

Uso de Análise Exploratória na classificação de biodiesel (B5) de diversas oleaginosas, analisados por FT-IR

Janaina do Couto Almeida¹ (IC)*, Douglas Queiroz Santos³ (PQ), Rafaela Gonçalves Machado¹ (IC), Roberta de Castro Souza¹ (IC), Manuel G. Hernández-Terrones² (PQ), Waldomiro Borges Neto¹ (PQ).
*janaca@gmail.com

¹ Laboratório de Quimiometria do Triângulo, Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia.

² Laboratório de Biocombustíveis, Instituto de Química, Universidade Federal de Uberlândia.

³ Instituto Federal de Goiás, Campi Itumbiara – GO.

Palavras Chave: biodiesel, metílico, etílico, MIR, HCA, PCA

Introdução

O Biodiesel é definido como um derivado mono alquil éster de ácidos graxos de cadeia longa, proveniente de fontes renováveis como óleos vegetais, cuja associação está relacionada à substituição de combustíveis fósseis em motores de ignição por compressão.

Este combustível biodegradável, pode ser obtido por diferentes processos tais como o craqueamento, a esterificação ou pela transesterificação. Pode ser produzido a partir de gorduras animais ou de óleos vegetais, existindo dezenas de espécies vegetais no Brasil que podem ser utilizadas, tais como milho, girassol, sebo, algodão, pinhão manso, dentre outras.

Neste trabalho propomos uma metodologia para classificar biodiesel utilizando Espectrometria no Infravermelho Médio (MIR) e métodos de Análise Exploratória como a Análise de Agrupamentos Hierárquicos (HCA) e Análise de Componentes Principais (PCA).

Resultados e discussão

Os espectros foram obtidos utilizando um espectrômetro de infravermelho da marca Shimadzu modelo IRPrestige-21, com transformada de Fourier e dispositivo amostrador por reflectância total atenuada (ATR) com cristal de ZnSe. Foi utilizada uma resolução de 4 cm⁻¹ e 32 varreduras.

A Análise de Agrupamentos Hierárquicos (HCA) conseguiu diferenciar as amostras de diferentes biodiesel e a separação de biodiesel metílico e etílico, como pode ser observado na figura 1.

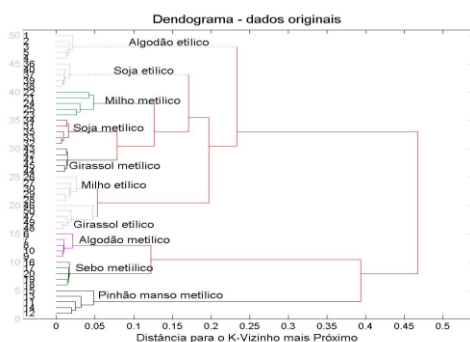


Figura 1: Dendrograma obtido pela HCA.

Na Análise de Componentes Principais (PCA) utilizando dados centrados na média e 7 PCs que explicam 98,72% da variância, obteve-se os agrupamentos semelhantes aos da HCA como pode ser observado na figura 2. Neste caso, também identificamos a distinção entre as amostras de diferentes biodiesel e a separação entre biodiesel metílico e etílico.

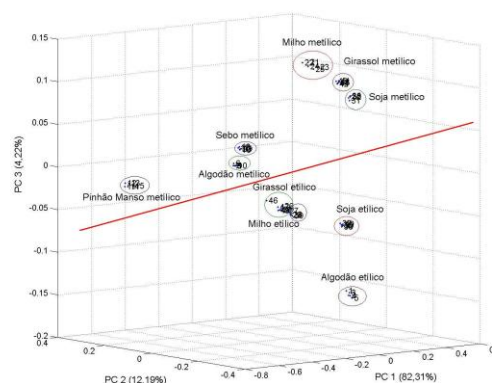


Figura 2: Gráfico dos escores obtidos por PCA.

Conclusão

A metodologia utilizando a técnica de Espectrometria na região do Infravermelho Médio aliada aos métodos de análise exploratória possibilitou a distinção entre amostras de diferentes biodiesel e a separação de biodiesel metílico e etílico.

Agradecimentos

FAPEMIG, TRANSPETRO, CNPq.