

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. Visando a utilização do biodiesel como fonte energética, alguns países estabeleceram programas de subsídio ou de uso obrigatório nas misturas com diesel, como é o caso do Brasil, que incluiu o biodiesel na matriz energética brasileira a partir da Lei nº 11.097, de 13 de janeiro de 2005, fixando a utilização mínima obrigatória de 2% em volume de biodiesel ao óleo diesel comercializado. Atualmente é comercializada a mistura B5, que contém 5% em volume de biodiesel ao óleo diesel. Para garantir que não haja adulterantes nos combustíveis comercializados, como óleos e gorduras *in natura*, ou até mesmo óleos provenientes de frituras, é necessário que se realizem análises que comprovem a qualidade do combustível. Neste trabalho foram desenvolvidos e aplicados modelos de análise multivariada empregando regressão por mínimos quadrados parciais (PLS), por intervalos (iPLS) e por sinergismo de intervalos (siPLS) visando a quantificação de adulterantes comuns em blendas biodiesel/diesel. Foram realizadas misturas binárias de petrodiesel e biodiesel, estabelecendo-se as faixas de concentração de 1 a 10%, com uma variação de 0,5%, e de 11 a 20%, com uma variação de 1%, de biodiesel, de soja e de sebo, em petrodiesel S50. Também foram preparadas amostras com diferentes concentrações e tipos de adulterantes, dentre eles: óleo de soja, óleo de girassol e óleo de fritura. Em balão volumétrico foi formulada cada uma das misturas para posterior análise. Para fazer a análise de tais amostras foi utilizado um espectrofotômetro no infravermelho (FTIR) Spectrum 400 da Perkin Elmer com acessório de reflexão total atenuada (ATR) empregando-se um cristal de seleneto de zinco (ZnSe). Os espectros foram obtidos em triplicata empregando-se 16 varreduras, faixa espectral entre 4000 e 650 cm^{-1} e resolução de 4 cm^{-1} para cada uma das amostras planejadas. Logo após, 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 os dados espectrais foram empregados na construção de modelos de regressão multivariados (PLS, iPLS e siPLS). Dentre os modelos construídos destacaram-se o iPLS subdividindo o espectro em quatro intervalos e o siPLS combinando dois intervalos para subdivisão em oito. Ambos selecionaram a faixa espectral de 1486 a 650 cm^{-1} que corresponde a região de impressão digital e a faixa espectral que contém os sinais referentes ao estiramento C-O presente nos ésteres (óleos, sebo e biodiesel). O modelo empregando esta região apresentou $R^2=0,998$, $\text{RMSECV}=0,592\%$ e $\text{RMSEP}=0,381\%$ para duas componentes principais. Este modelo estimou bem o percentual de biodiesel tanto nas amostras B5, quanto nas amostras que apresentavam teores maiores e menores, incluindo amostras 100% adulteradas (B0). Estes resultados indicam que a espectroscopia no infravermelho empregando FTIR-ATR em conjunto com a regressão multivariada por PLS permitem não só quantificar o biodiesel de blendas biodiesel/diesel, como também indicar amostras adulteradas.