

LARA DA HORA DUAILIBI MANCINI FERREIRA

**PREDIÇÃO RÁPIDA DE EXTRATIVOS E CINZAS EM BAGAÇO DE CANA-DE-
AÇÚCAR EMPREGANDO ESPECTROSCOPIA NIR E MÉTODOS
QUIMIOMÉTRICOS**

Monografia apresentada ao Departamento de
Química da Universidade Federal de Viçosa,
como parte das exigências para a conclusão do
Curso de Bacharelado em Química.

Orientador: Reinaldo Francisco Teófilo

**VIÇOSA – MINAS GERAIS
2020**

RESUMO

FERREIRA. Lara, Monografia de conclusão do Curso de Bacharelado em Química. Universidade Federal de Viçosa, Dezembro, 2020. **Predição rápida de extrativos e cinzas em bagaço de cana-de-açúcar empregando espectroscopia NIR e métodos quimiométricos.** Orientador: Reinaldo Francisco Teófilo.

A predição rápida de extrativos e cinzas a partir de espectros de infravermelho próximo (NIR) obtidos do bagaço de cana-de-açúcar (BCA) é o objetivo deste trabalho. Espectros NIR na faixa de 10000 a 4000 cm^{-1} foram obtidos diretamente sobre o BCA seco, moído e prensado. Foram analisados 27 genótipos diferentes. Para as mesmas amostras, os extrativos e as cinzas foram quantificados pelos métodos de referência. Os valores de cinzas e extrativos variaram respectivamente de 0,53 a 1,8 % m/m e 5,4 a 32,6 % m/m. A partir dos espectros e dos valores obtidos para extrativos e cinzas, modelos de regressão por quadrados mínimos parciais (PLS) foram construídos e validados. Os modelos para cinzas e extrativos apresentaram respectivamente valores de *RMSECV* iguais a 0,08 e 0,76 % m/m; R_{cv} iguais a 0,90 e 0,97; *RMSEP* iguais a 0,08 e 1,43 % m/m; e R_p iguais a 0,90 e 0,92. Os modelos preditivos para as propriedades de interesse foram obtidos de modo a substituir análises morosas e de alto custo por uma análise rápida, de baixo custo e sem consumo de reagentes.

Palavras-chave: Biomassa lignocelulósica, cana-de-açúcar, NIR, PLS.

ABSTRACT

FERREIRA, Lara, Undergraduate Final Paper Submitted to the Department of Chemistry in Partial Fulfillment of the Requirements for the Degree of Bachelor in Chemistry, Universidade Federal de Viçosa, December, 2020. **Rapid prediction of extracts and ashes in sugarcane bagasse using NIR spectroscopy and chemometric methods.** Advisor: Reinaldo Francisco Teófilo.

The express prediction of extracts and ash from near infrared (NIR) spectra sought on sugarcane bagasse (BSC) is the objective of this work. NIR spectra using a bench instrument (NB) in the range 4000 to 10000 cm^{-1} were captured directly over the dry, milled and pressed BSC. 27 different genotypes were analyzed. For the retainers themselves, extracts and ashes were quantified by reference methods. The values of ashes and extractives vary from 0,53 to 1,8 % w/w and 5,4 a 32,6 % w/w; respectively. From the spectra and values obtained for extracts and ashes, regression models by squares according to the partials (PLS) were constructed and validated. The models presented *RMSECV* values equal to 0.08 and 0.76 w/w; *RMSEP* equal to 0.08 and 1.43 w/w; *Rcv* equal to 0.90 and 0.97; and *Rp* equal to 0.90 and 0.92; for ashes and extracts respectively. The predictive models for the properties of interest were obtained in order to replace time-consuming and high-cost analysis with a fast, low-cost analysis without the use of reagents.

Keywords: Lignocellulosic biomass, Sugarcane, NIR, PLS.