

# CORRELAÇÃO EMPÍRICA PARA MASSA ESPECÍFICA DE BIODIESEL DE FONTES DIVERSAS E SUAS MISTURAS COM O DIESEL

Paulo Gabriel Ferreira de Azevedo <sup>1</sup>  
Luiz Antônio Pimentel Cavalcanti <sup>2</sup>

## RESUMO

Diante dos problemas ambientais e econômicos causados pelo uso excessivo de combustíveis fósseis, o biodiesel se mostra uma alternativa viável. O conhecimento das propriedades fluidodinâmicas desse combustível, como a massa específica, é indispensável. O presente trabalho teve por objetivo avaliar um modelo de regressão linear visando prever a massa específica dos biodiesel de algodão, soja e sebo bovino, e suas misturas com diesel petróleo (misturas BX). As amostras avaliadas foram misturas, em base gravimétrica, com o percentuais de biodiesel de 5%, 10%, 20%, 30%, 40% e 50% (m/m) e na faixa de temperatura de 293,15 K a 363,15 K em intervalos de 10 K. Com base nos dados experimentais de massa específica dos biodiesel avaliados e suas misturas BX, provenientes da literatura, foram construídos gráficos tridimensionais dessa propriedade em função da temperatura e fração de biodiesel presente nas misturas BX, verificou-se que os dados experimentais poderiam ser ajustados a um plano, obtendo-se um modelo para essa propriedade. Os parâmetros para cada tipo de biodiesel foram estabelecidos pelo software Matlab, com desvio percentual máximo de 0,15% e coeficiente de determinação ( $R^2$ ) mínimo de 0,9994. O método de qui-quadrado permitiu concluir que o modelo proposto representa satisfatoriamente os dados avaliados, podendo este ser utilizado para prever os valores de massa específica do biodiesel e misturas com o diesel de petróleo para o intervalo de temperatura estudado.

**Palavras-chave:** Biodiesel, Modelos preditivos, Massa específica.

## INTRODUÇÃO

Os prejuízos da dependência demasiada de reservas energéticas oriundas do petróleo têm tomado destaque tanto no setor econômico, com o esgotamento acelerado dessas reservas gerando o aumento no preço dos combustíveis fósseis, como no ambiental, com a atenção ao aquecimento global e poluição atmosférica (Ramirez-Verduzco, 2013; Martins et al., 2018). Diante desse cenário, os biocombustíveis vêm se destacando, devido a seus diversos benefícios

---

<sup>1</sup> Graduando do Curso de Engenharia Química do Instituto Federal da Bahia - IFBA, [paulo.azevedo@ifba.edu.br](mailto:paulo.azevedo@ifba.edu.br);

<sup>2</sup> Professor orientador: Doutor, Instituto Federal da Bahia - IFBA, [luiz.cavalcanti@ifba.edu.br](mailto:luiz.cavalcanti@ifba.edu.br).

para o meio ambiente, como baixa toxicidade, renovabilidade e baixa emissão de gases de efeito estufa em sua combustão (Gülün e Bilgin, 2017).

Destaque entre os biocombustíveis, o biodiesel é definido como uma mistura de ésteres alquílicos de ácidos graxos, obtidos, mais comumente, pela reação de transesterificação alcalina por rota metálica de triglicerídeos de biomassa vegetal, animal, óleos residuais e/ou microalgas (Cavalcanti, 2013). O biodiesel é completamente miscível em diesel de petróleo, de modo que o emprego de misturas biodiesel/diesel (misturas BX) é amplamente utilizada mundialmente (Cavalcanti, 2013; Kanaveli et al., 2017).

O conhecimento das propriedades do biodiesel em intervalos de temperatura e fração de biodiesel presente na mistura é importante nas simulações de processo de produção de biodiesel, bem como nos modelos para projeto de sistema de ignição do motor (Prieto et al., 2015). Não é viável a medição dessas propriedades em cada proporção de mistura e temperatura do processo em estudo, diante da dificuldade de análise e do custo; portanto, a utilização de modelos para prever essas propriedades é de extrema relevância (Cavalcanti, 2016).

A massa específica é uma das propriedades físicas mais importantes dos combustíveis. A entrada do combustível na câmara de combustão é dada em base volumétrica, portanto a massa específica está diretamente relacionada com a quantidade de combustível disponível para a combustão e, dessa forma, também relacionada com o desempenho do motor. Nessa perspectiva um excesso de volume de combustível na câmara pode levar à combustão incompleta, aumentando assim as emissões de gases poluentes e de efeito estufa. Além disso, dados de massa específica dos combustíveis também são usados em projetos de reatores, torres de destilação, tanques de armazenamento e tubulações (Ramirez-Verduzco, 2013).

