



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2018: SIC - XXX SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2018
<b>Local</b>	Campus do Vale - UFRGS
<b>Título</b>	Automação do processo de identificação de compostos de bio-óleo resultante de pirólise rápida
<b>Autor</b>	TIAGO CASAGRANDE
<b>Orientador</b>	JORGE OTAVIO TRIERWEILER

## **Automação do processo de identificação de compostos de bio-óleo resultante de pirólise rápida**

Aluno: Tiago Casagrande

Orientador: Jorge Otávio Trierweiler

A pirólise é um processo utilizado para geração de diversos produtos através da decomposição térmica de matérias-primas, usualmente em atmosfera inerte. O Brasil, sendo referência em agronegócio, apresenta grande disponibilidade de resíduos agroindustriais de baixo valor agregado. O processo de pirólise rápida é capaz de transformar esses recursos em produtos de alto valor agregado.

O *biochar* e o bio-óleo são os produtos obtidos pela pirólise rápida, sendo o último uma mistura de diversos compostos, cujos valores comerciais são apreciáveis. Sua identificação é, portanto, de grande importância e pode ser realizada por Cromatografia Gasosa com Espectrometria de Massas (GC-MS). Nesse trabalho, foram utilizadas ferramentas computacionais para automatizar o tratamento de dados envolvido nesse processo.

A análise cromatográfica é realizada com o apoio do Instituto de Química Analítica da UFRGS. O resultado das análises é composto por *cromatograma* e lista de compostos mais prováveis para cada pico; adicionalmente, os tempos de retenção dos compostos indicados são obtidos em referências primárias. A atividade de identificação consiste em cruzar essas informações, chegando-se ao *composto mais provável*. A cada amostra, são esperados mais de cem compostos, sendo necessários aproximadamente três minutos por composto para um operador experiente.

A automação implementada compreende basicamente a mesma estratégia realizada manualmente: os tempos de retenção dos compostos mais prováveis são comparados com o tempo de retenção do pico analisado. A linguagem de programação *Python* foi utilizada na obtenção dos dados em fonte primária *online*, assim como para a comparação dos tempos de retenção. Adicionalmente, os espectros de massa dos compostos identificados são apresentados para inspeção visual.

Resultados obtidos em testes realizados com o programa apresentam grande semelhança com aqueles obtidos manualmente. Algumas falhas podem ocorrer devido à falta ou ao grande número de referências disponíveis na plataforma escolhida para a consulta. Atividades previstas devem melhorar significativamente o processo, entre elas, implementações no filtro de coleta de informações e *download* do banco de dados.