

A SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL NA ANÁLISE COMPARATIVA DE REATORES PARA A PRODUÇÃO DE BIODIESEL DE SOJAS

Modelagem Termodinâmica, Análise de Sensibilidade e Validação Estatística via DWSIM

Elton Pereira de Alencar¹

<https://orcid.org/0009-0005-2773-317X>

Arley Silva Rossi²

<https://orcid.org/0009-0000-4844-4477>

RESUMO

A transição energética global e a busca por fontes sustentáveis posicionam o biodiesel como vetor estratégico para a substituição de combustíveis fósseis. Este estudo desenvolve uma análise comparativa detalhada da produção de biodiesel a partir do óleo de soja e metanol, avaliando o desempenho e a eficiência de diferentes arquiteturas de reatores industriais. Foi implementado um sistema de simulação computacional utilizando o software DWSIM para modelar a reação de transesterificação da trilinoleína, catalisada por hidróxido de sódio. A operação foi simulada sob diferentes condições de temperatura ($60 - 70^{\circ}C$), integrando uma coluna de destilação para a recuperação do álcool não reagido. Os resultados demonstraram que o Reator de Tanque Agitado Contínuo (CSTR) apresenta desempenho significativamente superior ao Reator de Fluxo em Pistão (PFR). O CSTR alcançou uma produção média de $0,3233 \frac{mol}{s}$, estabilizando o rendimento a partir de $68^{\circ}C$, enquanto o PFR obteve média de apenas $0,0052 \frac{mol}{s}$ sob condições idênticas. A análise estatística confirmou a superioridade do CSTR com alta significância ($p < 0,0001$). Os achados demonstram a viabilidade técnica da configuração CSTR para escalabilidade industrial, contribuindo para a otimização energética na produção sustentável de biocombustíveis.

Palavras-chave

Biodiesel de soja; simulação computacional; reatores contínuos; transesterificação; DWSIM.

Submetido em: 09/05/2026 – Aprovado em: 15/06/2026 – Publicado em: 15/06/2006

1 Graduando de Engenharia Química, Universidade Federal do Amazonas (UFAM), AM, eltonalencar05@gmail.com

2 Doutor em Engenharia Química, Universidade Federal do Amazonas (UFAM), AM, arleyrossi@ufam.edu.br



COMPUTATIONAL SIMULATION IN THE COMPARATIVE ANALYSIS OF REACTORS FOR SOYBEAN BIODIESEL PRODUCTION

Thermodynamic Modeling, Sensitivity Analysis, and Statistical Validation via DWSIM.

ABSTRACT

The global energy transition and the search for sustainable sources position biodiesel as a strategic vector for replacing fossil fuels. This study develops a detailed comparative analysis of biodiesel production from soybean oil and methanol, evaluating the performance and efficiency of different industrial reactor architectures. A computational simulation system using DWSIM software was implemented to model the transesterification reaction of trilinolein, catalyzed by sodium hydroxide. The operation was simulated under different temperature conditions (60-70° C), integrating a distillation column for the recovery of unreacted alcohol. The results demonstrated that the Continuous Stirred-Tank Reactor (CSTR) presents a significantly superior performance compared to the Plug Flow Reactor (PFR). The CSTR achieved an average production of 0.3233 mol/s, stabilizing the yield from 68° C, while the PFR obtained an average of only 0.0052 mol/s under identical conditions. Statistical analysis confirmed the superiority of the CSTR with high significance ($p < 0.0001$). The findings demonstrate the technical viability of the CSTR configuration for industrial scalability, contributing to energy optimization in the sustainable production of biofuels.

Keywords

Soybean biodiesel; Computational simulation; Continuous reactors; Transesterification; DWSIM.

1 INTRODUÇÃO

A crise climática global e a crescente necessidade de mitigar os impactos ambientais decorrentes do uso extensivo de combustíveis fósseis têm impulsionado a investigação e o desenvolvimento de fontes energéticas mais sustentáveis (IPCC, 2023; IEA, 2021). Nesse cenário, o biodiesel desponta como uma alternativa estratégica e promissora por ser produzido a partir de fontes renováveis, como óleos vegetais, gorduras animais e óleos residuais (IPCC, 2022; IEA, 2021). Além de sua origem biológica, este combustível apresenta um potencial significativo para reduzir as emissões de gases de efeito estufa em comparação com os derivados do petróleo, contribuindo para as metas globais de descarbonização (IEA, 2021; ANP, 2017). No contexto brasileiro, o óleo de soja assume papel de protagonismo como matéria-prima, devido à sua ampla disponibilidade em larga escala, cadeia produtiva consolidada e características químicas favoráveis (IEA, 2023), destacando-se pelo elevado teor de ácidos graxos insaturados, como os ácidos linoleico e oleico.

A transformação industrial do óleo de soja em biodiesel envolve uma sequência rigorosa de operações unitárias essenciais para garantir a qualidade do produto final. O processo inicia-se com o pré-tratamento para a remoção de impurezas da matéria-prima. A etapa central consiste na reação de transesterificação, na qual o óleo reage com um álcool de cadeia curta, geralmente o metanol, na presença de um catalisador, como o hidróxido de sódio (NaOH). Essa reação química converte os triacilglicerídeos (como a trilinoleína) em ésteres metílicos (biodiesel) e glicerina (IEA, 2021). Após a reação, o biodiesel bruto passa por processos de separação e purificação, incluindo etapas de lavagem e secagem, para atingir as especificações técnicas exigidas pelos órgãos reguladores, como a Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) (ANP, 2017).

A eficácia desse sistema de produção é altamente dependente da escolha e do dimensionamento dos reatores químicos empregados, uma vez que o rendimento e a eficiência podem variar conforme as condições operacionais. Nesse sentido, a modelagem computacional e a simulação de processos desempenham um papel vital na engenharia moderna, permitindo a compreensão e a otimização de sistemas complexos de maneira precisa, segura e econômica. Para este fim, a utilização do software DWSIM, um simulador de processos de código aberto, modular e compatível com o padrão CAPE-OPEN, tem se mostrado uma ferramenta robusta e validada pela literatura acadêmica para o estudo de rotas completas de biocombustíveis.

Este estudo propõe uma análise comparativa detalhada com foco em duas configurações clássicas de reatores de fluxo contínuo: o Reator de Tanque Agitado Contínuo (CSTR) e o Reator de Fluxo em Pistão (PFR). A hipótese central que norteia a investigação sugere que o reator CSTR apresentará uma maior eficiência de conversão e rendimento global sob as mesmas condições operacionais simuladas.

Tal vantagem é atribuída a um controle possivelmente mais preciso do tempo de residência e a uma transferência de massa e calor mais homogênea, fatores que são críticos para a cinética da reação de transesterificação.

O objetivo central desta pesquisa é, portanto, investigar sistematicamente como as características intrínsecas de cada reator influenciam os principais parâmetros de produção, como a conversão do óleo e o rendimento em ésteres. Através da coleta de parâmetros de processo e da realização de estudos de sensibilidade no ambiente DWSIM, busca-se validar a configuração que maximize a produtividade. Os resultados obtidos pretendem fornecer insights valiosos para o aprimoramento dos processos industriais de fabricação de biodiesel, promovendo a implementação de práticas mais sustentáveis e economicamente viáveis na indústria de biocombustíveis.

2 REVISÃO DE LITERATURA

2.1 Química Da Produção De Biodiesel (Transesterificação)

Tradicionalmente, a transesterificação é conduzida sob catálise básica homogênea utilizando hidróxidos ou metóxidos de sódio e potássio (NaOH, KOH, CH₃ONa), métodos que proporcionam elevadas taxas de conversão operando em condições moderadas de temperatura (frequentemente entre 50 °C e 65 °C) (MANDARI; DEVARAI, 2022). Do ponto de vista cinético, o mecanismo ocorre em três etapas consecutivas e reversíveis, em que os triacilglicerídeos (TG) são convertidos sequencialmente em diacilglicerídeos (DG), monoacilglicerídeos (MG) e, por fim, glicerol, gerando uma molécula de éster em cada etapa (NOUREDDINI; ZHU, 1997; TREJO-ZÁRRAGA et al., 2018). Estudos cinéticos, como o clássico modelo de Nouredini e Zhu, demonstram que, sob uma razão molar de metanol para óleo em torno de 6:1, a reação segue uma cinética de segunda ordem após um período inicial controlado por limitações de transferência de massa inerentes ao contato entre fases imiscíveis (NOUREDDINI; ZHU, 1997). No entanto, sob um grande excesso de álcool, a concentração deste permanece essencialmente constante, e o comportamento aproxima-se de uma cinética de pseudo-primeira ordem (ENCINAR et al., 2022). Apesar de sua eficiência em nível cinético, a catálise homogênea apresenta desafios industriais significativos, incluindo a formação indesejada de sabões (saponificação) na presença de água ou ácidos graxos livres, além da complexidade e do alto custo ambiental das etapas de purificação e lavagem com água para a remoção do catalisador solúvel (MANDARI; DEVARAI, 2022).

Para mitigar essas limitações, a literatura destaca o desenvolvimento da catálise heterogênea baseada em sólidos alcalinos ou ácidos.