Diante do exposto, esse estudo visa a avaliar um modelo de regressão linear para prever a massa específica dos biodiesel de algodão (B100-A), de soja (B100-S) e de sebo bovino (B100-SB) e suas misturas BX com o diesel em diferentes temperaturas.

## **METODOLOGIA**

Foram utilizados dados empíricos de massa específica, provenientes da literatura, dos biodiesel de algodão, soja e sebo bovino (B100), o diesel (B0) e as misturas B5, B10, B20, B30, B40, B50, com variações de temperatura de 293 a 363 K, com intervalos de 10 K (Cavalcanti, 2013). Esses dados experimentais foram tratados via regressão linear utilizando o software Matlab, com o aplicativo Curve Fitting, com o intuito de obtenção dos parâmetros do modelo.

Foi analisado o coeficiente de determinação ( $R^2$ ), obtido pelo software, e o desvio percentual médio (DPM) (Equação 1).

$$DPM = \frac{100}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\rho_{exp} - \rho_{pred}}{\rho_{exp}} \right| \quad (\text{Equação 1})$$

sendo  $\rho_{exp}$  e  $\rho_{pred}$  os valores de massa específica medidos experimentalmente e preditos pelos modelos, respectivamente, e  $N$  o número de pontos experimentais; dessa forma, quanto menor o valor de DPM, mais próximos estarão os valores modelados dos dados empíricos.

A validação estatística dos modelos encontrados foi avaliada pelo teste de aderência de modelos (qui-quadrado) (Equação 2). O teste do qui-quadrado ( $X^2$ ) é uma forma de avaliar se um conjunto de dados, divididos em  $k$  classes, enquadram-se em uma determinada hipótese, que nesse trabalho foram os modelos de massa específica propostos. Para tal, faz-se o uso da Equação 2, de modo a se consultar se o valor obtido por essa equação ( $X^2$ ), assumindo  $(k-1)$  graus de liberdade, corrobora para aceitação ou recusa da hipótese nula, tendo uma determinada probabilidade de ocorrência.

$$X^2 = \sum_{i=1}^N \left| \frac{(\rho_{exp} - \rho_{pred})^2}{\rho_{exp}} \right| \quad (\text{Equação 2})$$

Quanto menor o valor de  $X^2$ , mais aceitável a hipótese feita para um determinado conjunto de dados, isto é, o modelo representa satisfatoriamente os dados experimentais, aceitando-se um determinado nível de confiança, que neste trabalho foi de 95%.

## REFERENCIAL TEÓRICO

A massa específica do biodiesel é influenciada por diversos fatores, como a temperatura, pressão, composição do combustível, rotas de síntese e composição do óleo utilizado na produção do combustível. Então, modelos que levam esses fatores em consideração são relevantes na predição dessa propriedade fluidodinâmica. O modelo de Liew (Equação 3) é usado para avaliar a relação entre a massa específica do biodiesel, e suas misturas BX, com a temperatura (Cavalcanti, 2016).

$$\rho(T) = a_1 + a_2T \quad (\text{Equação 3})$$

Sendo  $\rho$  a massa específica em  $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$ ,  $T$  a temperatura em K e  $a_i$  os parâmetros do modelo. Nota-se que o modelo da Equação 3 estabelece uma relação linear entre a massa específica e a temperatura. Como a relação entre esses parâmetros é inversa, espera-se que o termo  $a_2$  da Equação 3 seja negativo.

Pham et al. (2018) estudaram os biodiesel oriundos de óleo residual, de pinhão manso e de coco (B100), suas misturas B5, B10, B20, B40, B50, B60 e B75, e o diesel, no intervalo de temperatura de 30 a 100 °C. Os autores avaliaram o modelo de Liew para os dados de massa específica dos B100 e encontraram erro máximo de 0,4026%, para o biodiesel de óleo residual, e coeficiente de correlação ( $R^2$ ) de 0,9979. Ficou evidenciado que o modelo de Liew pode ser usado para relacionar a massa específica do biodiesel com a temperatura.

