

## Determinação do Teor de Glicerina Livre em Biodiesel (B100) por Espectrometria no Infravermelho Próximo e APS-MLR

Anna Luiza B. Brito<sup>1</sup> (IC), Adriano A. Gomes<sup>2</sup> (PG), Gean Bezerra da Costa<sup>1</sup> (IC), David Douglas Fernandes<sup>1</sup> (IC), Germano Vêras<sup>1</sup>(PQ)\*

<sup>1</sup> LQAQ-DQ-CCT- Universidade Estadual da Paraíba Av Juvêncio Arruda, bairro Universitário Campina Grande-PB

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

\*[germano@uepb.edu.br](mailto:germano@uepb.edu.br)

Palavras Chave: Glicerina Livre, Biodiesel, APS, NIR

### Introdução

Um importante parâmetro no controle de qualidade do biodiesel é o teor de glicerina livre, termo definido como traços de glicerina dissolvida no biodiesel, que em excesso pode causar problemas no processo de combustão do motor e entupir filtros de combustível. Pela Resolução nº 42/2004 da ANP, o limite máximo permitido é de 0,02% em massa de biodiesel. Os métodos de referência para este parâmetro são baseados em cromatografia ou titrimetria, entretanto tais metodologias são dispendiosas, demoradas e envolvem consumo de grandes quantidades de reagentes. A espectroscopia NIR aparece neste cenário como uma alternativa bastante atrativa, por ser uma técnica não destrutiva, rápida e que requer pouco ou nenhum preparo da amostra.

Neste trabalho é proposto o uso da espectroscopia NIR para construção de modelos de calibração multivariada MLR com seleção de variáveis e Algoritmo das Projeções Sucessivas (APS), para relacionar o teor de glicerina livre com os espectros NIR.

As amostras de biodiesel foram obtidas por transesterificação do óleo de soja refinado, via rota metílica, usando KOH como catalisador. Caracterizações físico-químicas das amostras foram realizadas a fim de avaliar a qualidade das amostras sintetizadas. Para as amostras em conformidade, com os valores de referência, foi conduzida a aquisição dos espectros, em triplicata, na faixa de 2230 a 1100  $\text{cm}^{-1}$  utilizando espectrômetro UV-Vis-NIR da Perkin Elmer, modelo Lambda 750.

### Resultados e Discussão

Os espectros obtidos foram pré-processados por primeira derivada com filtro Savitzky-Golay, janela de sete pontos e polinômio de segunda ordem. As 86 amostras foram divididas em calibração (43 amostras), validação (15 amostras) e predição (28 amostras) utilizando o algoritmo APS para seleção de amostras. O APS foi empregado também com intuito de selecionar um subconjunto de variáveis minimamente colineares para construção de modelos MLR. Na Figura 1 é apresentado o espectro médio das amostras, em que estão indicadas as 30 variáveis selecionadas

pele APS. O gráfico do valor predito versus valor esperado para o teor de glicerina livre, obtido pelo modelo MLR, é apresentado na Figura 2.

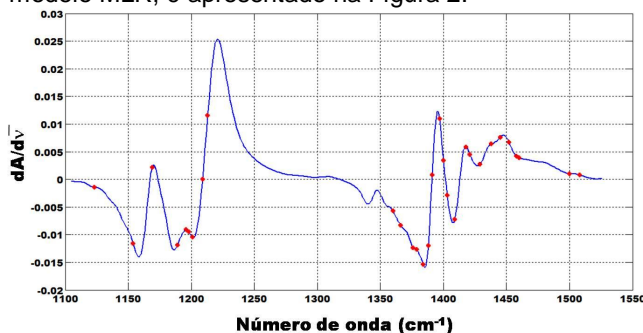


Figura 1: Variáveis selecionadas pelo APS

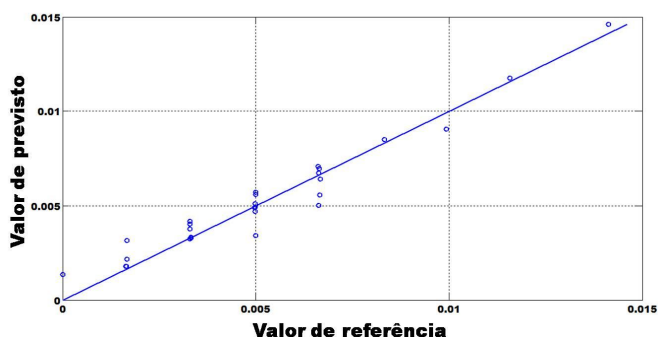


Figura 2: Valor predito versus valor de referência.

Para o conjunto de predição foi obtido RMSEP de 0,001, e a faixa de variação do teor de glicerina livre é de 0,0020 a 0,0265, e coeficiente de correlação de 0,9798.

### Conclusões

Os resultados obtidos mostram o potencial da metodologia proposta para determinação do teor de glicerina livre, como um método rápido e não destrutivo. Bem como a seleção de variáveis empregado o APS proporciona a construção de modelos mais simples.

### Agradecimentos

Agradecimento ao CNPq pelo financiamento do projeto nº: 576416/2008-8 e a Universidade Estadual da Paraíba pelas bolsas de Iniciação Científica.