

UMA ABORDAGEM BASEADA EM MODELOS DO TIPO COSMO PARA PREDIÇÃO DA VISCOSIDADE CINEMÁTICA EM SISTEMAS MULTICOMPONENTES: APLICAÇÃO AO BIODIESEL

G. O. Silva¹, J. L. Silva Junior²

¹Departamento de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, Brasil (gabrieloliveiradasilva1705@gmail.com)

²Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia Catarinense -Campus Araquari, Araquari, Brasil

Este trabalho apresenta um novo modelo para a viscosidade cinemática de misturas via acoplamento da equação de Eyring ao modelo preditivo CS25. O novo modelo foi aplicado para amostras de biodiesel (misturas de ésteres graxos) de diferentes composições na faixa de temperaturas entre 313,15 K e 353,15 K e validado com dados da literatura. Os resultados indicaram elevada capacidade preditiva, com coeficiente R^2 de 0,9804 e desvio absoluto médio de 3,60% para o banco de dados avaliado.

Palavras-chave: Viscosidade Cinemática; COSMO-SAC; Biodiesel; Equação de Eyring; Energia de Gibbs em excesso.

INTRODUÇÃO

As preocupações políticas e socioambientais e os riscos de escassez energética, têm impulsionado uma transição energética para fontes renováveis e limpas. Sob este viés há o “Compromisso pela qualidade do ar e saúde ambiental” (BRASIL, 2009) que incentiva o uso de combustíveis mais limpos, dentre eles o biodiesel; unido ao anseio de melhorar os processos industriais.

Esta fonte de energia é dada por uma mistura de ésteres graxos, normalmente obtidos pela reação de transesterificação de óleos e graxas com um álcool de cadeia curta, na presença de um catalisador, resultando em uma mistura de ésteres metílicos ou etílicos a depender do álcool, neste caso metanol ou etanol, respectivamente. Portanto, o biocombustível obtido nestas condições possui propriedades semelhantes ao petrodiesel, permitindo a mistura de ambos (Fontoura *et al.*, 2023), de tal modo que esta prática está prevista na legislação brasileira como obrigatória desde 2008 e há vistas de aumentos progressivos da quantidade de biodiesel no diesel nos próximos anos (BRASIL, 2020).

O incentivo ao uso do biodiesel está intrinsecamente alinhado aos Objetivos de Desenvolvimento Sustentável (ODS) da Agenda 2030 da Organização das Nações Unidas (ONU). A transição para esse biocombustível contribui diretamente para a expansão da energia limpa e

acessível (ODS 7), promove padrões de produção e consumo responsáveis na cadeia energética (ODS 12) e atua como ferramenta de mitigação frente às mudanças globais do clima através da redução da pegada de carbono (ODS 13).

Para o projeto, controle e otimização dos processos industriais, bem como para avaliação da qualidade dos produtos, o conhecimento sobre as propriedades das substâncias envolvidas é necessário. No caso do biodiesel, bem como de outros produtos industriais, a viscosidade é uma das principais propriedades, pois é essencial para cálculos de transporte de fluidos e de transferência de energia (Haj-Kacem *et al.*, 2016). Além disto, a viscosidade do biodiesel e de seus componentes também é necessária para o monitoramento da qualidade do próprio combustível e da eficiência de uma mistura (Cantiani *et al.*, 2018), além de ser um dos parâmetros de especificação comercial dos combustíveis. Assim, é fundamental compreender o comportamento desta propriedade e, como é infatível determiná-la experimentalmente para todas as temperaturas, pressões e composições imagináveis, é altamente desejável ter modelos matemáticos capazes de prever seu comportamento.

Muitos modelos de viscosidade já foram publicados na literatura, sendo a maioria deles baseados no princípio dos estados correspondentes ou na teoria

da taxa absoluta de reação de Eyring (Bosse e Bart, 2005). Entretanto, para misturas, o cálculo da viscosidade é um problema complexo pois a viscosidade não segue regras de aditividade linear. Existem correlações empíricas clássicas para corrigir isso, como a de Grunberg-Nissan (Grunberg e Nissan, 1949), mas elas exigem, geralmente, parâmetros de interação binária que são obtidos a partir de correlação de dados experimentais. Para uma mistura múltipla como o biodiesel, o número de parâmetros de interação binária exigido seria muito grande, tornando o método inviável na prática. Como qualquer modelo de energia de Gibbs em excesso pode ser acoplado à teoria de Eyring para representar as não-idealidades de uma mistura, uma abordagem interessante para este caso é a utilização de modelos preditivos de energia de Gibbs de excesso para a redução da necessidade de dados experimentais exaustivos. Dentre estes modelos, destacam-se aqueles baseados na metodologia COSMO, como o COSMO-SAC e suas variantes, dentre as quais se encontra o modelo CS25, proposto por Soares *et al.* (2025), que aprimora a descrição de interações moleculares complexas em relação ao modelo COSMO-SAC original desenvolvido por Lin e Sandler (2002).

