Identificação da origem do óleo diesel utilizando propriedades físico-químicas e análise multivariada

Camila N. C. Corgozinho (PG), Helga G. Aleme (PG), Paulo J. S. Barbeira* (PQ)

Laboratório de Ensaios de Combustíveis – Depto de Química – ICEx – Universidade Federal de Minas Gerais
Av. Antônio Carlos, 6627, 31270-901, Belo Horizonte, Minas Gerais, Brasil

** barbeira@ufmg.br*

Palavras Chave: *origem, óleo diesel, análise multivariada.*

Introdução

Os combustíveis comercializados em Minas Gerais são provenientes de diversas refinarias. A pluralidade de origens é mais acentuada nas fronteiras com outros Estados e estes possuem diferentes taxações sobre a comercialização de combustíveis. Esta diferença tem propiciado a evasão fiscal, devido à simulação da comercialização para Estados onde o imposto seja inferior.[1] Sendo assim, a determinação da origem das amostras de combustíveis pode ser um mecanismo eficiente nas ações de fiscalização e combate aos casos de evasão fiscal e adulterações, agilizando o processo de comprovação destes tipos de fraudes.

O objetivo deste trabalho foi propor modelos para a previsão e a classificação de amostras de óleo diesel com relação às suas origens e tipos, utilizando resultados de ensaios físico-químicos e técnicas de análise multivariada como análise de componentes principais (PCA) e análise de discriminantes lineares (LDA).

Resultados e Discussão

Dois conjuntos de dados foram utilizados para a previsão das origens e tipos das amostras de óleo diesel puro (B0) e de suas misturas com 2% de biodiesel (B2). Um deles, C1, foi formado por resultados de massa específica (ASTM D4052), ponto de fulgor (ASTM D93) e temperaturas de destilação (ASTM D86) correspondentes a 50% e 85% do volume recuperado. No outro conjunto, C2, foram utilizadas as temperaturas de destilação de 4 a 91% do volume recuperado.

Analisando-se os dados por PCA, com matriz de correlação, pode-se observar que os dois primeiros componentes principais permitiram a separação das amostras de acordo com a refinaria de origem, REPLAN, REDUC, REGAP, REVAP ou RLAM (Figura 1), para os conjuntos C1 e C2, de forma semelhante.

A segregação das amostras em função do tipo, interior ou metropolitano, também foi observada com dois componentes principais, para ambos os conjuntos. As variáveis mais significativas para a separação das duas classes foram as temperaturas de destilação T50, para C1 e de T80 a T91 para C2.

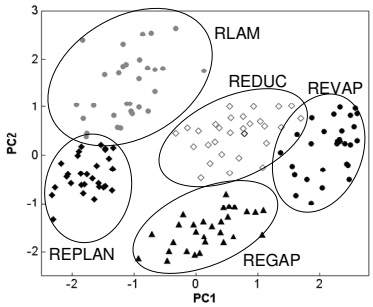

Figura 1. Gráfico dos escores das duas primeiras componentes principais obtidos para amostras de B0 e B2 pelo conjunto 1.

O tratamento dos dados por LDA levou a uma elevada porcentagem de classificação correta (%CC), como pode ser visualizado na Tabela 1.

Tabela 1. Porcentagem de classificação correta obtida por LDA para previsão de origens e tipo de diesel.

Conjunto	%CC origens	%CC tipo
C1	100	100
C2	96	94

Conclusões

De acordo com os resultados obtidos, pode-se concluir que as Análises de Discriminantes Lineares e de Componentes Principais aplicadas a resultados de ensaios físico-químicos de amostras de óleo diesel e de B2 são boas ferramentas para sua classificação e agrupamento, com relação às origens e tipo. A técnica LDA, por ser um método supervisionado, deve ser preferencialmente utilizada para a classificação das amostras, sendo a PCA aplicada para a confirmação dos resultados.

Agradecimentos

Os autores agradecem à FAPEMIG, à CAPES e ao LEC-UFMG.

[1] Barbeira, P. J. S. *Engenharia Térmica.* **2002**, 2, 48.
[2] Barbeira, P. J. S; Pereira, R. C. C.; Corgozinho, C. N. C. *Energy Fuels.* **2007**, *21*, 2212.