
Desenvolvimento de modelos matemáticos para estimativa de propriedades de produtos de origem petrolífera e biogénica, com base em espectroscopia de ^1H RMN em Refinaria / Biorefinaria

Resumo

O desenvolvimento de tecnologias relacionadas com equipamentos de espectroscopia (por ex.: NIR- Near infra Red e RMN – Ressonância Magnética Nuclear) tem permitido uma estimativa mais realista e precisa de propriedades de produtos, no âmbito de diversos processos de produção.

A utilização destes equipamentos em articulação com modelos matemáticos adequados pode permitir determinar rapidamente o valor de múltiplas características ou propriedades de produtos importantes para efeitos de avaliação de qualidade de produto e controlo processual, em refinarias / biorefinarias, nomeadamente, em matérias-primas, combustíveis e/ou componentes de combustíveis de origem biogénica, mineral ou sua mistura.

Processos analíticos rápidos e rigorosos são determinantes para conseguir eficiência e competitividade, para reagir com agilidade e rigor à mudança. No entanto, os desafios são exigentes uma vez que em refinarias / biorefinarias, a diversidade de matérias-primas, produtos intermédios e finais é cada vez maior e a sua composição química complexa, podendo coexistir num mesmo produto moléculas de origem mineral e biogénica originando, sob o ponto de vista químico, matrizes de elevada variabilidade. Neste cenário, a estimativa rigorosa de propriedades é difícil mas, por isso mesmo, desafiante.

O projeto implicará um trabalho experimental exaustivo para recolha de dados analíticos representativos, utilizando espectroscopia de RMN e métodos analíticos de referência. O aluno deverá ainda desenvolver modelos matemáticos adequados que permitam, com rigor necessário e suficiente, fazer a estimativa de múltiplas propriedades correspondentes a diversos produtos, validá-los e desenvolver uma aplicação que permita: a implementação deste processo na refinaria; a otimização de do número de ensaios realizado; a obtenção de resultados com maior agilidade logística, rigor e ganhos. A validação desta metodologia, abrirá caminho para se encarar um possível investimento em analisadores on-line, muito úteis no processo de *blending* – operações logísticas da Refinaria.

Para além da espectroscopia de RMN, poderá ainda ser utilizada a tecnologia NIR.