

Clusterização de biodiesel por espectrometria na região do visível aplicando técnicas de reconhecimento de padrões

Adenilton C. da Silva¹ (IC), Adriano A. Gomes¹ (IC), Anna Luiza B. de Brito¹ (IC), Gildo William B. da Silva¹ (IC), Everaldo Paulo de Medeiros² (PQ), Germano Vêras¹ (PQ)*

1- DQ - CCT- Universidade Estadual da Paraíba Av Juvêncio Arruda s/n, bairro Universitário, 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, espectrometria, visível, reconhecimento de padrões

Introdução

Nos últimos tempos cresceu o interesse por combustíveis que possam ser renováveis e que sejam menos prejudiciais ao meio ambiente. Como alternativa, a produção de biodiesel no Brasil tornou-se uma das formas mais eficazes para diversificar a matriz energética, contribuindo para a preservação do meio ambiente¹.

De forma geral, o biodiesel pode ser definido como sendo um mono-álquil éster de ácidos graxos derivados de fontes renováveis, como óleos vegetais e gorduras animais. Poucos artigos são encontrados tratando da determinação da origem a partir do qual o biodiesel foi obtido. Porém, fazer este tipo de reconhecimento, pode contribuir para aplicação de diferentes políticas, principalmente, relacionadas às leis fiscais².

Dentro desta perspectiva, este trabalho tem como objetivo apresentar um método para a classificação de biodiesel utilizando espectrometria na região do visível com PCA (Principal Components Analysis) e HCA (Hierarchical Cluster Analysis).

Resultados e Discussão

A síntese do biodiesel foi realizada através do processo de transesterificação pela rota etílica de óleos refinados (algodão, girassol e soja) de diferentes fabricantes, adquiridos no comércio de Campina Grande, PB.

Foram sintetizadas três amostras de biodiesel de algodão, oito de girassol e nove de soja, com base na variabilidade e disponibilidade das oleaginosas.

A obtenção dos espectros foi realizada em triplicada no instrumento Vis/NIR FOSS XDS MasterLabTM. Selecionou-se a faixa de 400 a 780 nm, com uma resolução espectral de 0,5nm.

Os dados foram pré-processados aplicando o algoritmo de Savitzky-Golay usando uma janela de 11 pontos, primeira derivada e ajuste com polinômio de segundo grau, através do software The Uscrambler 9.8[®].

A HCA foi aplicada empregando regra de ligação completa com medida da distância por Correlação linear simples (Pearson r), através do software Statistica 9.0[®].

A PCA foi utilizada empregando validação cruzada (leave-one-out) através do software The Uscrambler 9.8[®].

Pelo dendrograma (figura 1), obtido pelo método HCA, a formação do cluster de soja ocorreu na distância de ligação 0,014, já o de girassol em 0,015, e o de algodão em 0,005. A separação dos clusters, soja com girassol se deu na distância 0,04 e dos dois com algodão em 0,121. Verificou-se que as distâncias de separação foram pelo menos, duas vezes maior que as distâncias de formação, garantindo uma boa diferenciação dos clusters.

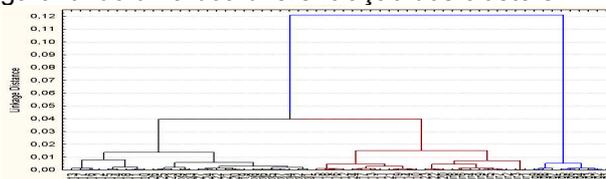


Figura 1. Dendrograma para as amostras de biodiesel de soja (preto), girassol (vermelho) e algodão (azul).

Pelo gráfico de Scores PC1 (87%) por PC2(8%) (figura 2), obtidos pelo método PCA, foi possível fazer o reconhecimento de clusters para as amostras de biodiesel referentes às oleaginosas de origem (algodão, girassol e soja).

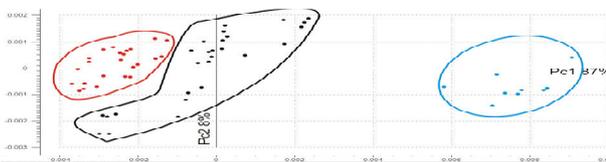


Figura 2. Gráfico de scores para as amostras de biodiesel de algodão (azul), girassol (vermelho) e soja (preto).

Conclusões

Conclui-se que o estudo da espectrometria na região do visível, associado à PCA e HCA são metodologias viáveis para o reconhecimento da origem do biodiesel de algodão, girassol e soja.

Agradecimentos

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

¹ LOFRANO, C.Z.R. Uma revisão sobre Biodiesel. Revista Científica do Unifae, v.2, n.2, p. 84,2008.

²GIORDANI, DOMINGOS SÁVIO; FERMINO, LÍVIA PEREIRA; CASTRO, HEIZIR FERREIRA. Determinação da Origem de Biodiesel e da sua Quantidade em Mistura com Petrodiesel Usando Nariz Eletrônico e Redes Neurais Artificiais. Disponível em: <http://www.biodiesel.gov.br/docs/congresso2007/caracterizacao/19.pdf>. Acesso em: 15/01/2010.