



E262

DETERMINAÇÃO DE PARÂMETROS DE QUALIDADE DE ÓLEO DIESEL UTILIZANDO ESPECTROSCOPIA NO INFRAVERMELHO PRÓXIMO

Márcia Cristina Breitzkreitz (Bolsista PIBIC/CNPq) e Prof. Dr. Jarbas J. Rodrigues Rowhedder (Orientador), Instituto de Química – IQ, UNICAMP

As especificações do óleo diesel brasileiro são praticamente as mesmas adotadas internacionalmente e dentre os principais parâmetros controlados estão a densidade e temperaturas de destilação das várias frações. Este trabalho propõe um método rápido e não destrutivo, baseado em espectroscopia NIR e calibração multivariada para a determinação destes parâmetros. Foram construídos modelos de calibração multivariada empregando PCR e PLS em associação com diferentes formas de pré-tratamento de dados (correção de linha base e primeira derivada) Foram avaliados dois caminhos óticos (1 e 10 mm) para avaliar a melhor região espectral para a determinação de cada parâmetro. Os espectros foram obtidos com um espectrofotômetro BOMEM, na faixa espectral de 14000 a 4000cm^{-1} (resolução de 8cm^{-1}). No caminho ótico de 10mm foram registrados 323 espectros de amostras de diesel e para o caminho de 1mm foram registrados 169 espectros e, em ambos os casos, a temperatura foi controlada a 20°C . Para o tratamento de dados utilizou-se o programa quimiométrico UNSCRAMBLER 7.5. Os resultados obtidos com os modelos construídos foram então comparados com as Técnicas ASTM normalmente empregadas para a quantificação destes parâmetros. A análise dos resultados obtidos indica que a calibração por PLS, empregando-se os dados na forma de primeira derivada e caminho ótico de 1mm (que abrange a região de 6000 a 4000cm^{-1}), fornece os melhores resultados, ou seja, menor RMSEP para o conjunto de previsão e a maior correlação no gráfico de valores previstos vs valores de referência, para todos os parâmetros estudados. Entretanto, como os valores de RMSEP ficaram abaixo dos valores de reprodutibilidade das técnicas de referência, os dois caminhos óticos poderiam ser empregados para a determinação destes parâmetros.

NIR - Quimiometria - Óleo diesel