

INTRODUÇÃO

Os biocombustíveis são combustíveis de fontes renováveis que podem substituir totalmente ou parcialmente os combustíveis derivados do petróleo e gás natural a fim de gerar energia, principalmente em motores de combustão.

Neste trabalho foi estudada a estabilidade do biodiesel e suas blendas Bx (biodiesel/diesel), nos tempos zero, vinte e quarenta dias, através de dados obtidos por técnicas espectroscópicas e quimiometria, com o objetivo de avaliar as diferenças observadas entre o combustível recebido da distribuidora e o combustível esterilizado, através da Espectroscopia no Infravermelho por Reflexão Total Atenuada (ATR) e quimiometria.

METODOLOGIA

Obtenção das Blendas

Para a posterior obtenção dos dados espectrais, da fase óleo, foram realizadas misturas de 10mL de uma fase oleosa (blenda biodiesel/diesel), estabelecendo uma faixa de contrações contendo 0, 5, 10, 50 ou 100% de biodiesel em petrodiesel, em 20mL de uma fase aquosa (meio Bushnell-Hass).

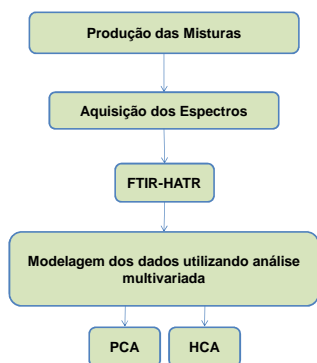


Figura 1: Fluxograma do procedimento realizado.

Espectros no infravermelho

Na aquisição dos espectros foi utilizado um espectrômetro no infravermelho modelo Prestige da Shimadzu 21 com acessório de reflexão total atenuada (ATR) empregando-se um cristal de seleneto de zinco (ZnSe). Foi utilizado o intervalo entre 4000 a 650 cm^{-1} e resolução de 4 cm^{-1} .

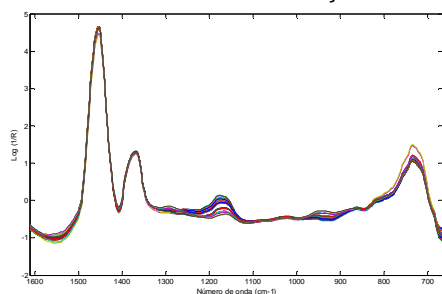


Figura 2: Espectros das misturas produzidas.

Análise multivariada

Os dados obtidos por infravermelho foram normalizados e com estes foi construída a matriz de dados espectrais para posterior modelagem. Utilizando ambiente computacional, MATLAB 7.0 e PLS Toolbox, os dados espectrais foram empregados na construção de modelos de regressão multivariados (PCA e HCA).

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem ao FAPERGS pela bolsa de iniciação científica concedida, bem como a Propesq pelo auxílio financeiro a realização do Projeto.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Após os primeiros tratamentos, foi feito o dendrograma (Figura 3), onde se pode notar um princípio de separação dos dois grupos estudados, um contendo as amostras do grupo Contaminação (destacado pela cor verde na Figura 3) e outro contendo as amostras do grupo Controle (destacado pela cor vermelha na Figura 3). Porém, as amostras FB5T20Ia, FB5T20Ib, FB520IIa e FB5T20IIb, que pertencem ao grupo Contaminação, estão representadas entre as amostras do grupo Controle.

Dendrogram of Data with Preprocessing: Smoothing (order: 1, window: 21 pt, incl only) + SNV

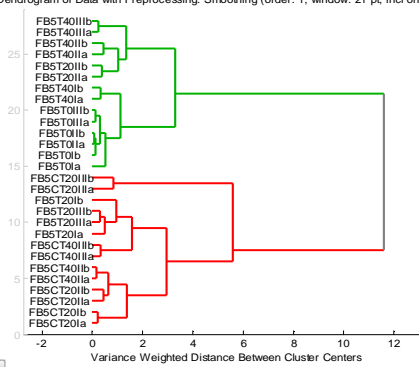


Figura 3: Dendrograma para os espectros das amostras B5, com a aplicação de alisamento e SNV.

Também foi feita a análise de componentes principais (PCA) dos espectros obtidos, que além dos tratamentos feitos para os dendrogramas, foi centrada na média. Na Figura 4 se pode notar que o grupo denominado Controle (destacado em vermelho) sofre um desvio negativo no escore PC1.

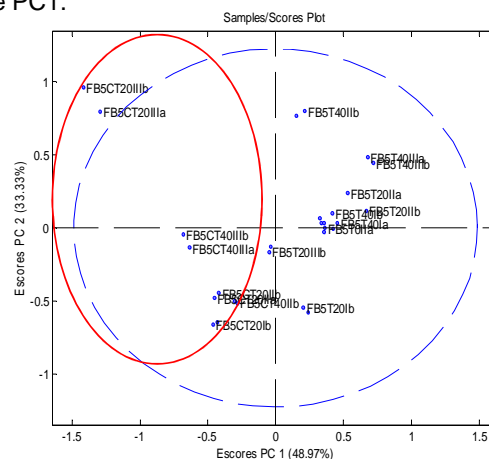


Figura 4: Escores PC1 versus PC2 para PCA dos espectros das amostras B5, com a aplicação de alisamento, segunda derivada, SNV e centrados na média.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Os resultados obtidos até o presente demonstram que a técnica de infravermelho (ATR-FTIR) permite inferir sobre transformações ocorridas na fração óleo do presente estudo. Foi possível através das análises multivariadas (PCA e HCA) extrair a informação relevante contida nos espectros que se relaciona com as diferenças encontradas entre as amostras analisadas. A principal distinção ocorreu entre aquelas do tempo zero e as dos tempos vinte e quarenta dias. Não foi observada para o B5 diferenças significativas entre as amostras dos tempos vinte e quarenta dias.