Além disso, a composição do combustível é um importante fator na modelagem dessa propriedade fluidodinâmica e precisa ser levada em consideração. Em função disso, Ramírez-Verduzco (2013) compilou dados de massa específica dos ésteres metílicos de ácidos graxos (EMAG) que compõem o biodiesel, provenientes da literatura e em distintos intervalos de temperatura, e examinou o modelo da Equação 4, com o objetivo de verificar a capacidade preditiva do mesmo.

$$\rho(M, N, T) = a_1 + \frac{a_2}{M} + a_3N + a_4T \quad (\text{Equação 4})$$

Sendo  $M$  a massa molar dos EMAG que compõem o combustível em  $\text{g}\cdot\text{mol}^{-1}$ ,  $N$  o número de ligações duplas na cadeia principal de EMAG e  $T$  a temperatura em K. Nota-se que os termos  $M$  e  $N$  estão estritamente atrelados à constituição química do combustível.

Utilizando a Equação 4 para cada EMAG, o autor calculou a massa específica dos B100 (biodiesel produzidos do óleo de coco, canola, algodão, babaçu e soja) através da Regra de Kay (Equação 5).

$$\rho = \sum(w_i \cdot \rho_i) \quad (\text{Equação 5})$$

Sendo  $w_i$  e  $\rho_i$  a fração mássica e a massa específica do EMAG. Em nenhum caso analisado foi constatado erro igual ou acima de 1%, sendo que o erro médio foi de 0,48%. Com base nisso, o autor concluiu que o modelo da Equação 4, aliado a Equação 5, reproduz razoavelmente bem as informações experimentais de massa específica dos biodiesel analisados.

Além da sua composição química, a fração do biodiesel nas misturas BX também é um fator relevante no desenvolvimento de modelos para predição da massa específica. Gabriel et al. (2020) estudaram um modelo tridimensional para predição da massa específica do biodiesel, e misturas BX, provenientes do óleo de chichá, por diferentes rotas de síntese. Os dados empíricos foram estabelecidos com variação de temperatura de 283,15 a 313,15 K, com intervalos de 5 K, e as misturas estudadas foram B10, B15, B20, B40, B60 e B80. O modelo investigado pelos autores (Equação 6) leva em consideração a influência linear da temperatura, tal como o modelo de Liew (Equação 3), e o fator referente a fração de biodiesel nas misturas BX.

$$\rho(X, T) = a_1 + a_2T + a_3X \quad (\text{Equação 6})$$

Onde X é a porcentagem de biodiesel presente na mistura com o diesel (mistura BX). Observando a Equação 6, nota-se que os autores atribuíram uma relação linear entre a fração de biodiesel na mistura BX e a massa específica da mistura. Neste trabalho foram encontrados erro máximo de 0,22% e R<sup>2</sup> mínimo de 0,9936. Com isso, tem-se que o modelo da Equação 6 representa satisfatoriamente os dados experimentais de massa específica do biodiesel, no intervalo de temperatura estudado.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Plotando-se os dados de massa específica em função da composição do biodiesel presente na mistura BX e temperatura, verifica-se um comportamento linear dos dados, tal comportamento sugere que modelo proposto pode representado pela equação de um plano que pode ajustado a Equação 6. Os parâmetros a<sub>1</sub>, a<sub>2</sub> e a<sub>3</sub> do modelo são exibidos na Tabela 1. Esses valores foram obtidos via regressão linear dos dados experimentais para cada biodiesel avaliado.

Tabela 1. Valores ajustados dos parâmetros a<sub>i</sub> do modelo da Equação 6.

Parâmetro	a <sub>1</sub> (kg·m <sup>-3</sup> )	a <sub>2</sub> (kg·m <sup>-3</sup> ·K <sup>-1</sup> )	a <sub>3</sub> (kg·m <sup>-3</sup> )	R <sup>2</sup>
Algodão	1045	-0,7114	45,63	0,9999
Soja	1046	-0,7131	42,45	0,9994
Sebo Bovino	1046	-0,7123	33,47	0,9999

Observando a Tabela 1, nota-se que os valores de  $a_2$  são negativos em todos os casos, concluindo que a relação entre massa específica e temperatura é inversamente proporcional. O contrário é observado na relação entre massa específica e a fração de biodiesel presente na mistura BX: quanto maior a fração de biodiesel, maior o valor de massa específica. Nota-se, ainda, que os valores dos termos  $a_2$  são próximos, independente do tipo de biodiesel. Essa observação indica que nos três casos estudados, a massa específica varia de modo similar com a temperatura.

O valor do termo  $a_3$  do biodiesel de sebo bovino é menor quando comparado com os biodiesel de algodão e de soja, tal diferença pode ser atribuída à composição de ésteres metílicos de ácidos graxos saturados, que é maior para o biodiesel de sebo bovino (55,0%), do que para os de algodão (26,2%) e soja (17,27%) (Cavalcanti, 2013). O coeficiente de correlação ( $R^2$ ) em todos os casos estão acima de 0,999.

