

## Quantificação de biodiesel de milho em misturas com diesel usando Espectrometria no Infravermelho Médio e calibração multivariada

Fábio dos Santos Fonseca<sup>1</sup> (PG)\*, Samuel Manzini de Oliveira<sup>1</sup> (IC), Flaysner Magayver Portela<sup>2</sup> (PG), Manuel Gonzalo Hernández-Terrones<sup>2</sup> (PQ), Waldomiro Borges Neto<sup>2</sup> (PQ) \*qfabiosf@gmail.com

<sup>1</sup>Laboratório de Quimiometria do Triângulo, Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia.

<sup>2</sup>Laboratório de Biocombustíveis, Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia.

Palavras Chave: biodiesel, etílico, metílico, milho, MIR, PLS.

### Introdução

O Biodiesel tem propriedades físicas muito semelhantes ao diesel. As emissões de poluentes, no entanto, são menores. O Biodiesel pode ser obtido a partir de óleos vegetais ou de gordura animal. Além de ser uma fonte de energia renovável apresenta a vantagem de ser biodegradável. Os óleos vegetais podem reagir quimicamente com um álcool, para produzir ésteres. Esses ésteres quando usados como combustíveis lavam o nome de Biodiesel.

Neste trabalho, a quantificação do teor de Biodiesel nas misturas com Diesel foi realizada através da técnica de Espectrometria no Infravermelho Médio (MIR) aliada ao método de regressão por Quadrados Mínimos Parciais (PLS). Foram obtidos espectros para as misturas com concentrações na faixa de 1 a 20% (v/v).

### Resultados e Discussão

Os espectros de infravermelho médio (MIR), foram obtidos no equipamento Shimatzu IRPrestige-21 com resolução de  $4\text{ cm}^{-1}$  e 32 varreduras. Os espectros foram corrigidos usando o método de correção da linha de base.

Para a construção do modelo PLS foram utilizadas 30 amostras na calibração e 10 para previsão. No modelo de calibração do Biodiesel de milho etílico foram utilizadas 9 Variáveis Latentes. Para o modelo com Biodiesel de milho metílico foram usadas 4 Variáveis Latentes. Os modelos foram criados utilizando PLS toolbox para Matlab. A eficiência dos modelos pode ser avaliada através dos resultados da Tabela 1.

Tabela 1. Resultados do modelo PLS.

Via de Reação	RMSEC	RMSEP	Erro médio (%)
Etílica	0,0330	0,1681	1,7454
Metílica	0,1532	0,1525	1,3977

Na Figura 1 (Biodiesel de milho etílico) e na Figura 2 (Biodiesel de milho metílico) temos o gráfico dos valores das concentrações reais versus os previstos indicando que o modelo foi linear na faixa analisada.

33ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

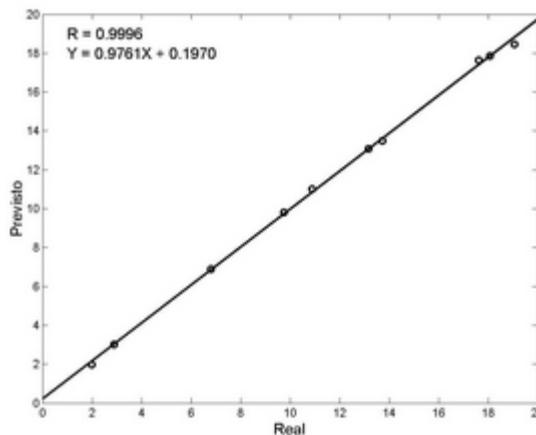


Figura 1. Concentração Real vs. Previsto.

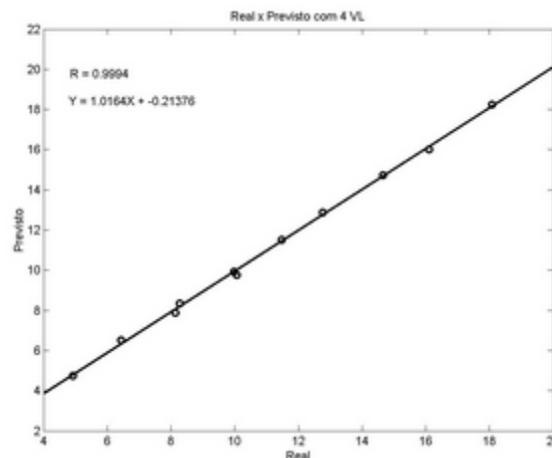


Figura 2. Concentração Real vs. Previsto.

### Conclusões

O modelo PLS para espectros MIR das amostras de misturas de diesel e biodiesel de milho etílico é uma ferramenta eficiente para a quantificação na faixa de 1 a 20% (v/v) com erro médio de previsão abaixo de 1,8%. A metodologia desenvolvida pode ser utilizada pelos órgãos fiscalizadores e produtores.

### Agradecimentos

A FAPEMIG pelo apoio financeiro.  
A TRANSPETRO pela parceria.