

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Estimação dos Parâmetros Cinéticos do Processo de Transesterificação por Enxame de Partículas

Gabriel Pereira de Paula ¹

Licenciatura em Matemática, UTFPR, Cornélio Procópio

Antonio Augusto Ignacio ²

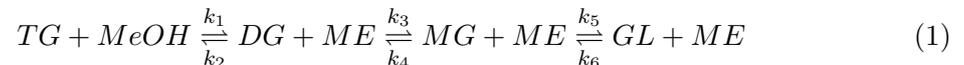
Licenciatura em Ciências Biológicas, UTFPR, Santa Helena

Evandro Alves Nakajima ³

Coordenação do Curso de Ciência da Computação, UTFPR, Santa Helena

1 Introdução

A primeira máquina a diesel foi apresentada em 1900 por Rudolf Diesel, funcionando 100% a base de óleo de amendoim e marcando os anos seguintes da pesquisa direcionada a fontes de energias limpas e renováveis. O biodiesel pode ser produzido a partir de óleos vegetais, óleo de cozinha usado, gorduras animais, dentre outros [1]. Dentre as formas de obtenção do biodiesel pode-se citar o processo de transesterificação de triglicerídeos (TG), o qual é explicitado pela equação (1):



Em que os termos TG , DG , MG , GL , ME e $MeOH$ representam respectivamente: triglicerídeos, diglicerídeos, monoglicerídeos, glicerol, metil éster (biodiesel) e metanol. Os parâmetros k_i , $i = 1, \dots, 6$ (constantes de velocidade de reação) devem ser estimados para fins de otimização do processo produtivo, isto é, produzir uma maior quantidade de biodiesel com a menor quantidade possível de substratos e no menor tempo possível. Dentre os métodos de estimação de parâmetros, pode-se citar o método de otimização por enxame de partículas, que se trata de técnica de otimização estocástica criada em 1995 por James Kennedy e Russell Eberhart [2].

Para o processo de transesterificação realizam-se os balanços de massa para os seis componentes envolvidos, os quais são exemplificados pelo balanço do componente DG :

$$\frac{dC_{DG}}{dt} = k_1 C_{TG} C_{MeOH} - k_2 C_{DG} C_{ME} - k_3 C_{DG} C_{MeOH} + k_4 C_{MG} C_{ME} \quad (2)$$

onde C_i representa a concentração molar do componente i . O método de otimização por enxame de partículas foi implementado no software Maple19, considerando os parâmetros k_i a serem otimizados. Para cada k_i são inicialmente definidas M partículas k_{ij} , $j = 1, \dots, M$

¹gabrielp.2018@alunos.utfpr.edu.br

²ignacio@alunos.utfpr.edu.br

³enakajima@utfpr.edu.br

com valores randômicos entre 0 e 2. Para cada j , o sistema de equações diferenciais que representam os balanços de massa é resolvido pelo método numérico de Runge-Kutta, podendo-se assim definir a função objetivo dada pela somatória dos erros absolutos entre os valores obtidos pelo modelo e os dados experimentais extraídos de [3].

Dentre todos os índices j da iteração realizada, o índice que obteve melhor resultado (menor valor para função objetivo) é definido como melhor local. Assim, para cada partícula, é definido um vetor dentro do espaço de busca, dado pela diferença entre cada partícula e o melhor local. O processo é então repetido N vezes e, a cada iteração, as partículas se aproximam parcialmente do melhor local e do melhor global.

2 Resultados e Conclusão

Os valores dos parâmetros obtidos pelo método aplicado foram: $k_1 = 0,036$, $k_2 = 0,080$, $k_3 = 0,140$, $k_4 = 1,491$, $k_5 = 0,383$ e $k_6 = 0,009$. A somatória dos erros absolutos entre os dados experimentais e o modelo foi de aproximadamente 2,475. Pode-se concluir, com os resultados encontrados (Figura 1) e uma análise dos erros individuais, que o modelo com os dados estimados representa de maneira confiável os dados experimentais.

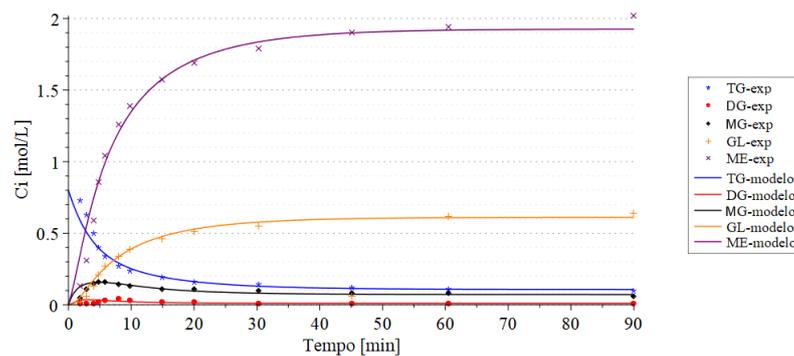


Figura 1: Dados do modelo comparados aos dados experimentais extraídos de [3]

Referências

- [1] Balat, M. and Balat, H. A critical review of bio-diesel as a vehicular fuel. *Energy conversion and management*, volume 49, pages 2727–2741, 2008. DOI: 10.1016/j.enconman.2008.03.016.
- [2] Kennedy, J. and Eberhart, R. Particle swarm optimization. IEEE, *Proceedings of ICNN'95 - International Conference on Neural Networks*, volume 4, pages 1942-1948, 1995. DOI: 10.1109/ICNN.1995.488968.
- [3] Nouredini, H. and Zhu, D. Kinetics of transesterification of soybean oil. *Journal of the American Oil Chemists' Society*, volume 74, pages 1457-1463, 1997. DOI: 10.1007/s11746-997-0254-2.