Materiais como CaO, MgO, óxidos mistos e catalisadores derivados de resíduos de biomassa (como conchas de ostra calcinadas impregnadas com NaOH) permitem a fácil separação do catalisador e a redução da geração de efluentes (JIN et al., 2017; MANDARI; DEVARAI, 2022). Contudo, sistemas heterogêneos frequentemente demandam condições mais severas, como temperaturas ou pressões elevadas e agitação vigorosa, a fim de superar as consideráveis resistências à transferência de massa impostas pelo sistema trifásico sólido-líquido-líquido (TREJO-ZÁRRAGA et al., 2018). O desenvolvimento de nanocatalisadores tem surgido como uma estratégia promissora para ampliar a área superficial e melhorar as taxas reacionais, atingindo rendimentos superiores a 98% (MANDARI; DEVARAI, 2022). Além disso, a transesterificação *in situ* (ou direta), que combina a extração do óleo das sementes e a reação em uma única etapa processual, tem demonstrado grande viabilidade econômica e eficiência na conversão de culturas não comestíveis, como *Jatropha curcas* e *Ricinus communis* (ROMERO-IBARRA et al., 2022).

Outras abordagens avançadas incluem a via enzimática utilizando lipases, que apresenta notável tolerância à umidade e à acidez elevada, embora o custo dos biocatalisadores e os longos tempos de reação ainda restrinjam sua aplicação irrestrita em larga escala industrial (MANDARI; DEVARAI, 2022). Similarmente, a rota via fluidos supercríticos (como o metanol supercrítico) dispensa completamente o uso de catalisadores e apresenta tolerância a contaminantes do óleo, mas os elevados requerimentos energéticos e de pressão limitam sua viabilidade econômica atual (MANDARI; DEVARAI, 2022; TREJO-ZÁRRAGA et al., 2018). Em suma, a escolha da rota reacional e a otimização rigorosa baseada na modelagem de parâmetros cinéticos, termodinâmicos e de transferência de massa continuam sendo os pilares fundamentais para o dimensionamento adequado de reatores e o incremento da rentabilidade na produção de biodiesel, garantindo os padrões de qualidade exigidos internacionalmente (TREJO-ZÁRRAGA et al., 2018).

2.2 Simulação De Processos Na Engenharia Química

A evolução contemporânea da engenharia química e da manufatura industrial é impulsionada pela convergência entre simulação de processos avançada, inteligência artificial (IA), gêmeos digitais e modelagem financeira rigorosa (KHANLARI, 2026; GALLAGHER, 2026; DWSIM, 2026). Historicamente, a simulação de processos baseava-se predominantemente em modelos de estado estacionário para prever o comportamento de plantas sob condições fixas, utilizando softwares amplamente consolidados como Aspen Plus, HYSYS e CHEMCAD (KHANLARI, 2026; GALLAGHER, 2026) e COMSOL Multiphysics para o dimensionamento de equipamentos e análises termodinâmicas e multifísicas complexas.

No entanto, a transição tecnológica rumo a 2026 marca uma profunda mudança de paradigma com a ascensão dos gêmeos digitais (*Digital Twins*), que atuam como réplicas virtuais dinâmicas, sincronizadas continuamente com os ativos físicos por meio de fluxos de dados em tempo real (KHANLARI, 2026; GALLAGHER, 2026; DWSIM, 2026) e sensores da Internet das Coisas (IoT). Esta infraestrutura digital, quando aliada à Inteligência Artificial por meio de Redes Neurais (DWSIM, 2026) Informadas pela Física (PINNs) e modelos substitutos (*surrogate models*) (ANDREASEN, 2020), possibilita a aceleração dos tempos de simulação computacional em fatores de 100 a 1000 vezes, permitindo otimizações e manutenções preditivas sem violar os princípios fundamentais das leis da física. Paralelamente, ao explorar escalas ainda menores, a computação quântica consolida-se como a ferramenta definitiva para a modelagem molecular e atômica, resolvendo equações intratáveis para a computação clássica e facilitando o design racional de materiais avançados, tais como geradores de ácido foto-ativos (PAGs) essenciais para a indústria de semicondutores.

2.3 Validação Do Software Dwsim E Padrão Cape-Open

A simulação de processos químicos é uma ferramenta fundamental na engenharia moderna, tradicionalmente dominada por softwares comerciais de alto custo de licenciamento, como Aspen Plus e Aspen HYSYS (ANDREASEN, 2022; DATACOR, 2026). No entanto, a literatura recente destaca a crescente validação e adoção de simuladores de código aberto, com ênfase particular no software DWSIM, que demonstra uma confiabilidade técnica comparável às alternativas proprietárias em diversas aplicações industriais e acadêmicas (DATACOR, 2026). O estudo de Tangsriwong et al. (2020), focado na modelagem de processos químicos usando softwares comerciais e de código aberto, confirma que as discrepâncias nos resultados de balanço de massa e energia entre o Aspen Plus e o DWSIM são geralmente inferiores a 5% (TANGSRIWONG *et al.*, 2020). Da mesma forma, Andreasen (2022) realiza uma avaliação rigorosa e abrangente do DWSIM utilizando o modelo de uma planta de separação de óleo e gás em escala real, atestando que os resultados globais obtidos apresentam desvios menores que 1% quando comparados às ferramentas comerciais consolidadas, reforçando a aplicabilidade do software gratuito em ambientes profissionais (ANDREASEN, 2022).

No campo da termodinâmica, a modelagem precisa de gases naturais e misturas afins depende da utilização de pacotes de propriedades robustos, como a equação de estado GERG-2008 (BALADÃO; SOARES; FERNANDES, 2018; RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM,). Baladão et al. (2018) comparam as equações GERG-2008 e Peng-Robinson para misturas de gás natural, concluindo que o modelo GERG-2008 atinge níveis de precisão superiores (com desvios de 0,1% a 1%) na determinação de densidade e pressão, embora exija um tempo computacional superior devido à complexidade matemática de suas iterações (BALADÃO; SOARES; FERNANDES, 2018).

Esta precisão ímpar é corroborada pela adoção do modelo GERG-2008 como padrão internacional ISO 20765-2 (LI *et al.*, 2025; RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM,). Este padrão viabiliza a sua aplicação no controle de redes de transporte de gás e na avaliação minuciosa do fator de compressibilidade em cenários modernos de dopagem com hidrogênio, conforme investigado pelo trabalho de Li *et al.* (2024), que testa as misturas sob variadas faixas de temperatura e alta pressão (LI *et al.*, 2025). O simulador DWSIM integra esses pacotes termodinâmicos avançados de forma nativa e disponibiliza algoritmos para cálculos de equilíbrio de fases e propriedades físicas (DWSIM, 2026).

A interoperabilidade de software é outro pilar essencial evidenciado de forma unânime na literatura por meio do padrão CAPE-OPEN. Morales Rodriguez *et al.* (2008) descrevem detalhadamente o uso de padrões CAPE-OPEN na integração de ferramentas de modelagem e simuladores de processo, ilustrando a comunicação e o fluxo de dados entre componentes como o ProSimPlus e o ICAS-MoT (MORALES RODRIGUEZ *et al.*, 2008). O DWSIM é reconhecido por sua conformidade impecável com esse padrão de interoperabilidade, permitindo a inserção de operações unitárias desenvolvidas por terceiros, como as colunas de destilação rigorosa do ChemSep, ou a integração de pacotes de propriedades externos nos seus fluxogramas de simulação (DWSIM, 2019a; CHEMSEP, 2021).

Diversos estudos aplicados exploram essas capacidades técnicas em cenários complexos de separação e conversão de energia. Shorey realiza uma simulação comparativa minuciosa de uma coluna de destilação de metanol e água usando DWSIM e ASPEN Plus, validando a eficácia do software livre para operar modelos rigorosos (RadFrac/Rigorous Column) na previsão de perfis de pureza e temperatura. Na área crítica de energias renováveis e descarbonização, Sekhar *et al.* (2026) demonstram a otimização da produção de hidrogênio líquido a partir de biogás através de reforma a vapor de metano (SMR) e liquefação criogênica, atingindo notáveis 78% de eficiência de gás frio utilizando exclusivamente simulação no DWSIM (SEKHAR *et al.*, 2026). Além disso, a utilidade do simulador estende-se a bioprocessos complexos; Sreemahadevan *et al.* (2024) avaliam a competência do DWSIM na simulação da produção de bioetanol a partir de biomassa lignocelulósica, validando-o como uma alternativa robusta e sem custos perante o SuperPro Designer ou o Aspen Plus para a simulação biotecnológica e análise tecno-econômica de plantas completas (SREEMAHADDEVAN; SIVAKUMAR; PALANISAMY, 2024). O desenvolvimento contínuo de suplementos (Add-In) para Microsoft Excel integrados ao DWSIM facilita cálculos termodinâmicos diretos e rotinas de "flash" em planilhas, ampliando a flexibilidade da análise analítica (DWSIM, 2019). De forma complementar, guias e revisões de mercado enfatizam que, enquanto simuladores comerciais consolidados como CHEMCAD ou softwares da AspenTech continuam presentes no topo do mercado corporativo, simuladores abertos avançam rapidamente ao incorporar integrações modernas com linguagens de script como Python e inovações baseadas em inteligência artificial (KHANLARI, 2026; GALLAGHER, 2026; DWSIM, 2026).

