

Determinação de acidez em biodiesel de soja empregando espectroscopia NIR e APS para seleção de amostras e variáveis

Priscila da Silva¹ (IC), Anna Luiza Bizerra de Brito¹(IC), David Douglas Sousa Fernandes¹ (IC), Adriano A. Gomes² (PG), Germano Vêras*¹ (PQ)

1 Laboratório de Química Analítica e Quimiometria – LQAQ, Departamento de Química – Universidade Estadual da Paraíba- UEPB, CEP 58429-500, Campina Grande, PB, Brasil

2 LAQA/Departamento de Química-UFPB, João Pessoa-PB, Brasil.

* germano@uepb.edu.br

Palavras Chave: acidez, biodiesel, NIR, APS

Introdução

Os bicomcombustíveis podem ser considerados como alternativa viável para substituir os combustíveis fósseis, a médio e longo prazo. Entretanto, alguns gargalos devem ser superados, em especial no tocante às metodologias para controle de qualidade. Métodos rápidos e de baixo custo refletirão no preço final do produto ao consumidor. A espectroscopia NIR em conjunto com técnicas quimiométricas atendem de modo satisfatório aos requisitos de rapidez e baixo custo. Neste trabalho é proposta a determinação do índice de acidez em amostras de biodiesel de soja, empregando NIR e o algoritmo das projeções sucessivas (APS) para seleção de amostras e variáveis.

Resultados e Discussão

115 amostras de biodiesel foram obtidas por transesterificação alcalina do óleo de soja, via rota metálica. Os espectros NIR em triplicata foram obtidos em um equipamento Lambda 750, da Perkin Elmer, na faixa de 2230 a 1100 cm^{-1} , com resolução de 1 cm^{-1} . A faixa espectral de trabalho é de 1526 a 1105 cm^{-1} (Fig.1a), região com melhor relação sinal/ruído. Os espectros foram derivados empregando filtro Savitzky-Golay com janela de 11 pontos e polinômio de segunda ordem (Fig.1b).

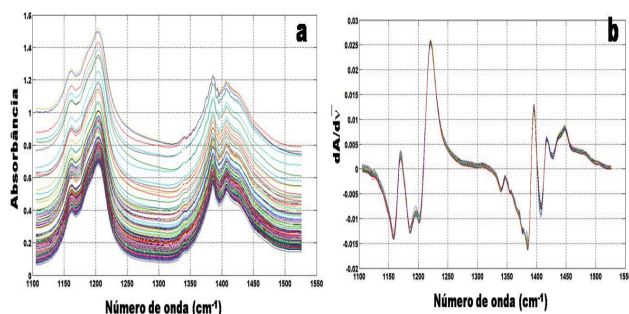


Figura 1. Espectros brutos (a) e pré-processados (b).

O algoritmo APS foi empregado para seleção de amostras e de variáveis nos espectros pré-processados. Na seleção das amostras de calibração e validação do modelo, o uso do APS

possibilita obter um conjunto de calibração com amostras que varrem o espaço modelado com um número mínimo de amostras, bem como evita possíveis extrapolações na fase de validação do modelo. O APS foi usado para seleção de variáveis para construção de modelo MLR relacionando índice de acidez, determinado via análise volumétrica, com os espectros NIR. O APS selecionou um total de nove números de onda, os quais possibilitaram a obtenção de modelos mais interpretáveis e parcimoniosos. Na figura 2 é apresentado o valor do índice de acidez previsto versus o respectivo valor de referência para o conjunto de amostras de predição.

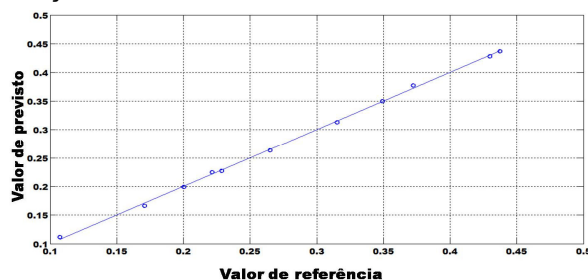


Figura 2. Valor predito versus valor de referência.

O RMSEP de predição obtido foi de 0,003, sendo a faixa de índice de acidez de 0,057 a 0,944 mg(KOH)/g (amostra), e coeficiente de correlação de 0.99962.

Conclusões

O uso combinado da espectroscopia NIR com modelos APS-MLR mostrou-se útil na determinação do índice de acidez em amostras de biodiesel, parâmetro importante como indicador de qualidade do combustível. Pode-se enfatizar ainda que o uso do APS para seleção de variáveis gera modelos mais simples.

Agradecimentos

Agradecimento ao CNPq pelo financiamento do projeto n°: 576416/2008-8.