

Classificação de misturas biodiesel/diesel através da rota de síntese do biodiesel por espectrometria NIR e ferramentas quimiométricas

Katiane M. Porto (IC)¹, Valber Elias de Almeida (IC)¹, Gean Bezerra da Costa (IC)¹, David Douglas de Sousa Fernandes (PG)¹, Clediano Asevedo Lima (IC)¹, Germano Vêras* (PQ)¹

1- DQ - CCT- LQAQ - Universidade Estadual da Paraíba. Av Juvêncio Arruda s/n, bairro Universitário, Campina Grande-PB [*germano@uepb.edu.br](mailto:germano@uepb.edu.br)

Palavras-Chave: misturas biodiesel/diesel, rota metílica x etílica, quimiometria

Introdução

O biodiesel é uma denominação genérica para combustíveis produzidos a partir de fontes renováveis, como óleos vegetais e gorduras animais, para serem utilizados em motores de ignição por compressão, também conhecidos como motores diesel. Além disso, o biodiesel pode ser usado para geração de energia em substituição ao óleo diesel e ao óleo combustível. A demanda mundial por combustíveis de origem renovável é crescente e o Brasil tem potencial para ser um grande exportador mundial, principalmente no contexto atual de mudanças climáticas. O biodiesel, produzido a partir da reação de transesterificação, pode usar diferentes tipos de álcool como matéria-prima. O metanol e o etanol são os álcoois mais utilizados, dando origem, respectivamente, às rotas metílica e etílica.

Em relação ao álcool, o metanol é o mais usado na transesterificação por razões de natureza física e química (cadeia curta e polaridade), mas em relação ao etanol, possui grande desvantagem nos aspectos ambientais, pois é em grande parte derivados de petróleo. Além disso, traz malefícios à saúde podendo causar, inclusive, cegueira e câncer. No entanto, o etanol é mais popular, por ser renovável e muito menos tóxico que o metanol. Assim, neste trabalho é proposto o uso da espectroscopia no infravermelho próximo e, como técnica de reconhecimento de padrões, SIMCA, para classificação de misturas biodiesel/diesel pela rota metílica e etílica.

Resultados e Discussão

Para o trabalho foram utilizadas 64 amostras de misturas biodiesel/diesel. Os espectros foram registrados em triplicata na região de 1100-1600 nm, com resolução de 1nm. Os dados foram pré-processados aplicando o algoritmo de Savitzky-Golay usando uma janela de 21 pontos, primeira derivada e ajuste com polinômio de segundo grau e avaliados previamente em um análise exploratória via PCA. A figura 1 apresenta os espectros das 64 amostras.

Modelo PCA foi construído para cada classe, empregando validação cruzada leave-one-out. Os respectivos pontos foram obtidos pela análise do gráfico de variância explicada versus número de componentes principais, sendo de 10 PC's para as classes metílicas e etílicas.

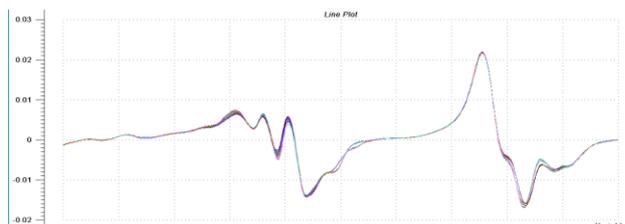


Figura 1: Faixa espectral de 1100 nm a 1600 nm.

Empregando os modelos obtidos e validados, foi conduzida uma classificação SIMCA em diversos níveis de significância estatística, os resultados são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1: Resultado da Classificação do SIMCA

| Erros | 1% | 5% | 10% | 25% |
|---------|----|----|-----|-----|
| Tipo I | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Tipo II | 0 | 0 | 0 | 0 |
| Total | 0 | 0 | 0 | 0 |

Os resultados SIMCA em termos de erros de classificação corroboram com os resultados obtidos na fase de análise exploratória, não ocorreu erros de classificação para nenhum dos níveis de significância adotados. No gráfico de *Coomans* é observado o modelo das amostras obtidas através da rota metílica em função da rota etílica.

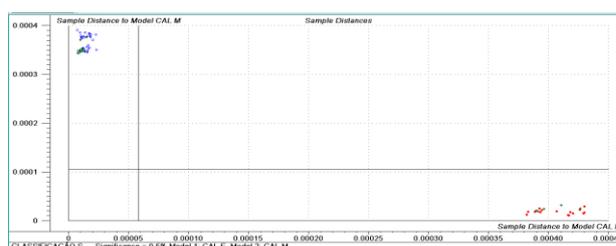


Figura 2: Gráfico de *Coomans*: 0 – metílico, 1- etílico.

Conclusões

Os resultados obtidos mostram que a metodologia proposta para classificar misturas biodiesel/diesel pela rota metílica e etílica apresentou desempenho eficiente para a classificação.

Agradecimento

Agradecimento ao CNPq pelo financiamento do projeto n°: 576416/2008-8