Essa ampla base de evidências bibliográficas comprova de forma incontestável que as soluções de simulação abertas contemporâneas já suportam o rigor industrial que outrora era domínio exclusivo de licenças comerciais.

2.4 Design E Comparação De Reatores Contínuos

O projeto de reatores químicos é um pilar fundamental da engenharia de processos, unindo a termodinâmica, a cinética química e os fenômenos de transporte para transformar matérias-primas de maneira eficiente. A literatura técnica destaca frequentemente dois arquétipos matemáticos ideais de escoamento contínuo: o Reator de Tanque Agitado Contínuo (CSTR) e o Reator de Fluxo em Pistão (PFR). No modelo do CSTR, postula-se que o conteúdo do reator encontra-se perfeitamente misturado, resultando em uma uniformidade espacial absoluta de concentração e temperatura, de modo que o balanço de massa determina que a reação ocorra ininterruptamente sob as concentrações diluídas da corrente de saída. Em franco contraste, o modelo PFR abstrai o movimento do fluido como pistões contínuos em um conduto cilíndrico, estipulando a ausência de dispersão ou mistura axial, aliada a uma mistura radial perfeita. Neste cenário, o balanço elementar de massa é modelado em um volume diferencial, resultando em uma concentração de reagentes e uma taxa de reação que decaem continuamente ao longo de toda a extensão longitudinal do tubo.

Em razão dessas distintas condições hidrodinâmicas, a eficiência volumétrica e a conversão diferem substancialmente entre os equipamentos contínuos. Estudos demonstram que, para reações de ordem positiva, a taxa cinética no PFR é inicialmente maximizada e sofre um decréscimo gradual, o que possibilita que determinado nível de conversão química seja alcançado em um volume de reator significativamente menor do que aquele exigido por um CSTR sob idênticas condições de temperatura. Para contornar as limitações de volume dos reatores de tanque, a engenharia frequentemente emprega uma configuração de múltiplos CSTRs dispostos em série, a qual, em limite assintótico, passa a aproximar-se do próprio comportamento cinético e de escoamento do PFR. Em redes que envolvem múltiplas reações químicas simultâneas ou consecutivas, a seletividade passa a depender das ordens das taxas relativas envolvidas no balanço. Se a cinética para o produto almejado possui uma ordem mais elevada em relação às reações paralelas indesejadas, a alta concentração preservada na entrada de um PFR fornece maior seletividade de conversão. Por outro lado, caso uma diluição imediata seja requerida para inibir reações parasitas de ordem superior, a utilização do CSTR demonstra-se estruturalmente como o arranjo preferencial.

O projeto de reatores químicos é um pilar fundamental da engenharia de processos, unindo a termodinâmica, a cinética química e os fenômenos de transporte para transformar matérias-primas de maneira eficiente.

A literatura técnica destaca frequentemente dois arquétipos matemáticos ideais de escoamento contínuo: o Reator de Tanque Agitado Contínuo (CSTR) e o Reator de Fluxo em Pistão (PFR) (ZAIDI, 2020). No modelo do CSTR, postula-se que o conteúdo do reator encontra-se perfeitamente misturado, resultando em uma uniformidade espacial absoluta de concentração e temperatura, de modo que o balanço de massa determina que a reação ocorra ininterruptamente sob as concentrações diluídas da corrente de saída (MUSHTAQ, 2014). Em franco contraste, o modelo PFR abstrai o movimento do fluido como pistões contínuos em um conduto cilíndrico, estipulando a ausência de dispersão ou mistura axial, aliada a uma mistura radial perfeita (ZAIDI, 2020). Neste cenário, o balanço elementar de massa é modelado em um volume diferencial, resultando em uma concentração de reagentes e uma taxa de reação que decaem continuamente ao longo de toda a extensão longitudinal do tubo (SKONECZNY, 2025; TUCKERMAN, 2022).

Em razão dessas distintas condições hidrodinâmicas, a eficiência volumétrica e a conversão diferem substancialmente entre os equipamentos contínuos (MUSHTAQ, 2014). Estudos demonstram que, para reações de ordem positiva, a taxa cinética no PFR é inicialmente maximizada e sofre um decréscimo gradual, o que possibilita que determinado nível de conversão química seja alcançado em um volume de reator significativamente menor do que aquele exigido por um CSTR sob idênticas condições de temperatura (MUSHTAQ, 2014; SKONECZNY, 2025; WITTRUP, 2007). Para contornar as limitações de volume dos reatores de tanque, a engenharia frequentemente emprega uma configuração de múltiplos CSTRs dispostos em série, a qual, em limite assintótico, passa a aproximar-se do próprio comportamento cinético e de escoamento do PFR (MUSHTAQ, 2014). Em redes que envolvem múltiplas reações químicas simultâneas ou consecutivas, a seletividade passa a depender das ordens das taxas relativas envolvidas no balanço (WITTRUP, 2007). Se a cinética para o produto almejado possui uma ordem mais elevada em relação às reações paralelas indesejadas, a alta concentração preservada na entrada de um PFR fornece maior seletividade de conversão (FOGLER; GURMEN, 2008; MUSHTAQ, 2014). Por outro lado, caso uma diluição imediata seja requerida para inibir reações parasitas de ordem superior, a utilização do CSTR demonstra-se estruturalmente como o arranjo preferencial (FOGLER; GURMEN, 2008; MUSHTAQ, 2014).

A transferência de calor e o balanço termodinâmico são determinantes complementares nas escolhas de projeto. O CSTR, graças à sua agitação e mistura vigorosa, proporciona um excelente controle de temperatura, mitigando severos riscos de instabilidade termodinâmica em reações em fase líquida intensamente exotérmicas (KARAKASIA, 2024; MUSHTAQ, 2014). O PFR, embora apresente rendimentos amplamente superiores no processamento de grandes volumes de fluxo gasoso na indústria petroquímica, demanda monitoramento térmico rigoroso (BAROZZI; SCOTTON; COPELLI, 2022; KARAKASIA, 2024).

Este reator apresenta sensibilidade paramétrica elevada e propensão ao desenvolvimento de gradientes com pontos quentes locais, capazes de desencadear falhas graves de segurança como o descontrole térmico ou "runaway" (BAROZZI; SCOTTON; COPELLI, 2022; MUSHTAQ, 2014). Para além dos parâmetros térmicos, os reatores industriais reais sofrem desvios de sua idealidade fluida, os quais são diagnosticados pela teoria empírica de Distribuição de Tempo de Residência (RTD) (AGGARWAL, 2024). Tal método mapeia o grau real de mistura dos traçadores, identificando anomalias no vaso como curtos-circuitos de fluxo ou zonas mortas estagnadas (FOGLER; GURMEN, 2008). A função teórica RTD do PFR idealiza-se por um pulso da função delta de Dirac, possuindo variância nula, e a do CSTR por um decaimento matemático exponencial, servindo ambas de modelo base para interpretações cinéticas empíricas (AGGARWAL, 2024; MUSHTAQ, 2014). Atualmente, o acoplamento analítico dessas formulações a robustos softwares de simulação termofluidodinâmica valida os balanços energéticos, assegurando níveis elevados de eficiência tecnológica e de estabilidade em operações químicas contínuas (MUSHTAQ, 2014; OCHOA-TAPIA; HERNANDEZ-RODRIGUEZ; ALVAREZ-RAMIREZ, 2025).

2.5 Estudos De Sensibilidade E Otimização Paramétrica

A otimização de processos químicos reacionais, como a transesterificação para a produção de biodiesel, exige uma compreensão profunda de como as variáveis independentes afetam o desempenho global do sistema (MANDARI; DEVARAI, 2022). Na simulação computacional, a análise de sensibilidade paramétrica consolida-se como uma ferramenta analítica indispensável (WEN; PETERA, 2015). Ela permite mapear o comportamento dinâmico da planta frente a flutuações operacionais, identificando com precisão as condições termodinâmicas que maximizam a conversão dos triacilglicerídeos em ésteres metílicos e minimizam o consumo energético (WEN; PETERA, 2015).

Nesse contexto, variáveis macroscópicas como a temperatura de reação, a pressão do sistema e a razão molar entre o álcool e o óleo exercem impactos diretos e significativos na cinética do processo (MANDARI; DEVARAI, 2022). O incremento térmico, por exemplo, atua de maneira expressiva na redução da viscosidade da mistura bifásica e no aumento da constante de velocidade da reação segundo o modelo de Arrhenius, favorecendo a transferência de massa. Contudo, é imperativo estabelecer um limite térmico operacional que evite a vaporização excessiva do metanol, o que poderia comprometer o tempo de residência da fase líquida e a saturação do meio.

Dessa forma, a aplicação sistemática de estudos de sensibilidade permite delinear a janela operacional ótima (envelope operacional) para as diferentes configurações de reatores (WEN; PETERA, 2015). Essa abordagem é essencial para suplantiar as barreiras cinéticas de mistura, garantindo a viabilidade técnica, a segurança do processo e a máxima eficiência energética na produção do biocombustível (WEN; PETERA, 2015).

