

Análise *Screening* para Identificação de Adulteração em Amostras de Álcool Etílico Hidratado Combustível

Rhayssa M. S. Ferreira¹ (IC)*, Rafael J. Santos¹ (IC), Maria Fernanda Pimentel² (PQ), Liliana F. B. L. Pontes³ (PQ), Márcio José Coelho Pontes¹ (PQ).

rhay.gmka@hotmail.com

¹ Universidade Federal Rural de Pernambuco

² Universidade Federal de Pernambuco.

³ Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia de Pernambuco- Campus Barreiros

Palavras Chave: AEHC, Espectroscopia MIR, Algoritmo das Projeções Sucessivas, Análise Discriminante Linear.

Introdução

A não conformidade em amostras de álcool etílico hidratado combustível (AEHC) pode ser proveniente, entre outros fatores, da adição irregular de água ou, em casos mais graves, de metanol. A utilização desse biocombustível adulterado se constitui uma fraude fiscal e, além disso, o metanol é tóxico, podendo causar sérios problemas de saúde, como a cegueira ou até a morte. É importante destacar que não existe, até o momento, um método oficial para a determinação do teor de álcool metílico em amostras de AEHC. O objetivo deste trabalho é avaliar o uso da espectroscopia na região do Infravermelho Médio (MIR) e a Análise Discriminante Linear (LDA) com uma prévia seleção de variáveis pelo algoritmo das projeções sucessivas (SPA)¹ para a construção de modelos *screening* que possam identificar adulteração em amostras de AEHC por metanol e/ou água.

Experimental

Um total de 175 amostras de AEHC (conformes: 59; adulteradas com metanol: 57 e adulteradas com água: 59) provenientes dos Estados de Pernambuco, Alagoas e Sergipe foram empregadas neste trabalho. O percentual de adulteração com metanol e água foi de 1-19% e 0,5-10 % (m/m), respectivamente. Os espectros IR foram registrados na região de 4000 – 700 cm^{-1} utilizando um espectrofotômetro FTIR 640 da Varian e uma sonda de ATR. Os dados foram pré-processados utilizando a 1ª. derivada pelo método de Savitzky -Golay, com uma janela de 11 pontos e um polinômio de segunda ordem. O algoritmo Kennard-Stone foi utilizado para dividir o conjunto de dados pré-processado em subconjuntos de amostras de treinamento (87), validação (44) e teste (44). O SPA-LDA foi comparado com os modelos SIMCA construídos em toda região espectral, em 4 níveis de significância do teste F (1, 5, 10 e 25%).

Resultados e Discussão

O SPA selecionou três variáveis, correspondentes aos números de onda 2372 cm^{-1} , 2202 cm^{-1} e 1039 cm^{-1} . O modelo LDA construído com essas variáveis apresentou um índice de acerto para o conjunto de teste de 98%. Em comparação com o SIMCA, em todos os níveis de significância testados, o SPA-LDA mostrou um melhor desempenho de classificação.

A Fig. 1 apresenta o gráfico dos escores obtido pela LDA com as três variáveis selecionadas pelo SPA. Como pode ser visto, é possível distinguir todas as classes de amostras ao longo das duas das funções discriminantes (FD1 e FD2).

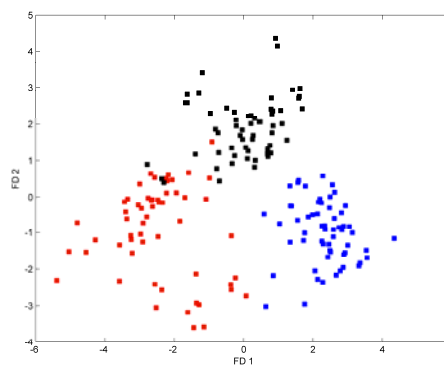


Fig. 1. Gráfico dos escores obtido pela LDA. ■ amostras conformes; ■ amostras adulteradas com H₂O e ■ amostras adulteradas com metanol.

Conclusões

O uso da combinação da espectrometria IR com o SPA-LDA mostrou ser uma alternativa eficiente para a identificação de amostras de AEHC adulteradas com metanol e água. Como vantagens, esta metodologia é rápida, não utiliza reagentes, além de consumir pouca amostra.

Agradecimentos

FACEPE, CNPq

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