As Figuras 1 a 3 apresentam os dados empíricos do trabalho de Cavalcanti (2013) para massa específica dos biodiesel de algodão, soja e sebo bovino em função do percentual de biodiesel presente na mistura BX e da temperatura, bem como os planos que representam o modelo proposto pela Equação 6.

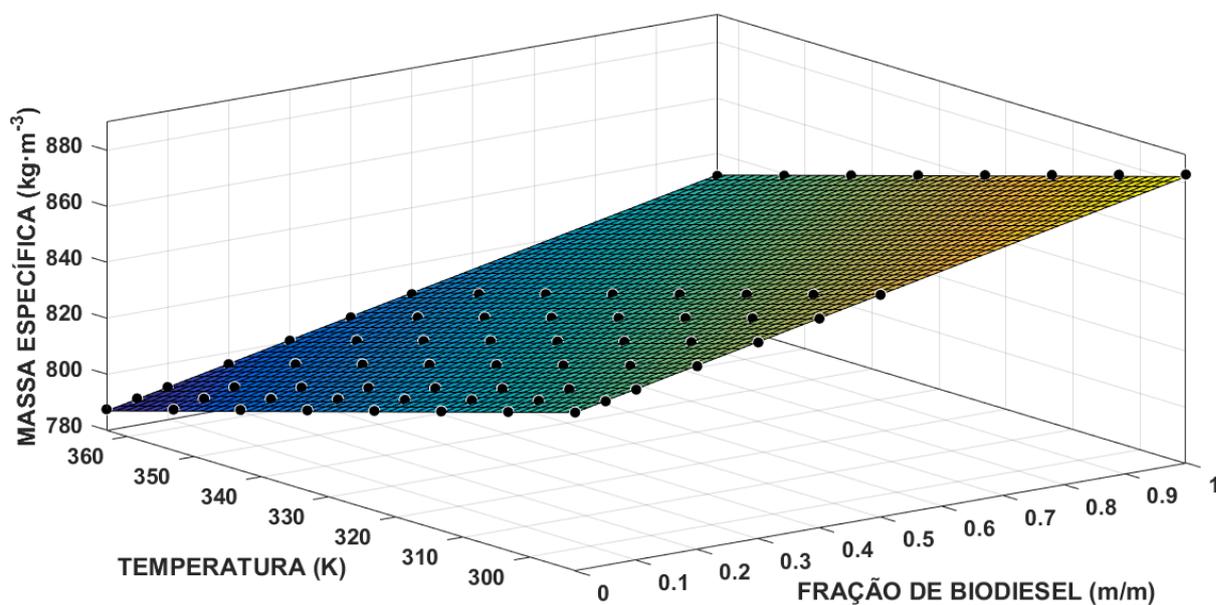


Figura 1. Superfície modelada e dados empíricos de massa específica para a mistura BX-A.