No modelo COSMO-SAC, bem como suas extensões posteriores, cada molécula é descrita por uma distribuição de densidade de carga superficial aparente a partir da energia livre de solvatação das moléculas em solução determinada pelo método COSMO (Klamt e Schüürmann, 1993). Essas densidades de carga são usualmente representadas por uma função de variável única denominada perfil sigma (ou simplesmente σ -perfil). O perfil sigma de uma molécula estabelece uma relação entre a fração da superfície molecular e a densidade de carga correspondente e é obtido a partir de sua estrutura eletrônica, computada por métodos de química quântica. Assim, o cálculo da energia de Gibbs em excesso (ou do coeficiente de atividade, como mostrado na equação (3) da seção a seguir) de acordo com o COSMO-SAC requer, portanto, o perfil sigma, a área superficial de van der Waals, o volume de cada molécula presente na mistura e um pequeno conjunto de parâmetros universais, o que torna o modelo genuinamente preditivo (Bouillot *et al.*, 2013). Essa base conceitual torna a abordagem amplamente aplicável para prever tanto o equilíbrio de fases quanto reações químicas, além de ser particularmente vantajosa, pois depende praticamente apenas da estrutura química das substâncias.

Diante desse cenário, este trabalho tem como objetivo desenvolver e avaliar um novo modelo para o cálculo da viscosidade cinemática de misturas líquidas complexas, aplicando-o a sistemas de biodiesel de diferentes origens lipídicas. A abordagem proposta baseia-se no acoplamento da equação clássica de Eyring com o modelo de coeficiente de atividade CS25, visando superar as limitações de métodos empíricos dependentes de dados experimentais. A capacidade preditiva e a robustez da metodologia desenvolvida são validadas frente a dados experimentais da literatura, estabelecendo uma alternativa confiável para a estimativa de propriedades de transporte em engenharia de processos.

METODOLOGIA

O Modelo Eyring-CS25

Para a predição dos valores de viscosidade cinemática do biodiesel, um novo modelo (Eyring-CS25) foi derivado. A partir da equação de Eyring, a viscosidade cinemática de misturas com NC componentes pode ser expressa como (Glasstone, Laidler e Eyring, 1964 *apud* Matsuda *et al.*, 2019):

$$\ln(\nu M) = \sum_{i=1}^{NC} x_i \ln(\nu_i M_i) + \frac{\Delta g^{\ddagger, E}}{RT} \quad (1)$$

onde ν e M são a viscosidade cinemática da mistura e a massa molar da mistura, respectivamente, $\Delta g^{\ddagger, E}$ é a energia de Gibbs de ativação em excesso para o fluxo viscoso. O subíndice i denota que a propriedade se refere a um componente i específico da mistura (neste caso, aos ésteres metílicos de ácidos graxos presentes no biodiesel). Com base nessa conexão entre propriedades termodinâmicas e de transporte, pode-se adotar um modelo fundamentado no conceito de energia de Gibbs em excesso para representar os desvios da viscosidade em relação ao comportamento ideal com a inclusão de um parâmetro de ajuste de escala k entre os termos $\frac{\Delta g^{\ddagger, E}}{RT}$ e $\frac{\Delta g_E}{RT}$:

$$\frac{\Delta g^{\ddagger, E}}{RT} = k \frac{\Delta g_E}{RT} \quad (2)$$

O parâmetro de ajuste de escala k representa uma proporcionalidade entre duas grandezas termodinâmicas de excesso originadas das mesmas interações intermoleculares: a energia de Gibbs em excesso, que quantifica os desvios em relação ao comportamento ideal da solução, e a energia de ativação em excesso para o fluxo viscoso, que expressa a penalidade energética associada aos

rearranjos moleculares necessários ao escoamento. Como ambas as grandezas têm origem nas mesmas interações intermoleculares, alguns autores têm assumido a hipótese de uma relação linear entre elas independente da temperatura e composição (Onodera, 2021; Bosse e Bart, 2006; Novak, 2006), hipótese que aqui também é assumida como aproximação.

