
Corroborando a ideia de um modelo computacional que calcule o FP e propriedades termodinâmicas, o FLAMMA (do inglês, FLAsh point Multicomponent: Methods and Algorithm) foi desenvolvido a partir de uma estrutura de dados que contém quatro grandes módulos, o Kernel, a Base de Dados, a Interface Gráfica e o DataTransfer. Desenvolvido utilizando a linguagem de programação Python e técnicas de Programação Orientada à Objetos (POO). As informações da Base de Dados são carregadas na Interface Gráfica de acordo com os parâmetros selecionados pelo usuário, e quando a simulação é executada o DataTransfer transfere os dados do módulo Interface Gráfica para o Kernel e retorna os resultados obtidos para a interface.

A interface do FLAMMA tem sido desenvolvida através do *software* gráfico QtDesigner em conjunto com funções implementadas em Python. A GUI (do inglês, *Graphical User Interface*) do FLAMMA é composta pela aba principal (Home Page), item *i* da Figura 1, e pela aba de seleção de modelos, modos de cálculo e substâncias (FLAMMA Main), conforme mostrado no item *ii*. Os itens *iii* e *iv* da Figura 1, respectivamente, apresentam a aba de edição de propriedades (Edit Properties) e a aba de resultados (Results). Na aba de resultados realiza-se a exibição gráfica ou em modo tabela dos resultados da simulação do FP, bem como apresenta a análise estatísticas entre dados experimentais e simulados.

Figura 1. Abas do software FLAMMA.



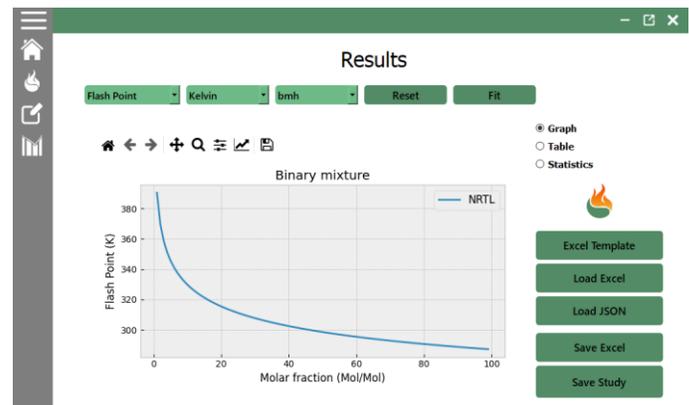
i – Home Page



ii – FLAMMA Main

General Properties	
Substances	ethanol
Flash Point	287.0
A Antoine	7.37229
B Antoine	1670.409
C Antoine	-40.191
nCH3	0.0
nCH2	0.0
nCDC	0.0
nCOO	0.0
Ncs	0.0
Substances	ethyl oleate
Flash Point	457.7
A Antoine	5.2087
B Antoine	1183.11
C Antoine	-252.24299999999997
nCH3	2.0
nCH2	15.0
nCDC	2.0
nCOO	1.0
Ncs	2.0

iii – Edit Properties



iv – Results

Além disso, o FLAMMA conta com o arquivo executável para que os usuários possam utilizar o programa em seus computadores de forma prática e eficiente, sem a necessidade de ter conhecimentos em programação ou compilação de códigos-fonte.

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

Palavras-chave: Biocombustíveis. Ponto de fulgor. *Software*.