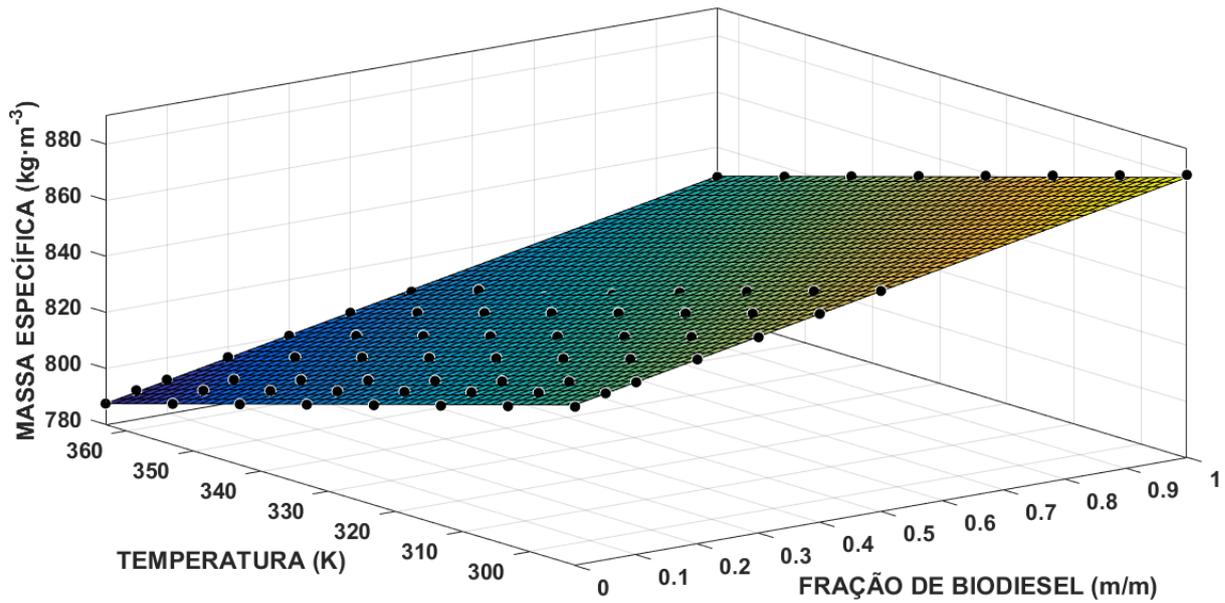


Figura 2. Superfície modelada e dados empíricos de massa específica para a mistura BX-S.

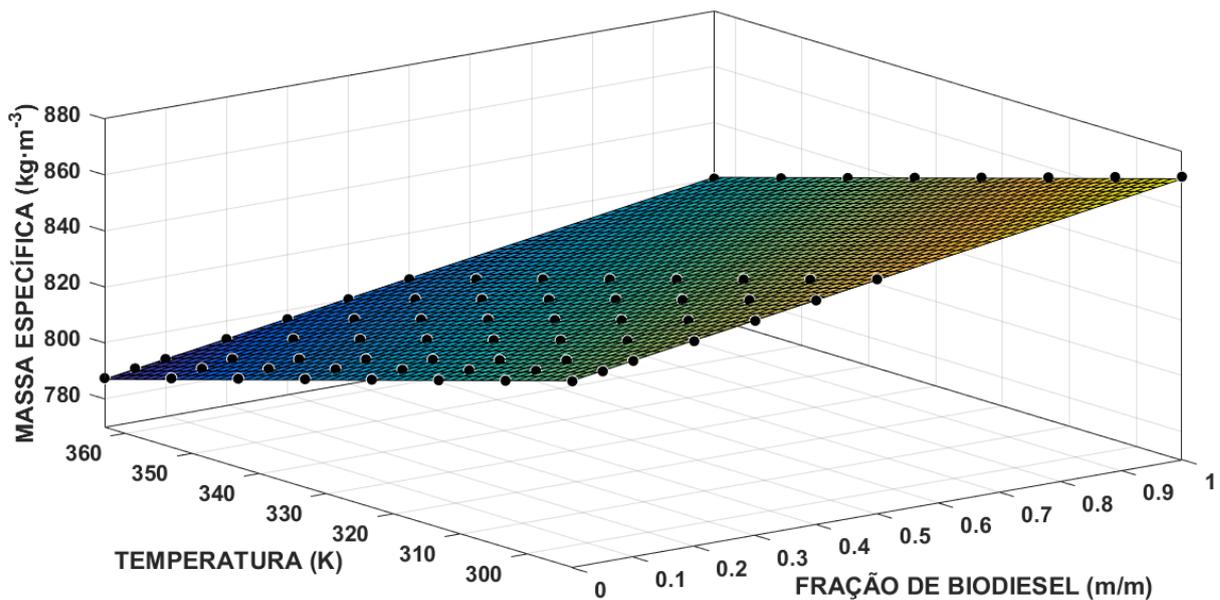


Figura 3. Superfície modelada e dados empíricos de massa específica para a mistura BX-SB

Os valores de DPM para os três tipos de biodiesel estudados estão exibidos na Tabela 2. O maior valor de DPM é 0,0637%, para o biodiesel de soja. Gabriel et al. (2020) estudaram modelos tridimensionais para predição de massa específica do biodiesel, e misturas BX, provenientes do óleo de chichá, por diferentes rotas de síntese; os mesmos encontraram erros máximos de 0,22%, superior aos obtidos pelo presente trabalho. Gülüm e Bilgin (2017) encontraram erro médio de 0,0607% estudando o modelo bidimensional da Equação 3.

Portanto, comparando com a literatura, os valores de DPM gerados pelo modelo da Equação 6 são satisfatórios.

Tabela 2. Valores de DPM gerados pelo modelo da Equação 1.

<b>Tipo de Biodiesel</b>	<b>DPM (%)</b>
Algodão	0,0244
Soja	0,0637
Sebo Bovino	0,0467

Os valores de qui-quadrado calculados ( $X^2_{\text{calculado}}$ ) pela Equação 2, com base nos dados experimentais dos três tipos de biodiesel, são mostrados na Tabela 3.

Tabela 3. Valores de  $X^2_{\text{calculado}}$  do modelo da Equação 2 para os três tipos de biodiesel.