A partir da relação entre a energia de Gibbs em excesso e os coeficientes de atividade das espécies na mistura (γ_i) - Equação (3) -, podemos calcular o termo $\frac{\Delta g^E}{RT}$.

$$\frac{\Delta g^E}{RT} = \sum_i^{NC} x_i \ln \gamma_i \quad (3)$$

Assim, combinando as equações (1), (2) e (3), e usando as propriedades de logaritmos, chegamos a uma expressão final acessível para o cálculo da viscosidade cinemática para uma mistura em uma determinada temperatura T :

$$\nu = \left(\frac{1}{M}\right) \exp \left[\sum_i^{NC} x_i \ln \left(\nu_i M_i \gamma_i^k \right) \right] \quad (4)$$

Na equação 4, a massa molar da mistura pode ser calculada pela média ponderada das massas molares individuais dos componentes da mistura:

$$M = \sum_i^{NC} x_i M_i \quad (5)$$

Estimativa da viscosidade cinemática dos componentes da mistura puros

Uma vez que a viscosidade cinemática de um fluido é definida como a razão entre a viscosidade dinâmica desse fluido (η) e a sua densidade (ρ) (equação 6), a viscosidade cinemática dos componentes puros foi estimada utilizando uma combinação das equações de Ghatee e de Rackett-modificada - equações (7) e (8), respectivamente (nas equações 6, 7 e 8 omitimos o subíndice i).

$$\nu = \frac{\eta}{\rho} \quad (6)$$

$$\left(\frac{1}{\eta}\right)^\varphi = aT + b \quad (7)$$

$$\rho = \left(\frac{A_R}{B_R \left[1 + (1 - (T/C_R)^{D_R}) \right]} \right) \quad (8)$$

Nas equações (7) e (8), a , b , φ , A_R , B_R , C_R e D_R são parâmetros ajustáveis e T é a temperatura absoluta. Estes parâmetros foram determinados a partir da correlação de dados experimentais disponíveis na literatura, conforme reportado em trabalho anterior (Silva e Silva Jr., 2025), no qual os autores verificaram que estes modelos conseguem representar satisfatoriamente as referidas propriedades dos ésteres metílicos.

Os parâmetros ajustados para as equações (7) e (8), correspondentes a cada um dos ésteres graxos puros que constituem os biodieseis avaliados neste trabalho, estão apresentados nas Tabelas 1 e 2 a seguir:

Tabela 1. Parâmetros do modelo Rackett-modificado

Éster	A_R (kg m ⁻³)	B_R	C_R (K)	D_R	Faixa de Temperatura
C8:0	297,7378	0,5137	558,9693	0,6386	283,15 – 453,15
C10:0	243,2360	0,4685	627,7264	0,6022	278,15 – 453,15
C12:0	383,2664	0,5773	604,5591	1,0714	283,15 – 360,05
C14:0	213,9252	0,4412	748,0742	0,6874	293,15 – 353,15
C16:0	575,7224	0,7202	381,8921	0,9701	308,15 – 373,15
C18:0	579,2488	0,7171	372,0500	1,0158	310,95 – 372,05
C18:1	595,0850	0,7345	380,2138	0,9527	283,15 – 373,15

Éster	A_R (kg m ⁻³)	B_R	C_R (K)	D_R	Faixa de Temperatura
C18:2	359,5005	0,5729	584,4380	0,6886	278,15 – 373,15
C18:3	595,8330	0,7217	396,4187	0,9696	278,15 – 363,15
C20:0	244,8687	0,4598	1.238,9329	1,7460	323,15 – 373,15

Tabela 2. Parâmetros do modelo de Ghatee

Éster	ϕ	a (mPa ^{-ϕ} s ^{-ϕ} K ⁻¹)	B (mPa ^{-ϕ} s ^{-ϕ})	Faixa de Temperatura
C8:0	0,63450	0,00920	-1,90880	283,15 – 372,05
C10:0	0,58025	0,00782	-1,64703	278,15 – 363,15
C12:0	0,56146	0,00712	-1,56086	283,15 – 373,15
C14:0	0,60884	0,00674	-1,57738	293,15 – 353,15
C16:0	0,48798	0,00566	-1,23948	303,15 – 363,15
C18:0	0,49483	0,00545	-1,25369	313,00 – 363,15
C18:1	0,47631	0,00548	-1,19415	273,15 – 453,15
C18:2	0,51983	0,00562	-1,21085	278,15 – 353,15
C18:3	0,56319	0,00573	-1,24199	278,15 – 373,15
C20:0	0,51649	0,00528	-1,26185	323,15 – 373,15