2.6 Métodos Estatísticos Aplicados À Engenharia

A engenharia moderna tem adotado a simulação computacional como o núcleo central para o desenvolvimento e a validação de sistemas complexos, exigindo um rigoroso arcabouço de Verificação e Validação (V&V) para garantir a credibilidade dos modelos preditivos. Na literatura, a verificação é frequentemente definida como o processo de assegurar a integridade matemática e algorítmica do modelo, respondendo se o sistema está sendo construído corretamente, enquanto a validação foca na adequação do modelo à realidade física, questionando se o sistema correto está sendo construído para representar o fenômeno de interesse (SOLMAZ, 2023). Para sustentar as decisões derivadas de tais modelos, a análise estatística formal dos dados de saída da simulação consolida-se como uma etapa indispensável (LAKHLOUFI, 2026). Diferentemente de experimentos físicos isolados, onde as amostras podem ser tratadas como independentes e identicamente distribuídas, os dados gerados por simulações, especialmente em análises de estado estável, frequentemente exibem dependência seriada (autocorrelação) e viés de inicialização, também conhecido como período transitório ou "warm-up" (CAVDUR, 2014). Ignorar essa correlação temporal subestima drasticamente a variância da média amostral, resultando em intervalos de confiança artificialmente estreitos e, conseqüentemente, em conclusões estatísticas falsamente positivas (LAKHLOUFI, 2026). Para mitigar esses efeitos, os estudos recomendam a eliminação do período de aquecimento e o emprego de métodos como as Médias de Lotes (*Batch Means*) ou Replicações Independentes, abordagens projetadas para agrupar ou separar os dados de forma a recuperar a independência estatística necessária para as análises subsequentes (MENG, 2002; CAVDUR, 2014).

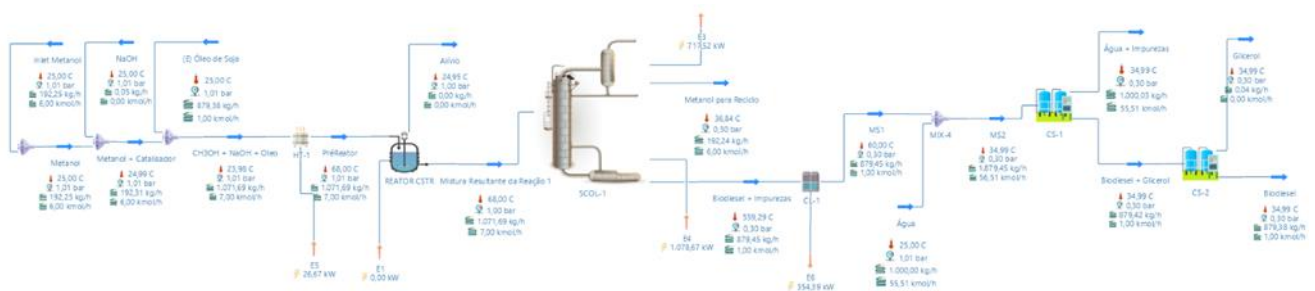
Uma vez que os dados de saída são adequadamente tratados e a sua independência é assegurada, os testes de hipótese são aplicados como o mecanismo fundamental para validar escolhas tecnológicas ou para comparar os resultados do modelo simulado com a realidade experimental (KLEIJNEN, 1995). Nesse aspecto, é amplamente reconhecido que os dados de simulação e os dados de campo raramente apresentam variâncias iguais, violando, assim, a premissa de homocedasticidade exigida pelo clássico teste t de Student (BUANA; ADNAN, 2025). Em resposta a esses cenários de heterocedasticidade, o teste t de Welch, também chamado de teste t para variâncias desiguais, é apontado como a metodologia mais robusta e confiável (GRAPHPAD SOFTWARE, 2024). O teste de Welch corrige essa discrepância ajustando os graus de liberdade através da aproximação de Welch-Satterthwaite, o que protege a avaliação contra a inflação das taxas de Erro Tipo I e mantém o poder estatístico adequado, mesmo quando os tamanhos das amostras e as variâncias populacionais diferem substancialmente (BUANA; ADNAN, 2025).

Além disso, estudos empíricos, incluindo simulações de Monte Carlo, indicam que o teste de Welch deve ser adotado como padrão em comparações de médias de grupos independentes, contornando a necessidade de testes preliminares de igualdade de variância que costumam ser pouco confiáveis na prática (BUANA; ADNAN, 2025; GRAPHPAD SOFTWARE, 2024). Por outro lado, quando as análises revelam que a premissa de normalidade dos dados foi drasticamente violada, a transição para métodos não-paramétricos, como o teste de Kruskal-Wallis, torna-se a alternativa ideal, visto que esses métodos utilizam o ranqueamento dos dados para lidar com assimetrias severas sem assumir distribuições específicas (MINITAB BLOG EDITOR, 2016). Em suma, a convergência metodológica entre o tratamento da autocorrelação, a correta quantificação das incertezas e a escolha criteriosa de testes estatísticos adaptados, como o teste de Welch, estabelece o alicerce metodológico imprescindível para a engenharia de sistemas guiada por dados

3 METODOLOGIA

Este estudo desenvolve uma análise comparativa do processo de produção de biodiesel a partir do óleo de soja, utilizando uma abordagem quantitativa baseada em modelagem termodinâmica e simulação computacional. A metodologia compreende cinco etapas principais: (i) definição dos parâmetros cinéticos e propriedades físico-químicas das matérias-primas; (ii) modelagem computacional do Reator de Tanque Agitado Contínuo (CSTR); (iii) configuração e modelagem do Reator de Fluxo em Pistão (PFR); (iv) execução de estudos de sensibilidade paramétrica sob diferentes gradientes de temperatura; e (v) tratamento estatístico dos dados para avaliação de desempenho. O fluxograma geral do processo químico simulado é apresentado na Figura 1.

Figura 1. Fluxograma do processo de produção de biodiesel a partir de óleo de soja (trilinoleína) com metanol e catalisador básico (NaOH).



Fonte: Elaborada pelo autor

3.1 Modelo Termodinâmico e Cinético

A precisão de uma simulação computacional aplicada à engenharia química depende intrinsecamente da rigorosa definição dos pacotes termodinâmicos e dos parâmetros cinéticos que governam as interações físico-químicas do sistema. No contexto da produção de biodiesel, a mistura reacional é caracterizada por uma complexa não-idealidade termodinâmica, decorrente da coexistência de compostos com polaridades substancialmente distintas. Para representar adequadamente os equilíbrios de fase no ambiente do simulador DWSIM, a configuração dos modelos de coeficiente de atividade e das propriedades termofísicas foi detalhada conforme os parâmetros ilustrados na Figura 2, garantindo a fidelidade dos balanços de massa e energia de todo o fluxograma.

Figura 2. Interface de configuração dos parâmetros termodinâmicos e cinéticos no simulador DWSIM.

The screenshot shows the 'Components, Stoichiometry and Reaction Orders' dialog box in DWSIM. It features a table with columns for Nome, Peso Molar, ΔHf (kJ/kg), Incluir, A.C, Stoich. Coeff., DO, and RO. The table lists Water, Methanol, Linoleic Acid, Glycerol, and Methyl linoleate. Below the table, there are sections for 'Estequiometria' (OK), 'Equilíbrio' (Equilibrium), and 'Calor de Reação (kJ/kmol_BC)' (-61360). The chemical equation is shown as $3\text{C}_3\text{H}_7\text{OH} + \text{C}_{57}\text{H}_{98}\text{O}_6 \leftrightarrow \text{HOCH}_2\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_2\text{OH} + 3\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CHCH}_2\text{CH}(\text{CH}_2)_7\text{COOCH}_3$. The 'Kinetic Reaction Parameters' section is set to 'Trilinolein' as the base component, 'Liquid' as the phase, and 'Molar Concentrations' as the units. The 'Especificação cinética' is set to 'Simple'. The 'Constantes de Taxa para Reactos Diretos e Inversos (k e k_i)' section shows 'Reação Direta' with 'Arrhenius' selected, a pre-exponential factor of 0,01, and an activation energy of 40000 J/mol. The 'Reação reversa' is also set to 'Arrhenius' with a pre-exponential factor of 0 and an activation energy of 0 cal/mol. The units for the rate constants are set to mol/[L.s].

Nome	Peso Molar	ΔHf (kJ/kg)	Incluir	A.C	Stoich. Coeff.	DO	RO
Water	18,0153	-13422,7	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0	0	0
Methanol	32,0419	-6271,17	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	-3	1	0
Linoleic Acid	280,45	-1587,51	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0	0	0
Glycerol	92,0938	-6328,33	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1	0	0
Methyl linoleate	294,472	-1760,2	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	3	0	0

Fonte: Elaborada pelo autor

A matéria-prima base selecionada, o óleo de soja, foi modelada assumindo a trilinoleína como seu componente majoritário e representativo. Essa aproximação metodológica permite que os cálculos cinéticos sejam direcionados a uma molécula de referência padronizada no banco de dados do simulador. A rota química central que fundamenta o processo é a reação de transesterificação, onde a interação entre a trilinoleína e o metanol promove a clivagem das ligações éster, resultando na formação de ésteres metílicos (biodiesel) e glicerol.

