

Quantificação de Biodiesel de Pinhão Manso em Blendas Biodiesel/Diesel usando HATR-MIR e PLS

José Eduardo Buiatte¹ (PG)*, Lucas Caixeta Gontijo¹ (PG), Sarmiento Junior Mazivila¹ (PG), Douglas Queiroz Santos² (PQ), Waldomiro Borges Neto¹ (PQ) *jeduardobuiatte@iqufu.ufu.br

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

² Escola Técnica de Saúde (ESTES), Universidade Federal Uberlândia.

Palavras Chave: PLS, pinhão-manso, biodiesel, quantificação

Introdução

No Brasil, a adição de 5% (v/v) de biodiesel no diesel é obrigatório pela Resolução 14/2012. O pinhão manso mostra-se uma fonte promissora para a produção de biodiesel, devido as vantagens apresentadas pelo seu óleo e cultivo.¹

Assim, o objetivo deste trabalho foi construir modelos de regressão multivariada por quadrados mínimos parciais (PLS) e infravermelho médio (MIR) para quantificação de biodieseis etílico e metílico de pinhão manso em blendas biodiesel/diesel, na faixa de concentração de 1,00% a 30,00% (v/v). Os modelos foram construídos seguindo as orientações da norma ASTM E1655-05. Também foi verificado se os modelos construídos atendiam as exigências da norma ABNT NBR 15568.²

Resultados e Discussão

Os espectros foram obtidos no espectrofotômetro Spectrum Two (PerkinElmer) com ATR de cristal de ZnSe, resolução de 4 cm⁻¹ e 16 varreduras. O método de correção dos espectros foi pelo método de *baseline*. Foram construídos dois modelos PLS: (i) quantificação de biodiesel etílico de pinhão manso (BEPM), e (ii) quantificação de biodiesel metílico de pinhão manso. O número mínimo de amostras de calibração é de 6(k+1) e o de validação é de 4k, onde k é o número de variáveis latentes (VLs) do modelo.

A Tabela 1 apresenta os resultados dos modelos obtidos. A partir destes resultados, verifica-se que o número mínimo de amostras está conforme o indicando na ASTM E1655. O modelo apresentou baixos valores de erros, indicando ótima exatidão e capacidade de previsão. Como os valores de t_{calc} são menores que os valores $t_{critico}$, o modelo não apresenta erros sistemáticos estatisticamente significantes. A boa linearidade dos modelos construídos pode ser verificada pelos coeficientes de correlação (R) com valores acima de 0,99.

Tabela 1. Resultados dos modelos PLS para a quantificação de biodiesel em blendas biodiesel/diesel.

Parâmetros	BEPM	BMPM
VLs	4	4
Amostras de calibração	45	47
Amostras de previsão	27	27
RMSECV (% v/v)	0,0723	0,0464
RMSEC (% v/v)	0,0590	0,0392
RMSEP (% v/v)	0,0723	0,0658
Erro médio (%)	0,76%	0,42
Coefficiente de Correlação (R)	0,99997	0,99998
t_{calc}	0,2883	0,7079
$t_{critico}$	2,0518	2,0518

A norma ABNT NBR 15568 propõe a construção de dois modelos PLS, uma para a faixa de concentração de 0-8% (v/v) e outra para 8-30% (v/v) para o teor de biodiesel, e o RMSEP não pode ser superior a 0,1% (v/v) e 1% (v/v), respectivamente. A Tabela 1 mostra que os valores de RMSEP foram abaixo de 0,1%, indicando que os modelos atendem a determinação de biodiesel em diesel, sem a necessidade de seleção de região espectral e de intervalos de concentração.

Conclusões

Os resultados obtidos para os modelos indicaram que as metodologias desenvolvidas foram eficientes na quantificação de biodieseis etílico e metílico de pinhão manso em blendas com diesel na faixa de 1,00 a 30,00% (v/v). Além disso, os modelos atenderam às exigências das normas ASTM E1655-05 e ABNT NBR 15568 podendo ser empregados no controle de qualidade deste tipo de combustível.

Agradecimentos

FAPEMIG (Projeto 17014/11), CAPES, CNPq

¹ Choudhury, H. A.; Goswami, P. P.; Malani, R. S.; Moholkar, V. S. *Ultrasonics Sonochemistry*, **2014**, *21*, 1050.

² ABNT NBR 15568. *Biodiesel: Determinação do teor de biodiesel em óleo diesel por espectroscopia na região do infravermelho médio*. ABNT: Rio de Janeiro, 2008.