

Monitoramento da produção de biodiesel por espectroscopia no infravermelho médio.

Camila M. Garcia (PG), Marcello G. Trevisan* (PG), Ulf F. Schuchardt (PQ) e Ronei J. Poppi (PQ);
*trevisan@iqm.unicamp.br

Instituto de Química, Universidade Estadual de Campinas, CP 6154, CEP 13084-970, Campinas, São Paulo.

Palavras Chave: *calibração multivariada, biodiesel, transesterificação.*

Introdução

Biodiesel (ésteres monoalquílicos) é um combustível 'limpo', feito a partir de fontes naturais e renováveis, como os óleos vegetais. O Brasil se destaca por possuir uma grande área agrária, com potencial para produção de grandes quantidades de biodiesel, de forma que normas regulamentam o uso progressivo deste componente em mistura com o diesel de petróleo nos próximos anos. Em consequência, torna-se necessário desenvolver metodologias rápidas e de baixo custo, tanto para o monitoramento de processos de produção como na detecção de fraudes e contaminações.

Resultados e Discussão

Neste trabalho, foi desenvolvido uma metodologia que permita a quantificação simultânea da proporção de óleo de soja (triglicerídeos), éster etílico (biodiesel), álcool etílico e glicerina em misturas sintéticas contendo estes componentes. Foram preparadas 11 misturas variando-se a concentração dos componentes estudados, conforme Figura 1.

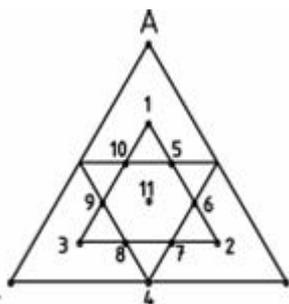


Figura 1 [] planejamento experimental utilizado, onde cada vértice representa óleo (A), éster-etílico (B) e glicerina (C).

As misturas foram analisadas utilizando-se a técnica espectroscopia no infravermelho médio, por reflectância total atenuada. Para isso, utilizou-se como branco espectral uma emulsão óleo:etanol de relação 1:3 (mol/mol). As leituras das amostras foram realizadas utilizando-se 32 varreduras e resolução de 2 cm^{-1} . A faixa espectral utilizada foi de 676 a 1929 cm^{-1} . A partir dos espectros obtidos, foi construída uma matriz de dados, o qual foi utilizada para se

construir um modelo de calibração multivariada, por quadrados mínimos parciais (PLS).

Foram construídos 4 modelos individuais para cada componente, otimizando-se o número de variáveis latentes por validação cruzada (leave-one-out). A Figura 2 apresenta os espectros obtidos.

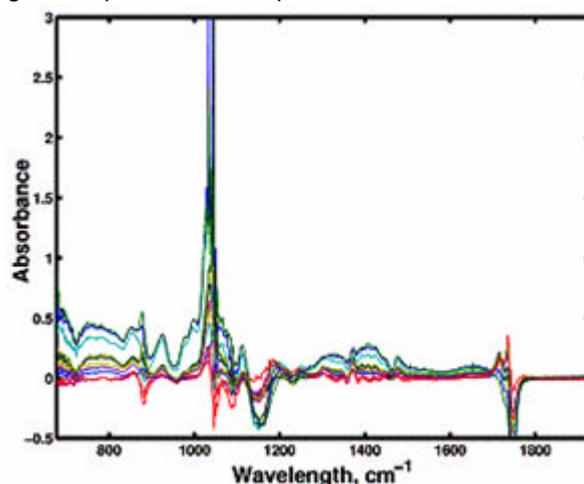


Figura 2. Espectros no infravermelho médio das misturas.

Com os modelos obtidos, foi possível obter erros médios abaixo de 10%, como descrito na Tabela 1.

Tabela 1. Erros médios de calibração para as substâncias estudadas.

Parâmetros	Etanol	Óleo	Éster	Glicerina
Variáveis Latentes	2	6	3	2
RMSECV* (% w/w)	8.6	5.4	3.6	3.8
RMSPD** (%)	6.21	1.42	11.82	38.97

* Erro quadrático médio de cross-validação; ** erro quadrático médio relativo percentual.

Conclusões

Foi possível construir um modelo utilizando espectroscopia no infravermelho e PLS para previsão simultânea que abrangesse toda a faixa de

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

concentração encontrada na reação de etanose de óleos vegetais.

Agradecimentos

Os autores gostariam de agradecer ao CNPq pelo financiamento e pela concessão das bolsas de pós-graduação.