

Anais da VI Jornada Científica
Embrapa São Carlos

6^a



JORNADA CIENTÍFICA

EMBRAPA SÃO CARLOS-SP

Aplicação da espectroscopia no infravermelho próximo no processo de produção do etanol de segunda geração

Ariane S. S. Pinto¹

S. C. Pereira²

M. P.A. Ribeiro³

C. S. Farinas⁴

¹Aluna de graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, SP, ariane_sbrice@hotmail.com;

²Pós-doutora, Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP;

³Professor do Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, SP;

⁴Pesquisadora, Embrapa Instrumentação, São Carlos, SP.

A fermentação alcoólica é realizada pela levedura *Saccharomyces cerevisiae*, a partir do consumo de açúcares simples, que são encontrados no caldo de cana-de-açúcar e também podem ser obtidos a partir da hidrólise de açúcares superiores presentes no material celulósico das plantas. A produção de etanol celulósico, ou etanol de segunda geração, é uma pontencial alternativa para aumentar a produção deste biocombustível sem a necessidade de expandir áreas de cultivo da cana-de-açúcar. Mensurar a diferença da concentração do substrato e do produto ao longo do tempo é crucial para o controle do balanço de massa da reação bioquímica e, conseqüentemente, determinante da economicidade do processo em questão. Contudo, ainda não há métodos quimiométricos, bem definidos, que sejam rápidos e práticos. O presente estudo avaliou a espectroscopia no infravermelho próximo (NIR, *Near Infrared Spectroscopy*) associada à análise multivariada como uma alternativa à quimiometria tradicional no monitoramento da produção de etanol celulósico a partir de bagaço e palha de cana-de-açúcar. A técnica de análise multivariada utilizada foi a regressão por mínimos quadrados parciais (PLS, *Partial Least Squares*), visto que esta mostrou-se eficiente no monitoramento de diversos produtos em misturas de compostos, destacando-se por quantificar multi-constituintes com nenhuma preparação da amostra de forma rápida e não destrutiva. A quantidade de variáveis latentes do modelo foi definida com base nos resultados da Validação Cruzada (*leave-one-out*), sendo que os fatores foram escolhidos cautelosamente a fim de evitar modelos sobreajustados (*over-fitting*). Salienta-se que os pré-tratamentos dos espectros, as modelagens, bem como as validações dos modelos foram realizados com o auxílio do software Matlab. O conjunto de amostras analisadas foi composto por espectros aferidos de misturas sintéticas ideais, bem como da fermentação real. Foram avaliados diversos conjuntos de calibração multivariada a fim de obter aquele que apresentasse o melhor monitoramento dos principais componentes da fermentação alcoólica de segunda geração (substrato e produto). Verificou-se que o melhor conjunto de calibração foi aquele composto por espectros de amostras sintéticas e reais, visto que, para este caso, obtiveram-se erros de validação externa de 1,68% para etanol e de 3,68 % para glicose, considerando-se 13 variáveis latentes para ambos compostos.

Palavras-chave: Etanol Celulósico; Espectroscopia no Infravermelho Próximo; Análise Multivariada.

Apoio financeiro: PIBIQ/CNPq (Processo n° 122979/2013-3)

Área: Agroenergia.