

Previsão da cristalinidade em biomassa de cana-de-açúcar através de métodos de análise multivariada e espectroscopia NIR

Ítalo P. Caliarí*¹ (IC), Márcio H. P. Barbosa² (PQ), Sukarno O. Ferreira³ (PQ), Reinaldo F. Teófilo¹ (PQ)

¹Departamento de Química – Universidade Federal de Viçosa

²Departamento de Fitotecnia – Universidade Federal de Viçosa

³Departamento de Física – Universidade Federal de Viçosa

*E-mail: caliarí.italo@gmail.com

Palavras Chave: cana-de-açúcar, cristalinidade, NIR, análise multivariada, quimiometria.

Introdução

A cristalinidade da celulose presente na biomassa lignocelulósica tem se mostrado uma importante aliada na estimativa do gasto energético necessário às etapas de hidrólise, as quais são necessárias no preparo de biocombustíveis tais como etanol. Devido à morosidade do método padrão para determinação da cristalinidade, que usa a difratometria de raio X, foi investigada a utilização de espectros na região do infravermelho próximo associados a métodos de análise multivariada para a previsão da cristalinidade de forma mais prática e rápida.

Amostras de 221 genótipos de cana-de-açúcar foram triturados sem caldo, secos em estufa a 65°C, moídos e peneirados a 60 mesh. O difratograma de raio X foi obtido pelo difratômetro D8 Discover da Bruker, variando o ângulo 2 Theta entre 10° e 40°. A cristalinidade foi calculada através do método de Segal¹. Os espectros NIR foram obtidos pelo espectrômetro FT-NIR modelo 660 IR da Varian nos comprimentos de onda de 4000 até 10000 cm⁻¹. A resposta foi obtida em Log (1/Refletância).

Os dados foram importados para o software Matlab e modelos para previsão foram construídos utilizando a regressão por quadrados mínimos parciais (PLS) e o algoritmo de seleção dos preditores ordenados (OPS)². As colunas foram centradas na média e a primeira derivada aplicada às linhas. O algoritmo Kennard Stone foi utilizado para selecionar o conjunto externo de variáveis.

Resultados e Discussão

A Tabela 1 mostra os parâmetros estatísticos para os modelos construídos. Observa-se que os erros foram significativamente menores e os coeficientes de correlação foram significativamente maiores para o modelo com variáveis selecionadas. Finalmente, o RDP foi maior que 1,4; o que indica que o modelo é aceitável.

A Figura 1 mostra a relação entre os valores medidos e preditos para o modelo com seleção de variáveis. Em relação aos erros obtidos, o modelo com seleção de variáveis apresentou erros abaixo de 5% e nenhum erro acima de 15%.

Deste modo, os resultados indicam que é possível realizar a previsão de cristalinidade em biomassa de cana-de-açúcar utilizando NIR.

Tabela 1. Dados estatísticos obtidos para os modelos construídos.

	Completo	OPS
Vetor	-	Reg
hOPS	-	9
hMod	5	5
nVars	1380	210
RMSECV	5,35	3,71
RCV	0,57	0,82
RMSEP	5,75	4,74
RP	0,79	0,87
RDP	0,87	1,46

Reg: Vetor de regressão usado no algoritmo OPS; hOPS e hMod: Número de variáveis latentes para o OPS e para o modelo respectivamente; nVars: Número de variáveis latentes usadas; RMSE: Raiz quadrática média do erro para a validação cruzada (CV) e para a previsão (P); R: Coeficiente de correlação para a validação cruzada (CV) e para a previsão (P). Índice de desempenho do desvio (RDP).

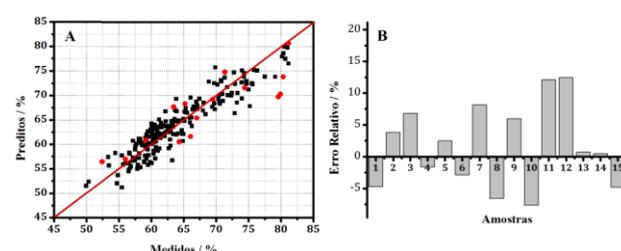


Figura 1. (A) Relação entre valores medidos e preditos para o modelo com seleção de variáveis. (■) amostras do conjunto calibração e (●) amostras do conjunto previsão. (B) erros relativos das amostras do conjunto de previsão preditas pelo modelo com variáveis selecionadas.

Conclusões

Os resultados indicam que é possível realizar a previsão de cristalinidade em biomassa de cana-de-açúcar utilizando espectroscopia NIR e métodos de análise multivariada. O modelo mais adequado para a previsão de cristalinidade a partir do NIR foi aquele obtido com seleção de variáveis aplicando o algoritmo OPS. O modelo apresentou boa capacidade preditiva aliada a um curto intervalo de tempo de análise e mínima manipulação da amostra

Agradecimentos

A FUNAPE, FAPEMIG, CAPES e CNPq

¹ Segal, L.; Creely, J. J.; Martin, A. E. e Conrad, C. M. *Textile Research Journal* **1959**, v. 29, p. 786-794.

² Teófilo, R. F.; Martins J. P. A.; Ferreira, M. M. C. *J. Chemom.* **2009**, v. 23, p. 32-48.