

## Aplicação do simplex-centróide com variável de processo: Otimização das condições de obtenção de biodiesel B100 de óleo de girassol.

Dionísio Borsato (PQ)\*, Hagata C. da Silva (IC), Gabriel H. Dias (PG), Rodolfo L. Coppo (PG), Elisângela T. da Silva (IC), Juliane R. Orives (IC), Kelly R. Spacino (IC), Karina G. Angilelli (PG). \*dborsato@uel.br

Departamento de Química, Universidade Estadual de Londrina, CP6001, CEP 86051-990. Londrina-PR

Palavras Chave: Biodiesel, Transesterificação, Delineamento de misturas.

### Introdução

O biodiesel pode ser obtido, de forma viável, por reações de transesterificações dos óleos vegetais que consiste na reação entre a mistura de um triglicerídeo com um álcool, na presença de catalisador, para formar ésteres e um subproduto, o glicerol. Dentre os álcoois empregados na transesterificação de óleos e gorduras, os mais utilizados são o metanol e o etanol. Muitas pesquisas tem sido realizadas utilizando delineamentos fatoriais com o objetivo de otimizar as condições de obtenção do biodiesel utilizando metanol ou etanol como agente de transesterificação<sup>1</sup>. Porém, até onde se sabe, não existem estudos utilizando o delineamento de mistura simplex-centróide, para comparar variáveis de processo, utilizando algoritmos matemáticos para otimizar as condições de obtenção de biodiesel de óleo de girassol.

O presente trabalho teve como objetivo apresentar uma análise detalhada das condições de obtenção do biodiesel, a partir da reação de transesterificação de óleo de girassol com metanol ou etanol, como variável de processo, examinando a influência de diferentes tipos de catalisadores no rendimento da reação empregando um delineamento de mistura.

### Resultados e Discussão

A reação de transesterificação dos triglicerídeos do óleo de girassol refinado, em triplicata, foi efetuada com metanol e etanol absoluto, grau analítico, sob aquecimento, a 60 e 70°C, respectivamente, e agitação lenta. Como catalisadores utilizou-se o hidróxido de potássio, hidróxido de sódio, metóxido e etóxido de sódio de acordo com o delineamento de mistura simplex-centróide<sup>2</sup>.

O glicerol foi separado do biodiesel B100 através de decantação em um funil de separação de 250 mL. Para promover a separação dos resíduos dos catalisadores, glicerol, triglicerídeos e álcool, os ésteres obtidos foram lavados com solução aquosa de ácido acético glacial a 1,5%, à 80°C e, em seguida, lavados com água, à 80°C, até pH neutro e desumidificados em estufa a 140°C por 2 horas. O rendimento foi calculado de acordo com a estequiometria da reação de transesterificação, utilizando como base de cálculo o ácido oléico, a 35ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

massa do biodiesel obtido e a massa de óleo de girassol utilizada.

O modelo polinomial obtido combinou os componentes de mistura (x) com variável de processo (z). O delineamento de mistura simplex-centróide foi associado a uma polinomial onde o ensaio realizado com o metanol foi codificado para z = +1 e aquele realizado com etanol foi codificado para z = -1.

$$Y(x, z) = 83,46x_1 + 4,47x_1z + 92,255x_2 + 2,605x_2z + 89,4x_3 + 8,9x_3z + 6,09x_1x_2 - 3,67x_1x_2z + 11,52x_1x_3 - 12,46x_1x_3z + 2,91x_2x_3 - 8,19x_2x_3z - 13,275x_1x_2x_3 - 7,635x_1x_2x_3z$$

Comparando-se a média de todos os tratamentos realizados com metanol e com etanol, o teste de Tukey mostrou haver diferença significativa, em nível de 5%, entre eles. Além disto, o teste de Levene's mostrou que a hipótese de homogeneidade da variância pode ser aceita (p=46,08%).

Aplicando-se na equação conjunta os valores otimizados da concentração dos catalisadores, foram obtidos os rendimentos, isto é, 98,3% e 89,65% quando se utilizou o metanol e etanol respectivamente mostrando que a equação, que inclui a variável de processo, pode ser utilizada para fins preditivos.

### Conclusões

Através dos resultados obtidos podemos concluir que a rota etílica, na produção de biodiesel de óleo de girassol, quando comparada com a rota metílica, se mostrou inferior quanto ao rendimento da reação.

O delineamento de mistura simplex-centróide mostrou-se uma ferramenta adequada para otimizar as condições de obtenção do biodiesel B100 de óleo de girassol utilizando diferentes catalisadores tendo o metanol e etanol como variável de processo.

### Agradecimentos

A UEL e ao CNPq pela concessão de bolsa

<sup>1</sup> Borsato, D., et al, Quim. Nova **2010**, *33*, 1726.

<sup>2</sup> Cornell, J.A.; Deng, J.C. *J. Food Sci.* **1982**, *47*, 836.