Cômputo dos coeficientes de atividade das espécies na mistura

Os coeficientes de atividade das espécies na mistura foram computados por meio do modelo CS25 utilizando o pacote computacional *open-source* JCOSMO, versão 3.0.0, desenvolvido pelo Laboratório Virtual de Predição de Propriedades da Universidade Federal do Rio Grande do Sul (<https://www.ufrgs.br/lvpp/>) (Gerber e Soares, 2010; Soares, 2025).

Seleção dos dados experimentais e ajuste do modelo

Para testar a capacidade preditiva do modelo desenvolvido, foram coletados valores de viscosidade cinemática em diferentes temperaturas

(313,15 K a 353,15 K) disponíveis na literatura para biodieseis provenientes de óleos de seis matérias-primas diferentes: babaçu e semente de algodão (Nogueira Jr. *et al.*, 2010), coco, soja e colza (Feitosa *et al.*, 2010) e Macaúba (Sousa, 2023). Para a seleção dos dados a serem utilizados neste trabalho, foram adotados dois critérios principais: 1) que os dados das propriedades (viscosidade cinemática ou viscosidade dinâmica e densidade) e o perfil de ésteres graxos correspondessem exatamente à mesma amostra e 2) a disponibilidade de dados das propriedades (viscosidade cinemática ou viscosidade dinâmica e densidade) para os ésteres graxos puros na fase líquida na mesma temperatura do biodiesel que compõem. Na Tabela 3, são apresentados os perfis de ésteres metílicos de ácidos graxos para os biodieseis selecionados neste estudo.

Tabela 3. Perfil de ésteres metílicos dos biodieseis estudados neste trabalho, em fração molar (x_i)

Biodiesel	Ésteres Metílicos de Ácidos Graxos (100 x_i)									
	C8:0	C10:0	C12:0	C14:0	C16:0	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3	C20:0
Babaçu ^a	-	6,71	32,15	25,85	13,97	4,14	17,19	-	-	-
Semente de algodão ^a	-	-	-	0,74	25,68	2,47	15,31	55,80	-	-

Biodiesel	Ésteres Metílicos de Ácidos Graxos (100 x _i)									
	C8:0	C10:0	C12:0	C14:0	C16:0	C18:0	C18:1	C18:2	C18:3	C20:0
Soja ^b	-	-	-	-	12,22	-	25,28	54,45	8,05	-
Coco ^b	6,13	4,66	39,19	19,45	12,15	03,14	11,46	3,82	-	-
Colza ^b	-	-	-	-	4,35	3,87	56,40	23,66	9,97	1,75
Macaúba ^c	8,16	5,42	48,06	11,35	7,13	2,24	15,51	2,13	-	-

^aNogueira Jr. *et al.* (2010); ^bFeitosa *et al.* (2010); ^cSousa (2023)

O parâmetro de ajuste de escala k foi determinado por meio de uma análise de mínimos quadrados, utilizando como função objetivo a minimização da soma dos quadrados da diferença entre as viscosidades cinemáticas experimentais (v_j^{exp}) e as calculadas pelo modelo (v_j^{calc}):

$$FO = \sum_j \left(v_j^{exp} - v_j^{calc} \right)^2 \quad (9)$$

O desempenho do modelo foi avaliado por meio de indicadores estatísticos, incluindo a raiz do erro quadrático médio (RMSE), o desvio relativo absoluto médio (AARD%) e o coeficiente de determinação (R^2), dados pelas equações (10) a (12).