A representação esquemática das estruturas moleculares e o mecanismo de clivagem envolvido nesta transformação química podem ser observados na Figura 3. A reação global e reversível do processo é descrita pela seguinte equação química balanceada:

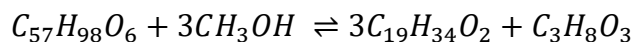
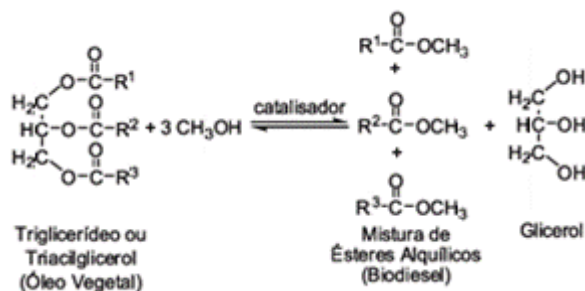


Figura 3. Representação esquemática da reação de transesterificação da trilinoleína com metanol para produção de biodiesel.



Fonte: (RINALDI et al., 2007)

Contudo, por se tratar de uma reação química em equilíbrio, a operação em proporção estequiométrica exata impõe severas limitações ao rendimento final da planta. Para contornar essa restrição termodinâmica e deslocar o equilíbrio reacional no sentido favorável à formação dos produtos, a simulação foi rigorosamente configurada para operar com uma proporção molar de 6:1 de metanol em relação ao triacilglicerídeo. Este excesso estequiométrico de álcool satura o meio continuamente, otimizando a taxa de conversão.

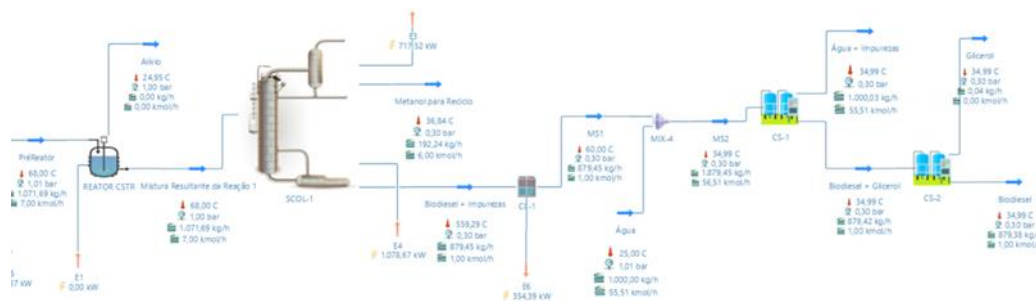
Para que a cinética da transesterificação ocorra em taxas operacionais e tempos de residência viáveis para a escala industrial, a presença de um agente catalítico é mandatória. No modelo virtual, estabeleceu-se o uso de hidróxido de sódio (NaOH) como catalisador básico homogêneo. A inserção dos dados cinéticos no gerenciador de reações baseou-se na formulação clássica de Arrhenius, na qual a constante de taxa reacional apresenta dependência exponencial em relação à temperatura sistêmica e à energia de ativação.

Essa dependência fenomenológica fundamentou diretamente a definição das condições de contorno da simulação. O pacote estruturado permitiu a avaliação preditiva do consumo dos reagentes em função da temperatura, submetida a um estudo de sensibilidade variando entre 60 °C e 70 °C. A modelagem precisa dessa cinética consolidou o pilar analítico necessário para a etapa subsequente: a avaliação do arranjo fluidodinâmico das geometrias dos reatores CSTR e PFR.

3.2 Arquitetura de Simulação no DWSIM

A etapa de engenharia de processos no ambiente DWSIM consistiu na elaboração rigorosa dos fluxogramas virtuais para a produção contínua de biodiesel, permitindo a avaliação de duas tecnologias distintas de reatores. A arquitetura da planta foi projetada para receber as correntes de alimentação de óleo de soja (trilinoleína) e metanol, pré-condicionadas termicamente, direcionando-as à unidade reacional. O layout geral do sistema de transesterificação simulado pode ser visualizado na Figura 4.

Figura 4. Fluxograma do processo de produção de biodiesel simulado no DWSIM, ilustrando a etapa reacional e a coluna de destilação para recuperação de metanol.



Fonte: Elaborada pelo autor

Inicialmente, a planta foi modelada empregando um Reator de Tanque Agitado Contínuo (CSTR). No simulador, o CSTR foi configurado assumindo mistura perfeita e operação em regime estacionário. Esta configuração teórica assegura homogeneidade de concentração e temperatura em todo o volume reacional, visando favorecer a taxa de conversão através do controle otimizado do tempo de residência das fases polares e apolares.

Para estabelecer uma base comparativa sólida sob condições termodinâmicas idênticas, o fluxograma foi posteriormente reestruturado, substituindo-se o módulo CSTR por um Reator de Fluxo em Pistão (PFR). A geometria do reator tubular foi dimensionada especificamente com um volume interno de 5m³ e um comprimento de tubo de 10m. Esta arquitetura permite a análise do gradiente de concentração ao longo do eixo axial do equipamento, avaliando seu impacto na eficiência cinética.

Complementarmente ao estágio reacional, ambas as configurações (CSTR e PFR) foram integradas a uma operação unitária de separação térmica. Uma coluna de destilação foi acoplada à jusante dos reatores com a finalidade primária de fracionar a corrente de saída e recuperar o excesso de metanol. A implementação desta coluna demonstrou-se altamente eficaz na separação do álcool não reagido da mistura de ésteres e glicerol, viabilizando seu reaproveitamento cíclico e contribuindo de forma decisiva para a sustentabilidade e viabilidade econômica do processo em escala industrial.

3.3 Estudo de Sensibilidade Paramétrica e Critérios de Avaliação

A otimização de processos químicos industriais exige uma compreensão profunda de como as flutuações nas variáveis independentes impactam os indicadores de desempenho e a estabilidade global da planta. No âmbito desta pesquisa, para determinar com precisão as condições operacionais que maximizam a conversão da trilinoleína em ésteres metílicos, empregou-se de forma sistemática a ferramenta de análise de sensibilidade paramétrica nativa do simulador DWSIM. Este recurso avançado permite a execução de múltiplas iterações automatizadas, variando-se os parâmetros de entrada dentro de limites predefinidos para mapear o comportamento dinâmico da planta em diferentes cenários operativos, sem a necessidade de intervenção manual ou reconfiguração do fluxograma em cada ponto de cálculo individual.

O estudo de sensibilidade concentrou-se primordialmente na análise da influência da temperatura e da pressão sobre a cinética da reação de transesterificação. A temperatura é reconhecida como uma variável crítica no sistema, pois afeta diretamente a constante de velocidade da reação segundo o modelo de Arrhenius, além de influenciar propriedades físicas fundamentais, como a viscosidade e a solubilidade mútua entre as fases oleosa e alcoólica, que são fatores determinantes para a transferência de massa. O intervalo de temperatura definido para a análise sistemática compreendeu a faixa de 60° C a 70° C . Esta delimitação estratégica fundamenta-se na necessidade de operar em condições otimizadas que favoreçam o rendimento sem exceder drasticamente o ponto de ebulição do metanol sob a pressão de projeto, buscando o equilíbrio ideal entre a aceleração da cinética reacional e a manutenção da estabilidade térmica e operacional do sistema.

Os resultados gerados por essa variação paramétrica foram organizados em matrizes de dados multidimensionais, permitindo a construção de curvas de sensibilidade que evidenciam o comportamento comparativo dos reatores CSTR e PFR. Como exemplo da visualização analítica desses resultados, a Figura 5 ilustra o perfil de produção de biodiesel em resposta ao gradiente térmico aplicado, destacando o comportamento de patamar produtivo observado em temperaturas mais elevadas.

O principal critério de avaliação adotado para determinar a eficiência das tecnologias de reatores foi o rendimento global em biodiesel. Este indicador foi quantificado através da taxa de produção molar (mol/s) de metil linoleato gerada em relação à carga de trilinoleína alimentada ao sistema. Adicionalmente à produtividade absoluta, considerou-se a eficiência de recuperação de metanol na coluna de destilação e o balanço energético total como critérios de validação da sustentabilidade e viabilidade econômica do processo. Esta abordagem permitiu não apenas identificar o ponto de máxima produtividade, como também compreender a robustez de cada reator frente às variações térmicas, fornecendo os subsídios necessários para a subsequente validação estatística dos dados.

3.4 Tratamento Estatístico dos Dados

A validação científica de resultados oriundos de simulação computacional requer a aplicação de métodos estatísticos rigorosos que assegurem a confiabilidade das conclusões inferidas e comprovem que as diferenças observadas não são fruto de flutuações aleatórias do modelo. Nesta etapa, os dados de produção molar (mol/s) gerados durante o estudo de sensibilidade térmica para ambos os reatores (CSTR e PFR) foram tabulados e submetidos a uma análise comparativa de médias e variâncias.

Para verificar a significância da diferença entre os desempenhos, aplicou-se o teste t de Student para duas amostras independentes. Especificamente, adotou-se o Teste de Welch (t-test com variâncias não assumidas iguais), uma abordagem robusta para situações onde as populações apresentam dispersões distintas, como é o caso da disparidade de eficiência entre as tecnologias estudadas. O conjunto de dados incluiu 11 pontos de amostragem para cada reator, correspondentes ao intervalo de 60 °C a 70 °C.

