

# Identificação de Adulteração em Misturas Diesel/Biodiesel Usando a Espectrometria NIR e Análise Discriminante Linear

Alinne G. B. Silva<sup>1</sup> (IC)\*, Fernanda V. C. Vasconcelos<sup>2</sup> (PG), Maria Fernanda Pimentel<sup>3</sup> (PQ), Claudete Fernandes Pereira<sup>2</sup> (PQ), Márcio José Coelho Pontes<sup>1</sup> (PQ).

girlaine\_bb@yahoo.com.br

<sup>1</sup> Universidade Federal Rural de Pernambuco

<sup>2</sup> Universidade Federal da Paraíba

<sup>3</sup> Universidade Federal de Pernambuco.

Palavras Chave: Misturas Diesel/Biodiesel, Espectrometria NIR, Algoritmo das Projeções Sucessivas, LDA.

## Introdução

A não conformidade das misturas de Diesel/Biodiesel (BX) é resultante, na maioria dos casos, da conversão incompleta do óleo a éster durante a produção do biodiesel ou, principalmente, devido à adição irregular de óleo vegetal *in natura* ao diesel mineral. A espectroscopia na região do infravermelho próximo (NIR) aliada aos métodos quimiométricos de análise tem sido frequentemente utilizada para a detecção de óleo vegetal e biodiesel presentes no diesel. A maioria desses trabalhos emprega métodos quantitativos multivariados e pouca atenção tem sido dada à aplicação das técnicas de reconhecimento de padrões supervisionadas para esta finalidade. Neste trabalho, a espectrometria NIR e a Análise Discriminante Linear (LDA) com uma prévia seleção de números de onda pelo Algoritmo das Projeções Sucessivas (SPA)<sup>1</sup> são avaliadas quanto ao seu potencial em detectar adulteração em amostras de BX por óleo vegetal *in natura*. Para tanto, foram analisadas 140 amostras de quatro diferentes classes: diesel puro - D (35); misturas de diesel, biodiesel e óleo vegetal - DBO (38); diesel e óleo vegetal - DO (35) e B5 (32). As misturas foram preparadas em diferentes níveis de concentração empregando óleos de girassol, soja e seus respectivos ésteres metílicos, bem como biodiesel 68%soja/32%sebo bovino e óleo de fritura. Diferentes amostras de óleo diesel foram utilizadas a fim de incluir variabilidade ao conjunto de dados. Os espectros NIR foram registrados na região de 14000 – 3799  $\text{cm}^{-1}$  (resolução de 8  $\text{cm}^{-1}$  e média de 32 varreduras) utilizando um espectrofotômetro FTIR da Bomem (FTLA 2000-160) e três cubetas de diferentes caminhos ópticos: 1,0 mm (8814 – 3799  $\text{cm}^{-1}$ ), 10 mm (11329 – 5944  $\text{cm}^{-1}$  e 5531 – 4490  $\text{cm}^{-1}$ ) e 20 mm (11688 – 5952  $\text{cm}^{-1}$  e 5381 – 4679  $\text{cm}^{-1}$ ). O SPA-LDA foi comparado com os modelos SIMCA em função do número de erros para o conjunto de Teste.

## Resultados e Discussão

Em todos os caminhos ópticos estudados, os modelos SIMCA classificaram corretamente todas

as amostras em suas respectivas classes. Contudo, a grande maioria também foi classificada como pertencente a outra classe. Para os modelos SPA-LDA, os melhores resultados foram obtidos com caminho óptico de 20 mm, classificando corretamente 31 das 32 amostras do conjunto de Teste, utilizando apenas cinco variáveis. A Fig. 1 mostra os gráficos dos escores obtidos pela LDA com as variáveis selecionadas pelo SPA. Como pode ser visto, é possível distinguir todas as classes de amostras ao longo das duas funções discriminantes, utilizando-se os três caminhos ópticos estudados.

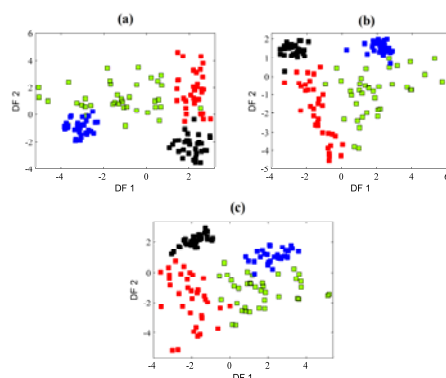


Fig.1. Gráfico dos escores obtido pelo SPA-LDA para os caminhos ópticos de (a) 1mm, (b) 10 mm e (c) 20 mm. ■: B5; ■: DO; ■: DBO e ■: D.

## Conclusões

O uso da espectrometria NIR em conjunto com o SPA-LDA mostrou ser uma alternativa eficiente para identificar adulterações em misturas de diesel/biodiesel por óleo vegetal. A metodologia proposta poderá ser aplicada a novas amostras de maneira simples e rápida, sem a utilização de reagentes e com baixo consumo de amostra.

## Agradecimentos

FACEPE, FINEP, CNPq, TRANSPETRO.

<sup>1</sup> Pontes, M. J. C. et al, Chemom. Intell. Lab. Syst. **2005**, 78, 11.