

Predição do índice de cetanas de diferentes tipos de biodiesel utilizando *fuzzy clustering* e redes neurais.

Diogo Viola De Nadai^{1*} (PG), Paulo Cesar Muniz de Lacerda Miranda¹ (PQ), Carlos Eduardo Novo Gatts² (PQ). e-mail: diogonadai@gmail.com

¹LCQUI, ²LCFIS - Universidade Estadual do Norte Fluminense (UENF), Campos dos Goytacazes - RJ, CEP:28013602.

Palavras Chave: biodiesel, predição, índice de cetanas, RMN-¹H, "fuzzy clustering", redes neurais.

Introdução

Durante as últimas décadas, a necessidade de se produzir energias alternativas aos combustíveis fósseis, resultou no desenvolvimento de novas tecnologias baseadas no uso de biomassa renovável. No caso específico dos motores a compressão por ignição movidos a diesel, os esforços se concentraram no biodiesel.^[1]

Um dos principais indicadores da qualidade do biodiesel é o índice de cetanas (IC). Este consiste numa maneira relativa de classificar combustíveis dieíséis de acordo com o intervalo entre sua injeção e ignição.

Atualmente, técnicas estatísticas têm sido aplicadas para identificar e quantificar os fatores que causam influência significativa sobre os resultados dos experimentos. Esses métodos são usualmente referenciados como métodos de análise estatística multivariada. Entre estes podemos destacar a análise de "cluster",^[2] que visa à identificação de agrupamentos em um conjunto de dados, e as redes neurais, que são algoritmos de computação não linear, inspirados em sistemas nervosos biológicos.

Neste trabalho buscamos através de um banco com dados de espectros teóricos de RMN-¹H fazer a predição do IC de diferentes tipos de biodiesel utilizando técnicas de análise multivariada.

Resultados e Discussão

Para compor a base de dados foram escolhidos ésteres com IC disponíveis na literatura. A estes foram adicionados diferentes tipos de biodiesel utilizando o mesmo critério, resultando num total de 44 elementos (35 ésteres e 9 tipos de biodiesel).

Utilizando o programa gNMR^[3], foram simulados os espectros de RMN-¹H dos ésteres componentes. Estes espectros foram fatiados em 7 intervalos, referentes aos diferentes tipos de hidrogênios presente nestas moléculas. O banco de dados foi formatado utilizando a integração dos sinais presentes em cada uma destas fatias.

Após a construção do banco de dados utilizou-se o "fuzzy clustering" para a classificação dos grupos de pertinência. Os resultados das funções de pertinência

obtidos deste tratamento foram utilizados para formação de uma nova base de dados. Esta, por sua vez, foi utilizada como dado de entrada numa rede neural *feed-forward backpropagation* com arquitetura 5-9-1 com o intuito de fazer a predição dos IC. Desta maneira o banco foi separado em duas partes: uma com os dados dos ésteres (para o treinamento da rede), e outra com dados dos biodieíséis (para a validação dos resultados). Os resultados obtidos são mostrados na tabela 1.

Tabela 1. Comparação dos resultados simulados pela rede em relação aos dados da literatura com os respectivos erros relativos (e.r.).

Biodiesel	IC - Literatura	IC - Rede	e.r. (%)
Algodão (Met)	51,2	50,99	0,41
Colza (Met)	54,4	52,04	4,33
Açafoa (Met)	49,8	50,47	1,34
Soja (Met)	46,2	47,90	3,68
Girassol (Met)	46,6	48,26	3,56
Palma (Et)	56,2	54,44	3,13
Soja (Et)	48,2	49,51	2,72
Soja (Isoprop)	52,6	51,09	2,87
Soja (But)	51,7	51,03	1,29

* O nome entre parênteses representa o álcool utilizado para a produção do respectivo biodiesel.

O tratamento dos dados foi realizado com a utilização do ambiente estatístico R.^[4]

Conclusões

A metodologia (inérita) proposta mostrou-se muito eficiente para fazer a predição do IC de diferentes tipos de biodiesel (misturas) a partir de dados de ésteres (substâncias puras), com e.r. para esse conjunto de dados variando entre 0,41% e 4,33%.

Agradecimentos

A FAPERJ pela bolsa concedida.

¹ Haas, M. J.; McAloon, A. J.; Yee, W. C.; Foglia, T. A. *Bioresource Technology*. **1997**, 97, 671-678.

² Xu J., Zhang Q., Shih C. *Molecular Diversity*. **2006**, 10, 463-478.

Sociedade Brasileira de Química (SBQ)

³home.cc.umanitoba.ca/~budzelaa/gNMR/gNMR-license.html

acessado em 07/05/2006.

⁴<http://www.r-project.org>, acessado em 23/11/2007.