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_j \left(v_j^{exp} - v_j^{calc} \right)^2} \quad (10)$$

$$AARD(\%) = \frac{100}{n} \sum_j \left| \frac{v_j^{calc} - v_j^{exp}}{v_j^{exp}} \right| \quad (11)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_j \left(v_j^{exp} - v_j^{calc} \right)^2}{\sum_j \left(v_j^{exp} - \bar{v}^{exp} \right)^2} \quad (12)$$

Também foram determinados os valores dos desvios relativos para cada dado individual analisado:

$$\delta v(\%) = 100 \times \left(\frac{v_j^{calc} - v_j^{exp}}{v_j^{exp}} \right) \quad (13)$$

Nas referidas equações, n representa o número total de pontos experimentais ou calculados, enquanto o subscrito j indica um ponto de dado específico avaliado. A variável v_j^{exp} corresponde à média aritmética de todos os valores experimentais de viscosidade.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os resultados obtidos indicam que o modelo proposto apresenta elevada capacidade preditiva para a viscosidade cinemática de misturas de biodiesel. A comparação entre os valores calculados e os dados experimentais revelou um R^2 de 0,9804, um AARD (%) global de 3,60% e baixos valores para o RMSE ($4,47 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$), evidenciando a boa concordância entre os valores experimentais e os calculados pelo modelo. Para os biodieseis individuais, os valores de AARD (%) variaram de 1,90% (macaúba) a 4,68% (colza).

Com o mesmo objetivo, Pinto (2019) aplicou as equações UNIFAC-VISCO e GC-UNIMOD, ambas modelos de contribuição de grupos e utilizando diferentes funções objetivo, na predição da viscosidade cinemática do biodiesel de babaçu, utilizando também a composição reportada por Nogueira Jr. *et al.* (2010). Os valores de AARD(%) encontrados pela autora foram de 5,63% a 6,38% utilizando o modelo UNIFAC-VISCO, e 3,16% a 4,43% com o modelo GC-UNIMOD. Portanto, o modelo GC-UNIMOD traz resultados análogos ao modelo aqui proposto, enquanto o modelo UNIFAC-VISCO apresentou desvios ligeiramente maiores. A mesma autora aplicou também estes modelos a outras amostras de biodiesel, encontrando desvios relativos médios na faixa de 0,96% a 6,88% quando o modelo UNIFAC-VISCO foi empregado e 0,88% a 13,00% quando ela utilizou o modelo GC-UNIMOD.

Por sua vez, Silva (2024) empregou um método de de aprendizado de máquina para a predição da viscosidade cinemática e outras propriedades do

biodiesel com base em sua composição de ácidos graxos, computando 136 amostras, das quais foram selecionadas 80% para treinamento do modelo e 20% para teste. Neste trabalho, o valor para o RMSE encontrado pela autora foi de aproximadamente $2,32 \times 10^{-7} \text{ m}^2 \text{ s}^{-1}$ e um $R^2 = 0,9970$. Este resultado mostra a elevada capacidade do uso de aprendizado de máquina para a predição de propriedades. Apesar do modelo Eyring-CS25 ter apresentado um desempenho menor, os resultados são muito satisfatórios tendo em vista o custo computacional e a simplicidade do modelo.

O parâmetro ajuste de escala k convergiu para o valor otimizado de 4,85 por meio da minimização da soma dos quadrados dos desvios entre as viscosidades cinemáticas calculadas e experimentais. Do ponto de vista termodinâmico, esse resultado indica que a energia de Gibbs de ativação em excesso do fluxo viscoso é aproximadamente cinco vezes superior à energia de Gibbs em excesso calculada pelo modelo CS25, evidenciando que as interações intermoleculares responsáveis pelos desvios da idealidade exercem influência significativa sobre a barreira energética associada ao rearranjo molecular durante o escoamento. Dessa forma, o valor obtido para k fornece suporte à hipótese de proporcionalidade proposta na Equação (2), estabelecendo uma ligação quantitativa entre uma propriedade termodinâmica de equilíbrio (Δg^E) e uma propriedade de transporte ($\Delta g^{\ddagger, E}$).

A consistência dessa hipótese é reforçada pela Figura 1, na qual se observa elevada concordância entre as viscosidades cinemáticas calculadas e experimentais para biodieles obtidos de diferentes matérias-primas. A proximidade dos pontos em relação à reta identidade demonstra que a utilização de um único valor de k é suficiente para reproduzir satisfatoriamente o comportamento experimental de misturas de ésteres graxos em toda a faixa de viscosidades investigada.

