

Classificação de biodiesel por SIMCA na região do infravermelho vermelho próximo

Anna Luiza B. Brito¹ (IC), Adriano A. Gomes (IC)¹, Gean Bezerra da Costa (IC)¹, Adenilton C. da Silva (IC)¹ Everaldo Paulo de Medeiros² (PQ), Germano Vêras¹(PQ)*,

1- DQ - CCT- Universidade Estadual da Paraíba Av Juvêncio Arruda s/n, bairro Universitario Campina Grande-PB

2- Embrapa Algodão, Rua Oswaldo Cruz, 1143-Centenário, Caixa Postal 174-Campina Grande-PB-Brasil-58428-095

*germano@uepb.edu.br

Palavras Chave: Biodiesel, SIMCA, NIR

Introdução

A escassez eminente dos combustíveis fósseis, bem como os problemas ambientais causados pelo uso desta matriz energética despertou a busca por fontes de energia mais limpas e renováveis. O diesel derivado de óleos vegetais se destaca tanto por ser fonte de energia renovável quanto pelo cumprimento das exigências dos órgãos de proteção ambiental, além do que o Brasil apresenta uma grande variedade de oleaginosas com potencial para produção de biodiesel.

Este trabalho tem como objetivo desenvolver um modelo capaz de reconhecer similaridades entre amostras de biodiesel derivado de diferentes oleaginosas (soja, girassol, canola).

As amostras de biodiesel foram obtidas pela reação de transesterificação dos óleos via rota etílica na presença de KOH. O conjunto para construção dos modelos SIMCA de cada oleaginosa foi composto de sete amostras de soja, sete de canola e seis de girassol. Cada amostra gerou três alíquotas de biodiesel, preparadas independentemente, perfazendo um total 21 alíquotas para biodiesel de soja, 21 para canola e 18 para girassol.

A aquisição dos espectros NIR foram conduzidas em instrumento FOSS XDS MasterLabTM. Os dados foram pré-processados aplicando o algoritmo de Savitzky-Golay usando uma janela de 11 pontos, segunda derivada e ajuste com polinômio de segundo grau, através do software The Unscrambler 9.8®, com base nos quais foi realizada a classificação das amostras pela técnica SIMCA de duas amostras para cada oleaginosa, com 3 alíquotas de biodiesel, preparadas independentemente. As medidas de todas as alíquotas foram feitas em triplicata. Portanto, para construção do modelo SIMCA foram utilizados 63 espectros para biodiesel de soja e de canola, e 54 espectros para girassol.

Resultados e Discussão

Na figura 1a estão apresentados os espectros NIR puros das amostras de biodiesel e em 1b o gráfico dos dados pré-processados das mesmas amostras.

Tendo como ponto de partida os espectros derivados, mostrados, foi realizado uma

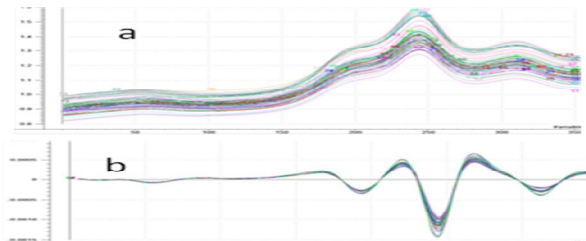


Figura 1: a) Espectros NIR das amostras de biodiesel b) espectros derivados.

classificação não supervisionada via PCA (figura 2), onde foi possível ver a distribuição espacial dos três agrupamentos de biodiesel referente a cada oleaginosa. Os modelos foram construídos utilizando validação cruzada (leave-one-out). Uma vez conhecida a existência dos agrupamentos, foi possível fazer reconhecimento de padrões por SIMCA. Para os modelos SIMCA de biodiesel de girassol e de canola foram utilizados 2 PC's e para o biodiesel de soja, 3 PC's.

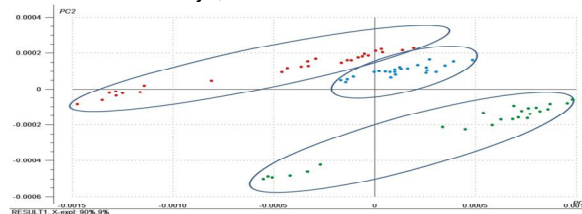


Figura 2 – Gráfico de scores para biodiesel de soja (vermelho), biodiesel de girassol (azul) e biodiesel de canola (verde).

Verificou-se que todas as amostras foram sem erro tipo 1 e 2.

Conclusões

Pelos resultados obtidos pode-se observar que é possível classificar biodiesel a partir da oleaginosa de partida utilizando os procedimentos descritos neste trabalho, o que representa uma ferramenta importante no reconhecimento de padrões para amostras desta natureza.

Agradecimentos

Agradecimento ao CNPq pelas bolsas de Iniciação Tecnológica e Industrial e pelo financiamento do projeto n°: 576416/2008-8.