<b>Tipo de Biodiesel</b>	<b><math>X^2_{\text{calculado}}</math></b>
Algodão	0,0073
Soja	0,1692
Sebo Bovino	0,0140

Os dados experimentais foram distribuídos em 8 classes, de modo que o grau de liberdade é 7, e foi assumido o nível de confiança de 95%, portanto tem-se que o valor de qui-quadrado tabelado ( $X^2_{\text{tabelado}}$ ) é de 14,067, para os três casos estudados. Em todos os casos, o  $X^2_{\text{calculado}} < X^2_{\text{tabelado}}$ , evidenciando que o modelo da Equação 6 se adequa bem aos dados experimentais, em todos os casos estudados.

Para avaliar o modelo da Equação 6, foram analisados dados experimentais não incluídos nas regressões lineares dos dados de massa específica dos misturas BX-A, BX-S e BX-SB. Nessas regressões, foram utilizados dados no intervalo de temperatura de 293,15 a 363,15 K, com intervalos de 10 K. Outra forma de validação do modelo é propor a utilização de dados experimentais de massa específica dos três tipos de biodiesel para  $T = 283,15$  K e aplicando esse valor de temperatura a Equação 6, foram obtidos gráficos das Figuras de 4 a 6, que contém a reta modelada e os dados experimentais.

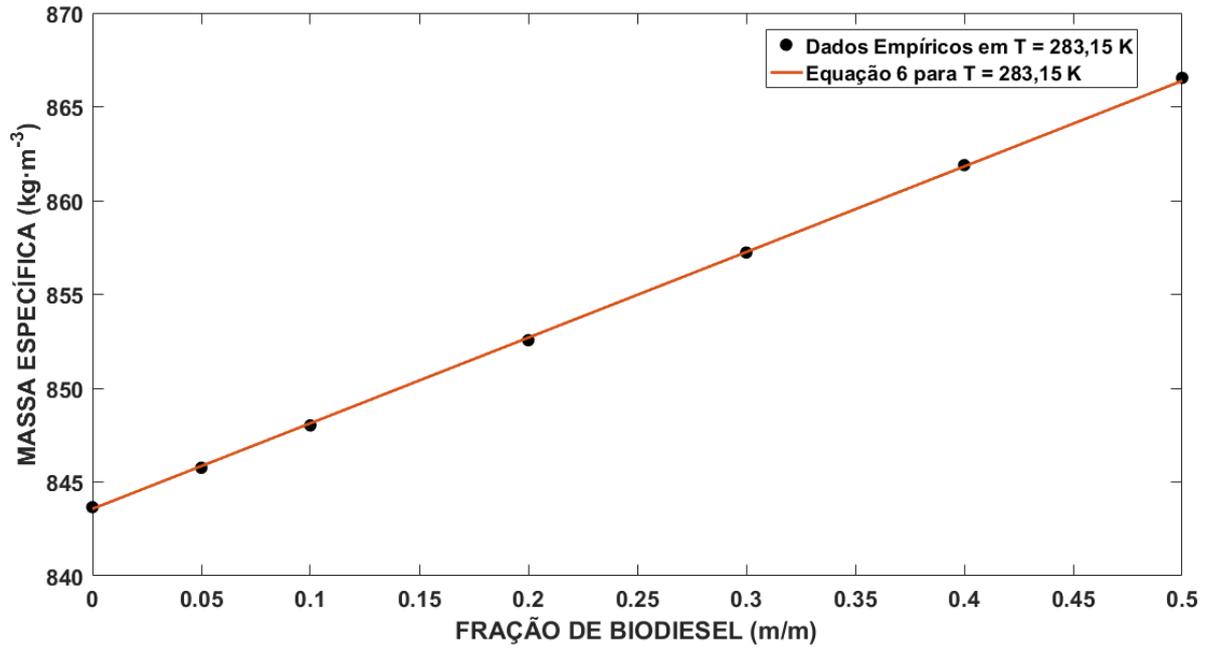


Figura 4. Reto modelada e dados experimentais da mistura BX-A para T = 283,15 K.