A análise dos desvios relativos (Figura 2), entretanto, fornece informações adicionais sobre o significado físico desse parâmetro. Embora os erros permaneçam reduzidos para todos os sistemas avaliados e não apresentem dependência evidente com a magnitude da viscosidade, observa-se um leve agrupamento dos resíduos em função da matéria-prima. Enquanto os biodieles de babaçu, algodão, coco e macaúba apresentam desvios predominantemente positivos, os biodieles de soja e colza apresentam desvios predominantemente negativos. Esse comportamento sugere que, embora

um único valor médio de k seja suficiente para descrever adequadamente todas as misturas investigadas, pequenas variações do valor ótimo desse parâmetro podem existir em função da composição química do biodiesel.

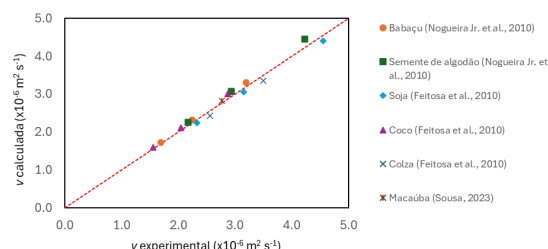


Figura 1. Gráfico dos valores calculados vs valores experimentais publicados na literatura para os biodieles estudados.

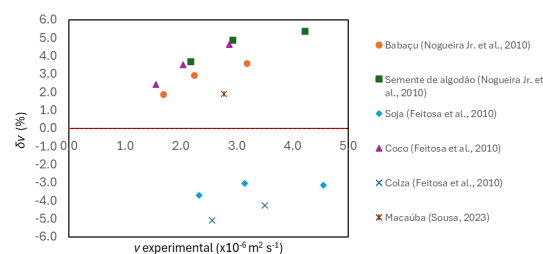


Figura 2. Gráfico dos desvios relativos do modelo em relação aos dados experimentais publicados na literatura para os biodieles estudados.

Um aspecto particularmente interessante é que os biodieles de soja e colza avaliados distinguem-se dos demais por apresentarem frações molares apreciáveis de linolenato de metila (C18:3), da ordem de 8% e 10% em fração molar, respectivamente, enquanto esse componente está ausente (ou em quantidades desprezíveis) nas demais matérias-primas avaliadas. Embora o conjunto de dados disponível ainda seja muito pequeno para estabelecer uma relação causal, essa observação levanta a hipótese de que o maior grau de insaturação da mistura possa influenciar discretamente a proporcionalidade entre a energia de Gibbs em excesso e a energia de Gibbs de ativação em excesso do fluxo viscoso, refletindo-se em pequenas alterações do valor ótimo de k .

Assim, os resultados obtidos não apenas corroboram a hipótese de proporcionalidade proposta neste trabalho, como também sugerem que a constante k possa representar um parâmetro característico de misturas de ésteres graxos quando os coeficientes de atividade são obtidos pelo modelo CS25. As pequenas tendências observadas nos resíduos indicam, contudo, que esse parâmetro

pode apresentar uma dependência secundária da composição molecular, hipótese que poderia ser investigada em estudos futuros envolvendo biodieseis com diferentes distribuições de ésteres graxos e graus de insaturação.

Por outro lado, na Figura 3 avalia-se que o modelo aqui proposto exibiu coerência na descrição do comportamento da viscosidade cinemática com a temperatura, demonstrando sua potencialidade para este tipo de análise.

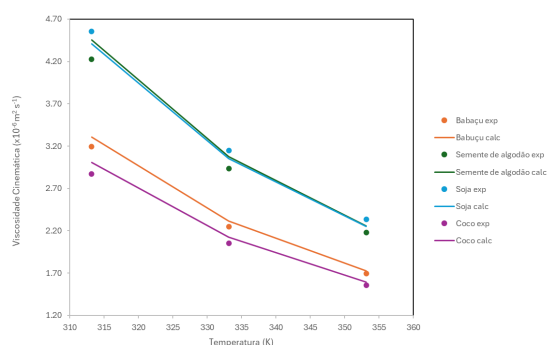


Figura 3. Gráfico dos valores experimentais e calculados pelo modelo Eyring-CS25 em função da temperatura para biodieseis selecionados

CONCLUSÃO

Neste trabalho foi desenvolvido um novo modelo para a predição da viscosidade cinemática de misturas de biodiesel, denominado Eyring-CS25, obtido a partir da incorporação da teoria da taxa absoluta de Eyring aos coeficientes de atividade calculados pelo modelo preditivo CS25. A abordagem proposta estabelece uma relação entre a energia de Gibbs em excesso e a energia de Gibbs de ativação em excesso do fluxo viscoso por meio de uma constante de proporcionalidade, permitindo incorporar diretamente os efeitos de não idealidade ao cálculo da viscosidade de misturas líquidas.

