

Simulação do processo de desacetilação de Quitina a Quitosana mediante AVEVA Process Simulation

Peralta G.E^a, Russo D.M^a, Pistonesi M.F^a, Bispo H^b

^aDepartamento de Química, INQUISUR-CONICET, Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca-B.A

^bDepartamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande-PB, Brasil

Gastonperalta57@gmail.com

RESUMO

A quitina, um biopolímero abundante nos exoesqueletos de crustáceos, é convertida em quitosana mediante uma reação de desacetilação alcalina com NaOH a temperatura elevada. A estequiometria geral do processo segue a reação: Quitina + NaOH → Quitosana + CH₃COONa.

A quitosana resultante possui propriedades físico-químicas de alto valor industrial, tais como biocompatibilidade, biodegradabilidade e uma marcada atividade antimicrobiana, o que a torna adequada para aplicações na indústria farmacêutica, alimentícia e de tratamento de efluentes [Pistonesi 2001]. Nesse contexto, a simulação computacional é uma ferramenta estratégica da Engenharia de Sistemas em Processos (PSE) para avaliar condições operacionais e construir plataformas para o escalonamento industrial.

Este trabalho desenvolve um modelo computacional para a desacetilação de quitina no AVEVA Process Simulation (APS). Primeiramente, foi criado um fluido termodinâmico declarando os componentes com o pacote de Peng-Robinson, forçando a fase líquida ao trabalhar com polímeros. Em seguida, foi definido um modelo cinético baseado em uma lei de Arrhenius de primeira ordem para a quitina [Narudin et al. (2022)]:

$$\frac{dy}{dx} = 2.97 \cdot \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \cdot z[\text{Quitina}] \quad (1)$$

Este modelo foi integrado em um reator de conversão (CNVR) em fase líquida contínua, alimentado com quitina sólida e uma solução aquosa de NaOH sob pressão e temperatura controladas. A simulação superou os requisitos de inicialização do APS para polímeros, alcançando a convergência matemática do estado estacionário. Foi possível simular a desacetilação e extrair a evolução espacial e temporal dos parâmetros termodinâmicos e mássicos, facilitando a análise direta da interação entre a temperatura e a concentração de reagentes na taxa de conversão. Embora existam limitações pela falta de propriedades termofísicas exatas para macromoléculas em bases padrão, este trabalho constitui um avanço exitoso em direção à construção de um gêmeo digital da obtenção de quitosana. Como perspectiva futura, recomenda-se à comunidade de PSE avançar na calibração cinética dinâmica com validação experimental e utilizar modelos termodinâmicos de eletrólitos para prever e otimizar com exatidão o consumo de álcali em escala industrial.

Palavras-chave: quitosana; desacetilação; simulação de processos.

Agradecimentos

Peralta G. E agradece à Universidad Nacional del Sur (UNS, Argentina), D. M. Russo agradece ao Conselho Nacional de Pesquisas Científicas e Técnicas (CONICET, Argentina). M. F. Pistonesi agradece à Comissão de Pesquisas Científicas (CIC, Argentina). H. Bispo agradece à Universidade Federal de Campina Grande (UFCG).

Referências

Narudin, N. A. H., Rosman, N. A., Shahrin, E. W. E., Sofyan, N., Hanif Mahadi, A., Kusriani, E., ... & Usman, A. (2022). Extraction, characterization, and kinetics of N-deacetylation of chitin obtained from mud crab shells. *Polymers and Polymer Composites*, 30, 09673911221109611.

Pistonesi, M. (2001). Obtenção de quitosana padrão e sua aplicação para o tratamento de águas residuais (Tese de Doutorado, Universidad Nacional del Sur, Argentina).



Realização:

