

SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE OTIMIZAÇÃO DA PRODUÇÃO DE MALEATO A PARTIR DO ÓLEO DE MAMONA

Larissa Monteiro Lopes, Fabiano Andre Narciso Fernandes

O maleato de óleo de mamona é utilizado nas mais diversas aplicações, dentre elas: a produção de tintas solúveis em água, cosméticos e até mesmo como monômero para a fabricação de polímeros. O maleato é produzido a partir de uma reação de substituição, na qual o anidrido maleico substitui o grupo hidroxila do óleo de mamona. O produto reacional pode ser obtido a partir de duas rotas: reação direta autocatalisada pela temperatura (1) e outra catalisada com radical livre (2). Esta última utiliza o peróxido de benzoílo (BPO) como catalisador a fim de aumentar a conversão reacional, produzindo além do maleato monosubstituído, o disubstituído e trisubstituído. O projeto baseia-se em um modelo cinético pré-estabelecido, em que há disponíveis as constantes cinéticas e expressões das velocidades de formação/consumo dos reagentes, produtos e catalisadores do sistema, a partir das quais são modeladas as condições reacionais (temperatura, concentração de BPO, concentração dos reagentes, entre outras) mais adequadas ao sistema a fim de otimizá-lo, com o fim de garantir uma maior conversão possível de óleo de mamona em maleato. O diferencial do projeto é que ele não é feito propriamente em bancada laboratorial, mas pega dados já adquiridos previamente desse modo e aplica-os em um código em linguagem Python, modelando o sistema reacional de modo digital. As vantagens que esse tipo de experimento são a redução de custos e também de desperdícios de bancada.

Palavras-chave: mamona. otimização. python. reação.