

Seleção de variáveis, classificação SIMCA e IR na Detecção de óleo de soja e biodiesel em óleo diesel na região amazônica.

Vaildo N. Carneiro Filho¹(IC)*, Abilio F. Bonfim dos Santos¹(PG), Ricaro A. de Q. Brito (IC), Aline Pinto de Sena¹ (IC), Heronides Adonias Dantas Filho¹ (PQ), Geraldo Narciso da R. Filho¹ (PQ).

*vaildo.filho@hotmail.com

¹Instituto de ciências exatas e naturais(ICEN), Universidade Federal do Pará(UFPA).

Palavras Chave: Seleção de variáveis, Classificação SIMCA, Infravermelho, Adulteração, óleo de Soja, óleo diesel.

A tabela 1 a seguir apresenta os resultados da classificação SIMCA para 10 amostras de teste.

Introdução

As técnicas de seleção de variáveis espectrais, apesar de já empregadas há vários anos¹, ainda se tornam importantes em aplicações da atualidade, como detecção de adulterantes em combustíveis². Este trabalho tem como objetivo aplicar técnicas de seleção de variáveis espectrais, infravermelho e classificação SIMCA na detecção de óleo de soja e biodiesel em óleo diesel de petróleo. Foram preparadas misturas óleo de soja/óleo diesel e biodiesel de soja/óleo diesel, nas proporções de 1% a 30%. O conjunto de teste corresponde a 10 amostras biodiesel/óleo diesel e óleo de soja/óleo diesel. O espectrômetro IR empregado é da marca Thermo Nicolet, região espectral de 4.000 – 400 cm⁻¹, resolução de 2cm⁻¹ e média de 64 varreduras por amostra. Para a classificação SIMCA empregou-se o programa The Unscrambler, versão 9.2.

Tabela 1. Resultado da classificação para 10 amostras teste.

Amostra	Biodiesel /Diesel	Óleo de Soja/Diesel
Biodiesel/Diesel 3%	X	
Biodiesel/Diesel 5%	X	
Biodiesel/Diesel 10%	X	
Biodiesel/Diesel 15%	X	
Biodiesel/Diesel 25%	X	
Óleo de soja/Diesel 3%		X
Óleo de soja/Diesel 5%		X
Óleo de soja/Diesel 10%		X
Óleo de soja/Diesel 15%		X
Óleo de soja/Diesel 25%		X

Resultados e Discussão

A figura abaixo apresenta os espectros das amostras de óleo de soja/óleo diesel e biodiesel/óleo diesel e a região espectral empregada para classificação SIMCA.

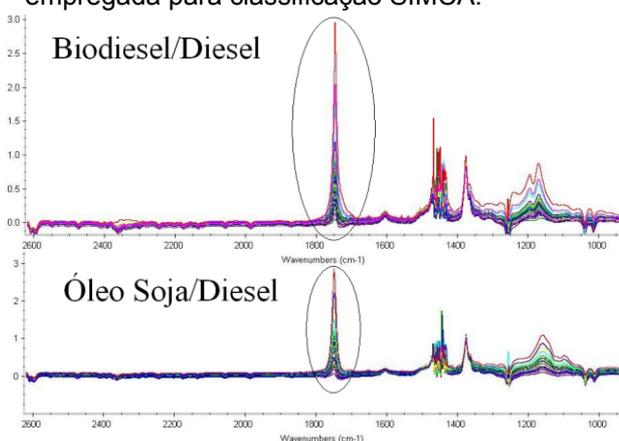


Figura 1. Espectros de Infravermelho das amostras de biodiesel/diesel e óleo de soja/diesel e a região espectral por volta de 1745 cm⁻¹.

A adulteração por óleo de soja e biodiesel foi realizada propositalmente a fim de avaliar a eficiência da classificação do modelo, onde pode ser observado que a banda em aproximadamente 1745cm⁻¹ aumenta de intensidade na medida em que as proporções de biodiesel e óleo de soja são adicionadas em maior quantidade na mistura.

Como pode ser observado na Tabela 1, o resultado da classificação SIMCA indicou um acerto de 100% nas 10 amostras teste de óleo diesel que foram adulteradas com biodiesel (5 amostras) e com óleo de soja (5 amostras). Apesar disso serão empregadas durante a preparação do pôster técnicas de seleção de variáveis, como Algoritmo Genético (AG) e Algoritmo das Projeções Sucessivas (APS) para melhor comparação dos resultados obtidos.

Conclusões

A técnica de espectrometria IR e a classificação SIMCA demonstraram ser um método alternativo e auxiliar na detecção de adulterantes^[2] em óleo diesel (devido ter classificado todas as amostras de forma eficiente), além de ser um método rápido e eficaz.

Agradecimentos

Fundação de Amparo a Pesquisa do Estado do Pará (FAPESPA), CNPq.

¹ Pontes, M. J. C.; Galvão, R. K. H.; Araújo, M. C. U. Moreira, P. N. T.; Pessoa Neto, O. D.; José, G. E.; Saldanha, T.C.B.; The successive projections algorithm for spectral variable selection in classification problems, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 2005 (78), 11-18.

² Oliveira, F. C. C.; de Souza, A. T. P. C., Dias, J. A., Dias, S. C. I., Rubim, J. C.; a escolha da faixa espectral no uso combinado de métodos espectroscópicos e quimiométricos, *Química Nova*, 2004 (27), 218-225.