O tratamento estatístico baseou-se na formulação de uma hipótese nula (H_0), que pressupõe a inexistência de diferença significativa entre as médias de produção, e uma hipótese alternativa (H_1), que estabelece a superioridade do reator CSTR. O nível de confiança estabelecido para a análise foi de 95% ($\alpha = 0,05$). Os parâmetros de média aritmética e desvio padrão foram calculados para caracterizar a estabilidade de cada sistema frente às perturbações térmicas. A decisão estatística foi fundamentada no valor-p (p-value), onde valores inferiores ao nível de significância adotado indicam a rejeição de H_0 e confirmam a validade estatística das vantagens operacionais observadas na simulação.

4 RESULTADOS

4.1 Desempenho e Balanço de Massa e Energia dos Reatores

As simulações da transesterificação em regime contínuo foram conduzidas inicial e isoladamente para os reatores CSTR e PFR sob condições isotérmicas otimizadas. O sistema baseado no reator CSTR atingiu uma produção de 0,36 kg/h de biodiesel na corrente final, após a etapa de purificação. A coluna de destilação integrada a esta configuração recuperou 192,18 kg/h de metanol a partir de uma alimentação de 192,25 kg/h do insumo. O balanço energético líquido desta planta estabilizou-se em uma demanda de 33,63 kW. Os indicadores consolidados para o CSTR constam na Tabela 1.

Tabela 1 - Indicadores de desempenho e balanço de massa/energia para o reator CSTR.

Parâmetro de Análise	Valor Obtido	Unidade
Produção de Biodiesel (Final)	0,36	kg/h
Alimentação de Óleo (Trilinoleína)	879,38	kg/h
Recuperação de Metanol	192,18	kg/h
Entradas de Energia	1105,34	kW
Saídas de Energia	1071,71	kW
Balanço Energético Líquido	33,63	kW

Fonte: Elaborada pelo autor (2026).

Em contrapartida, a planta simulada com o reator PFR, operando sob proporções molares e condições termodinâmicas idênticas, registrou uma produção final de 0,004 kg/h de biodiesel. A etapa de purificação correspondente recuperou 192,22 kg/h de metanol. Sob o aspecto energético, as correntes de entrada do sistema tubular totalizaram uma demanda térmica de 1251,64 kW. Os dados paramétricos do PFR estão sumarizados na Tabela 2.

Tabela 2 - Indicadores de desempenho e balanço de massa/energia para o reator PFR.

Parâmetro de Análise	Valor Obtido	Unidade
Produção de Biodiesel no Reator	0,006	kg/h
Produção de Biodiesel (Final)	0,004	kg/h
Alimentação de Óleo (Trilinoleína)	879,38	kg/h
Recuperação de Metanol	192,22	kg/h
Entradas de Energia	1251,64	kW
Produção de Biodiesel no Reator	0,006	kg/h

Fonte: Elaborada pelo autor (2026).

4.2 Estudo de Sensibilidade Térmica

Os resultados da variação da temperatura sistêmica no intervalo de 60 °C a 70 °C estão descritos na Tabela 3. Os dados evidenciam que a produção molar do CSTR aumenta progressivamente com o incremento térmico, estabilizando-se em um platô de 0,3656 mol/s a partir de 68 °C. Para o reator PFR, os valores permaneceram restritos a uma margem inferior a 0,01 mol/s em toda a faixa avaliada, atingindo um pico pontual de 0,0061 mol/s a 68 °C.

Tabela 3 - Perfil de produção de biodiesel em função da variação de temperatura para os reatores CSTR e PFR.

Temperatura (°C)	Reator CSTR (mol/s)	Reator PFR (mol/s)
60	0,2661	0,0044
61	0,2771	0,0046
62	0,2885	0,0048
63	0,3004	0,005
64	0,3126	0,0052
65	0,3252	0,0054
66	0,3382	0,0056
67	0,3517	0,0058
68	0,3656	0,0061
69	0,3656	0,0055
70	0,3656	0,0049

Fonte: Elaborada pelo autor (2026).

4.3 Resultados da Análise Estatística

Os dados paramétricos gerados no estudo de sensibilidade foram submetidos ao teste t de Welch (para amostras com variâncias desiguais) com nível de confiança de 95%. O reator CSTR apresentou média de 0,3233 mol/s (desvio padrão de 0,0384), enquanto o PFR obteve média de 0,0052 mol/s (desvio padrão de 0,0005). O processamento estatístico retornou uma estatística t de 27,3598 (com 10,0039 graus de liberdade) e um valor-p inferior a 0,0001, conforme consolidado na Tabela 4.

Tabela 4 - Resumo da Análise Estatística (Teste t de Welch).

Parâmetro Estatístico	Reator CSTR	Reator PFR
Média (mol/s)	0,3233	0,0052
Desvio Padrão	0,0384	0,0005
Estatística t	27,3598	-
Graus de Liberdade (gl)	10,0039	-
Valor-p	< 0,0001	-
Média (mol/s)	0,3233	0,0052

Fonte: Elaborada pelo autor (2026).

5 DISCUSSÃO

5.1 Comparativo de Desempenho e Limitações Fluidodinâmicas

A análise dos balanços de massa e energia demonstra uma disparidade tecnológica substancial entre as configurações propostas, corroborando a premissa de que a eficiência volumétrica e a conversão diferem drasticamente entre os equipamentos contínuos devido às suas distintas condições hidrodinâmicas (MUSHTAQ, 2014).

O desempenho marcadamente superior do reator CSTR pode ser fundamentado nas características fluidodinâmicas exigidas pela reação de transesterificação. A mistura reacional é um sistema bifásico líquido-líquido, composto pelo óleo de soja (fase apolar) e metanol (fase polar), naturalmente imiscíveis (NOUREDDINI; ZHU, 1997). Para viabilizar a cinética reacional, é indispensável a geração de uma ampla área interfacial, condição garantida pelo regime de mistura perfeita e intensa agitação mecânica do CSTR (KARAKASIA, 2024; MUSHTAQ, 2014).

O desempenho inferior e a regressão na taxa de conversão do PFR nas condições avaliadas justificam-se pela ausência de mistura radial ativa, evidenciando os desvios de idealidade fluida aos quais reatores industriais reais estão sujeitos (AGGARWAL, 2024; ZAIDI, 2020). A geometria tubular adotada (volume de 5 m³ e comprimento de 10 m) resulta em baixas velocidades axiais, propiciando um regime de baixa turbulência. Na ausência de misturadores estáticos, o escoamento tubular falha em manter a emulsão dos reagentes. Consequentemente, o processo no PFR é severamente governado por resistências à transferência de massa, impedindo o contato efetivo entre óleo, álcool e catalisador, o que explica a conversão quase nula apontada nos resultados (NOUREDDINI; ZHU, 1997; TREJO-ZÁRRAGA et al., 2018). Adicionalmente, a demanda energética excessiva observada no PFR (1251,64 kW) torna esta configuração inviável sob a ótica termodinâmica para a rota proposta, visto que a eficiência energética ótima deste equipamento é tipicamente reservada para o processamento de grandes volumes de fluxo gasoso, apresentando alta sensibilidade e limitações em misturas líquidas complexas (BAROZZI; SCOTTON; COPELLI, 2022; KARAKASIA, 2024).

5.2 Impacto Térmico na Cinética Reacional

O comportamento cinético mapeado pelo estudo de sensibilidade corrobora o modelo de Arrhenius, onde o aumento térmico reduz a viscosidade da fase oleosa e eleva a constante reacional (MANDARI; DEVARAI, 2022). O platô produtivo atingido pelo CSTR a 68 ° C indica o limiar ótimo para o sistema (WEN; PETERA, 2015). A partir deste ponto, o ganho de conversão é neutralizado, possivelmente devido à proximidade com o ponto de ebulição do metanol, que pode induzir a vaporização do álcool e reduzir seu tempo de residência na fase líquida reacional. O PFR, por sua vez, mostrou-se insensível ao incremento de temperatura, reafirmando que o fator limitante de sua configuração não é a ativação térmica, mas sim a barreira física da imiscibilidade (NOUREDDINI; ZHU, 1997; TREJO-ZÁRRAGA et al., 2018)

5.3 Significado Estatístico e Integração da Planta

Do ponto de vista inferencial, o valor-p ($p < 0,0001$) atestado pelo teste de Welch rejeita categoricamente a hipótese nula (BUANA; ADNAN, 2025; KLEIJNEN, 1995).

Isso comprova que a vantagem produtiva do CSTR não provém de artefatos ou flutuações da simulação computacional, mas de uma adequação fluidodinâmica real à físico-química do processo (LAKHLOUFI, 2026).

Por fim, a elevada taxa de recuperação de metanol (superior a 192 kg/h em ambos os casos) pela coluna de destilação comprova a eficácia da operação unitária de separação térmica (SHOREY, [s.d.]). A reciclagem quase integral do álcool não reagido confirma a viabilidade de operar com o grande excesso estequiométrico (6:1) necessário para deslocar o equilíbrio reacional, minimizando perdas materiais e estabelecendo um ciclo produtivo economicamente e ambientalmente sustentável (NOUREDDINI; ZHU, 1997; ENCINAR et al., 2022)

6 CONCLUSÃO

Este estudo desenvolveu e avaliou uma análise comparativa do processo de produção de biodiesel a partir do óleo de soja e metanol, utilizando modelagem termodinâmica e simulação computacional por meio do software DWSIM. A investigação focou no desempenho de diferentes tecnologias de reatores contínuos (CSTR e PFR), integrados a uma coluna de destilação para recuperação de insumos e otimização energética.

