

DETERMINAÇÃO DAS PROPRIEDADES DE FIBRAS DE POLI(TEREFTALATO DE ETILENO) UTILIZANDO MODELOS EMPÍRICOS MULTIVARIADOS ASSOCIADOS À ESPECTROSCOPIA NIR

Viviane Fonseca Caetano¹, Glória Maria Vinhas¹, Maria Fernanda Pimentel¹

Bolsista PRH-ANP 28, viviane_fc@yahoo.com.br, ¹Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Pernambuco

RESUMO

MOTIVAÇÃO: Devido a grande aplicabilidade do poli(tereftalato de etileno) - PET em diversos setores industriais, torna-se de interesse científico como também industrial o desenvolvimento de métodos que sejam rápidos, eficazes e limpos que possam substituir métodos de referência convencionais, e assim reduzir o tempo de análise nos laboratórios das indústrias.

OBJETIVO: Desenvolver modelos empíricos multivariados, através da espectroscopia do infravermelho próximo e da calibração multivariada, para determinação das propriedades de fibras de PET.

APLICAÇÃO NA INDÚSTRIA DO PETRÓLEO: Este trabalho tem aplicabilidade no setor industrial, especificamente para o PET, pois através dos modelos empíricos multivariados desenvolvidos será possível monitorar as principais propriedades de fibras de PET de forma rápida e eficaz nas linhas de produção.

RESULTADOS OBTIDOS: Neste trabalho, foi desenvolvido um método baseado na espectroscopia no infravermelho próximo e modelos de regressão por mínimos quadrados parciais para determinar os grupos carboxílicos terminais de fibras de PET. Para a construção dos modelos, foi necessário aumentar a faixa da variação da propriedade. Isto foi conseguido através da utilização de degradação da gama nas doses de 25 e 200 kGy. Os espectros das fibras de PET foram obtidos por reflectância difusa, com uma resolução de 4 cm⁻¹ e 32 scans. Várias técnicas de pré-processamento foram avaliados, tais como: como suavização, derivação, variação normal padrão, correção multiplicativa de sinal e combinação destes. O melhor modelo PLS apresentou RMSEP (raiz do erro médio quadrado da predição) de 3.3 milliequivalente/kg e correlação de 0,79. Os próximos passos será a determinação do teor de dietileno glicol e do índice de viscosidade utilizando a mesma técnica.