

Avaliação da técnica de IV associada à calibração multivariada para determinação de ésteres derivados de ácidos graxos.

José A. da Silva¹ (PG), Dilamara Riva¹ (PG), Juliana B. Dalmarco¹ (PG), Sandra Stets² (PG), Rafael G. Neves¹ (IC), Alberto Wisniewski Jr³ (PQ) Edesio L. Simionatto^{1*} (PQ)

1 Universidade Regional de Blumenau (*edesio@furb.br); 2 Universidade Federal do Paraná; 3 Universidade Federal de Sergipe

Palavras Chave: biodiesel, ésteres, infravermelho, calibração multivariada.

Introdução

A matriz energética mundial é centrada em fontes não renováveis (gás natural, carvão mineral e petróleo). Após a crise energética nos anos de 1970, aliado a uma consciência ambiental crescente, tornou-se relevante a busca por uma matriz energética sustentável, baseada em combustíveis alternativos renováveis.¹

O biodiesel é um combustível renovável constituído por uma mistura de ésteres graxos obtida por reação de transesterificação entre um óleo vegetal ou gordura animal e um álcool na presença de um catalisador.

Dentre as propriedades do biodiesel destaca-se o teor de ésteres graxos, que segundo ANP, na Resolução nº 7 de março de 2008, estabelece em 96,5% a pureza mínima do biodiesel.

Várias técnicas vêm sendo utilizadas para determinar o teor de ésteres em biodiesel, dentre elas podemos citar a cromatografia gasosa que é uma técnica de alto custo e que demanda um longo tempo para execução. Pesquisas envolvendo a espectroscopia de IV estão sendo desenvolvidas, pois esta técnica envolve baixo custo, rapidez, dispensa o preparo prévio da amostra, além de não gerar resíduos.²

Em função disto, este trabalho tem por objetivo determinar o teor de ésteres em biodiesel, utilizando a técnica de infravermelho associada à calibração multivariada e comparar os resultados com a técnica de CG-DIC conforme Norma EN14103:2003.

Resultados e Discussão

A calibração multivariada tem por objetivo a construção de um modelo matemático que relacione a resposta de um dado instrumento analítico com algumas propriedades de interesse das respectivas amostras. A partir do modelo construído, torna-se possível a análise quantitativa dessas propriedades em novas amostras onde elas são desconhecidas.²

As 10 amostras de biodiesel foram fornecidas pela empresa ENGEPLAM e produzidas através de transesterificação utilizando catálise básica. As mesmas foram analisadas por CG-DIC e por IV em triplicata. Os espectros de IV obtidos foram

processados através do programa PLS-toolbox 3.0 que opera em ambiente Matlab.

O modelo com melhor capacidade de previsão apresentou as seguintes características: 9 amostras em triplicata, faixa espectral de 500 a 4000 nm, pré processamento "MSC (mean)", 4 VL (variáveis latentes) e método de validação cruzada "Leave one out".

A capacidade de previsão foi confirmada frente ao conjunto de validação externa, obtendo-se valores apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Teor de ésteres real e previsto.

Amostra	Teor real (%)	Teor previsto (%)	Erro relativo (%)
1 a	86,90	87,20	0,34
1 b	87,50	88,10	0,68
1 c	87,70	85,63	2,34

A variância capturada por este modelo foi de 99,80% para a matriz X e 99,58% para a matriz Y. O modelo apresentou boa capacidade preditiva, mas seu coeficiente de correlação (R) foi de 0,656. A Norma EN14103:2003 descreve que o erro para repetibilidade não deve ser maior que 1,6% entre amostras. Neste modelo observa-se que uma das amostras utilizadas para validação externa ficou com valor acima deste.

Conclusões

Com estes resultados preliminares, observa-se que a técnica de IV associada à calibração multivariada pode ser uma alternativa para quantificação do teor de ésteres em biodiesel. Mais ensaios são necessários, com maior número de amostras, para confirmar estes resultados.

Agradecimentos

FURB; UFPR

¹ Marques, M. V.; Naciuk, F. F.; Mello, A. M. S.; Seibel, N. M.; Fontoura, L. A. M. Quim. Nova. **2010**, 33, 978.

² Bezzerra, L. A. Relatório de Estágio, Dpto de Engenharia Química, UFP. **2005**.