Os resultados obtidos demonstraram elevada concordância entre as viscosidades cinemáticas calculadas e os dados experimentais disponíveis na literatura, apresentando um elevado coeficiente de determinação. A boa concordância observada para biodieseis provenientes de diferentes matérias-primas indica que um único valor da constante de proporcionalidade foi suficiente para representar satisfatoriamente todos os sistemas investigados, fornecendo suporte à hipótese de proporcionalidade entre a energia de Gibbs em excesso e a energia de Gibbs de ativação em

excesso do fluxo viscoso para misturas de ésteres graxos.

A análise dos desvios relativos mostrou ainda que o modelo mantém desempenho consistente ao longo de toda a faixa de viscosidades estudada, sem evidências de perda sistemática de capacidade preditiva em função da magnitude da viscosidade. Entretanto, observou-se um leve agrupamento dos resíduos de acordo com a matéria-prima utilizada, sugerindo que pequenas diferenças na composição dos biodieseis — possivelmente associadas ao grau de insaturação e, em particular, à presença de ésteres linolênicos (C18:3) — possam influenciar discretamente o valor ótimo da constante de proporcionalidade. Embora essa hipótese ainda necessite de validação por meio de um conjunto mais amplo de sistemas experimentais, a reduzida magnitude dos desvios obtidos demonstra que a utilização de um único valor médio para k constitui uma aproximação adequada para as misturas de biodiesel investigadas. Dessa forma, o modelo Eyring-CS25 constitui uma ferramenta promissora para estudos de simulação, projeto e otimização de processos que dependem de estimativas confiáveis da viscosidade de misturas de biodiesel.

Por fim, ao disponibilizar um modelo fundamentado em princípios termodinâmicos para a estimativa da viscosidade de combustíveis renováveis, este trabalho contribui para o desenvolvimento de ferramentas capazes de apoiar a modelagem e a otimização de processos relacionados à produção e utilização de biodiesel. Nesse contexto, seus resultados encontram-se alinhados aos esforços voltados para a transição energética e para o uso mais eficiente de recursos, em consonância com o Compromisso pela Qualidade do Ar e Saúde Ambiental e com os Objetivos de Desenvolvimento Sustentável 7 (Energia Limpa e Acessível), 12 (Consumo e Produção Responsáveis) e 13 (Ação Contra a Mudança Global do Clima).

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem à Universidade Federal de Santa Catarina, em especial ao Departamento de Química, e ao Instituto Federal Catarinense - Campus Araquari, nossas Instituições de origem, bem como à organização do V Web Encontro Nacional de Engenharia Química.