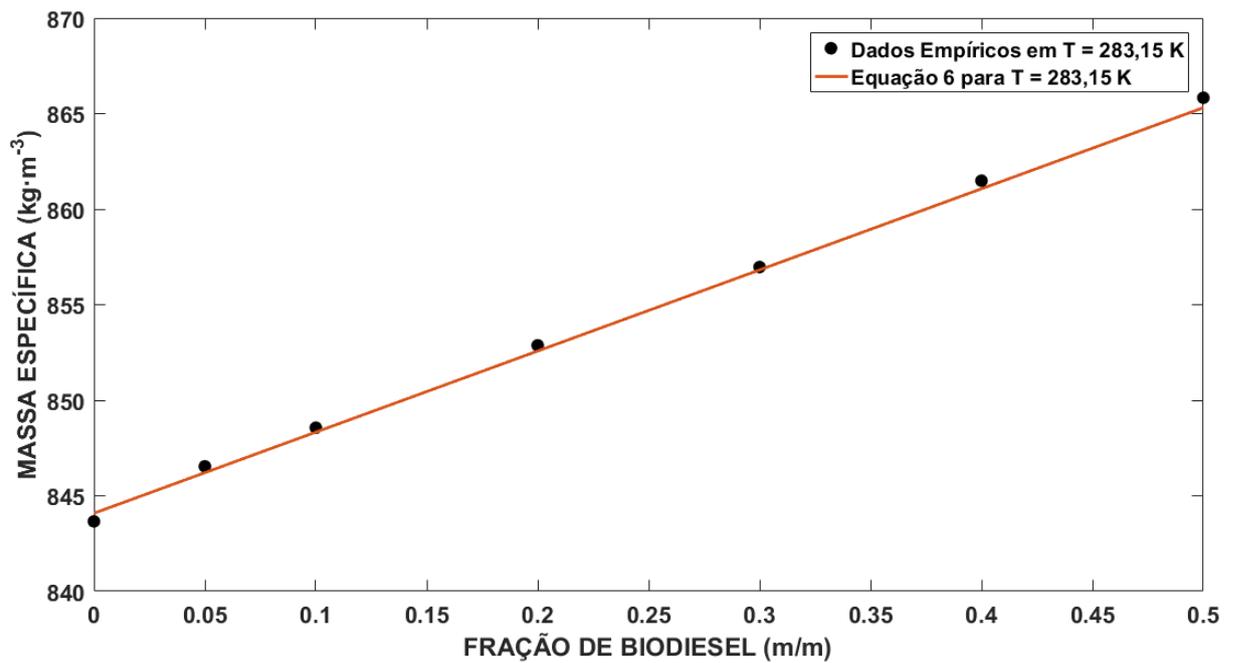


Figura 5. Reto modelada e dados experimentais da mistura BX-S para T = 283,15 K

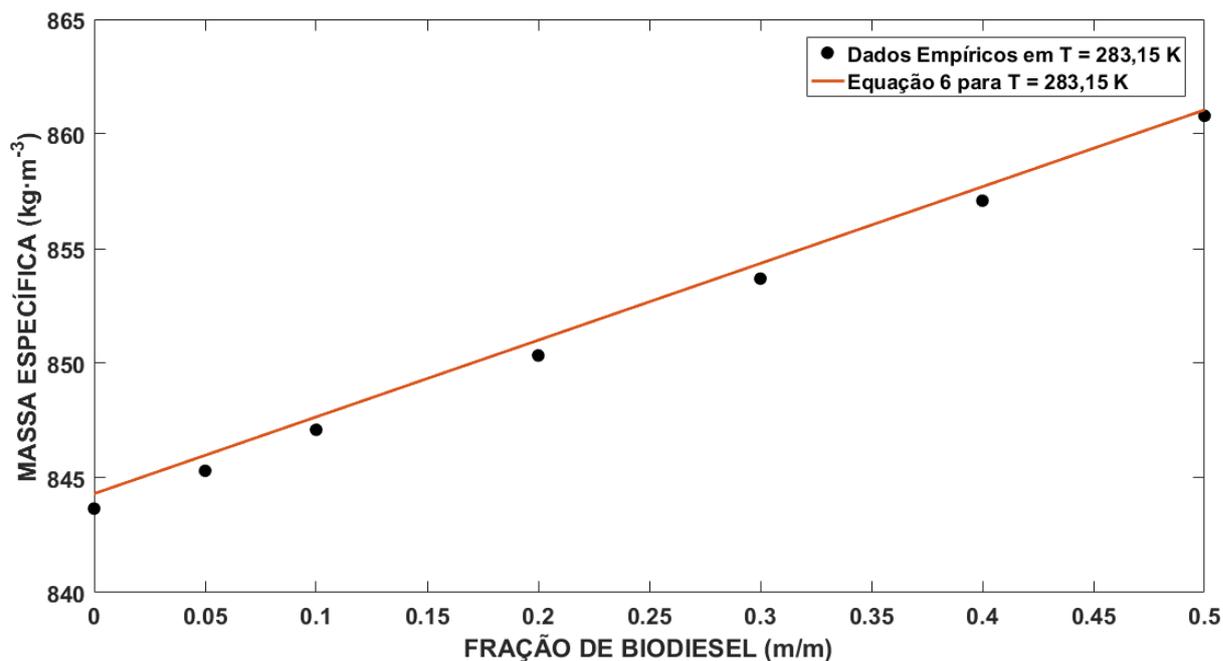


Figura 6. Reto modelada e dados experimentais da mistura BX-SB para T = 283,15 K.

