

A mistura B3, 3% de biodiesel (BD) em diesel, atualmente comercializada no país deve seguir as especificações determinadas pela ANP. Novas metodologias de análises deste combustível estão sendo estudadas e a espectroscopia no infravermelho médio (FTIR) associada à utilização de ferramentas quimiométricas é uma alternativa que tem como vantagens não ser destrutiva, ser rápida e ter baixo custo, além de se poderem determinar vários parâmetros em uma única análise. Neste trabalho foi estudada a determinação simultânea do teor de BD, massa específica, ponto de fulgor e teor de enxofre, utilizando a regressão por mínimos quadráticos parciais (PLS). Foram elaboradas 85 blendas binárias, com concentração de 0,2 a 30% (v/v), a partir de BD de soja e de dois tipos de diesel, interior e metropolitano. As amostras foram separadas em 2 conjuntos: 57 para calibração e 28 para previsão. Para a análise das propriedades, exceto o teor de BD, foram utilizados os métodos-padrão estabelecidos pela ANP. Os espectros FTIR foram obtidos na faixa de 4000 a 650  $\text{cm}^{-1}$ , com uma resolução de 4  $\text{cm}^{-1}$  e 32 varreduras, utilizando acessório de ATR. Os softwares Matlab e Unscrambler foram utilizados para desenvolver os modelos PLS, iPLS e siPLS. Dois tipos diferentes de pré-processamentos foram testados: no primeiro os dados foram centrados na média e no outro os dados foram autoescalados. Para determinar o número de variáveis latentes (VL) necessário para a construção dos modelos foi utilizado o erro de validação cruzada (RMSECV). Os modelos foram comparados pelo erro de previsão (RMSEP), sendo selecionadas as regiões que apresentaram menores RMSEP. Para todas as propriedades verificou-se que os modelos em que foram selecionadas uma ou mais regiões apresentaram os menores erros, ao contrário dos modelos que consideraram toda a região espectral.