

Classificação de biodiesel empregando espectroscopia UV-Vis e SIMCA

Marcelo Marques de Fontes¹ (PG), Adriano A. Gomes²(PG), Georgiano Almeida Ferreira¹ (IC), Adenilton C. da Silva¹ (IC), Germano Vêras¹(PQ)*

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

²LAQA/Departamento de Química-UFPB, João Pessoa-PB, Brasil.

*germano@uepb.edu.br

Palavras Chave: Biodiesel, UV-Vis, SIMCA

Introdução

O biodiesel já é considerado uma alternativa aos combustíveis derivados do petróleo, e possui no Brasil obrigatoriedade da adição de 5% no diesel comercial. Esta demanda cada vez maior tem impulsionado a busca por matérias-primas alternativas ao óleo de soja, que é cerca de 80 % da produção de biodiesel, que vão desde óleos vegetais de diversos biomas, tal como do Semi-árido, a óleos residuais. Esta diversificação de possibilidades faz surgir a necessidade de se desenvolver metodologias para caracterizar o biodiesel do ponto de vista da matéria-prima utilizada para produção.

Neste trabalho é proposto o uso da espectroscopia UV-Vis e, como técnica de reconhecimento de padrões, SIMCA para classificação de amostras biodiesel com relação a oleaginosa de síntese (algodão, girassol e soja).

As amostras de biodiesel foram obtidas por reação de transesterificação na presença de etanol anidro, via catálise homogênea com KOH. Foi conduzida a caracterização físico-química das amostras a fim de avaliar a qualidade das mesmas. Para as amostras em conformidade foram obtidos espectros em triplicata na faixa de 400 a 780 nm, com resolução espectral de 0.5 nm, em espectrômetro UV 1800, da Shimadzu. 63 amostras foram divididas nos conjuntos de treinamento (43 amostras) e de predição (20), empregando o algoritmo Kennard-Stone.

Resultados e Discussão

Em virtude dos espectros na região do UV-Vis serem constituídos de bandas alargadas e lisas, com pouca informação de cunho qualitativo, o poder discriminante dos dados foi avaliado previamente em um análise exploratória via PCA e HCA. Os resultados indicaram potencial para efeito de classificação. Os espectros das 63 amostras são apresentados na Figura 1.

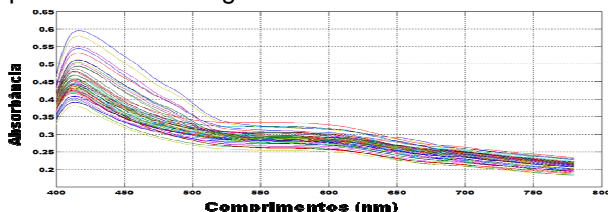


Figura 1. espectros UV-Vis das amostras de biodiesel.

Modelos PCA foram construídos para cada classe, empregando validação cruzada leave-one-out. Os respectivos postos foram obtidos pela análise do gráfico de variância explicada versus

número de componentes principais, sendo de 2 PC's para a classe de algodão, 3 para classe de girassol e 3 para soja. Empregando os modelos obtidos e validados, foi conduzida uma classificação SIMCA em diversos níveis de significância estatística e os resultados são apresentados na Tabela 1.

Tabela1: Resultados da classificação SIMCA.

Erros	1%	5%	10%
Tipo I	0	0	2
Tipo II	2	1	1
Total	2	1	3

Os resultados SIMCA em termos de erros de classificação corroboram com os resultados obtidos na fase de análise exploratória. Para o nível de 5% de significância apenas um erro tipo II ocorreu, em que uma amostra de girassol é classificada com sendo de soja, confirmando a leve sobreposição destas classes, observada no gráfico de Scores. Com relação às amostras de algodão não ocorreu erros de classificação para nenhum dos níveis de significância adotados, visto que este grupo aparecia no gráfico de Coomans como um conjunto coeso e bastante afastado das demais amostras, como pode ser visualizado na Figura 2.

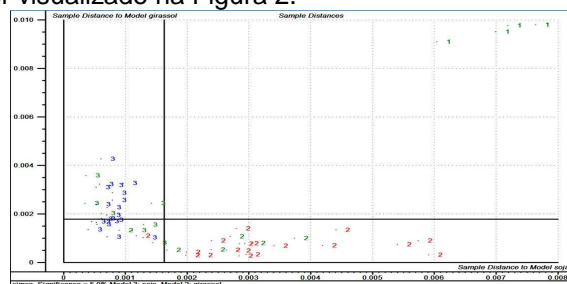


Figura 2: Gráfico de Coomans: 1-Algodão; 2-Girassol; 3-Soja

Conclusões

Os resultados obtidos mostram que a metodologia proposta para indicar a matéria prima empregada na produção de biodiesel apresentou desempenho satisfatório, podendo ser empregado no controle de qualidade na forma de um análise screening.

Agradecimentos

Ao CNPq pelo financiamento do projeto n° 576416/2008-8.