REFERÊNCIAS

- BOSSE, D.; BART, H. Viscosity Calculations on the Basis of Eyring's Absolute Reaction Rate Theory and COSMOSPACE. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 44, n. 22, p. 8428-8435, 2005.
- BOUILLOT, B.; TEYCHENE, S.; BISCANS, B. An evaluation of COSMO-SAC model and its evolutions for the prediction of drug-like molecule solubility: Part 1. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 26, p. 9276-9284, 2013.
- BRASIL. Ministério do Meio Ambiente, Ministério da Saúde, Ministério das Cidades. **Compromisso pela Qualidade do Ar e Saúde Ambiental**. 2009. Disponível em: <https://www.gov.br/mma/pt-br/assuntos/meio-ambiente-urbano-recursos-hidricos-qualidade-ambiental/qualidade-do-ar/repositorio/plano-nacional-de-qualidade-do-ar>. Acesso em: 26 jun. 2026.
- BRASIL. Ministério de Minas e Energia. Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **Biodiesel**. 2020. Disponível em: <https://www.gov.br/anp/pt-br/assuntos/producao-e-fornecimento-de-biocombustiveis/biodiesel>. Acesso em: 24 junho 2026.
- CANTIANI, A. *et al.* CFD analysis of biodiesel combustion applied to industrial burners. **Modelling, Measurement and Control C**, v. 79, n. 3, p. 61-69, 2018.
- FEITOSA, F. X.; RODRIGUES, M. L.; VELOSO, C. B.; CAVALCANTE, C. L. ALBUQUERQUE, M. C. G.; SANT'ANA, H. B. Viscosities and Densities of Binary Mixtures of Coconut + Colza and Coconut + Soybean Biodiesel at Various Temperatures. **Journal of Chemical & Engineering Data**, v. 55, n. 9, p. 3909-3914, 2010.
- FONTOURA, L. A. M.; SANTOS, S. J.; MARQUES, M. V. **O biodiesel e as fontes de energia: contexto, química e tecnologia**. 1. ed. Blumenau: Editora IFC, 2023.
- GERBER, R. P.; SOARES, R. P. Prediction of Infinite-Dilution Activity Coefficients Using UNIFAC and COSMO-SAC Variants. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 49, n. 16, p. 7488-7496, 2010.
- GLASSTONE, S.; LAIDLER, K. J.; EYRING, H. **The Theory of Rate Processes**, traduzida por S. Hasegawa, N. Hirai, H. Goto, McGraw-Hill, New York, 1941 (Capítulo 9) Yoshioka Shoten, Tokyo, 1964.
- GRUNBERG, L.; NISSAN, A. H. Mixture Law for Viscosity. **Nature**, v. 164, p. 799-800, 1949.
- HAI-KACEM, R. B.; ALZAMEL, N. O.; AL-OMAIR, N. A.; ALKHALDI, M. A.; AL-ARFAJ, A. A.; OUFELLI, N. Sensitivity of Viscosity Arrhenius-Type Equation to Density of Liquids. **Asian Journal of Chemistry**, v. 28, n. 11, p. 2407-2410, 2016.
- KLAMT, A.; SCHÜRMANN, G. COSMO: a new approach to dielectric screening in solvents with explicit expressions for the screening energy and its gradient. **Journal of Chemical Society, Perkin Transactions 2**, n. 5, p. 799-805, 1993.
- LIN, S. T.; SANDLER, S. I. A Priori Phase Equilibrium Prediction from a Segment Contribution Solvation Model. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 41, n. 5, p. 899-913, 2002.
- MATSUDA H.; TOCHIGI, K.; KURIHARA, K.; FUNAZUKURI, T.; RATTAN, V. K. Estimation of kinematic viscosities for multi-component systems using modified Eyring and activity coefficient model. **Fluid Phase Equilibria**, v. 492, p. 137-144, 2019.
- NOGUEIRA JR., C. A.; FEITOSA, F. X.; FERNANDES, F. A. N.; SANTIAGO, R. S.; SANT'ANA, H. B. Densities and Viscosities of Binary Mixtures of Babassu Biodiesel + Cotton Seed or Soybean Biodiesel at Different Temperatures. **Journal of Chemical & Engineering Data**, v. 55, n. 11, p. 5305-5310, 2010.
- NOVAK, L. Entity-Based Eyring-NRTL Viscosity Model for Mixtures Containing Oils and Bitumens. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 45, n. 21, p. 7329-7335, 2006.
- ONODERA, N.; SAKABE, J.; FUNAZUKURI, T. Prediction of dynamic viscosities of carbon dioxide – organic solvent mixtures with combined equation of state and Eyring theory. **The Journal of Supercritical Fluids**, v. 177, p. 105345, 2021.
- PINTO, C. N. **Otimização de parâmetros para modelos baseados no conceito de contribuição de grupos aplicado ao cálculo de viscosidade de misturas não ideais**. 2019. 184 f. Tese (Doutorado em Ciências) - Programa de Pós- Graduação em Engenharia de Alimentos, Universidade de São Paulo, Pirassununga, 2019.
- SILVA, A. D. **Previsão das propriedades do biodiesel e seu perfil ideal de ácidos graxos por meio de aprendizado de máquina**. 2024. 77 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2024.
- SILVA, G. O.; SILVA JUNIOR, J. L. Estimativa dos parâmetros termodinâmicos de ativação viscosa de ésteres presentes no biodiesel utilizando um método teoricamente consistente. In: 31º Encontro de Química da Região Sul, 2025, Toledo, PR. **Anais [...]**. Toledo, PR: SBQ Sul, 2025.
- SOARES, R. D. P. **JCOSMO: A computational tool for modern quasi-chemical models**. Disponível em: <https://lvpp.github.io/jcosmo-docs/>. Acesso em: 29 jun. 2026.

SOUSA, B. A. **Óleo a Semente de Macaúba (*Acrocomia aculeata*): Extração, Obtenção de Biodiesel e Caracterização da Conversão e Viscosidade Cinemática.** 2023. 93 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2023.