

E360

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS DE QUALIDADE DE ÓLEO DIESEL UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO E SELEÇÃO DE VARIÁVEIS

Márcia C. Breitzkreitz (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Jarbas J. R. Rohwedder (Orientador), Instituto de Química – IQ, UNICAMP

As especificações do diesel brasileiro são praticamente as mesmas adotadas internacionalmente, sendo as principais: qualidade da ignição, volatilidade, densidade, viscosidade e teor de enxofre. Este trabalho propõe o desenvolvimento de uma metodologia analítica para a determinação dos principais parâmetros de qualidade de óleo diesel baseada em espectroscopia NIR, calibração multivariada e seleção de variáveis (números de onda). Os espectros NIR foram obtidos de 800 a 2500 nm (resolução 8 cm^{-1}), com um espectrofotômetro Bomem MB-160. As medidas foram realizadas em caminhos ópticos de 1 mm (148 amostras) e 10 mm (323 amostras), com temperatura controlada a 20°C . Foram construídos modelos quimiométricos empregando PLS 1 com toda a região espectral e RLM com as variáveis selecionadas pelos Algoritmos APS (Algoritmo das Projeções Sucessivas) e AG (Algoritmo Genético). Os resultados obtidos, indicam que, de uma forma geral, os modelos construídos empregando os espectros obtidos em cela de caminho óptico de 1m (região de combinação de vibrações e primeiro sobreton de vibrações de ligações C-H) apresenta menores valores de erro de previsão (RMSEP) do que aqueles obtidos em cela de caminho óptico 10 mm (região de segundo sobreton de vibrações de ligações C-H e primeiro sobreton de combinação). Além disto, valores de RMSEP semelhantes foram encontrados, para um mesmo caminho óptico, com modelos PLS e RLM, indicando que a seleção de variáveis torna os modelos de calibração mais robustos.

Espectroscopia NIR – Seleção de Variáveis – Óleo Diesel