Observando as Figuras de 4 a 6, nota-se que somente no caso da mistura BX-SB os pontos experimentais não estão contidos na reta modelada. Os valores de DPM gerados pela reta formada e os dados experimentais, ambos para T = 283,15 K, foram calculados e se apresentam na Tabela 4.

Tabela 4. Valores de DPM gerados pela Equação 6 e dados empíricos para T = 283,15 K.

<b>Tipo de Biodiesel</b>	<b>DPM (%)</b>
Algodão	0,0114
Soja	0,0397
Sebo Bovino	0,0686

O valor máximo de DPM exibido na Tabela 4 é de 0,0686%, para o BX-SB, o que condiz com a análise visual do gráfico da Figura 6. Deste modo, constata-se que os valores modelados pela Equação 6 conformam-se adequadamente aos dados experimentais, ambos para T = 283,15 K.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os dados experimentais de massa específica das misturas BX-A, BX-S e BX-SB, no intervalo de temperatura estudado, adequaram-se satisfatoriamente a um modelo tridimensional planar. A aplicação da regressão linear nos dados empíricos estabeleceu parâmetros com  $R^2$  próximos a 1 e gerou superfícies que representa a massa específica em função da temperatura e da fração de biodiesel presente na mistura. O modelo gerou pequenos desvios entre os valores modelados e os empíricos, mas os dados de DPM indicaram que essa diferença é aceitável e próximo dos encontrados nos resultados de trabalhos similares. Com o teste do qui-quadrado, foi concluído que o modelo representa adequadamente os dados experimentais. Diante do conjunto de resultados, conclui-se que o modelo estudado pode ser usado para prever a massa específica dos biodiesel de algodão, soja e sebo bovino e suas misturas BX, no intervalo de temperatura avaliado, com aplicações em sistemas de modelagem de combustão, em motores, ou em equipamentos de operações unitárias, como reatores.

## REFERÊNCIAS

Cavalcanti, L. A. P. Modelos de regressão aplicados para predição das propriedades físicas das misturas do biodiesel de sebo bovino com o diesel. **CIATEC-UPF**, v. 8, n. 2, p. 22-33, 2016.

Cavalcanti, L. A. P. **Reologia e melhoramento das propriedades de escoamento a frio de biodiesel e suas misturas BX**. Recife: Universidade Federal de Pernambuco, 2013. (Tese de doutorado).

Gabriel, R.; Vieira, W. T.; Soletti, J. I.; Ribeiro, L. M. O.; Carvalho, S. H. V. Empirical modeling of different viscosity and density behavior of biodiesel from chichá (*Sterculia striata*) with diesel versus temperature variation. **Journal of King Saud University - Science**, v. 32, n. 1, p. 628-635, 2020. <https://doi.org/10.1016/j.jksus.2018.08.009>

Gülüm, M.; Bilgin, A. Measurements and empirical correlations in predicting biodiesel-diesel blends' viscosity and density. **Fuel**, v. 199, p. 567-577, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.03.001>

Kavaneli, I. P.; Atzemi, M.; Lois, E. Predicting the viscosity of diesel/biodiesel blends. **Fuel**, v. 199, p. 248-263, 2017. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2017.02.077>

Martins, F.; Felgueiras, C.; Smitková, M. Fossil fuel energy consumption in European countries. **Energy Procedia**, v. 153, p. 107-111, 2018. <https://doi.org/10.1016/j.egypro.2018.10.050>

Pham, M. T.; Hoang, A. T.; Le, A. T.; Tawaha, A. R. M. S. A.; Dong, V. H.; Le, V. V. Measurements and prediction of the density and viscosity of biodiesel blends. **International Journal of Technology**, v. 5, p. 1015-1026, 2018.

Prieto, N. M. C. T.; Ferreira, A. G. M.; Portugal, A. T. G.; Moreira, R. J.; Santos, J. B. Correlation and prediction of biodiesel density for extended ranges of temperature and pressure. **Fuel**, v. 141, p. 23-38, 2015. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2014.09.113>

Ramirez-Verduzco, L. F. Density and viscosity of biodiesel as a function of temperature: Empirical models. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 19, p. 652-665, 2013. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2012.11.022>