Os resultados obtidos demonstraram que a configuração baseada no Reator de Tanque Agitado Contínuo (CSTR) apresenta um desempenho significativamente superior ao Reator de Fluxo em Pistão (PFR). Através do estudo de sensibilidade térmica, observou-se que o CSTR alcançou uma produção média de 0,3233 mol/s, estabilizando seu rendimento máximo a partir da temperatura de 68 °C. Em nítido contraste, o reator PFR obteve taxas de conversão severamente restritas, com média de apenas 0,0052 mol/s na mesma faixa operacional.

A validação estatística inferencial, conduzida através do teste t de Welch, confirmou categoricamente a superioridade do CSTR ($p < 0,0001$). Esse achado atesta que o regime de mistura perfeita proporcionado pelo tanque agitado é fluidodinamicamente mais adequado para promover o tempo de contato necessário entre as fases imiscíveis (óleo e álcool) características da reação de transesterificação. Adicionalmente, a integração de uma coluna de destilação à jusante dos reatores provou-se uma estratégia de engenharia altamente eficaz. O equipamento permitiu a separação rigorosa do metanol não reagido da corrente de produtos, viabilizando o seu reaproveitamento cíclico, o que reduz substancialmente as perdas de matéria-prima e os custos operacionais.

Conclui-se, portanto, que a utilização do reator CSTR acoplado ao sistema de separação térmica representa a alternativa técnica e economicamente mais viável para a produção de biodiesel nas condições analisadas. As principais contribuições científicas deste trabalho incluem a validação quantitativa de rotas reacionais via simulação e a comprovação estatística de desempenho, fornecendo subsídios técnicos valiosos para a otimização energética e a transição sustentável na indústria de biocombustíveis.

REFERÊNCIAS

- AGGARWAL, N. **Residence Time Distribution in CSTR and PFR - Model with Python Code**. ChemEnggCalc, 2 out. 2024. Disponível em: <https://chemenggcac.com/residence-time-distribution-in-cstr-and-pfr/>. Acesso em: 2 jun. 2026.
- ANÁLISE** Cinética e Mecânica da Transesterificação de Triacilglicerídeos de Soja em Meio Alcoólico sob Catálise Básica Homogênea. Documento técnico. [S. l.: s. n., s. d.].
- ANDREASEN, A. Applied Process Simulation-Driven Oil and Gas Separation Plant Optimization Using Surrogate Modeling and Evolutionary Algorithms. **ChemEngineering**, v. 4, n. 1, p. 11, 2020.
- ANDREASEN, A. Evaluation of an Open-source Chemical Process Simulator Using a Plant-wide Oil and Gas Separation Plant Flowsheet Model as Basis. **Periodica Polytechnica Chemical Engineering**, v. 66, n. 3, p. 503–511, 2022. Disponível em: <https://pp.bme.hu/ch/article/download/19678/9410>.
- ANP – Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **RenovaBio**. Rio de Janeiro: ANP, [s.d.]. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/renovabio>. Acesso em: 3 abr. 2026.
- BALADÃO, L. F.; SOARES, R. P.; FERNANDES, P. R. B. Comparison of the GERG-2008 and Peng-Robinson Equations of State for Natural Gas Mixtures. **International Journal of Engineering Research and Applications (IJERA)**, v. 8, n. 8, Part-III, p. 25-34, ago. 2018. Disponível em: https://www.ijera.com/papers/Vol8_issue8/Part-3/E0808032534.pdf.
- BAROZZI, M.; SCOTTON, M. S.; COPELLI, S. Runaway Boundaries for PI Controlled Tubular Reactors. **Chemical Engineering Transactions**, v. 90, p. 583-588, 2022. Disponível em: <https://www.cetjournal.it/cet/22/90/098.pdf>. Acesso em: 2 jun. 2026.
- BUANA, T. I. W.; ADNAN, A. Evaluating Statistical Power in t-Test and Welch’s Test via Monte Carlo Simulation Approach. **Journal of Mathematics, Computations, and Statistics**, v. 8, n. 2, p. 530-537, out. 2025. Disponível em: <https://journal.unm.ac.id/index.php/JMATHCOS/article/download/7407/5818>. Acesso em: 2 jun. 2026.
- CAVDUR, F. **Systems Simulation Output Data Analysis Introduction**. [S.l.: s.n.], 12 maio 2014. Disponível em: <http://fatihcavdur.home.uludag.edu.tr/docs/end3032/lec11.pdf>. Acesso em: 2 jun. 2026.
- CHEMSEP. **ChemSep | the CAPE-OPEN Laboratories Network**. [S.l.]: CO-LaN, 2021. Disponível em: <https://www.colan.org/process-modeling-component/chemsep-2/>.

CONTINUOUS stirred-tank reactor. In: **Wikipedia: the free encyclopedia**. Flórida: Wikimedia Foundation, 2025. Disponível em: https://en.wikipedia.org/wiki/Continuous_stirred-tank_reactor. Acesso em: 2 jun. 2026.

DWSIM. CAPE-OPEN. **DWSIM - Open Source Chemical Process Simulator**, jun. 2019a. Disponível em: <https://dwsim.org/wiki/index.php?title=CAPE-OPEN>.

DWSIM. **DWSIM – Open-Source Chemical Process Simulator**. [S.l.]: DWSIM, 2026. Disponível em: <https://dwsim.org/>.

DWSIM. Excel Add-In for Thermodynamic Calculations. **DWSIM - Open Source Chemical Process Simulator**, jul. 2019b. Disponível em: https://dwsim.org/wiki/index.php?title=Excel_Add-In_for_Thermodynamic_Calculations.

ENCINAR, J. M. et al. Transesterification of Soybean Oil through Different Homogeneous Catalysts: Kinetic Study. **Catalysts**, v. 12, n. 2, p. 146, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/catal12020146>.

FOGLER, H. S.; GURMEN, M. N. 6. Multiple Reactions. In: **Elements of Chemical Reaction Engineering**. 4. ed. Ann Arbor: University of Michigan, 2008. Disponível em: <https://websites.umich.edu/~elements/course/lectures/six/index.htm>. Acesso em: 2 jun. 2026.

FOGLER, H. S.; GURMEN, M. N. 13. Distribution of Residence Times for Chemical Reactors. In: **Elements of Chemical Reaction Engineering**. 4. ed. Ann Arbor: University of Michigan, 2008. Disponível em: <https://websites.umich.edu/~elements/course/lectures/thirteen/index.htm>. Acesso em: 2 jun. 2026.

GALLAGHER, M. **Top 10 Best Chemical Process Software of 2026**. Gitnux Software Advice, mar. 2026. Disponível em: <https://gitnux.org/best/chemical-process-software/>.

GRAPHPAD SOFTWARE. The unequal variance Welch t test. **GraphPad Prism 11 Statistics Guide**. [S.l.]: GraphPad Software, LLC,. Disponível em: https://www.graphpad.com/guides/prism/latest/statistics/stat_the_unequal_variance_welch_t_t.htm. Acesso em: 2 jun. 2026.

IEA – International Energy Agency. **Net Zero by 2050: A Roadmap for the Global Energy Sector**. Paris: IEA, 2021. Disponível em: <https://www.energy.gov/sites/default/files/2021-12/IEA,%20Net%20Zero%20by%202050.pdf>. Acesso em: 1 abr. 2026.

IEA – International Energy Agency. **World Energy Outlook 2023**. Paris: IEA, 2023. Disponível em: <https://www.energy.gov/sites/default/files/2024-02/004.%20IEA%2C%20World%20Energy%20Outlook%202023.pdf>. Acesso em: 1 abr. 2026.

IPCC – Intergovernmental Panel on Climate Change. **Chapter 6: Energy systems**. In: Climate Change 2022: Mitigation of Climate Change. Contribution of Working Group III to the Sixth

Assessment Report. Genebra, Suíça: IPCC, 2022. Disponível em: <https://www.ipcc.ch/report/ar6/wg3/chapter/chapter-6/>. Acesso em: 1 abr. 2026.

IPCC – Intergovernmental Panel on Climate Change. **Climate Change 2023: Synthesis Report**. Contribution of Working Groups I, II and III to the Sixth Assessment Report. Genebra, Suíça: IPCC, 2023. Disponível em: https://www.ipcc.ch/report/ar6/syr/downloads/report/IPCC_AR6_SYR_FullVolume.pdf. Acesso em: 1 abr. 2026.

JIN, H. et al. Kinetics and Mechanism of NaOH-Impregnated Calcined Oyster Shell-Catalyzed Transesterification of Soybean Oil. **Energies**, Basel, v. 10, n. 11, p. 1920, 2017. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/en10111920>.

KARAKASIA, J. **What is the Difference Between CSTR and PFR?**. K-Jhil, 22 out. 2024. Disponível em: <https://kjhil.com/difference-between-cstr-and-pfr/>. Acesso em: 2 jun. 2026.

KHANLARI, A. **Best Chemical Process Simulation Software - 2026 Guide**. Datacor, abr. 2026. Disponível em: <https://www.datacor.com/resources/best-chemical-process-simulation-software>.

KLEIJNEN, J. P. C. Statistical validation of simulation models. **European Journal of Operational Research**, v. 87, p. 21-34, 1995. Disponível em: <https://pure.uvt.nl/ws/portalfiles/portal/947232/statisti.pdf>. Acesso em: 2 mar. 2026.

