

## Determinação Anômala de metanol em grande excesso de etanol utilizando espectroscopia Raman e Máquinas suportadas em Vetores.

Marco Flores ferrão (PQ)<sup>1</sup>, Cesar Mello (PQ)<sup>1,\*</sup>, Eduardo Nassar<sup>1</sup>, Kátia Ciuffi<sup>1</sup>, Eduardo Nassar<sup>1</sup>, Kátia Ciuffi<sup>1</sup>, Ronei J. Poppi(PQ)<sup>3</sup>, Diórginis Ribeiro (PG)<sup>3</sup> e Emiliane Ricci(PG)<sup>1</sup>.

1. IQ-Universidade de Santa Cruz

2 IQ-Universidade de Franca

3 IQ-Universidade Estadual de Campinas -Unicamp

Palavras Chave: Determinação de metanol em excesso de etanol, Raman e Máquinas suportadas em vetores.

### Introdução

#### Teoria das Máquinas Suportadas em Vetores com Mínimos Quadrados (LS-SVM)

As máquinas suportadas em vetores, usadas para regressão, são uma generalização do algoritmo Generalized Portrait desenvolvido, na Rússia, por Vapnik, Lerner e Chernonenkis na década de sessenta. Entretanto a forma atual das máquinas suportadas em vetores (SVM) foi desenvolvida por Vapnik e colaboradores nos laboratórios da AT&T Bell, no final da década de noventa. Fizemos o mesmo para verificar a mistural metanol/etanol. Para nós houve uma indicação clara que em baixas concentrações de metanol e altas concentrações de etanol estes não formão misturas homogêneas, mesmo com vigorosa agitação. Pode ser observado na Fig.1. que os componentes comportan-se como três componetes, ou clusters, diferentes, possivelmente devido às ligações de hidrogênio, dificultando sua determinação nestas misturas nestas concentrações, pois parece que estamos modelando 3 substâncias diferentes. Todavia estudaremos este sistema como, no futuro próximo com espectroscopia LASER de femtosegundo and Picosegundo.

30ª Reunião Anual da Sociedade Brasileira de Química

### Resultados e Discussão

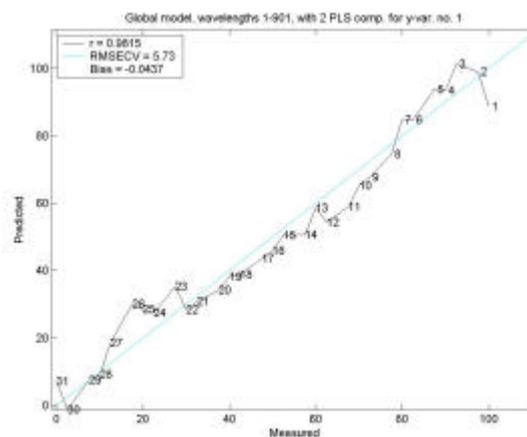


Figura 1. Calibração usando Support Vector Machine.

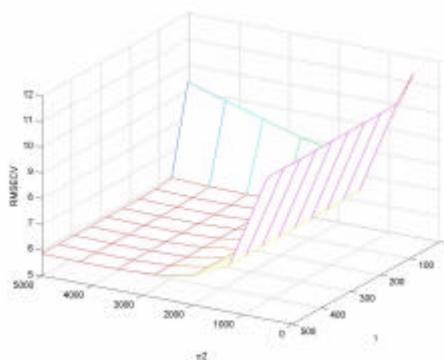


Fig.2  $S$  e  $g$  utilizados no modelamento com LS-SVM

### Conclusões

Podemos concluir que na verdade o modelo não foi eficiente uma vez que estamos modelando compostos supostamente com ligações de hidrogênio supostamente diferentes, fato demonstrado pela espectroscopia Raman

### Agradecimentos

*Sociedade Brasileira de Química ( SBQ)*

FAPES, CNPQ, CAPES e Universidade de Franca.

<sup>1</sup> A.Dong Nan Chin, Rober L. DELEON and J. F. Garvey, JACS, 2000, 122, 11887; W. Castleman junior, and Bruce . Kay, J. Phys. Chem, 1985, 89, 4867.