LAKHLOUFI, H. **Simulation Output Analysis**. MetricGate, 18 jan. 2026. Disponível em: <https://metricgate.com/docs/simulation-output-analysis/> Acesso em: 2 mar. 2026.

LI, J.-C.; FAN, Y.; PANG, D.; WU, T.; ZHANG, Y.; ZHOU, K. Investigation on the Compressibility Factor of Hydrogen-Doped Natural Gas Using GERG-2008 Equation of State. **Energies**, v. 18, n. 1, p. 53, 2025. Disponível em: <https://www.mdpi.com/1996-1073/18/1/53>. Acesso em: 2 mar. 2026.

MANDARI, V.; DEVARAI, S. K. Biodiesel Production Using Homogeneous, Heterogeneous, and Enzyme Catalysts via Transesterification and Esterification Reactions: a Critical Review. **Bioenergy Research**, v. 15, n. 2, p. 935–961, 2022. Disponível em: <https://pmc.ncbi.nlm.nih.gov/articles/PMC8476987/>. Acesso em: 2 mar. 2026.

MENG, X. **Batch Means for Interval Estimation in Steady-State Simulations**. [S.l.: s.n.], 18 out. 2002. Disponível em: <https://www.eg.bucknell.edu/~xmeng/Course/CS6337/Note/master/node88.html>. Acesso em: 2 mar. 2026.

MÉTODOS Estatísticos Aplicados à Engenharia: Tratamento de Dados de Simulação e Validação de Escolhas Tecnológicas através de Testes de Hipótese. [S.l.: s.n., 2026].

MINITAB BLOG EDITOR. Data Not Normal? Try Letting It Be, with a Nonparametric Hypothesis Test. **Minitab Blog**, 22 ago. 2016. Disponível em: <https://blog.minitab.com/en/blog/understanding-statistics/data-not-normal-try-letting-it-be-with-a-nonparametric-hypothesis-test>. Acesso em: 2 jun. 2026.

MORALES RODRIGUEZ, R.; GANI, R.; DÉCHELOTTE, S.; VACHER, A.; BAUDOUIN, O. Use of CAPE-OPEN standards in the interoperability between modelling tools (MoT) and process simulators (ProSim). **Chemical Engineering Research & Design**, v. 86, n. 7, p. 823-833, 2008. Disponível em: <https://orbit.dtu.dk/en/publications/use-of-cape-open-standards-in-the-interoperability-between-modell/>.

MUSHTAQ, F. **Analysis and Validation of Chemical Reactors performance models developed in a commercial software platform**. 2014. Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Energia) – KTH School of Industrial Engineering and Management, Estocolmo, 2014. Disponível em: <https://www.diva-portal.org/smash/get/diva2:726698/ATTACHMENT01.pdf>. Acesso em: 2 jun. 2026.

NOUREDDINI, H.; ZHU, D. Kinetics of Transesterification of Soybean Oil. **Journal of the American Oil Chemists' Society**, v. 74, n. 11, p. 1457-1463, 1997. Disponível em: https://digitalcommons.unl.edu/cgi/viewcontent.cgi?params=/context/chemeng_biomaterials/article/1008/type/native/.

OCHOA-TAPIA, J. A.; HERNANDEZ-RODRIGUEZ, R.; ALVAREZ-RAMIREZ, J. Effect of the Residence Time Distribution on the Dynamical Behavior of Isothermal Continuous Stirred Tank Reactors: A Nonlocal Modeling Approach. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 64, n. 12, p. 6433-6444, 16 mar. 2025. Disponível em: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/acs.iecr.5c00604>. Acesso em: 2 jun. 2026.

PLUG flow reactor model. In: **Wikipedia: the free encyclopedia**. Flórida: Wikimedia Foundation, 2025. Disponível em: https://en.wikipedia.org/wiki/Plug_flow_reactor_model. Acesso em: 2 jun. 2026.

PROJETO e Comparação de Reatores Contínuos: Fundamentos Matemáticos, Transferência de Calor e Dinâmica de Tempo de Residência. [S. l.: s. n., 20--?].

RESIDENCE Time Distributions of Chemical Reactors. Ann Arbor: University of Michigan, [20--?]. Disponível em: https://umich.edu/~elements/5e/16chap/Fogler_Web_Ch16.pdf. Acesso em: 2 jun. 2026.

ROMERO-IBARRA, I. C. et al. Direct Transesterification: From Seeds to Biodiesel in One-Step Using Homogeneous and Heterogeneous Catalyst. In: FATTAH, I. M. R. (Ed.). **Advanced Biodiesel - Technological Advances, Challenges, and Sustainability Considerations**. Londres: IntechOpen, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.5772/intechopen.108234>.

RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM. **Reference Equations of State GERG-2008 - Chair of Thermodynamics**. Bochum, Alemanha, 2024. Disponível em: https://www.thermo.ruhr-uni-bochum.de/thermo/forschung/wagner_GERG.html.en.

SEKHAR, C.; FARAHANI, A. S.; KHADER, M. A.; KALYVAS, C.; CHIZARI, M. Simulation and Optimisation of Hydrogen Production from Biogas via Steam–Methane Reforming and Cryogenic Liquefaction Using DWSIM. **Processes**, v. 14, n. 3, p. 532, 2026. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2227-9717/14/3/532>.

SHOREY, R. **Simulation of Distillation Column using DWSIM and ASPEN Plus: A Comparative Study**. Dehradun, India: University of Petroleum & Energy Studies (UPES), viXra.org, [s.d.]. Disponível em: <https://vixra.org/pdf/1810.0481v1.pdf>.

SKONECZNY, S. Comparison of PFR and CSTR in Softinery Web Application. **Softinery**, Cracóvia, 2025. Disponível em: <https://softinery.com/blog/comparison-of-pfr-and-cstr-in-softinery-web-application>. Acesso em: 2 jun. 2026.

SOLMAZ, S. Verification and Validation in Computer-Aided Engineering – Explained. **SimScale**, 9 jun. 2023. Disponível em: <https://www.simscale.com/blog/verification-and-validation-cae/>. Acesso em: 2 jun. 2026.

SREEMAHADEVAN, S.; SIVAKUMAR, K. V.; PALANISAMY, M. Evaluation of the Open Source Process Simulator DWSIM for Bioprocess Simulation. **Periodica Polytechnica Chemical Engineering**, v. 68, n. 2, p. 195–202, 2024. Disponível em: <https://pp.bme.hu/ch/article/view/23166>.

TANGSRIWONG, K.; LAPCHIT, P.; KITTIJUNJIT, T.; KLAMRASSAMEE, T.; SUKJAI, Y.; LAO-NUAL, Y. Modeling of chemical processes using commercial and open-source software: A comparison between Aspen Plus and DWSIM. **IOP Conference Series: Earth and Environmental Science**, v. 463, n. 1, p. 012057, 2020. Disponível em: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1755-1315/463/1/012057>.

THE ENERGY Balance for Chemical Reactors. In: **Chemical Reactor Analysis and Design Fundamentals**. [S. l.]: Nob Hill Publishing, 2026. Cap. 6. Disponível em: <https://sites.engineering.ucsb.edu/~jbrow/chemreacfun/ch6/slides-enbal-2up.pdf>. Acesso em: 2 jun. 2026.

TREJO-ZÁRRAGA, F. et al. Kinetics of Transesterification Processes for Biodiesel Production. In: BERNAT, K. (Ed.). **Biofuels - State of Development**. Londres: IntechOpen, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.5772/intechopen.75927>.

TUCKERMAN, M. E. 1.24: Plug flow reactors and comparison to continuously stirred tank reactors. **Chemistry LibreTexts**. Nova York: New York University, 23 set. 2022. Disponível em: https://chem.libretexts.org/Courses/New_York_University/CHEM-UA_652%3A_Thermodynamics_and_Kinetics/01%3A_Lectures/1.24%3A_Plug_flow_reactors_and_comparison_to_continuously_stirred_tank_reactors. Acesso em: 2 jun. 2026.

8.2 THE REACTION of Biodiesel: Transesterification. **EMS Online Courses**, [s.d.]. Disponível em: <https://courses.ems.psu.edu/egee439/book/export/html/684>.

WEN, Z.; PETERA, J. CFD Numerical Simulation of Biodiesel Synthesis in a Spinning Disc Reactor. **Chemical and Process Engineering**, v. 36, n. 1, p. 21-37, 2015. Disponível em: <https://journals.pan.pl/Content/85013>.

WITTRUP, K. D. PFR vs. CSTR: Size and Selectivity. **Notas de aula (10.37 Chemical and Biological Reaction Engineering)**. Massachusetts: MIT OpenCourseWare, 2007. Disponível em: https://ocw.mit.edu/courses/10-37-chemical-and-biological-reaction-engineering-spring-2007/7f66d10fe91facfed4a32695695f2996_lec09_03072007_w.pdf. Acesso em: 2 jun. 2026.

ZAIDI, A. An In-Depth Breakdown | PFR and CSTR Reactor Design. **Engineeringness**, 29 ago. 2020. Disponível em: <https://engineeringness.com/an-in-depth-breakdown-pfr-and-cstr-reactor-design/>. Acesso em: 2 jun. 2026.